

# Grobstruktursimulation der Biomassevergasung in einer Wirbelschicht am Beispiel von Holz

vorgelegt von  
Diplom Ingenieur  
Stephan Gerber  
aus Potsdam

von der Fakultät III – Prozesswissenschaften  
der Technischen Universität Berlin  
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften  
– Dr.–Ing. –

genehmigte Dissertation

Promotionsausschuss

Vorsitzender: Universitätsprofessor Dr.–Ing. Felix Ziegler  
Gutachter: Universitätsprofessor Dr. rer. nat. Frank Behrendt  
Gutachter: Universitätsprofessor (a.D.) Dr.–Ing. Wolfgang Klose  
Gutachter: Dr.–Ing. Michael Oevermann

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 20. Oktober 2011

Berlin 2012

D 83



# Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	iii
Tabellenverzeichnis	ix
Nomenklatur	xi
<b>1 Einleitung</b>	<b>2</b>
1.1 Aufteilung der Arbeit . . . . .	3
<b>2 Einführung</b>	<b>5</b>
2.1 Modellierungssystematik von Gas-Feststoff-Strömungen . . . . .	5
2.1.1 Direkte Numerische Simulation . . . . .	6
2.1.2 Euler-Lagrange-Modelle . . . . .	7
2.1.3 Euler-Euler-Modelle . . . . .	11
2.2 Literaturübersicht . . . . .	12
2.3 Ziel der Arbeit . . . . .	19
<b>3 Bilanzgleichungen und verwendete Modelle der Gas- und Festphase</b>	<b>20</b>
3.1 Die Gasphase . . . . .	20
3.1.1 Homogene Gasphasenchemie . . . . .	24
3.2 Die Festphase . . . . .	28
3.2.1 Impulsbilanz der Partikel - Bewegungsgleichungen . . . . .	29
3.2.2 Partikelkräfte . . . . .	30
3.2.3 Partikelkollisionen . . . . .	38
3.2.4 Numerische Verfahren zur Lösung der Bewegungsgleichungen . . . . .	41
3.2.5 Massen- und Energiebilanz der Partikel . . . . .	43
3.2.6 Heterogene Chemie . . . . .	46
3.2.7 Aufheizung, Trocknung, primäre Pyrolyse und Schrumpfung der Partikel . . . . .	49
3.2.8 Integration des Partikelmodells . . . . .	58
3.3 Mapping Algorithmen zwischen den Phasen . . . . .	59
3.3.1 Euler → Lagrange Mapping . . . . .	60
3.3.2 Lagrange → Euler Mapping . . . . .	62
3.3.3 Mapping Algorithmen dieser Arbeit . . . . .	67
<b>4 Euler-Lagrange-Simulation</b>	<b>69</b>
4.1 Programmablauf . . . . .	69
4.2 Parallelisierung . . . . .	73
<b>5 Simulationsergebnisse</b>	<b>91</b>

---

5.1	Rechengebiet . . . . .	91
5.2	Simulationsergebnisse . . . . .	93
5.2.1	Das Vergleichsszenario . . . . .	99
5.2.2	Thermische Dynamik der Wirbelschicht - Vergleich dreier Anfangs- temperaturen der Festphase . . . . .	113
5.2.3	Variation der Holzzufuhr . . . . .	123
5.2.4	Einfluss eines verringerten Inertteeranteils . . . . .	131
5.2.5	Einfluss einer erhöhten Leerrohrgeschwindigkeit im Lufteinlass	136
5.2.6	Einfluss der Wandtemperaturen des Reaktors . . . . .	142
5.2.7	Einfluss der Einlasstemperatur der Luft . . . . .	148
5.2.8	Einfluss der Partikelgröße des zugeführten Holzes . . . . .	153
5.2.9	Einfluss der Partikeltemperatur des zugeführten Holzes . . . . .	159
5.2.10	Einfluss der Kollisionsparameter . . . . .	164
5.2.11	Partikelhistorien in einer Wirbelschicht . . . . .	169
5.2.12	Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Da- ten bzw. anderen numerischen Modellen . . . . .	179
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>188</b>
6.1	Ausblick . . . . .	189
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>193</b>

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Einteilung der Euler-Lagrange-Methoden nach der Dichte der Strömung bzw. dem bezogenen Partikelabstand nach Sommerfeld (2000a)	10
3.1	Gleichgewichtskonstante der Wassergas-Shift-Reaktion nach Hiller u. Reimert (2010)	25
3.2	Frequenz der Bewegung über den Partikeldurchmesser bei gegebener modifizierter Stokes-Zahl von fünf nach Gleichung (3.24)	35
3.3	Darstellung des Feder-Dämpfer-Modells für die Normalkraft	38
3.4	Darstellung des Feder-Dämpfer-Modells für die Tangentialkraft	39
3.5	Reaktionsschema der primären Pyrolyse	53
3.6	Vergleich der zeitlichen Temperaturentwicklung mit Hilfe verschiedener Modelle	57
3.7	Partikel in einer Zelle mit ähnlicher Ausdehnung	61
3.8	Partikel mit der Temperatur $T_P$ zwischen zwei Zellen $i$ und $i+1$ mit den Temperaturen $T_i$ und $T_{i+1}$	65
3.9	Volumenverteilung eines kugelförmigen Partikels anhand eines volumengleichen Würfels	67
4.1	Ablauf des Hauptprogramms	70
4.2	Ablauf der Partikelbewegung aus 4.1	71
4.3	Ablauf der Suche nach Kollisionspartnern	73
4.4	Schablonen zur Orientierung auf dem Rechengitter I (zusammen mit Abb. 4.5)	77
4.5	Schablonen zur Orientierung auf dem Rechengitter II (zusammen mit Abb. 4.4)	77
4.6	Mögliche Gebietsaufteilung die in dieser Arbeit nicht abgebildet werden können (die dicken schwarzen Linien sind Gebietsgrenzen des zerlegten Gitters)	78
4.7	Darstellung der vereinfachten Zell-Nachbarschaftbeziehungen für die Kollisionsüberprüfung	78
4.8	Ablauf des Algorithmuses zur parallelen Kollisionsberechnung aus 4.2	79
4.9	Zelldarstellung des Rechengebietes - Aufteilung für parallele Rechnungen	81
4.10	Speed-up der Simulation für verschiedene Partikelzahlen	90
4.11	Parallele Effizienz der Simulation für verschiedene Partikelzahlen	90
5.1	Schnappschüsse zu Beginn der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 0.7 s und 0.9 s)	101
5.2	Schnappschüsse zu Beginn der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 0.95 s und 1.15 s)	101

5.3	Schnappschüsse am Ende der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 95 s und 95.2 s) . . . . .	102
5.4	Schnappschüsse am Ende der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 95.25 s und 95.45 s) . . . . .	103
5.5	Schnappschüsse der Volumenfraktion der Gasphase zu Beginn der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 0.7 s und 0.9 s) .	104
5.6	Schnappschüsse der Volumenfraktion der Gasphase zu Beginn der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 0.95 s und 1.15 s)	105
5.7	Schnappschüsse der Volumenfraktion der Gasphase am Ende der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 95 s und 95.2 s)	106
5.8	Schnappschüsse der Volumenfraktion der Gasphase am Ende der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 95.25 s und 95.45 s)	107
5.9	Axialer Schwerpunkt und Höhe von 90 % der Partikelmasse über die Zeit . . . . .	108
5.10	Zeitlicher Verlauf der Auslasskonzentrationen einiger Produktgase für den Fall 2 . . . . .	109
5.11	Zeitlicher Verlauf der Auslasskonzentrationen der Teere für den Fall 2	109
5.12	Zeitlicher Verlauf der Auslasstemperatur für den Fall 2 . . . . .	110
5.13	Teer 1 für verschiedene Höhenstufen im Reaktor über die Zeit (Fall 2)	110
5.14	Teer 2 für verschiedene Höhenstufen im Reaktor über die Zeit (Fall 2)	111
5.15	Teer 3 für verschiedene Höhenstufen im Reaktor über die Zeit (Fall 2)	111
5.16	Stromlinien im oberen Reaktorteil . . . . .	112
5.17	Richtung und Größe der Fluidströmung im oberen Reaktorteil . . .	112
5.18	Massenanteil des ersten Teeres im oberen Reaktorteil . . . . .	112
5.19	Über den Querschnitt massengemittelte Feststofftemperaturen über die Zeit aufgetragen (ca. 0.146 m über dem Reaktorboden, Fälle 1 bis 3) . . . . .	114
5.20	Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene initiale Betttemperaturen (Fälle 1 bis 3 aus Tabelle 5.3) . . . . .	116
5.21	Auslasskonzentrationen des Kohlenmonoxids über die Zeit aufgetragen für die Fälle 1 bis 3 . . . . .	117
5.22	Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 1 bis 3 . . . . .	118
5.23	Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 1 bis 3) . . . . .	119
5.24	Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 1 bis 3) . . . . .	119
5.25	Zeitlicher Verlauf der Produktgase am Auslass (Fall 1) . . . . .	120
5.26	Zeitlicher Verlauf der Produktgase am Auslass (Fall 3) . . . . .	120
5.27	Zeitlicher Verlauf der Teere am Auslass (Fall 1) . . . . .	121
5.28	Zeitlicher Verlauf der Teere am Auslass (Fall 3) . . . . .	121
5.29	Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene Holzmassenströme (Fälle 2 und 6 bis 8 aus Tabelle 5.3) . . . . .	123
5.30	Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2 und 6 bis 8 . . . . .	124
5.31	Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2, 6, 7 und 8) . . . . .	125
5.32	Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2, 6, 7 und 8) . . . . .	126
5.33	Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 6) . . . . .	128
5.34	Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 6)	128

5.35	Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 7) . . . . .	129
5.36	Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 7)	129
5.37	Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 8) . . . . .	130
5.38	Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 8)	130
5.39	Über den Querschnitt massengemittelte Feststofftemperaturen über die Zeit aufgetragen (ca. 0.146 m über dem Reaktorboden, Fälle 2, 6, 7 und 8) . . . . .	131
5.40	Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene Inertteerteile (Fälle 2 und 4 aus Tabelle 5.3) . . . . .	132
5.41	Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2 und 4 . . . . .	133
5.42	Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2 und 4) . . . . .	134
5.43	Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2 und 4) . . . . .	134
5.44	Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 4) . . . . .	135
5.45	Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 4)	135
5.46	Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene Leerrohrgeschwindigkeiten (Fall 2 und Fall 10 aus Tabelle 5.3) . . . . .	136
5.47	Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2 und 10 . . . . .	137
5.48	Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2 und 10) . . . . .	139
5.49	Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2 und 10) . . . . .	139
5.50	Axialer Schwerpunkt und Betthöhe bei 90 % der Feststoffmasse über die Zeit (Fälle 2 und 10) . . . . .	140
5.51	Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 10) . . . . .	140
5.52	Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 10) . . . . .	141
5.53	Über den Querschnitt massengemittelte Feststofftemperaturen über die Zeit aufgetragen (ca. 0.146 m über dem Reaktorboden, Fälle 2 und 10) . . . . .	141
5.54	Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2, 12 und 13 . . . . .	142
5.55	Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene Wandtemperaturen (Fälle 2, 12 und 13 aus Tabelle 5.3) . . . . .	143
5.56	Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2, 12 und 13) . . . . .	144
5.57	Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2, 12 und 13) . . . . .	145
5.58	Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 12) . . . . .	145
5.59	Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 12) . . . . .	146
5.60	Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 13) . . . . .	146
5.61	Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 13) . . . . .	147

5.62	Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene Einlasstemperaturen (Fälle 2 und 11 aus Tabelle 5.3) . . . . .	148
5.63	Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2 und 11 . . . . .	149
5.64	Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2 und 11) . . . . .	150
5.65	Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2 und 11) . . . . .	151
5.66	zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 11) . . . . .	151
5.67	Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 11) . . . . .	152
5.68	Über den Querschnitt massengemittelte Feststofftemperaturen über die Zeit aufgetragen (ca. 0.146 m über dem Reaktorboden, Fälle 2 und 11) . . . . .	152
5.69	Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene Partikelgrößen (Fälle 2 und 14 aus Tabelle 5.3) . . . . .	153
5.70	Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2 und 14 . . . . .	154
5.71	Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2 und 14) . . . . .	155
5.72	Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2 und 14) . . . . .	156
5.73	Axialer Schwerpunkt und Betthöhe bei 90 % der Feststoffmasse über die Zeit (Fälle 2 und 14) . . . . .	157
5.74	Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 14) . . . . .	157
5.75	Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 14) . . . . .	158
5.76	Über den Querschnitt massengemittelte Feststofftemperaturen über die Zeit aufgetragen (ca. 0.146 m über dem Reaktorboden, Fälle 2 und 14) . . . . .	158
5.77	Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene initiale Holztemperaturen (Fälle 2 und 9 aus Tabelle 5.3) . . . . .	159
5.78	Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2 und 9 . . . . .	160
5.79	Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2 und 9) . . . . .	161
5.80	Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2 und 9) . . . . .	162
5.81	Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 9) . . . . .	162
5.82	Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 9)	163
5.83	Über den Querschnitt massengemittelte Feststofftemperaturen über die Zeit aufgetragen (ca. 0.146 m über dem Reaktorboden, Fälle 2 und 9) . . . . .	163
5.84	Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene Kollisionsparameter (Fälle 2 und 5 aus Tabelle 5.3) . . . . .	164
5.85	Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2 und 5 . . . . .	165
5.86	Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2 und 5) . . . . .	167
5.87	Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2 und 5) . . . . .	167
5.88	Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 5) . . . . .	168

