



## Strömungsmechanische Modellierung eines Brenngaserzeugungssystems

Florian Scharf

Forschungszentrum Jülich GmbH  
Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK)  
Brennstoffzellen (IEK-3)

# Strömungsmechanische Modellierung eines Brenngaserzeugungssystems

Florian Scharf

Schriften des Forschungszentrums Jülich  
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment

Band / Volume 138

---

ISSN 1866-1793

ISBN 978-3-89336-784-9

# Inhaltsverzeichnis

|          |                                                                            |           |
|----------|----------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung und Zielsetzung</b>                                          | <b>1</b>  |
| 1.1      | Motivation                                                                 | 3         |
| 1.2      | Zielsetzung                                                                | 5         |
| 1.3      | Methodik                                                                   | 6         |
| 1.4      | Gliederung der Arbeit                                                      | 7         |
| <b>2</b> | <b>Grundlagen der Brenngaserzeugung für Brennstoffzellen</b>               | <b>9</b>  |
| 2.1      | Brenngaserzeugung aus Mitteldestillaten                                    | 9         |
| 2.1.1    | Systemanforderungen einer HT-PEFC APU                                      | 9         |
| 2.1.2    | Chemie der Brenngaserzeugung                                               | 10        |
| 2.1.3    | Kinetik katalytischer Oberflächenreaktionen                                | 17        |
| 2.1.4    | Einfluss der Kraftstoffzusammensetzung                                     | 21        |
| 2.2      | Wärmeintegriertes Brenngaserzeugungssystem                                 | 21        |
| 2.2.1    | Integration der Verdampfer und Wärmetauscherkomponenten                    | 21        |
| 2.2.2    | Reaktoren der Brenngaserzeugung                                            | 24        |
| 2.2.3    | Einspritzsysteme                                                           | 24        |
| 2.3      | Dampferzeugungssystem                                                      | 27        |
| 2.3.1    | Verdampfen                                                                 | 27        |
| 2.3.2    | Siederegime                                                                | 27        |
| 2.3.3    | Strömungs- und Siedeverhalten des Zweiphasensystems Nassdampf              | 30        |
| 2.3.4    | Siede- und Strömungsverhalten von Einzeltröpfen und Tropfensprays          | 40        |
| <b>3</b> | <b>Theorie und Modelle der numerischen Strömungsmechanik</b>               | <b>45</b> |
| 3.1      | Allgemeine Aufgabenbeschreibung                                            | 45        |
| 3.2      | Integrale und differentielle Bilanzierung von allgemeinen Erhaltungsgrößen | 46        |
| 3.3      | Grundgleichungen der numerischen Strömungsmechanik                         | 46        |
| 3.3.1    | Erhaltungsgleichungen                                                      | 46        |
| 3.3.2    | Navier-Stokes und Euler Gleichungen                                        | 47        |
| 3.3.3    | Solver Theorie                                                             | 48        |
| 3.3.4    | Parallel Processing / HPC                                                  | 49        |
| 3.4      | Physikalische Modellgrundlagen                                             | 50        |
| 3.4.1    | Turbulenz                                                                  | 50        |
| 3.4.2    | Wärmeübertragung                                                           | 53        |
| 3.4.3    | Stoffgemische und Reaktionen                                               | 54        |
| 3.4.4    | Mehrphasenströmung                                                         | 57        |
| 3.4.5    | Poröse Medien ( <i>porous media</i> )                                      | 61        |

