

Berichte aus der Energietechnik

Ognjan Božić

**Numerische Simulation der Mineralumwandlung
in Kohlenstaubfeuerungen**

Shaker Verlag
Aachen 2003

INHALTSVERZEICHNIS

Symbolverzeichnis	X
1. Einleitung	1
2. Stand der Technik und Weiterentwicklung	3
2.1 Gebräuchliche Methoden zur Vorhersage von Verschlackungen	3
2.1.1 Chemische Ascheanalysen	3
2.1.2 Ascheschmelzverhalten	7
2.1.3 Andere Untersuchungsmethoden	7
2.2. Übersicht über Simulationsmodelle	7
2.2.1 Simulationsmodelle, mit angenäherten algebraischen Ausdrücken	8
2.2.2 Simulationsmodelle mit diskreten Methoden	9
2.2.3 Programme zur Berechnung thermochemischer und physikalischer Eigenschaften reiner Stoffe und Mischungen	10
2.2.4 Kombinierte Simulationspakete zur Vorhersage der Verschlackung	11
2.3. Weiterentwicklung des Standes der Technik durch die vorliegende Arbeit	13
3. Modellierung der Verbrennung und Mineralumwandlung	15
3.1 Kohle-/Mineraleigenschaften	15
3.2 Modell der Kohlestaubfeuerung	19
3.2.1 Allgemeines über die Modellierung von Feuerungen im verwendeten Programmsystem FLOREAN	19
3.2.2 Berechnung der kontinuierlichen Phase	20
3.2.2.1 Aufheizung und Trocknung	22
3.2.2.2 Pyrolyse	22
3.2.2.3 Abbrand der Flüchtigen	23
3.2.2.4 Koksabbrand	24
3.2.2.5 Abbrand des Kohlenmonoxids	25
3.2.3 Modellierung der dispersen Phase (Lagrange-Beschreibung)	25
3.2.3.1 Berechnung der Flugbahnen	25
3.2.3.2 Partikelzusammensetzung und Reaktionsmodelle der Kohle	26
3.2.3.2.1 Trocknung	26
3.2.3.2.2 Pyrolyse	27
3.2.3.2.3 Koksabbrand	27
3.2.3.2.4 Einfluß des Koksabbrandes auf die Mineralumwandlung	30
3.2.3.3 Energiebilanz eines Partikels	31

3.3 Modellierung der Mineralumwandlung	33
3.3.1 Allgemeine Bemerkungen über Modellierung und Modelldarstellung	33
3.3.2 Modellierung von Schmelzen, Reaktionen im flüssigen Zustand und Erstarrung am Beispiel der Eisenoxidation	46
3.3.2.1 Allgemeiner Prozeßverlauf	46
3.3.2.2 Schmelzvorgang.	47
3.3.2.3 Prozeß im flüssigen Zustand	50
3.3.2.4 Erstarrung durch Glasbildung und/oder Kristallisation	53
3.4 Kopplung der Programme FLOREAN – TRAMIK.	55
3.4.1 Kopplung der Mehrphasenströmung im Brennraum	55
3.4.2 Kopplungsverfahren	57
3.4.3 Modell für die Verteilung der Mineralien auf die Startpunkte der Partikelbahnen	59
3.4.4 Besonderheiten der numerischen Verfahren bei der Kopplung von Euler- und Lagrange-Betrachtungsweise.	61
4. Reaktionskinetik bei der Umwandlungen von Kohlemineralstoffen	63
4.1 Untersuchungen der Mineralkinetik am IPTC der TU Braunschweig	63
4.1.1 Durchgeführte Experimente als Basis für Modellbildungen	63
4.1.2 Übersicht einzelner Mineralsysteme mit identifizierter Kinetik	65
4.1.2.1 Pyrrhotinzersetzung	65
4.1.2.2 Melanteritzerzersetzung	65
4.1.2.3 Magnesitzerzersetzung.	66
4.1.2.4 Kieseritzerzersetzung.	67
4.1.2.5 Natriumsulfatzerzersetzung	68
4.1.2.6 Reduktion von Eisenoxiden (Fe_xO - und Fe_3O_4 -Reduktion).	69
4.1.2.7 Mehrstufige Eisenoxidation (Fe -, Fe_xO -, Fe_3O_4 -Oxidation)	69
4.1.2.8 Calciumferritbildung	70
4.1.2.9 Wollastonitbildung	71
4.1.2.10 Enstatitbildung.	71
4.1.2.11 Thermische Zersetzung von Kaolinit	72
4.1.2.12 Bestimmung der Kinetik und Verglasungstemperatur bei der Hochtemperaturzerersetzung von Illit.	73
4.1.2.13 Hedenbergitbildung	74
4.2 Mineralkinetik bestimmt aus Literaturdaten	75
4.2.1 Umwandlung der Eisensulfide im Brennraum	75
4.2.1.1 Pyritzerzersetzung.	75
4.2.1.2 Schwefeloxidation	77
4.2.1.3 Pyrrhotinzersetzung bei Sauerstoffüberschuß.	78
4.2.1.4 Pyrrhotinschmelze in oxidierender Rauchgasatmosphäre.	78
4.2.1.5 Die Umwandlung von FeS - zu Fe_3O_4 - Schmelze	79
4.2.1.6 Die Pyrrhotinzersetzung in Atmosphären mit Sauerstoffmangel	79
4.2.1.7 Reduktion von flüssigem Fe-S	80
4.2.2 Umwandlung der Eisenoxide	80
4.2.2.1 Kristallisation den Eisenoxiden (am Beispiel von Fe_3O_4 und Fe).	80
4.2.2.2 Hämatitreduktion	81

4.2.2.3 Magnetitreduktion	81
4.2.3 Thermische Zersetzung der Karbonate	82
4.2.3.1 Kalkspat	82
4.2.3.2 Magnesit	84
4.2.3.3 Siderit	84
4.2.4 Thermische Zersetzung von Kaolinit	86
4.2.4.1 Dehydroxylation von Kaolinit	86
4.2.4.2 Zersetzung von Metakaolin und Glasbildung	88
4.2.4.3 Bildung der Hochtemperaturphasen	89
4.2.4.4 Sinterung und Schmelzen	92
4.2.5 Hochtemperaturzersetzung von Naturgips als Beispiel für Sulfatumwandlungen.	92
4.2.6 Binäre Umwandlungen im festen Zustand	93
4.2.6.1 Magnesioferrit	93
4.2.6.2 Fayalit	94
4.2.6.3 Magnesium-Aluminat (Spinell).	95
4.2.6.4 Calciumaluminat.	96
5. Simulationsrechnungen der Verschlackungsneigung und Vergleich mit Messungen	99
5.1 Simulation einer Strahlflamme mit Gasflammkohle	100
5.2 Simulation eines kohlenstaubgefeuerten Dampferzeugers.	106
5.2.1 Beschreibung der Brennkammer	106
5.2.2 Bestimmung der Kohle- und Mineraleigenschaften	108
5.2.3 Simulation von Strömung, Abbrand und Wärmeübertragung in der Brennkammer nach dem Euler-Euler Verfahren	109
5.2.4 Simulation der Verschlackung inklusive Mineralphasenverteilung auf den Feuerraumwänden	112
6. Ausblick	118
7. Anhänge	119
Anhang 7.1 Mineraluntersuchungen und – modellbildungen.	119
Anhang 7.2 Simulationsergebnisse	128
Anhang 7.3 Phasendiagramm-Verzeichnis	166
Anhang 7.4 Tabellenverzeichnis	173
Anhang 7.5 Verschlackungskennzahlen	178
8. Literatur	180