5.89	Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 5)	168
5.90	Zeitlicher Verlauf der Partikeltemperatur (jedes 50ste Holzpartikel)	169
5.91	Zeitlicher Verlauf der Partikelmasse (jedes 50ste Holzpartikel)	171
5.92	Zeitlicher Verlauf der Partikeldichte (jedes 50ste Holzpartikel)	171
5.93	Zeitlicher Verlauf des Partikelwasseranteils (jedes 50ste Holzpartikel)	172
5.94	Zeitlicher Verlauf des Partikelholzanteils (jedes 50ste Holzpartikel)	173
5.95	Zeitlicher Verlauf des Partikelholzkohleanteils (jedes 50ste Holzpartikel)	175
5.96	Zeitlicher Verlauf der Partikeltemperatur dreier ausgewählter Holzpartikel	175
5.97	Zeitlicher Verlauf der Partikelmasse dreier ausgewählter Holzpartikel	176
5.98	Zeitlicher Verlauf der Partikeldichte dreier ausgewählter Holzpartikel	176
5.99	Zeitlicher Verlauf des Partikelholzkohleanteils dreier ausgewählter Holzpartikel	177
5.100	Zeitlicher Verlauf des Partikelholzanteils dreier ausgewählter Holzpartikel	177
5.101	Zeitlicher Verlauf der radialen Position dreier ausgewählter Holzpartikel	178
5.102	Zeitlicher Verlauf der axialen Position dreier ausgewählter Holzpartikel	178
5.103	Zeitlicher Verlauf der Reaktortemperatur für verschiedene Höhen (experimentelle Daten)	179
5.104	Zeitlicher Verlauf der Reaktortemperatur für verschiedene Höhen des Standardfalles)	180
5.105	Aus 19 verschiedenen Messungen gemittelte Gaszusammensetzung des Reaktors (experimentelle Daten)	181
5.106	Gaszusammensetzung des Standardfalles ohne Teer (Simulationsdaten)	182



# Tabellenverzeichnis

3.1	Kinetische Daten der homogenen Gasphasenreaktionen . . . . .	26
3.2	Massenanteile der beim Teerzerfall entstehenden Gase nach Rath u. Staudinger (2001) . . . . .	27
3.3	Kinetische Daten des Teerzerfalls nach Rath u. Staudinger (2001) . .	27
3.4	Ansätze für die Wärmekapazitäten von Holz und Holzkohle . . . . .	46
3.5	Kinetische Daten der heterogenen Reaktionen der Holzkohle . . . . .	49
3.6	Kinetische Daten der primären Pyrolyse . . . . .	54
3.7	Massenanteile der bei der primären Pyrolyse entstehenden Gase nach Seebauer (1999) . . . . .	55
3.8	Massenanteile am Gesamtteer der bei der primären Pyrolyse entstehenden Teerkomponenten nach Rath u. Staudinger (2001) . . . . .	55
5.1	Rand- und Anfangsbedingungen der fluiden Phase . . . . .	96
5.2	Parameter und Anfangswerte der festen Phase . . . . .	97
5.3	Variierte Parameter der Simulationen für alle 14 Fälle . . . . .	98
5.4	Über die letzten zehn Simulationssekunden gemittelte Auslasstemperaturen aller Fälle . . . . .	113



# Nomenklatur

## Griechische Buchstaben

<u>Buchstabe</u>	<u>Bedeutung</u>	<u>Einheit</u>
$\varepsilon$	Volumenanteil der fluiden Phase	1
$\rho_{Holzkohle}$	Dichte der Holzkohle im Partikel	kg/m <sup>3</sup>
$\rho_g$	Dichte der fluiden Phase	kg/m <sup>3</sup>
$\rho_p$	Dichte eines Partikels	kg/m <sup>3</sup>
$\rho_w$	Dichte des Holzes im Partikel	kg/m <sup>3</sup>
$\boldsymbol{\tau}$	Spannungstensor der fluiden Phase	kg/m s <sup>2</sup>
$\mu_{eff}$	effektive dynamische Viskosität der fluiden Phase	kg/m s
$\mu_{lam}$	laminare dynamische Viskosität der fluiden Phase	kg/m s
$\mu_{turb}$	turbulente dynamische Viskosität der fluiden Phase	kg/m s
$\Delta$	Längenmaß für den LES Ansatz	m
$\boldsymbol{\omega}_p$	Eigenrotation eines Partikels	1/s

## Lateinische Buchstaben

<u>Buchstabe</u>	<u>Bedeutung</u>	<u>SI Einheit</u>
$A$	Frequenzfaktor	1/s
$c_t$	Parameter im Subgridmodell des LES Ansatzes	m
$d_p$	Durchmesser eines Partikels	m
$E$	Aktivierungsenergie	J/mol
$g$	Gravitationskonstante	m/s <sup>2</sup>
$h_\alpha$	Enthalpie der Komponente $\alpha$	J/kg
$h$	Enthalpie der Gasphase	J/kg
$\Delta h_\alpha^0$	Standardbildungsenthalpie der Komponente $\alpha$	J/kg
$I_P$	Massenträgheitsmoment eines Partikels	kg m <sup>2</sup>
$F_s$	Impulsaustauschterm der Gasphase	kg/m <sup>2</sup> s <sup>2</sup>
$F_i$	eine am Partikel angreifende Kraft	kg m/s <sup>2</sup>
$m_p$	Masse eines Partikels	kg
$m_{Holz}$	Masse des Holzes in einem Partikel	kg
$m_{Holzkohle}$	Masse der Holzkohle in einem Partikel	kg
$m_{Wasser}$	Masse des Wassers in einem Partikel	kg
$p$	Druck der fluiden Phase	Pa
$\mathbf{q}$	Wärmestrom der Gasphase	J/m <sup>2</sup> s
$\dot{Q}_s$	Enthalpiewechselwirkung zwischen Gasphase und Festphase	J/m <sup>3</sup> s
$r_p$	Radius eines Partikels	m
$R_\alpha$	spezielle Gaskonstante der Komponente $\alpha$	J/kg K
$R$	universelle Gaskonstante	J/mol K
$S_{ij}$	Parameter im LES Ansatz	1/s
$T$	Temperatur der fluiden Phase	K
$T_i$	ein am Partikel angreifendes Moment	kg m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>
$T^0$	Referenztemperatur der Standardbildungsenthalpie	K
$\mathbf{u}_g$	Geschwindigkeit der fluiden Phase	m/s
$\mathbf{u}_p$	Geschwindigkeit eines Partikels	m/s
$V_{Partikel,Holz}$	Volumen eines Holzpartikels	m <sup>3</sup>
$V_{Partikel,Holz_0}$	Volumen eines Holzpartikels zu Beginn der primären Pyrolyse	m <sup>3</sup>

---

$\dot{w}_{\alpha,g}$	Massenquellterm der Komponente $\alpha$ aufgrund homogener Gasphasenreaktionen	$\text{kg}/\text{m}^3 \text{s}$
$\dot{w}_{\alpha,s}$	Massenquellterm der Komponente $\alpha$ aufgrund heterogener Reaktionen auf der Partikeloberfläche	$\text{kg}/\text{m}^3 \text{s}$
$x_i$	kartesische Raumrichtung	1
$\mathbf{x}_p$	Position eines Partikels	m
$Y_\alpha$	Massenanteil der Komponente $\alpha$ in der fluiden Phase	1

# Einleitung

Im Zuge der Erfüllung der Klimaschutzziele der Bundesregierung kommt es zu weitgehenden Änderungen unseres Energiemarktes. Um diese Änderungen am Markt zu etablieren wird z.B. durch das Gesetz für den Vorrang Erneuerbarer Energien eine breite Palette an unterschiedlichen Technologien staatlich gefördert. Diese Palette umfasst u.a. die Nutzung von Wasserkraft, Windkraft, solarer Strahlungsenergie, Geothermie und auch von Biomasse. Biomasse hat gegenüber einigen anderen regenerativen Energien u.a. den Vorteil grundlastfähig zu sein und damit unabhängig von unbeeinflussbaren Schwankungen in der Windstärke und in der Sonneneinstrahlung, einen Beitrag zur zukünftigen Energieversorgung zu leisten. Wesentlicher Punkt an der Nachhaltigkeit der Energieversorgung durch Biomasse ist natürlich die Nutzung nachhaltig erwirtschafteter Biomasse.

Speziell die thermochemische Zersetzung von Biomasse gilt als interessant, da sie Lignin, als einen häufig und z.T. in hohen Anteilen vorkommenden Bestandteil der Biomasse, zersetzen kann. Lignin tritt insbesondere bei verholzenden Pflanzen auf (Bäume, Sträucher etc.). Weiterhin ist der Umsatzgrad der eingesetzten Biomasse bei der thermochemischen Zersetzung deutlich höher als bei klassischen Biogasanlagen, somit kann ein hoher Anteil der geernteten Biomasse in andere Energieformen (Elektrizität, Wärme, brennbares Schwachgas etc.) umgewandelt werden.

Die Frage warum energietechnisch gesehen eine Vergasung einer anlagentechnisch einfacheren Verbrennung vorgezogen werden sollte, ist unmittelbar an die potentielle Anlagengröße gebunden. Je kleiner die erwartete Leistung, desto eher sollte die

Vergasung der Verbrennung vorgezogen werden, wenn man zusätzlich zur Wärmege-  
winnung auch elektrische Energie erhalten möchte. Die nachhaltige Nutzung sowohl  
der Verbrennung als auch der Vergasung von Biomasse ist an kleine Einzugskreise der  
Biomasse gebunden, da zum einen die volumetrische Energiedichte im Vergleich zu  
fossilen Energieträgern geringer ist und zum anderen auch das Aufkommen der Bio-  
masse weniger konzentriert ist als bei fossilen Energieträgern. Diese beiden Punkte  
machen eine zumindest in Teilen dezentrale Art der Energiewandlung interessant.

Die thermochemische Zersetzung von Biomasse hat jedoch auch einige Nachteile,  
die die kommerzielle Nutzbarkeit dieser Technologie zu teuer (wartungsintensiv, in-  
vestitionsintensiv etc.) werden lassen. Einer dieser Nachteile ist die Entstehung von  
Teeren und Partikeln sowie deren Austrag aus dem Reaktor während der Vergasung.  
Sowohl die stoffliche als auch energetische Nutzung des bei der Vergasung entstehen-  
den Produktgases setzen meist Teer- und Partikelanteile in engen Grenzen voraus.  
Konzepte wie druckaufgeladene Wirbelschichten mit einer nachfolgenden Nutzung  
der Produktgase in Gasturbinen können sehr hohe Teer- und Partikelgehalte tolerie-  
ren, sind allerdings deutlich weniger geeignet um dezentral eingesetzt zu werden bzw.  
deutlich investitionsintensiver. Die Frage nach der notwendigen Investition zur Er-  
richtung von Vergasungsanlagen hängt allerdings nicht nur von den technologischen  
Problemen ab sondern auch vom Umfang der Nutzung der entsprechenden Anlagen.  
Aus wissenschaftlicher Sicht sind die technologischen Probleme der Holzvergasung  
Motivation für diese Arbeit.

## 1.1 Aufteilung der Arbeit

Kapitel 2 bietet einen Einblick in die CFD-basierte Modellierung von Gas-Feststoff-  
Strömungen und verdeutlicht dabei Stärken und Schwächen einzelner Konzepte. Wei-  
terhin wird ein Ausschnitt relevanter Literatur gezeigt, der den Stand der Forschung  
aufzeigt.

In Kapitel 3 werden die verwendeten Gleichungen für die Gasphase und die Festphase  
aufgezeigt. Dabei wird detailliert auf die verwendeten Modelle eingegangen. Es wird  
dabei unterschieden in Gleichungen für die Gasphase (siehe Kapitel 3.1), Gleichungen

für die feste Phase (siehe Kapitel 3.2) und dem Mapping zwischen den Phasen (siehe Kapitel 3.3). Die Beschreibung der Gasphase betrifft die Massen-, Energie-, Impuls- und Speziesbilanzen in Kapitel 3.1 sowie die homogenen chemischen Reaktionen der Gasphase in Kapitel 3.1.1.

Die Präsentation der Festphase in Kapitel 3.2 unterteilt sich grob in drei Teile. Zum einen werden die relevanten Partikelbewegungsgleichungen und das Partikelabbrandmodell in den Kapiteln 3.2.1 und 3.2.5 aufgezeigt und zum anderen dann folgend mit den Modellen für die modellierten Vorgänge der Partikelbewegung und des Partikelabbrandes näher beschrieben. Die Beschreibung der Partikelbewegung folgt anhand der Bewegungskräfte (siehe Kapitel 3.2.2), der Partikelkollisionen (siehe Kapitel 3.2.3) und abschließend der Integration der Bewegungsgleichungen (siehe Kapitel 3.2.4). Der Partikelabbrand wird in den Kapiteln 3.2.6 (Beschreibung der heterogenen Chemie der Simulation), 3.2.7 (Beschreibung der Aufheizung, Trocknung, Pyrolyse und Schrumpfung der Partikel) und abschließend wieder in einem Kapitel zur Integration des Modells für den Partikelabbrand (siehe Kapitel 3.2.8) erläutert.