|          |                                                                                              |            |
|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>4</b> | <b>Stand der Technik</b>                                                                     | <b>63</b>  |
| 4.1      | Reaktorentwicklung am IEK-3                                                                  | 63         |
| 4.2      | Modulierbare Einspritzsysteme                                                                | 66         |
| 4.2.1    | Technische Zerstäuber für Mitteldestillate                                                   | 66         |
| 4.2.2    | Weit modulierbare Einspritzsysteme für Mitteldestillate                                      | 70         |
| 4.3      | Integrierte Wärmeübertrager und Verdampfer in Brenngaserzeugungssystemen                     | 70         |
| 4.4      | CFD-Reaktormodellierung                                                                      | 73         |
| 4.5      | Ableitung der Arbeitsschwerpunkte                                                            | 74         |
| <b>5</b> | <b>Modellierung und Auslegung weit modulierbarer Einspritzsysteme</b>                        | <b>75</b>  |
| 5.1      | Modellierung einfacher Tropfensprays                                                         | 75         |
| 5.1.1    | Modellkraftstoffe für Kerosin                                                                | 75         |
| 5.1.2    | Düsen- und Spraycharakterisierung                                                            | 77         |
| 5.1.3    | Fehleranalyse der Dralldruckdüsen                                                            | 80         |
| 5.1.4    | Düsenmodellierung                                                                            | 82         |
| 5.2      | Modellierung von Mehrdüsensystemen                                                           | 82         |
| 5.2.1    | Fallbeispiel Quenchstufe im Wassergas-Shiftreaktor WGS-5                                     | 83         |
| 5.3      | Modellierung von instationären Einspritzphänomenen                                           | 86         |
| 5.3.1    | Validierung der Verweilzeitanalyse am Fallbeispiel ATR 8                                     | 87         |
| 5.3.2    | Validierung der lokalen Modellgenauigkeit am Fallbeispiel ATR 10                             | 88         |
| 5.4      | Herleitung eines pulsierenden Einspritzmodells                                               | 90         |
| 5.4.1    | Hochgeschwindigkeitsanalyse der instationären Einspritzphänomene                             | 90         |
| 5.4.2    | ähnlichkeitstheoretische Anpassung der Modellparameter                                       | 92         |
| 5.5      | Modellierung und Auslegung der pulsierenden Einspritzung am Fallbeispiel ATR 11              | 94         |
| 5.5.1    | Konzeptvalidierung                                                                           | 94         |
| 5.5.2    | Auslegung der pulsierten Einspritzung                                                        | 96         |
| 5.5.3    | Zusammenfassende Bewertung der Modelle und Methoden                                          | 100        |
| <b>6</b> | <b>Modellierung der chemischen Reaktionen</b>                                                | <b>103</b> |
| 6.1      | Experimentelle Analyse der Reaktionsverläufe                                                 | 103        |
| 6.1.1    | Statistische Untersuchung der autothermen Reformierung am Fallbeispiel ATR 9.2               | 103        |
| 6.1.2    | Statistische Untersuchung der exothermen Vorreaktionen am Fallbeispiel ATR 9.2               | 105        |
| 6.1.3    | Statistische Untersuchung der katalytischen Verbrennung am Fallbeispiel CAB 2.3              | 107        |
| 6.2      | Modellierung der inhomogenen katalytischen Hauptreaktionen                                   | 107        |
| 6.2.1    | Monolithcharakterisierung                                                                    | 108        |
| 6.2.2    | Modellierung der Reaktionskinetik                                                            | 109        |
| 6.2.3    | Herleitung einer ähnlichkeitstheoretischen Modellierungsmethode der autothermen Reformierung | 113        |

|          |                                                                                                        |            |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 6.3      | Modellierung der exothermen Vorreaktionen . . . . .                                                    | 116        |
| 6.3.1    | Verweilzeitanalyse . . . . .                                                                           | 116        |
| 6.3.2    | Herleitung eines Matlab/Simulink Modells . . . . .                                                     | 118        |
| 6.3.3    | CFD-Implementierung der angepassten Reaktionskinetiken . . . . .                                       | 119        |
| 6.4      | Zusammenfassende Bewertung der Modelle und Methoden . . . . .                                          | 122        |
| <b>7</b> | <b>Modellierung und Auslegung der integrierten Wärmetauscher</b>                                       | <b>125</b> |
| 7.1      | Modellierung der Wärmeübertragung in einem aufgespritzten Tropfenspray . . . . .                       | 125        |
| 7.1.1    | Experimentelle Untersuchung der Wärmeübergangsphänomene . . . . .                                      | 125        |
| 7.1.2    | Fehleranalyse und Herleitung der Wärmeübergangskoeffizienten . . . . .                                 | 130        |
| 7.1.3    | Herleitung des CFD-Modells für ebene Flächen . . . . .                                                 | 132        |
| 7.1.4    | Herleitung eines geometriespezifischen CFD-Modells . . . . .                                           | 136        |
| 7.1.5    | Auslegung des integrierten Wärmetauschers im katalytischen Brenner<br>CAB 3 . . . . .                  | 139        |
| 7.2      | Modellierung des Wärmeübergangs in dispersen Nassdampfströmungen . . . . .                             | 143        |
| 7.2.1    | Nassdampfströmungen mit überkritischem Dampfanteil . . . . .                                           | 143        |
| 7.2.2    | Vereinfachte 2D Modellierung . . . . .                                                                 | 144        |
| 7.2.3    | Experimentelle Modellvalidierung und Fehleranalyse . . . . .                                           | 145        |
| 7.2.4    | Auslegung des Rohrwendel-Wärmetauschers im autothermen Reformier<br>ATR 10 . . . . .                   | 146        |
| 7.3      | Kombination der Modellierungsmethoden am Fallbeispiel ATR 11 . . . . .                                 | 150        |
| 7.3.1    | Modellierung der Wärmeübertrager in einem CFD-Gesamtmodell . . . . .                                   | 151        |
| 7.3.2    | Fehleranalyse und Bewertung der CFD-Modellierung . . . . .                                             | 155        |
| 7.4      | Zusammenfassende Bewertung der Modelle und Methoden . . . . .                                          | 156        |
| <b>8</b> | <b>Implementierung eines CFD-Gesamtmodells</b>                                                         | <b>159</b> |
| 8.1      | Konzeptherleitung und Modellerstellung am Fallbeispiel des autothermen Re-<br>formers ATR 12 . . . . . | 159        |
| 8.2      | Konzeptvalidierung des ATR 12 im implementierten 2D-Gesamtmodell . . . . .                             | 161        |
| 8.3      | Konzeptvalidierung und Optimierung des ATR 12 im implementierten 3D-<br>Gesamtmodell . . . . .         | 164        |
| 8.4      | Bewertung des implementierten CFD-Gesamtmodells . . . . .                                              | 167        |
| <b>9</b> | <b>Zusammenfassung und Ausblick</b>                                                                    | <b>169</b> |
| 9.1      | Zusammenfassung . . . . .                                                                              | 169        |
| 9.2      | Ausblick . . . . .                                                                                     | 174        |