Kapitel 4 erläutert das Gesamtkonzept der Simulation und die Arbeiten an der Parallelisierung. Dabei wird detailliert auf einzelne Berechnungsabläufe eingegangen (siehe Kapitel 4.1) und die Parallelisierung getrennt für die Simulation als ganzes, die Partikelkollisionen und die Verteilung der Partikelvolumina über die Zellen beschrieben (siehe Kapitel 4.2).

In Kapitel 5 wird eine breit angelegte Parameterstudie vorgestellt und deren Ergebnisse diskutiert. Es werden insgesamt 14 Parametersätze präsentiert und miteinander verglichen. Dabei wird anhand zeitlich gemittelter Ergebnisse für die Hauptprodukte (inkl. Teer) und die Temperatur erklärt, wie die Ergebnisse zu deuten sind. Die Interpretationen der Ergebnisse erfolgt z.T. unter Verwendung von Schwerpunktdaten, Daten für die mittleren Partikeltemperaturen, Daten der Holzzusammensetzung etc. Es werden sowohl Daten über den Reaktorquerschnitt gezeigt als auch über die Zeit. Zusätzlich werden einige Partikelhistorien aufgezeigt und diskutiert.

Letztendlich wird in Kapitel 6 der Arbeit eine Zusammenfassung gegeben.

# Einführung

## 2.1 Modellierungssystematik von Gas-Feststoff-Strömungen

Die Modellierung von Gas-Feststoff-Strömungen kann auf verschiedenste Art und Weise stattfinden. Wesentliche Unterscheidungsmerkmale liegen dabei in der Modellierung der Impulsbilanzen und der festen Phasen. Modellierungen im Rahmen der Zell- und Zonenmodelle verwenden meist empirische Ansätze und /oder Daten aus anderen komplexeren Modellierungsarten, um den Impulstransport der beteiligten Phasen zu beschreiben, wohingegen die Methoden der Euler-Euler- bzw. Euler-Lagrange-Modelle meist auf eine aufwändige Lösung der entsprechenden Impulsbilanzen im Rahmen der Computational Fluid Dynamics (CFD) setzen.

Kern dieser Arbeit sind Modellierungen der letztgenannten Art, welche sich der CFD-Methoden bedienen. Hier soll ein kleiner Überblick der CFD-basierenden Methoden gegeben werden (siehe Kapitel 2.1.1, 2.1.2 und 2.1.3). Anschließend werden im Kapitel 2.2 einige Publikationen vorgestellt, die einen Einblick in die Modellierung der reaktiven Gas-Feststoff-Strömungen mit Fokus auf die Vergasung bzw. Verbrennung von Biomassen und Kohlen bieten. Die Darstellungen in Kapitel 2.2 können und sollen nicht alle relevanten Arbeiten beschreiben, da dies den Rahmen der hier vorliegenden Arbeit sprengen würde. Es wird daher ein sinnvoller und beispielhafter Ausschnitt wichtiger Publikationen gezeigt und kurz erläutert.

### 2.1.1 Direkte Numerische Simulation

Der Begriff der Direkten Numerischen Simulation (DNS) stammt aus dem Bereich der einphasigen Simulation von Strömungsvorgängen, bei denen keine Modellierung der Turbulenz notwendig ist, da die Gitterauflösung so fein ist, dass alle Strömungsphänomene auf dem betrachteten Rechengitter hinreichend genau aufgelöst werden können. Insbesondere bedarf es keines Schließungsansatzes für die Turbulenz, da nur die Bilanzgrößen betrachtet werden, für die unmittelbar Rand- und Anfangsbedingungen vorliegen und die nicht von weiteren nicht bilanzierten Größen abhängen. Materialfunktionen werden natürlich auch bei dieser Art der Modellierung gebraucht, da z.B. die Impulsbilanz den Spannungstensor enthält, welcher auf bekannte bzw. bilanzierte Größen zurückgeführt werden muss. Anwendungen dieser Methode sind auf akademische Fälle beschränkt, da die Zahl der benötigten Rechenzellen stark mit der Reynoldszahl wächst (die Zahl der Rechenzellen ist proportional zu  $Re^{\frac{9}{4}}$ ). Der Grund für diese Abhängigkeit zwischen der Zahl der Rechenzellen und der Reynoldszahl liegt in der Abhängigkeit der Größe verschiedener Strömungsphänomene von der Reynoldszahl und der Tatsache, dass alle diese Phänomene numerisch auf dem gewählten Rechengitter aufgelöst werden müssen, um von einer DNS zu sprechen.

Der Begriff der DNS bei reaktiven Gas-Feststoff-Strömungen ist analog zu den oben beschriebenen Vorgängen mit einer numerischen Auflösung aller Phänomene verbunden, jedoch mit dem zusätzlichen Problem, dass die Phasengrenzflächen Ort (Partikel bewegen sich) und Form (Partikel zerbrechen, schrumpfen etc.) ändern. Die Anzahl der Phasengrenzflächen ist ebenfalls deutlich größer als im einphasigen Bereich. Damit verbunden, muss das Rechengitter meist ständig angepasst werden, um den neuen Positionen der Feststoffe gerecht zu werden. Auch im zweiphasigen Bereich bleiben die Anwendungen der DNS auf akademische Fälle beschränkt, auf die hier nicht näher eingegangen werden soll.

### 2.1.2 Euler-Lagrange-Modelle

Bei den sogenannten Euler-Lagrange-Modellen wird die fluide Phase als Kontinuum betrachtet (Euler'sche Schreibweise) und die Partikel entsprechend ihres materiellen Charakters als disperse Einzelkörper, die in Form der materiellen oder Lagrange'schen Schreibweise behandelt werden. In der Lagrange'schen Schreibweise überführt man die konvektiven Glieder zusammen mit dem Speicherterm einer Bilanz (zum Beispiel die des Impulses) in eine materielle oder Lagrange'sche Zeitableitung der entsprechenden Größe. Der gedachte Beobachter wechselt seine Position also von einem ortsfesten Punkt zu dem betrachteten Einzelkörper, er bewegt sich mit dem Einzelpartikel. Nichts desto trotz werden viele Herleitungen auf Basis der Lagrange'schen Schreibweise durchgeführt und im Nachhinein in ein Euler-System überführt.

Der Vorteil der Euler-Lagrange-Modellierung liegt darin, dass sie in gewisser Weise die natürliche Formulierung für einen Einzelkörper ist (in der Mechanik wird häufig mit Lagrange'schen Schreibweisen gearbeitet). Phänomene wie die Partikel-Partikel- oder Partikel-Wand-Kollision können mit einfachen mechanischen Modellen hinreichend genau beschrieben werden, wenn sie denn entsprechend zeitlich aufgelöst werden können. Im Rahmen der Euler-Lagrange-Modellierung kann das Verhalten eines jeden einzelnen Partikels anhand seiner Geschichte und seines Istzustandes berechnet werden, d.h. es muss nicht davon ausgegangen werden, dass sich Partikel in der unmittelbaren Nachbarschaft ähnlich verhalten. Dies ist natürlich insbesondere für Wirbelschichten von Vorteil, da in Wirbelschichten, durch die zum Teil starke Partikelbewegung bedingt, lokal recht unterschiedliche Partikeleigenschaften vorliegen können.

Die obigen Bemerkungen gelten dabei für alle typischen Bilanzgrößen wie Masse, Impuls und Energie. Zusätzlich bietet die Methode der Euler-Lagrange-Modellierung die Möglichkeit, auch Phänomene innerhalb der Partikel zu betrachten (zum Beispiel mit Hilfe eindimensionaler Bilanzen im Fall von kugelsymmetrischen Vorgängen).

Im Unterschied zu der bereits erläuterten Direkten Numerischen Simulation (DNS) von Partikelströmungen wird bei den Euler-Lagrange-Methoden das verwendete Rechengitter nicht verwendet, um die Oberfläche der Einzelpartikel zu approximieren,

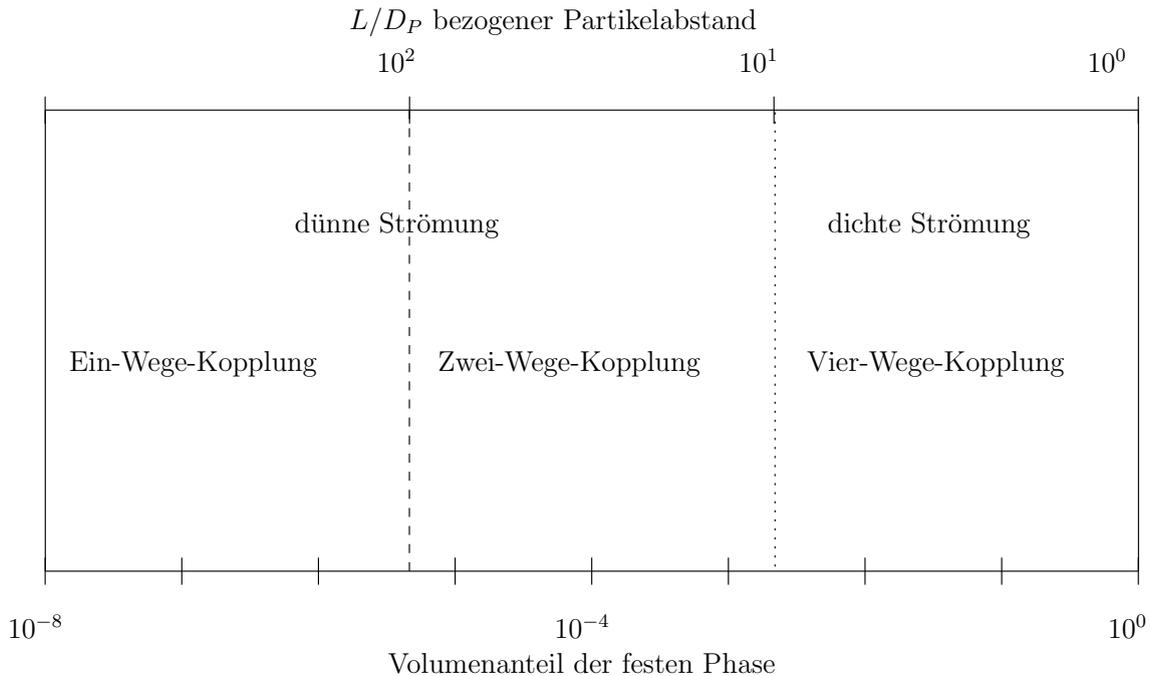
sondern es muss sogar so grob sein, dass wenigstens ein Partikel komplett in eine Rechenzelle passt und nicht der Fall auftreten kann, dass einzelne Gebietszellen zu 100 % mit der festen Phase gefüllt sind. Man muss sich hier bei polydispersen Partikelströmungen entsprechend nach dem lokal vorhandenen Maximaldurchmesser der Partikel richten. Die Verwendung von Euler-Lagrange-Methoden mit sehr wenigen Partikeln pro Zelle ist allerdings auch mit einigen Nachteilen verbunden, da trotz der Lagrange'schen Betrachtung der Partikel das Fluid weiterhin als Kontinuum betrachtet wird und somit die Wechselwirkungsterme zwischen den beiden Phasen gewisse Mindestanforderungen erfüllen müssen, um sie bei der Lösung der kontinuierlichen Feldgleichungen des Fluids verwenden zu können.

Ein wesentlicher Nachteil dieser Methode besteht in der meist sehr großen Partikelanzahl realer technischer Systeme, die schon bei kleineren Laborreaktoren schnell Größenordnungen von weit über eine Million erreichen können. Das Verfolgen aller Partikel solcher Systeme ist mit heutigen Rechenanlagen praktisch nicht abzubilden. Aus diesem Grund werden bei den Euler-Lagrange-Methoden (insbesondere im dünnen Bereich mit hoher Partikelanzahl) häufig sogenannte virtuelle Partikel betrachtet, die mit ihrem Verhalten stellvertretend für viele andere Partikel stehen und damit den Rechenaufwand erheblich reduzieren können.

Die Partikelbewegung selbst kann bei den Euler-Lagrange-Verfahren nur mit Hilfe von semiempirischen Ansätzen berechnet werden, die streng genommen nur für die stationäre Bewegung der Partikel gelten. Relationen, die die Zeitkonstante der Bewegung und damit das instationäre Bewegungsverhalten wiedergeben, sind praktisch nicht bekannt. Zum anderen können die genannten semiempirischen Relationen meist nur den Einfluss einer Größe beschreiben. Damit impliziert eine linear additive Verwendung von mehreren Termen zur Beschreibung der Partikelbewegung eine gewisse Form des Gesamtausdruckes, der so nicht experimentell validiert wurde. Die fehlende Auflösung der Partikeloberfläche forciert z.B., dass das Partikel zwar von einer Seite angeströmt werden kann, jedoch das Geschwindigkeitsfeld hinter dem Partikel (in Bezug auf die Anströmung) nicht entsprechend verändert wiedergegeben werden kann.

In der Theorie sollten weiterhin sämtliche Interaktionen der Festkörper im Wirbelbett in ihrer richtigen zeitlichen Reihenfolge modelliert werden, was letztendlich bedeutet, dass man zum einen sehr häufig die zeitliche Reihenfolge bestimmen muss (z.B. kann man dann lokal nur das erste Kollisionspaar identifizieren und muss dann, aufgrund der veränderten Partikeleigenschaften nach der Kollision, neu bestimmen welches Partikelpaar als nächstes kollidiert) und zum anderen muss der eigentliche Kollisionsvorgang selbst zeitlich aufgelöst werden, was sehr schwierig ist, da die Kontaktzeiten zum Teil extrem klein sein können. Eine Kollisionsbehandlung in dichten Gebieten mit Mehrfachkollisionen stellt zusätzliche Schwierigkeiten bereit. Typische mechanische Modelle der Kollision von Partikeln gehen davon aus, dass nur zwei Partikel zeitgleich miteinander kollidieren können, was im dichten Bereich offensichtlich nicht zutreffen muss. Daher bedient man sich häufig der sogenannten Diskreten Elemente Methode. Die Methode verwendet einfache mechanische Elemente (Feder, Dämpfer etc.) zur Modellierung des Kollisionsverhaltens und bringt damit den Vorteil, dass Mehrfachkollisionen abgebildet werden können.

Sommerfeld (2000a) teilt die verschiedenen Bereiche von Gas-Feststoff-Strömungen in Abhängigkeit der Volumenfraktion der festen Phase bzw. in Abhängigkeit des bezogenen Partikelabstandes ein, wie in Abbildung 2.1 dargestellt. Die in dieser Arbeit behandelten Fälle finden sich im dichten Bereich der Gas-Feststoff-Strömungen wieder. In Abhängigkeit vom Volumenanteil der festen Phase bzw. dem Ausmaß der Kräfte rückwirkung der beiden Phasen aufeinander kann man die Wechselwirkungen der fluiden mit der festen Phasen in drei Gruppen unterteilen: Ein-, Zwei- und Vier-Wege-Kopplungen. Bei der Ein-Wege-Kopplung ist der Anteil der festen Phase so klein, dass zwar die feste Phase von der fluiden beeinflusst wird aber nicht die fluide von der festen. Im Gegensatz dazu wird bei der Zwei-Wege-Kopplung eine Rückwirkung der Partikel auf das Fluid berücksichtigt. Die Vier-Wege-Kopplung findet sich im Bereich dichter Gas-Feststoff-Strömungen wieder und berücksichtigt zum einen die Partikel-Fluid-Wechselwirkung und zum anderen auch den Volumenanteil der festen Phase. Zusätzlich ist dieser Bereich häufig dadurch bestimmt, dass die Partikelbewegung von den Partikel-Partikel- und/oder Partikel-Wand-Kollisionen dominiert wird. In dieser Arbeit wird aufgrund der zum Teil erreichten dichtesten Packung der Feststoffe ausschließlich die Vier-Wege-Kopplung berücksichtigt.



**Abbildung 2.1:** Einteilung der Euler-Lagrange-Methoden nach der Dichte der Strömung bzw. dem bezogenen Partikelabstand nach Sommerfeld (2000a)

Resümierend lässt sich festhalten, dass die Euler-Lagrange-Methoden praktisch nicht einsetzbar sind für industrielle Anlagen (von Kleinstanwendungen abgesehen), jedoch eine detailgenaue Modellierung erlauben. Typische Anwendungen dieser Methode liegen im Bereich der Modellvalidierung anderer einfacherer Methoden (z.B. Euler-Euler-Methoden), dem Erstellen von Referenzlösungen und Betrachtungen von Laboranlagen, wie in dieser Arbeit. Die schnell voranschreitende Entwicklung von Rechenanlagen ist eng an die weitere Entwicklung der Anwendbarkeit der Euler-Lagrange-Methoden gekoppelt und sollte daher in den nächsten Jahren den Bereich der potentiellen Einsatzfelder erheblich erweitern, da insbesondere die Euler-Lagrange-Methoden von der steigenden Zahl der prozessorintern verfügbaren Rechenkerne profitieren. Da die meisten Berechnungen auf Partikelebene stattfinden und sich damit relativ gut parallelisieren lassen (die Berechnungen für ein Partikel sind größtenteils unabhängig vom Geschehen an bzw. in anderen Partikeln), bieten sich gerade Partikelsysteme zur effizienten Parallelisierung an.

### 2.1.3 Euler-Euler-Modelle

Eine Beschreibung aller Phasen einer Gas-Feststoff-Strömung durch Kontinuumsansätze wird im Allgemeinen als Euler-Euler-Ansatz bezeichnet. Alle Phasen werden hier als miteinander wechselwirkende Kontinua betrachtet. Das Übertragen des kontinuierlichen Ansatzes auf die Strömungsmechanik von Festkörpern erzeugt zwangsläufig große Ähnlichkeiten bzgl. der Form der entstehenden Bilanzgleichungen. Die Materialfunktionen wie z.B. der Spannungstensor müssen allerdings angepasst werden, um den veränderten Bedingungen Rechnung zu tragen. Dabei wird auf die kinetische Theorie zurückgegriffen, was die Modellierung recht komplex werden lässt. Typischerweise wird eine feste Phase durch eine ihr eigene Ausprägung einer Materialeigenschaft charakterisiert. Diese Eigenschaften können durch den Durchmesser (bzw. den äquivalenten Durchmesser) aber auch durch Größen wie die Dichte oder die Zusammensetzung gegeben sein. Keine dieser Eigenschaften muss dabei als zeitlich oder räumlich konstant angenommen werden, auch wenn dies zum Beispiel für den Durchmesser häufig der Fall ist.

Die Lösung der Feldgleichungen aller Phasen führt auf lineare Gleichungssysteme, deren Lösung standardisiert ist. Der Vorteil der Verwendung standardisierter Lösungsmethoden verliert allerdings an Bedeutung, wenn man berücksichtigt, dass bei Euler-Euler-Methoden nicht nur einige wenige lineare Gleichungssysteme gelöst werden müssen, sondern im Gegensatz zu einphasigen Berechnungen ganze Sätze an Bilanzgleichungen. Bei einphasigen Berechnungen von strömungsmechanischen Problemen werden typischer Weise die Bilanzen für die Masse, den Impuls, die Energie und ggf. die Spezies sequentiell solange gelöst, bis die gewünschte Fehlertoleranz erreicht wird. Bei den Euler-Euler-Methoden müssen allerdings diese Bilanzgleichungen für alle Phasen berechnet werden und sind zudem auch noch stark gekoppelt. Damit erhöht sich der Rechenaufwand signifikant, und es stellt sich zudem die Frage nach der Stabilität derartiger sequentieller Lösungsmethoden. Nichts desto trotz profitieren die Euler-Euler-Methoden von der wissenschaftlichen Entwicklung in den Bereichen der linearen Gleichungssysteme (aufgrund der höheren Anzahl der Bilanzgleichungen allerdings nicht so stark wie die Euler-Lagrange-Methoden). Typische Randbedingungsarten (Neumann, Cauchy, Dirichlet) lassen sich im Zuge der Lösung

der Feldgleichungen leicht implementieren, da im Gegensatz zu den Euler-Lagrange-Methoden ohne weiteres Ableitungen der gesuchten Größen darstellbar sind.

Es gibt allerdings auch Nachteile dieser Methode. Zum einen impliziert der Kontinuumsansatz, dass genug Partikel pro Gebietszelle vorliegen, damit Mittelungsoperationen ohne große Fehler durchgeführt werden können. Das Einhalten dieser Bedingung wird bei polydispersen Partikelströmungen in Wirbelschichten umso schwieriger, da nach obigen Anmerkungen, diverse Durchmesserklassen betrachtet werden müssen. Es ist aber keineswegs notwendig, auch nur annähernd alle Partikeldurchmesser durch eigene Phasen zu beschreiben. So zeigte z.B. Fan u. Fox (2009), dass es für eine inerte monomodale Partikelverteilung durchaus ausreichend ist, drei bis vier Festphasen zu betrachten. In wie weit diese rein fluiddynamisch motivierten Aussagen auch für reaktive Systeme gelten, ist fraglich, da eine für inerte Strömungen geeignete fluiddynamische Beschreibung nicht zwangsläufig auch geeignet sein muss, um die Einflüsse der modellierten inneren Koordinaten (z.B. die Durchmesser der Phasen) auf die mittlere Reaktivität der festen Phasen beschreiben zu können. Des Weiteren ist die Modellierung der Euler-Euler-Modelle als die komplizierteste der hier vorgestellten Methoden einzustufen (Kollisionen, Spannungstensor etc.). Der Einzelpartikelcharakter der festen Phase geht in dieser Art der Modellierung komplett verloren, was die Modellierung zum Teil erheblich erschwert. Zudem gibt es keinerlei Erweiterungen der Theorie für rotationsbehaftete Partikel, was diese Methode für einige Fälle ungeeignet macht.

## 2.2 Literaturübersicht

Zur Modellierung der Holzvergasung in der Wirbelschicht wird eine enorme Anzahl von Modellen für diverse Vorgänge in den betreffenden Phasen gebraucht. So hat sich der Bereich der inerten Gas-Feststoff-Strömungen in den letzten Jahren von vorzugsweise zweidimensionalen Beschreibungen zu vermehrt dreidimensionalen Modellierungen gewandelt, was sicherlich von der steigenden Effizienz aktueller Rechenanlagen begünstigt wurde. Dabei ist insbesondere die Impulskopplung zwischen den Phasen ein entscheidendes Manko, da es zwar viele Korrelationen gibt, diese

jedoch eine weite Streuung der Ergebnisse hervorrufen. Aktuelle Übersichtsartikel für den Bereich der inerten Wirbelschichten können zum Beispiel in den Arbeiten von Deen u. a. (2007); van der Hoef u. a. (2008) gefunden werden.

Für den Bereich der Simulation des Abbrandes einzelner Biomassepartikel gilt ähnliches. Es gibt eine Vielzahl von Modellen, deren Ergebnisse zum Teil auch durch Experimente validiert wurde. Probleme bestehen allerdings bei der akkuraten Beschreibung der Pyrolyse mit der damit gekoppelten Beschreibung der Teerentstehung und des Teerabbaus in den Partikeln selbst. Zusätzlich sind auch die Stoffwerte der beteiligten Substanzen (Holz, Holzkohle, Teere etc.) und deren Abhängigkeit von den Prozessbedingungen und dem Umsatzgrad mit relativ hohen Unsicherheiten verbunden. Die Modellierung des homogenen bzw. heterogenen Abbaus von Pyrolyseteeren steht aufgrund der vielen Komponenten des Teers und der damit verbundenen potentiell komplexen Reaktionsmechanismen erst am Anfang. Selbst die Frage, was als Teer gilt und was nicht, ist nicht unumstritten, was die Vergleichbarkeit der Literaturergebnisse erheblich erschwert.

Resümierend lässt sich hier feststellen, dass eine Literaturübersicht aller verwendeten Modelle an dieser Stelle nicht zielführend ist. Daher beschränkt sich die Literaturübersicht hier auf Beispiele aus dem Feld der reaktiven Gas-Feststoff-Reaktoren (meist auf Basis von Biomassen und Kohlen) mit Hilfe diverser Methoden (Euler-Lagrange, Euler-Euler, gekoppelte Euler-Euler und Euler-Lagrange Modelle), wobei der Fokus klar auf den Methoden liegt, welche komplexe strömungsmechanische Modellierungen (CFD) berücksichtigen. Einen breiten Überblick über die Modellierung von Mehrphasenströmungen liefern die beiden Bücher von Crowe (2006); Crowe u. a. (1998), welche sich aufgrund ihrer zahlreichen Referenzen für die Einarbeitung in das Thema anbieten.

Ein aktueller und ausführlicher Übersichtsartikel von Gomez-Barea u. Leckner (2010) über die Biomassevergasung in Wirbelschichten kann ggf. herangezogen werden, um sich über weitere Modellierungsarten und -ergebnisse zu informieren.

In einer Reihe von Publikationen von (Papadikis u. a. (2008, 2009a,b,c)) wird eine Kombination aus Euler-Euler und Euler-Lagrange Verfahren präsentiert, welche im Rahmen von FLUENT 6.2 durch UDF's (user defined functions) modelliert

wurde. Die beiden Arbeiten Papadikis u. a. (2008, 2009a) dokumentieren in zwei Teilen einen Vergleich aus zwei- und dreidimensionalen Simulationen eines Wirbelbettes aus Sand, in welches ein Holzpartikel mit einem Durchmesser von 0.0005 m gegeben wird. Das Sandbett wird durch ein Euler'sches Kontinuum entsprechend der kinetischen Theorie granularer Medien für ideal sphärische Partikel modelliert. Die Sandpartikel haben einen einheitlichen Durchmesser von 0.00044 m und eine Dichte von  $2500 \text{ kg/m}^3$ . Der simulierte Reaktor hat eine Breite von 0.04 m und das Bett hat eine Schütthöhe von 0.04 m. Die Anströmung wird durch reinen Stickstoff bei einer Leerrohrgeschwindigkeit von  $0.3 \text{ m/s}$  realisiert. Papadikis u. a. (2008) untersucht die Bewegung des Partikels und die einzelnen Anteile der auf das Partikel wirkenden Kräfte, während die Zersetzung der Partikel unterbunden wird. Dabei werden die Widerstandskraft, die Gewichtskraft und die Auftriebskraft sowie die virtuelle Masse-Kraft berücksichtigt. Die Partikelrotation wird nicht berücksichtigt. Die Impulswechselwirkung des Lagrange'schen Partikels mit der Sandphase wird in Anlehnung an die Verhältnisse in einer Dreiphasenströmung modelliert. Die Blasenbildung innerhalb des Wirbelbettes führt zu recht sprunghaften Änderungen der Kräfte über die gesamte Simulationszeit von 3 s. Vergleiche der Kraftanteile in den zwei- und dreidimensionalen Situationen verdeutlichen signifikante Unterschiede, was als generell akzeptierte Tatsache gelten kann. Leider werden kaum Aussagen bzgl. der verwendeten Simulationsparameter gemacht (Gitterweiten, Randbedingungen, Integratoren der Partikelbewegung etc.). Im zweiten Teil der Arbeit von Papadikis u. a. (2009a) wird der identische Reaktor betrachtet, jedoch unter Berücksichtigung der Zersetzung des Holzes. Holz reagiert dabei in einem ersten Schritt zu Gasen, Teeren und Holzkohle. Die Teere zerfallen dann in einem zweiten Schritt weiter zu Gasen und Holzkohle. Die Partikeltemperatur wird mit einer eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung modelliert, welche Stoffparameter enthält, die vom Umsatzgrad des Holzes linear abhängig modelliert wurden. Konvektion und Strahlung innerhalb des Partikels werden nicht berücksichtigt, was die Form der Energiebilanz erheblich vereinfacht (siehe z.B. Grønli (1996)). Als Ergebnisse werden u.a. die Dichteänderung des Holzpartikels über die Zeit, Temperaturprofile innerhalb des Holzpartikels sowie Anteile der Edukte und Produkte der Pyrolyse an der ursprünglichen Biomasse

über die Zeit gezeigt. Ein detaillierter Vergleich mit experimentellen Daten oder den Ergebnissen anderer Forschergruppen wird leider nicht präsentiert.