|          |                                                                    |            |
|----------|--------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>A</b> | <b>Anhang zu Kapitel 4</b>                                         | <b>177</b> |
| A.1      | Designübersicht der autothermen Reformer ATR-5 bis ATR-9 . . . . . | 177        |
| A.2      | CFD-Simulationen des WGS-4 . . . . .                               | 179        |
| A.3      | Netzabhängigkeit der CFD-Simulationen . . . . .                    | 180        |
| <b>B</b> | <b>Anhang zu Kapitel 5</b>                                         | <b>183</b> |
| B.1      | Stoffwerte des Kerosin-Modellkraftstoffs . . . . .                 | 183        |
| B.2      | Versuchsaufbau des Düsenteststands . . . . .                       | 185        |
| B.3      | Versuchsaufbau der Strömungsvisualisierungsexperimente . . . . .   | 186        |
| B.4      | Pulsierende Einspritzung bei 100 % Last . . . . .                  | 187        |
| <b>C</b> | <b>Anhang zu Kapitel 6</b>                                         | <b>189</b> |
| C.1      | Versuchsaufbau Druckverlustmessungen . . . . .                     | 189        |
| C.2      | WGS-Reaktionsmechanismus . . . . .                                 | 190        |
| C.3      | Verweilzeitverhalten bei 25 % Last . . . . .                       | 191        |
| C.4      | Fehlerrechnung: VWZ-Summenkurven . . . . .                         | 192        |
| C.5      | Matlab/Simulink Modell . . . . .                                   | 193        |
| <b>D</b> | <b>Anhang zu Kapitel 7</b>                                         | <b>195</b> |
| D.1      | Versuchsaufbau der Verdampfungsversuche . . . . .                  | 195        |
|          | <b>Nomenklatur</b>                                                 | <b>197</b> |
|          | <b>Abbildungsverzeichnis</b>                                       | <b>201</b> |
|          | <b>Tabellenverzeichnis</b>                                         | <b>207</b> |
|          | <b>Literaturverzeichnis</b>                                        | <b>209</b> |

Brennstoffzellen-Bordstromaggregate ermöglichen im mobilen Sektor eine energieeffiziente Stromerzeugung für Anwendungen mit erhöhtem Bordstrombedarf. Dieses Buch befasst sich mit der vollständigen strömungsmechanischen Modellierung (CFD) der Kernkomponenten eines Brenngaserzeugungssystems und darauf aufbauend der Weiterentwicklung der einzelnen Reaktoren. Hierzu wurde die CFD-Modellbibliothek zur vollständigen Beschreibung der Kernkomponenten in CFD-Gesamtmodellen erweitert. Auf Basis der hergeleiteten CFD-Modelle wurde die nächste Generation der Kernkomponenten der Brenngaserzeugung entwickelt. Die Reaktoren zeichnen sich dabei durch eine erhöhte Modularität und ein einfacheres und kompakteres Design der integrierten Wärmeübertrager aus.

**Autor:**

Florian Scharf studierte an der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen (RWTH Aachen) Maschinenbau mit der Studienrichtung Verfahrenstechnik. Seit 2008 beschäftigt er sich am Institut für Energie- und Klimaforschung – Brennstoffzellen (IEK-3) im Forschungszentrum Jülich mit der strömungsmechanischen Modellierung von Brenngaserzeugungssystemen für die Anwendung in mobilen Brennstoffzellen-Systemen. Der Inhalt dieses Buches wurde von der RWTH Aachen als Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Ingenieurwissenschaften genehmigt.

**Institut:**

Die Forschungsaufgaben des Instituts für Energieforschung – Brennstoffzellen (IEK-3) sind auf die Realisierung von Hoch- und Niedertemperaturbrennstoffzellen sowie von entsprechenden Stacks oder Systemen für stationäre oder mobile Anwendungen ausgerichtet. Ferner umfassen die verfahrens- und systemtechnischen Entwicklungen die Bereitstellung von Apparaten zur Brenngaserzeugung. Diese Arbeiten werden von physikalischen-chemischen Grundlagenuntersuchungen sowie Systemanalytischen Studien der Energieverfahrenstechnik begleitet.