In Papadikis u. a. (2009c) wird der Prozess der Pyrolyse eines einzelnen Holzpartikels in einem leeren Reaktor für eine Dauer von 4 s gezeigt. Das Partikel selbst wird wiederum durch eine eindimensionale Energiebilanz und die entsprechenden Kinetiken für die primäre und sekundäre Pyrolyse beschrieben. Es werden Profile der Temperatur, der scheinbaren Dichte der Feststoffe und der Edukte und Produkte der Pyrolyse im Partikel gezeigt. Zusätzlich werden Ergebnisse bzgl. der zeitlichen Änderung der Partikelmasse und der Partikelgeschwindigkeit präsentiert. Das in den Reaktor eingebrachte Partikel wird noch vor Abschluss der Pyrolyse aus dem Reaktor getragen und somit gibt es keine Aussagen über den finalen Zustand der Partikels. Der dokumentierte Ablauf der Partikelhistorie beginnt mit einem Aufwärmen des Partikels, der Pyrolyse bei Bildung der gasförmigen und festen Produkte und endet mit dem Austrag des Partikels. Das Partikel wird durch eine Kugel mit einem Durchmesser von 0.0005 m und einer scheinbaren Dichte von  $700 \text{ kg/m}^3$  modelliert. Innerhalb von 0.8 s ist die Partikeloberfläche so heiß, dass die Pyrolyse beginnt, bei einer festen Anströmtemperatur von 773 K. Nach 2 s hat das Partikel die Außentemperatur angenommen und nach 4 s (dem Austritt aus dem Reaktor) sind noch 37 % der ursprünglichen Biomasse vorhanden. Ca. 40 % der umgesetzten Biomasse sind in Teere übergegangen.

In der Arbeit von Papadikis u. a. (2009b) wird der Einfluss der Partikelschrumpfung auf das Verhalten zweier Partikel mit einem Durchmesser von 0.0005 m in einem Wirbelbett aus Sand untersucht. Das Sandbett wird dabei mit Hilfe eines Euler-Ansatzes als eine Phase beschrieben. Die Schrumpfung der Partikel wird mit zwei verschiedenen Parametersätzen modelliert und führt zu zwei bzgl. der scheinbaren Dichte sehr ähnlichen Partikeln mit unterschiedlicher Größe, aber wiederum unvollendeter Pyrolyse (die Endwerte der Dichten, Massen etc. werden leider nicht genannt). Die vorgestellten Daten haben eine zeitliche Dauer von 4 s bzw. 5 s und sind dreidimensional. Das Modell der Gasphase und die entsprechenden numerischen Aspekte (Gitterauflösung, Integration der Partikeltrajektorien etc.) sind wie bei Papadikis u. a. (2009c) wenig aufschlussreich dokumentiert. Jedoch zeigt sich, dass das Parti-

kelschrumpfen von Bedeutung für das transiente Bewegungs- und Abbrandverhalten eines Partikels ist, während die Profile innerhalb des Partikels stark denen aus der Arbeit von Papadikis u. a. (2009c) ähneln.

Die Arbeit von Lathouwers u. Bellan (2001a) befasst sich mit der Euler-Euler-Modellierung von reaktiven Gas-Feststoff-Wirbelschichten mit Anwendung auf die Pyrolyse von Biomassen. Es werden detailliert alle Modellannahmen beschrieben und insgesamt 5 s Simulationszeit analysiert. Um die Zeit zum Erreichen einer stationären Fluidisierung zu minimieren und damit die Aussagekraft der wenigen Sekunden Rechenzeit zu erhöhen, wurde das Bett im unteren Bereich initial asymmetrisch mit Blasen belegt (die Anfangssituation der Partikel im Bett kann als eine Art abklingende Anfangsbedingung gesehen werden). Eine Parameterstudie dient dazu die Teerausbeute zu maximieren. Der Reaktor hat eine Breite von 0.1 m und eine Höhe von 0.55 m. Die Biomassezuführung ist ähnlich wie bei Abbildung 5.1(a) auf der dem Gasauslass gegenüberliegenden Seite. Die initiale Betthöhe ist mit 0.163 m gegeben. Die Einlasstemperatur wird von 600 K bis 950 K variiert, und es werden die Ausbeuten an Teer, Pyrolysegas und Holzkohle zeitaufgelöst präsentiert. Zusätzlich werden die Einlasstemperatur der Biomasse, die Einlassgasgeschwindigkeit des Fluidisierungsgases, die Orte der Biomassezugabe, die Massenströme der zugegebenen Biomasse und deren Partikelgröße variiert und bzgl. ihrer Teerausbeute bewertet. Der Anschaulichkeit wegen werden diverse Schnappschüsse der Ausbeuten der Produkte, der Volumenfraktionen der Phasen und der Temperaturverteilung gezeigt. In einer weiteren Arbeit (Lathouwers u. Bellan (2001b)) wird eine Optimierung des Teergehalts durchgeführt, gezielte rechenzeitsparende Modellvereinfachungen getestet und ein Scale-Up vorgenommen. Der fluiddynamische Teil der Arbeit wird durch die beiden vorherigen Publikationen Lathouwers (1999); Lathouwers u. Bellan (2000) mit experimentellen Daten verglichen.

In den Publikationen Zhou u. a. (2004a,b, 2003) wird eine Large Eddy Simulation zum Thema Kohleverbrennung vorgestellt, in der die feste Phase mit Hilfe eines diskreten Elementansatzes modelliert wird. Es werden Simulationszeiten von ca. 2 s präsentiert und im Ganzen 1480 Partikel verfolgt (1460 Sandpartikel und 20 reaktive Kohlepartikel). Die Beschreibung des Modells ist sehr ausführlich dargestellt

und alle wesentlichen Parameter der Simulation werden genannt. Unter anderem werden die Wärmeleitung zwischen den Partikeln und diverse Reaktionen stickstoffhaltiger Komponenten berücksichtigt. Der Reaktor selbst ist recht klein mit einer Breite von ca. 0.05 m und einer Höhe von 0.07 m. Die Gitterauflösung ist mit neunmal dreizehn Zellen als grob einzuordnen, wobei die Sandpartikel einen Durchmesser von 0.002 m und die Kohlepartikel Durchmesser zwischen 0.0008 m und 0.002 m haben. Im ersten Teil der Publikation (Zhou u. a. (2004a)) wird die Wirkung der variierten Parameter auf die turbulente Struktur der Strömung untersucht. Unter den variierten Parametern der Simulation befinden sich Größen wie die Einlassgeschwindigkeit, der Partikeldurchmesser der Kohle sowie die Einlasstemperatur des fluidisierenden Gases. Näher analysiert wird u.a. das Partikel-Kollisionsverhalten untereinander und an den Reaktorwänden, Partikelgeschwindigkeitsverteilungen, die mittleren Partikelgeschwindigkeiten sowie die turbulenten Intensitäten der Gas- und Partikelbewegung. Im zweiten Teil der Publikation (Zhou u. a. (2004b)) wird der eigentliche Verbrennungsvorgang näher analysiert. Dabei werden u.a. die Heizraten der Partikel, die energetischen Beiträge zur Partikeltemperatur während der Aufheizung und des Abbrandes, die Produktkonzentrationen sowie die Übertemperatur der Kohlepartikel bzgl. der oben genannten Parametervariation bewertet. Die Energiebilanz der Kohlepartikel wird vereinfacht als nulldimensional angenommen.

Yu u. a. (2007) untersuchen in ihrer Arbeit die Kohlevergasung mit Hilfe eines Euler-Euler-Modells. Die experimentelle Validierung ist dabei der Arbeit von Ocampo u. a. (2003) entnommen. Das zweidimensionale Rechengebiet wird durch 2200 Zellen diskretisiert. Im Ganzen werden die Ergebnisse von sechs verschiedenen Simulationen mit variierenden Parametern interpretiert. Variiert werden die Brennstoff-, Luft- und Wasserdampfmassenströme in den Einlässen und die Temperaturen der zugeführten Ströme. Die Ergebnisse erläutern den Zusammenhang aus Sauerstoffkonzentration und Betttemperatur in Abhängigkeit von der Betthöhe, die Abhängigkeit der lokalen Umsatzraten der Reaktionen des Kohlenstoffs mit Sauerstoff, Wasser und Kohlendioxid vom lokalen Volumenanteil der Kohle sowie die örtlichen Konzentrationsprofile der Hauptbestandteile des Produktgases für die sechs verschiedenen Fälle. Der Vergleich aus experimentellen Daten und den Simulationsergebnissen liefert Abweichungen bis ca. 20 %.

Simsek u. a. (2009) verwendet ein Euler-Lagrange-Verfahren um die Rostfeuerung zu simulieren. Die Simulation berücksichtigt ein zweidimensionales Rechengebiet für die eigentliche Feststoffbewegung (mittels diskreter Elemente Methode) sowie die Kopplung zu einer als dreidimensional betrachteten Brennkammer, in der eine turbulente Strömung mit diversen Gasphasenreaktionen betrachtet wird. Die Berechnung der Brennkammer wird durch ANSYS-CFX bewerkstelligt. Die Schrumpfung der Feststoffe wird nur während der Verbrennung - nicht während Trocknung und Pyrolyse berücksichtigt. Der Feststoff hat bei Simsek u. a. (2009) eine größere Heterogenität als in der vorliegenden Arbeit und berücksichtigt ein Gemisch aus sechs initialen Durchmesserklassen die aus verschiedensten Materialien bestehen können (Papier, Braun- und Steinkohlen, Holz etc.). Zwischen den Partikeln und auch zwischen Brennkammer und den Partikel auf dem sich bewegenden Rost wird der Strahlungsaustausch modelliert, da Strahlung eine der wesentlichen Energietransportmechanismen bei der Rostfeuerung ist. Quantitative Ergebnisse werden in Form von Betttemperaturen über die Betthöhe präsentiert und dabei mit experimentellen Ergebnissen verglichen. Zusätzlich werden Schnappschüsse u.a. der Temperatur und der Methankonzentration in der Brennkammer zusammen mit den Massenanteilen der aus der Pyrolyse resultierenden Kohle auf dem Rost gezeigt.

Zusammenfassend soll hier anhand der Arbeit von Gomez-Barea u. Leckner (2009) dargelegt werden wo Probleme der bisherigen Modellierung der Biomassevergasung zu sehen sind. Gomez-Barea u. Leckner (2009) nennen die folgenden Punkte als wesentliche Mankos der bisherigen Modellierung:

- Modelle der Pyrolyse und der Vergasung sind als Sensitivparameter zu bewerten. Um gute Ergebnisse innerhalb einer Wirbelschichtsimulation zu erhalten, sind detaillierte Aussagen über die Gaszusammensetzung und die Ausbeuten der Pyrolyse für hohe Heizraten und mit der entsprechenden Biomasse bereitzustellen.
- Modelle der Holzkohle- und Teerwandlung sind am wenigsten zufriedenstellend. Die Chemie der Teerwandlung kann als stark entwicklungsbedürftig angesehen werden. Die Holzkohlewandlung wird, obwohl in der Literatur häufig bereitgestellt, sehr vereinfacht modelliert.

- Es gibt keine ausreichende Validierung der Berechnungen durch entsprechende Experimente, insbesondere für größere Anlagen.
- Am besten entwickelt sind die Modelle von Hamel (2001) und de Souza-Santos (1989). Allerdings ist die Gültigkeit der Modelle direkt an die Gültigkeit der semiempirischen Modelle der Fluidodynamik gekoppelt.

## 2.3 Ziel der Arbeit

Ziel der Arbeit ist es, ein Simulationstool zu entwickeln, welches die Holzvergasung in einer Wirbelschicht mit Hilfe eines Euler-Lagrange-Verfahrens beschreibt. Die turbulenten Schwankungen innerhalb der Gasphase sollen mit Hilfe eines Grobstrukturansatzes beschrieben werden. Die Beschreibung der chemischen Vorgänge innerhalb der Wirbelschicht beschränkt sich auf die Verwendung globaler Reaktionskinetiken. Da die Verwendung eines Euler-Lagrange-Verfahrens sehr rechenintensiv ist, soll das entstandene Simulationstool parallelisiert werden, um den Anwendungsbereich des Tools zu vergrößern und die zeitliche Dauer sowie die Anzahl der berücksichtigten Partikel gegenüber der Literatur zu vergrößern und somit die Aussagekraft zu erhöhen. Entsprechend den Darstellungen über Probleme bei der Modellierung der Biomassevergasung in Kapitel 2.2 sollen die heterogenen Reaktionen in Abhängigkeit des Umsatzgrades der Holzkohle modelliert werden und ein möglichst detailreiches Teerabbaumodell verwendet werden.

# Bilanzgleichungen und verwendete Modelle der Gas- und Festphase

## 3.1 Die Gasphase

Die Gasphase innerhalb eines Euler-Lagrange-Verfahrens wird als kontinuierliche Phase beschrieben. Bei der Herleitung der Bilanzgleichungen mehrphasiger Systeme wurde auf die gängige Literatur zurückgegriffen. Zum einen sind dabei die sehr frühen Arbeiten von Anderson u. Jackson (1967, 1969) von Nutzen, da sie ein konsistentes nichtreaktives Modell (ohne Energie- und Speziestransportgleichungen) für die Bilanzgleichungen bereitstellen, welches in der letztgenannten Arbeit z.T. auch experimentell validiert wurde. Darauf aufbauend ist das Buch von Kuo, K. K. (1986) zu nennen, welches zum anderen nun auch die Energie- und Speziestransportgleichungen bereitstellt und somit ein geschlossenes System zur Berechnung der gesuchten Bilanzgrößen der Fluidströmung bereithält.

Des Weiteren sind aus dem Bereich der vollkontinuierlichen Modellierung (sogenannte Euler-Euler-Modelle) die Arbeit von Gidaspow (1994) sowie die zahlreichen Dokumente des Multiphase Flow with Interphase eXchanges (kurz MFIX) Programmes als Basis dieses Kapitel eingegangen. Euler-Euler-Modelle betrachten zwar alle (also auch die festen) Phasen als Kontinua, jedoch ist die fluide Phase und deren Modellierung der hier vorgestellten zumindest artverwandt, wenn nicht teilweise sogar identisch. Des Weiteren dienten die Arbeiten von Klein (1999); Klein u. a. (2001) als

Basis zur Vereinfachung der Bilanzgleichungen, da in dieser Arbeit asymptotische Entwicklungen der üblichen Feldgleichungen zur Beschreibung einphasiger Strömungen zu einem verwertbaren Ergebnis führten, nämlich u.a. der Vernachlässigung der materiellen Ableitung des Druckes in der Energiebilanz 3.6.

Im Folgenden werden hier die verwendeten Bilanzgleichungen der fluiden Phase und zum Teil auch verwendete Materialgesetze erläutert und vorgestellt.

Die globale Massenbilanz ist gegeben durch:

$$\frac{\partial \varepsilon \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_g \mathbf{u}_g) = \sum_{\alpha} \dot{w}_{\alpha,s}, \quad (3.1)$$

wobei  $\varepsilon$ ,  $\rho_g$ , and  $\mathbf{u}_g$  für den Volumenanteil der Gasphase, die Gasdichte und die Geschwindigkeit der Gasphase stehen.

In engem Zusammenhang mit der Massenbilanz steht die Komponentenbilanz der Gasphase, welche in Gleichung (3.2) dargestellt ist.

$$\frac{\partial \varepsilon \rho_g Y_{\alpha}}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_g Y_{\alpha} \mathbf{u}_g) = \dot{w}_{\alpha,g} + \dot{w}_{\alpha,s} \quad (3.2)$$

$Y_{\alpha}$  steht hier für den Massenanteil der Komponente  $\alpha$  in der Gasphase und  $\dot{w}_{\alpha,g}$  für die Netto-Produktionsrate der Komponente  $\alpha$ , welche durch homogene Gasphasenreaktionen hervorgerufen wird. Der Term  $\dot{w}_{\alpha,s}$  stellt in Gleichung (3.2) den Massenaustauschterm der Komponente  $\alpha$  zwischen der festen Phase und der Gasphase dar. Im hier vorliegenden Fall kann dieser Term - je nach Komponente - sowohl ein positives als auch negatives Vorzeichen haben. Die Pyrolyse und die Trocknung des Holzes rufen ausschließlich positive Terme hervor, wohingegen die am Partikel ablaufenden heterogenen Reaktionen ein negatives Vorzeichen (Edukte der Vergasungsreaktionen) als auch ein positives Vorzeichen des Termes  $\dot{w}_{\alpha,s}$  in Gleichung (3.2) verursachen können (Produkte der Vergasungsreaktionen). Details der Berechnung des Termes  $\dot{w}_{\alpha,s}$  in Gleichung (3.2) können den Kapiteln 3.2.6 und 3.2.7 entnommen werden. Die Summe der Massenanteile  $Y_{\alpha}$  ist definitionsgemäß gleich eins. Diffusive Prozesse wurden vernachlässigt.

Die Impulsbilanz der Gasphase kann als

$$\frac{\partial \varepsilon \rho_g \mathbf{u}_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) + \varepsilon \nabla p + \varepsilon (\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}) + \varepsilon \rho_g \mathbf{g} = \mathbf{F}_s \quad (3.3)$$

geschrieben werden, wobei  $p$ ,  $\boldsymbol{\tau}$  und  $\mathbf{g}$  Bezeichner für den Druck, den Spannungstensor und die Gravitationskraft sind.  $\mathbf{F}_s$  in Gleichung (3.3) steht für den Impulstransport zwischen der festen und gasförmigen Phase und wird wie in der Arbeit von Gerber (2006b) beschrieben berechnet. Der Spannungstensor kann in der herkömmlichen Schreibweise einer einphasigen Strömung verwendet werden als:

$$\boldsymbol{\tau} = -\mu_{eff} \left( \nabla \mathbf{u}_g + \nabla \mathbf{u}_g^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{u}_g \right),$$

wobei  $\mu_{eff}$  die effektive dynamische Viskosität der Gasphase ist. Die effektive dynamische Viskosität ist die Summe aus einem laminaren Wert und einer sogenannten turbulenten dynamischen Viskosität, welche an sich kein Stoffwert ist, sondern aus einem Schließungsansatz für die Turbulenz der Strömung resultiert. In dieser Arbeit wurde der Ansatz von Marchisio u. Fox (2007) verwendet, der sich wie folgt darstellen lässt:

$$\mu_{eff} = \varepsilon(\mu_{lam} + \mu_{turb}) = \varepsilon\mu_{lam} + \varepsilon\rho_g(c_t\Delta)^2 \sqrt{S_{ij} : S_{ij}}. \quad (3.4)$$

$\Delta$  ist hier als  $\Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$  definiert und der Term  $S_{ij}$  ist durch

$$S_{ij} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}_g + \nabla \mathbf{u}_g^T) \quad (3.5)$$

gegeben.  $\mu_{lam}$  und  $\mu_{turb}$  stehen für die laminare und turbulente Viskosität. Der Ansatz fällt durch seine starke Ähnlichkeit zu dem einphasigen Ansatz aus Smagorinski (1963) auf und kann daher als leichte Modifikation des Originalansatzes unter Berücksichtigung des Volumenanteils der festen Phase gedeutet werden.

Die Energiebilanz wird in dieser Arbeit in Form einer Gesamtenthalpiebilanz behandelt und enthält somit keinerlei chemische Quellterme:

$$\frac{\partial \varepsilon \rho_g h}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{u}_g \rho_g h) + \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{q}) = \dot{Q}_s. \quad (3.6)$$

In Gleichung (3.6) stehen  $\mathbf{q}$  und  $\dot{Q}_s$  für die phaseninterne Wärmeleitung und den Energieaustauschterm zwischen der festen und gasförmigen Phase. Die Summe aus innerer und chemischer Enthalpie ist durch  $h$  benannt. Ein häufig in Energiebilanzen auftretender Term, die materielle Ableitung des Druckes, wird in dieser Arbeit nicht berücksichtigt, denn in Arbeiten, die sich speziell mit Strömungen geringer Machzahl beschäftigen (Klein (1999); Klein u. a. (2001)), stellte sich heraus, dass dieser Term

mit dem Quadrat der Machzahl skaliert und somit einen vernachlässigbaren Einfluss hat.

Letztendlich wird natürlich trotz der Verwendung einer Gesamtenthalpiebilanz die Temperatur zur Auswertung diverser Gleichungen gebraucht (chem. Kinetiken, Beziehungen der Transportkoeffizienten, Partikelmodell der Festphase etc.), weshalb die Temperatur nach Bestimmung der Gesamtenthalpie mit Hilfe eines Newton-Verfahrens berechnet wird. Die Gesamtenthalpie  $h$  ergibt sich als Summe der Gesamtenthalpien der einzelnen chemischen Komponenten  $h_\alpha$  zu

$$h(T) = \sum_{\alpha} Y_{\alpha} h_{\alpha}(T). \quad (3.7)$$

Jede der Gesamtenthalpien der einzelnen chemischen Komponenten hängt ihrerseits von der Temperatur und der komponentenspezifischen Standardbildungsenthalpie  $\Delta h_{\alpha}^0$  ab:

$$h_{\alpha}(T) = \Delta h_{\alpha}^0 + \int_{T^0}^T c_{p,\alpha}(T) dT,$$

wobei hier die Annahme eines idealen Gases verwendet wurde, da die Enthalpie hier als nicht druckabhängig angenommen wurde (das totale Differential der Enthalpie ergibt i.A. eine Druck und Temperaturabhängigkeit). Die tatsächliche Implementation der Wärmekapazitäten in OpenFOAM beruht allerdings auf einer polynomialen Gleichung in Form der Temperatur und beinhaltet keine explizite Darstellung der Standardbildungsenthalpie  $\Delta h_{\alpha}^0$ .

Um den Satz an Bilanzgleichungen zu schließen, wird die ideale Gasgleichung zur algebraischen Kopplung aus dem thermodynamischen Druck  $p_{thermodynamisch}$ , der Temperatur  $T$  und der über die Massenanteile der einzelnen Spezies gewichteten speziellen Gaskonstanten  $\sum_{\alpha} Y_{\alpha} R_{\alpha}$  verwendet:

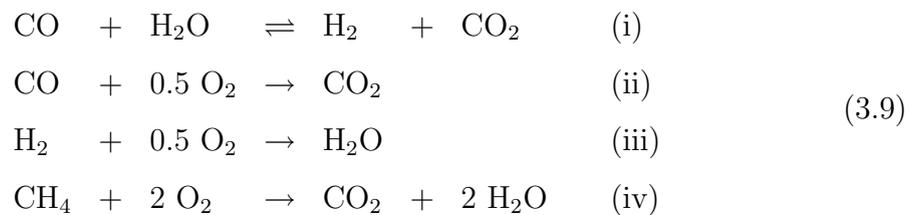
$$p_{thermodynamisch} = \rho_g T \sum_{\alpha} Y_{\alpha} R_{\alpha}. \quad (3.8)$$

Der thermodynamische Druck ist in dieser Arbeit entsprechend den Darstellungen in Klein (1999); Klein u. a. (2001) als zeitlich und räumlich konstant angenommen worden. Der Druck in Gleichung (3.3) entspricht daher einem dynamischen Druck, wie er in inkompressiblen Systemen berechnet wird und hat somit keinerlei expliziten Einfluss auf Dichte, Temperatur oder Zusammensetzung.

### 3.1.1 Homogene Gasphasenchemie

Die homogene Chemie in der Gasphase wird wie die heterogene auch mit Hilfe von Globalreaktionen modelliert. Dabei werden in dieser Arbeit die Oxidation von Wasserstoff, Methan und Kohlenmonoxid als irreversible Vorgänge betrachtet und als einzige reversible Gasphasenreaktion die Wassergas-Shift-Reaktion. Zusätzlich wird der homogene Zerfall von zwei Teersorten modelliert.

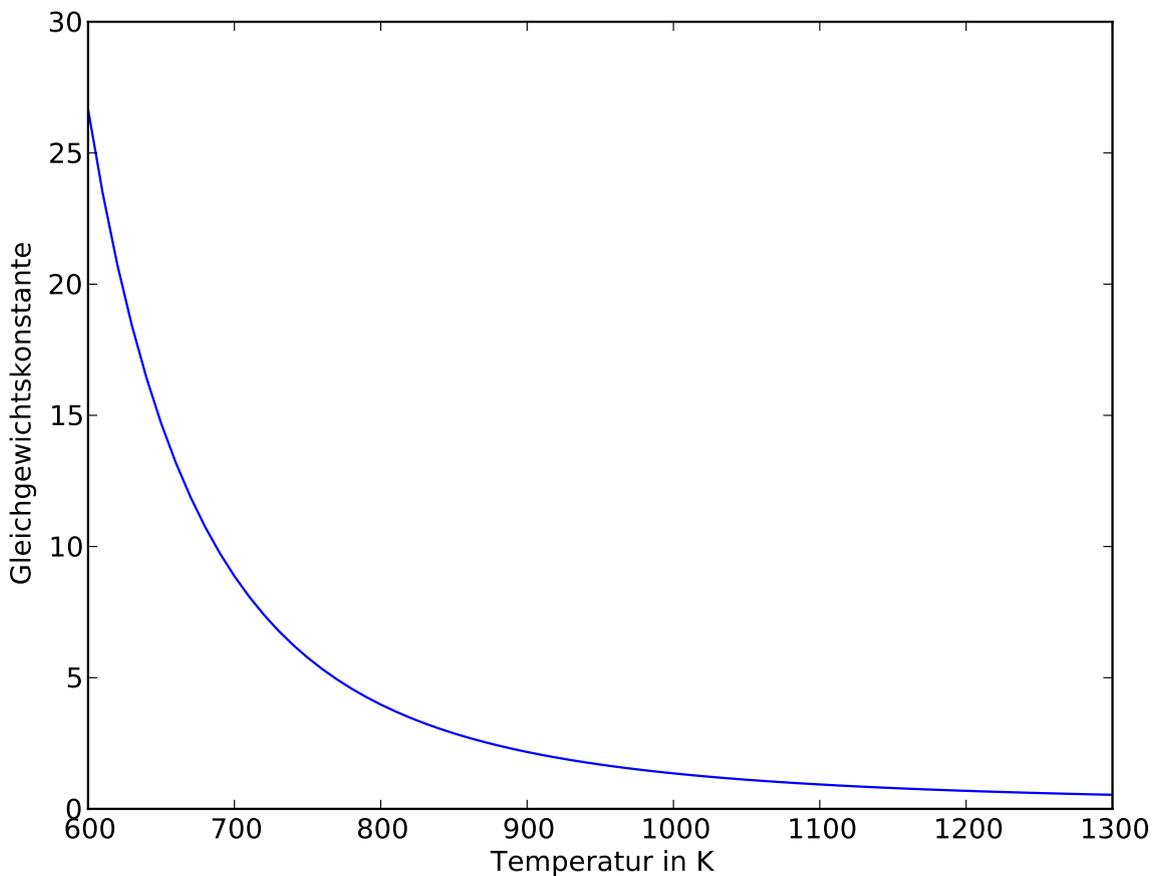
Die Verwendung der globalen Kinetiken ist natürlich damit verbunden, dass die Messbedingungen zum Teil Eingang in die hier verwendeten Kinetiken gefunden haben. Der in dieser Arbeit berücksichtigte Reaktionsmechanismus (ohne Teerzerfall) ist in Gleichung (3.9) abgebildet.



Die sehr einfache Beschreibung der chemischen Reaktionen in der Gasphase in dieser Arbeit liegt im hohen Gesamtrechenaufwand von reaktiven Euler-Lagrange-Verfahren begründet. Detaillierte Beschreibungen sind an dieser Stelle eher unüblich (siehe zum Beispiel Zhou u. a. (2004a)) und würden die Rechenlast weiter enorm erhöhen. Die gewählten Reaktionen sind dabei typisch für diese Modellierungsart und berücksichtigen die wesentlichen chemischen Vorgänge.

Da nur eine reversible Reaktion in dieser Arbeit berücksichtigt wurde, sind die Ergebnisse unter Umständen stark von dieser Reaktion abhängig bzw. ihrer Gleichgewichtslage abhängig. Aus diesem Grund zeigt Abbildung 3.1 die Gleichgewichtskonstante der Wassergas-Shift-Reaktion (gezeigt wird die Gleichgewichtskonstante der Rückreaktion aus Gleichung (3.9)). Die Gleichgewichtskonstante deutet darauf hin, dass bei niedrigen Temperaturen das Gleichgewicht auf Seite des Kohlendioxids sein wird. Die Gleichgewichtskonstante sinkt bei ca. 1100 Kelvin unter eins und liefert daher Gleichgewichte die mit steigender Temperatur tendenziell immer stärker auf der Seite des Kohlenmonoxids liegen. Da dies rein thermodynamische Betrachtungen

sind, bleibt hier anzumerken, dass bei niedrigen Temperaturen mit deutlich kleineren Umsatzraten zu rechnen ist als bei hohen.



**Abbildung 3.1:** Gleichgewichtskonstante der Wassergas-Shift-Reaktion nach Hiller u. Reimert (2010)

Die verwendeten Kinetiken für die in Gleichung (3.9) gezeigten Reaktionen sind in Tabelle 3.1 dargestellt.

Der homogene Zerfall der bei der primären Pyrolyse entstehenden Teere wird anhand des Modells von Rath u. Staudinger (2001) modelliert. Dabei entstehen drei Teere von denen zwei als homogen abbaubar angenommen werden. OpenFOAM erlaubt die Eingabe von Ratenausdrücken im CHEMKIN-Format und hat damit eine Standardschnittstelle für chemische Kinetiken. Da wie im Kapitel 3.1 beschrieben, eine Gesamtenthalpiebilanz verwendet wird, gibt es keine explizite Eingabemöglichkeit für die Reaktionsenthalpie einzelner Reaktionen, da sich die Reaktionsenthalpie aus den polynomialen Ausdrücken der Wärmekapazitäten der an einer Reaktionen beteiligten Stoffe ergibt.

Reaktionsnummer und Ratenausdruck	Literaturreferenz
(i) $r_{[CO]} = -10^{6.44} \cdot e^{-\frac{12.56}{RT}} [CO]^{1.0} [H_2O]^{1.0}$	Biba u. a. (1978)
(ii) $r_{[CO]} = -10^{14.6} \cdot e^{-\frac{167.36}{RT}} [CO]^{1.0} [H_2O]^{0.5} [O_2]^{0.25}$	Dryer u. Glassman (1973)
(iii) $r_{[H_2]} = -10^{12.3} \cdot e^{-\frac{109.202}{RT}} [H_2]^{1.0} [O_2]^{1.0}$	Mitani u. Williams (1980)
(iv) $r_{[CH_4]} = -10^{13.2} \cdot e^{-\frac{202.505}{RT}} [CH_4]^{0.7} [O_2]^{0.8}$	Dryer u. Glassman (1973)
Einheiten der Ratenausdrücke mol/cm <sup>3</sup> s, Einheit der Gaskonstante kJ/molK	

**Tabelle 3.1:** Kinetische Daten der homogenen Gasphasenreaktionen

Der Zerfall von Teeren in der Arbeit von Rath u. Staudinger (2001) berücksichtigt keine speziellen Komponenten für den Teer sondern geht von virtuellen Teerkomponenten aus. Das ist insofern gängig in der Literatur, als das der bei der Pyrolyse entstehende Teer aus sehr vielen (Größenordnung 100) in ihren Anteilen variierenden Komponenten besteht und somit Vereinfachungen notwendig sind. Allerdings zeigen diese Vereinfachungen bei der Implementation der Teerzerfallskinetiken in OpenFOAM einige Schwächen.

Die von Rath u. Staudinger (2001) veröffentlichten Daten für den Teerzerfall beinhalten Massenfraktionen (siehe Tabelle 3.2) der beim Teerzerfall entstehenden Komponenten. Auf Basis der veröffentlichten Massenfraktionen lassen sich allerdings keine sinnvollen Stoffe finden, die den oben genannten Bedingungen entsprechen. Als Teere werden Benzol, Ethanol und Propanol gewählt, wobei Benzol als der nicht abbaubare Teer gewählt wurde. Diese Stoffauswahl ist an sich vollkommen willkürlich, da in der Arbeit von Rath u. Staudinger (2001) keine konkreten Spezies genannt werden. Ethanol und Propanol sind somit aus rein energetischen Gründen gewählt worden und gelten im Allgemeinen nicht als Teervertreter. Die Reaktionsenthalpie der Teerzerfallsreaktionen wird damit durch die Wärmekapazitäten der Teere und ihrer Zerfallsprodukte bestimmt und ist endotherm.

Die Endothermie der Teerzerfallsreaktionen wurde durch die Wahl der beiden zersetzlichen Teere (Ethanol und Propanol) sowie durch die Wahl von C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> als Produkt festgelegt. Die Wahl von typischen Teersubstanzen (meist Aromaten) als repräsentative Teersubstanzen führt direkt auf stark exotherme Reaktionen, obwohl das Cracken von Teeren als endothermer Prozess bekannt ist. Rath u. Staudinger

(2001) spezifiziert nur einen Gesamtwert der bei der Teerzersetzung entstehenden Kohlenwasserstoffe, da sich ansonsten Konsistenzprobleme innerhalb der Ergebnisse ergeben. Die Wahl von  $C_2H_2$  als Produkt an Stelle von  $CH_4$  fiel ebenfalls aufgrund der sich ergebenden Reaktionsenthalpie der Teerzersetzung (Methan würde die Reaktionsenthalpie ins exotherme verschieben). Die kinetischen Daten des als Reaktion erster Ordnung angenommenen Teerzerfalls sind in Tabelle 3.3 aufgelistet.

Gaskomponente	Ethanol	Propanol
CO	0.602	0.534
CO <sub>2</sub>	0.121	0.085
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	0.137	0.211
H <sub>2</sub> O	0.14	0.17

**Tabelle 3.2:** Massenanteile der beim Teerzerfall entstehenden Gase nach Rath u. Staudinger (2001)

Gaskomponente	Ethanol	Propanol
A in 1/s	$3.076 \cdot 10^3$	$1.13 \cdot 10^6$
E in kJ/mol	66.3	109.0
a	1.0	1.0
kinetischer Ansatz $r = A \cdot e^{-\frac{E}{RT}} \cdot A^a$		

**Tabelle 3.3:** Kinetische Daten des Teerzerfalls nach Rath u. Staudinger (2001)

In dieser Arbeit wurde ein Splittingverfahren erster Ordnung zur getrennten Integration der Quellterme der einzelnen Gasphasenkomponenten aufgrund von homogenen chemischen Gasphasenreaktionen und den restlichen Feldgleichungen verwendet. Zur Integration der homogen chemischen Quellterme stehen in OpenFOAM die in Kapitel 3.2.8 genannten Integrationsverfahren zur Verfügung. Die Ergebnisse dieser Arbeit basieren bzgl. der homogen chemischen Quellterme ausschließlich auf der Integration mit dem Verfahren von Cash u. Karp (1990).

## 3.2 Die Festphase

Die Bilanzgleichungen der festen Phase sind innerhalb der Euler-Lagrange-Modellierung in einfacher Form gegeben (im Vergleich mit der Euler-Euler-Modellierung) und bieten einen natürlichen Zugang zu den gesuchten Größen. Die gesuchten Größen sind hier die Masse, die Temperatur, die Zusammensetzung, die Größe, die Geschwindigkeit, der Ort und die Rotationsgeschwindigkeit jedes einzelnen Partikels.

Die Partikel werden in dieser Arbeit generell als kugelförmig angenommen. Der Einfluss dieser Annahme ist rechenstechnisch nicht zu unterschätzen, da die Kollisionsdynamik nicht kugelförmiger Partikel um einiges komplizierter ist (siehe Schwager u. Pöschel (2005)). Die Partikelbewegung und der Partikelabbrand nicht kugelförmiger Partikel können ohne deutlich größeren Aufwand anhand der Sphärizität gut modelliert werden. Die Sphärizität eines beliebigen Körpers ist als Oberfläche einer volumengleichen Kugel im Verhältnis zur Oberfläche des Körpers definiert. Der Einfluss der Sphärizität auf die für die Bewegung eines Partikels maßgebliche Widerstandskraft ist in der Literatur gut beschrieben, allerdings kaum für andere am Partikel angreifenden Kräfte oder Momente. Der Abbrand eines Partikels ist maßgeblich durch die Form des Partikels beeinflusst, wie zum Beispiel die Arbeit von Lu (2006) zeigt. Der Einfluss der Partikelform kann durchaus Faktor zwei bis drei bei der Gesamtumsatzzeit des Partikels ausmachen.

Effekte, die die Änderung des Ortes, der Geschwindigkeit und der Rotationsgeschwindigkeit beeinflussen, werden in Kapitel 3.2.1, 3.2.3 und 3.2.2 beschrieben. Kapitel 3.2.1 zeigt die eigentlichen Bewegungsgleichungen (siehe Gleichung (3.10)), wohingegen in den Kapitel 3.2.2 und 3.2.3 die am Partikel angreifenden Kräfte und Momente diskutiert werden. Die Berechnung der Masse, der Temperatur, der Zusammensetzung und der Größe des Partikels wird in den Kapiteln 3.2.5, 3.2.6 und 3.2.7 erklärt. Die Kapitel 3.2.4 und 3.2.8 dokumentieren die Lösungsstrategien der Partikelbewegung und des reaktiven Partikelmodells.

Die Bewegungsgleichungen der Partikel innerhalb der Euler-Lagrange'schen Modellierung basieren auf (semi-) empirischen Gesetzmäßigkeiten, deren Basis häufig in der

Lösung spezieller Umströmungsprobleme einer Kugel für schleichende Strömungen und stationäre Bedingungen liegt.

### 3.2.1 Impulsbilanz der Partikel - Bewegungsgleichungen

Die Bilanz des Impulses eines Partikels wird hier zusammen mit dem Pendant der Drehimpulsbilanz der fluiden Phase behandelt. Die Änderung des Ortes ergibt sich aus der Tatsache, dass die erste materielle Ableitung des Ortes die Geschwindigkeit ist. Zusammenfassend ergeben sich die Bewegungsgleichungen eines Partikels zu:

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} &= \mathbf{u}_p, \\ \frac{dm_p\mathbf{u}_p}{dt} &= \sum_{i=1}^n \mathbf{F}_i, \\ \frac{dI_p\boldsymbol{\omega}_p}{dt} &= \sum_{i=1}^m \mathbf{T}_i,\end{aligned}\tag{3.10}$$

wobei  $\mathbf{x}_p$  den Ort,  $\mathbf{u}_p$  die Geschwindigkeit,  $\boldsymbol{\omega}_p$  die Rotationsgeschwindigkeit und  $m_p$  die Masse des Partikels bezeichnen.  $I_p = \frac{2}{5}m_p r_p^2$  steht in Gleichung (3.10) für das Massenträgheitsmoment eines Partikels, wobei in dieser Arbeit bzgl. des Massenträgheitsmomentes immer davon ausgegangen wird, dass das Partikel eine isotrope Massenverteilung besitzt und somit Effekte wie die Pyrolyse (es entsteht typischer Weise am äußeren Rand des Partikels zuerst Holzkohle während in der Mitte des Partikels noch Holz sein kann) nicht auf die Bestimmung des Massenträgheitsmomentes einwirken. Der Radius eines Partikels ist durch  $r_p$  gegeben. Die Größen  $\mathbf{F}_i$  und  $\mathbf{T}_i$  in den Bewegungsgleichungen eines Partikels (3.10) berücksichtigen die an dem Partikel angreifenden Kräfte (Widerstandskraft, Kollisionskräfte etc.) und Momente (Kollisionsmomente etc.). Gleichung (3.10) zeigt, dass die Masse eines Partikels  $m_p$  sowie deren Massenträgheitsmoment  $I_p$  in den zeitlichen Ableitungen der linken Seite stehen und somit die Änderung der Masse (bzw. der Dichte), z.B. durch den Partikelabbrand, und des Durchmessers, z.B. während der Pyrolyse und der Vergasung, direkt auf die zu ermittelnden Trajektorien der Partikel wirken. Zur Lösung dieses Satzes an Bewegungsgleichungen müssen entsprechende Anfangsbedingungen vorgegeben werden.

### 3.2.2 Partikelkräfte

Es gibt ein Vielzahl an Kräften, die an einem Partikel wirken, wenn sich dieses Partikel in einem strömenden Fluid befindet. Eine sehr nützliche Darstellung der Partikelkräfte findet sich in Sommerfeld (2000b). In dieser Arbeit wird jede, der hier kurz besprochenen Kräfte, vorgestellt und am Ende auf ihre Bedeutung für verschiedene Systeme geprüft. Die dabei untersuchten Systeme sind Kupferpartikel in Luft, Glaspartikel in Luft und Luftblasen in Wasser, welche wegen ihrer Unterschiede im Dichteverhältnis von disperser und kontinuierlicher Phase gewählt wurden. Basis dieser Untersuchung ist die Arbeit von Hjelmfeld u. Mockros (1966), in der via Fourieranalyse die Amplitude (Verhältnis der Partikelgeschwindigkeit zur Fluidgeschwindigkeit) und die Phasenverschiebung (Zeitverzug der Partikelreaktion) der Lösung der entstehenden Bewegung berechnet wurde. Die Betrachtung gilt ausschließlich den Kräften, die bei kleinen Reynoldszahlen (hier kommen verschiedene Definitionen der Reynoldszahlen ins Spiel, die dem jeweils zugrunde liegenden Effekt angepasst wurden) gelten und somit auch analytisch bestimmbar sind. Diese Tatsache sollte nicht darüber hinwegtäuschen, dass eine gewisse Generalität bzgl. der Reynoldszahlabhängigkeit der Untersuchung gegeben ist, da die allgemeinen Bestimmungsausdrücke der angreifenden Kräfte zumeist als Abweichungen der analytischen Beziehungen definiert sind und somit angenommen werden kann, dass es sich eben um Abweichungen handelt und damit der Hauptanteil der Wirkung einzelner Effekte bereits im analytisch gegebenen Anteil der Kräfte liegt. Andernfalls wäre eine Definition eines Abweichungsfaktors sinnlos, da der Referenzwert der Abweichung keinerlei Bedeutung hätte. Die in allen analytischen Ausdrücken implizierte Ungestörtheit der Partikel und der Strömung erlaubt eine Verwendung der Ausdrücke nur in dünnen Strömungen (Bereich der Ein-Wege-Kopplung, siehe dazu auch Abbildung 2.1). Die Art der Strömung hängt nach Crowe (1981) wesentlich vom Verhältnis zweier Zeitskalen ab: der Zeit zwischen zwei Kollisionen  $\tau_C$  (dem Reziprok der Kollisionsfrequenz) und der Reaktionszeit eines Partikels  $\tau_P$ , welche nur aufgrund von Widerstandskräften wie folgt definiert ist

$$\tau_P = \frac{\rho_P d_P^2}{18 \mu_F f_D}, \quad (3.11)$$

mit  $f_D$  als Abweichungsfaktor zur Widerstandskraftberechnung bei nicht Stokes'schen Verhalten (keine schleichende Strömung) mit Werten größer eins. Ist dann  $\frac{\tau_P}{\tau_C} < 1$  handelt es sich um eine dünne Strömung, andernfalls um eine dicke.

Es folgt eine kurze Darstellung der am Partikel angreifende Kräfte, deren Details (insbesondere der Implementation in die bestehende Simulationssoftware und der Kraftbeiwerte) in der Arbeit von Gerber (2006a,b) aufgezeigt sind.

### Widerstandskraft

Die Widerstandskraft einzelner Partikel in strömenden Fluiden kann hier ohne Übertreibung als eine der am besten erforschten Einflüsse einer Strömung auf Partikel dargestellt werden. Diese Kraft vereint sowohl Reibungseffekte als auch Formwiderstandseffekte und wurde bereits sehr früh in der Arbeit von Stokes (1851) für schleichende Strömungen untersucht. Das treibende Potential der Widerstandskraft ist die Differenzgeschwindigkeit zwischen Fluid und Partikel:

$$\mathbf{F}_W = \frac{3\rho_F m_P C_W (\mathbf{u}_F - \mathbf{u}_P) |\mathbf{u}_F - \mathbf{u}_P|}{4\rho_P D_P} \quad (3.12)$$

mit dem Beiwert der Widerstandskraft  $C_W$ . Es gibt eine Vielzahl von Relationen zur Bestimmung des Reibungsbeiwertes (z.B. Martin (1980); Schiller u. Naumann (1933)). Generell ist der Beiwert als Funktion der Partikelreynoldszahl, die wie folgt definiert ist, gegeben:

$$Re_P = \frac{D_P |\mathbf{u}_F - \mathbf{u}_P|}{\nu_F}. \quad (3.13)$$

### Saffmann-Kraft

Die Saffmannkraft ist in den Arbeiten Saffmann (1965, 1968) untersucht worden. Aufgrund eines Gradienten im anströmenden Fluidgeschwindigkeitsfeld erfährt das Partikel eine Kraft, die senkrecht zur Anströmung wirkt und das Partikel zu höheren Geschwindigkeiten hin treibt. Der Zusammenhang lässt sich als:

$$\mathbf{F}_S = \frac{\rho_F \pi D_P^3 C_S}{8} ((\mathbf{u}_F - \mathbf{u}_P) \times \boldsymbol{\omega}_F) \quad (3.14)$$

darstellen, dabei ist  $\boldsymbol{\omega}_F$  die Rotation der Fluidgeschwindigkeit. Dabei steht  $C_S$  für den Beiwert der Saffmannkraft, der wiederum abhängig ist von der Partikelreynoldszahl und der wie folgt definierten Reynoldszahl der Saffmannkraft:

$$Re_S = \frac{|\boldsymbol{\omega}_F| D_P^2}{\nu_F}. \quad (3.15)$$

Diese Kraft wirkt aufgrund der Abhängigkeit vom Gradienten des Fluidgeschwindigkeitsfeldes insbesondere an Gebietswänden und Grenzen zwischen den Phasen, da dort die zu erwartenden Gradienten am größten sein werden, bedingt durch die Haftbedingung des Fluids an festen Wänden bzw. die starke Geschwindigkeitsänderung am Rand von Gasblasen im Bett, verursacht durch starke Änderung der lokalen Volumenanteile der Phasen. Geeignete Korrelationen des Beiwertes sind z.B. in Dandy u. Dwyer (1990) und Mei (1992) gegeben.

### Magnus-Kraft

Die Quantifizierung der Magnuskraft geht auf Arbeiten von Rubinow u. Keller (1961) und Crowe u. a. (1998) zurück. Die Magnuskraft ist dabei der Saffmannkraft sehr ähnlich, jedoch resultiert sie aus der Eigenrotation des Partikel in einer gleichförmigen Anströmung. Der formelmäßige Zusammenhang ist gegeben durch:

$$\mathbf{F}_M = \frac{\rho_f}{8} \pi D_P^2 C_M |\mathbf{u}_F - \mathbf{u}_P| \frac{\boldsymbol{\Omega} \times (\mathbf{u}_F - \mathbf{u}_P)}{|\boldsymbol{\Omega}|}, \quad (3.16)$$

wobei  $C_M$  der Beiwert der Magnuskraft ist und  $\boldsymbol{\Omega}$  als Differenz der Rotationen des Fluids und des Partikels definiert ist als:

$$\boldsymbol{\Omega} = \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u}_F - \boldsymbol{\omega}_P. \quad (3.17)$$

Korrelationen für den Beiwert, der hier eine Funktion der Partikelreynoldszahl und der Größe  $Re_R$  (siehe Gleichung (3.18)) ist, sind z.B. in Osterle u. Dinh (1998) zu finden.

$$Re_R = \frac{|\boldsymbol{\Omega}| D_P^2}{\nu_F} \quad (3.18)$$

### Druckkraft

Eine resultierende Kraft an einem Partikel entsteht durch einen lokalen Druckgradienten, wobei die Längenskala zur Bildung des Gradienten größer als der Partikeldurchmesser sein soll. Der Zusammenhang aus Druckkraft und Druckgradienten ist im Folgenden gegeben:

$$\mathbf{F}_P = -\frac{m_p}{\rho_p} \nabla p. \quad (3.19)$$

### Added-Mass-Kraft

Ändert ein Partikel in einer Fluidströmung seine Geschwindigkeit so wird zwangsläufig auch ein gewisser Teil des umgebenden Fluids seine Geschwindigkeit ändern. Die Masse des mitbewegten Fluids nennt man "Added Mass", da sie sich näherungsweise wie eine zusätzliche Partikelmasse verhält. Der zu berücksichtigende Term innerhalb der Gleichung (3.10) für die Added-Mass-Kraft sieht wie folgt aus

$$\mathbf{F}_A = \frac{1}{2} C_A \rho_F \frac{m_P}{\rho_P} \frac{d}{dt} (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p), \quad (3.20)$$

wobei  $C_A$  ein Beiwert zur Berücksichtigung höherer Partikelreynoldszahlen ist, der der Arbeit von Odar u. Hamilton (1964) entnommen werden kann.

### Basset-Kraft

Die Basset-Kraft liegt in der sich instationär verändernden Grenzschicht eines Partikels während einer Geschwindigkeitsänderung begründet. Dabei gilt folgender Ansatz für die Basset-Kraft:

$$\mathbf{F}_B = 9 \sqrt{\frac{\rho_F \mu_F}{\pi}} \frac{m_p}{\rho_p d_p} C_B \left( \int_0^t \frac{d(\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p)}{dt} \frac{1}{(t - \tau)^{0.5}} d\tau + \frac{(\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p)_0}{\sqrt{t}} \right), \quad (3.21)$$

wobei  $C_B$  wiederum ein Beiwert ist, der die Berücksichtigung höherer Partikelreynoldszahlen erlaubt und der Arbeit von Odar u. Hamilton (1964) entnommen werden kann. Aus Gleichung (3.21) läßt sich klar erkennen, dass es sich bei der Basset-Kraft um eine Art abklingende Anfangsbedingung handelt (natürlich muss das Geschwindigkeitsfeld des Fluids nicht stationär sein).

### Gewichtskraft und Auftrieb

Eine der Kräfte, die in einer Gas-Feststoff-Strömung dominieren, ist durch die folgende Gleichung gegeben:

$$\mathbf{F}_G + \mathbf{F}_A = V_P (\rho_P - \rho_F) \mathbf{g}, \quad (3.22)$$

wobei die Auftriebskraft  $\mathbf{F}_A$  häufig gegenüber der Gewichtskraft  $\mathbf{F}_G$  vernachlässigt wird, da der Einfluss des verdrängten Volumens aufgrund des Dichteverhältnisses zwischen fester und fluider Phase sehr klein ist.

### Partikelkontaktkräfte und Partikelkontaktmomente

Diese Art der Kräfte geht auf die Interaktion zwischen den Partikeln zurück und wird ausführlich in Kapitel 3.2.3 beschrieben. Eine Beeinflussung der Kollisionsdynamik durch das die Partikel umgebende viskose Fluid (siehe z.B. Yang (2006)) wird hier nicht berücksichtigt, da das die Partikel umgebende Gas deutlich zu dünn ist, um hier nennenswerte Effekte hervorzurufen.

### Partikelrotation

Die Eigenrotation der Partikel wird durch die folgende Gleichung beschrieben:

$$\mathbf{T} = \frac{\rho_F}{2} \left( \frac{D_P}{2} \right)^5 C_R |\boldsymbol{\Omega}| \boldsymbol{\Omega}, \quad (3.23)$$

wobei der Beiwert  $C_R$  aus den Beziehungen der Arbeiten von Dennis u. a. (1980); Rubinow u. Keller (1961); Sawatzki (1970) verwendet wurde.

### Relevante Kräfte einer Gas-Feststoff-Strömung

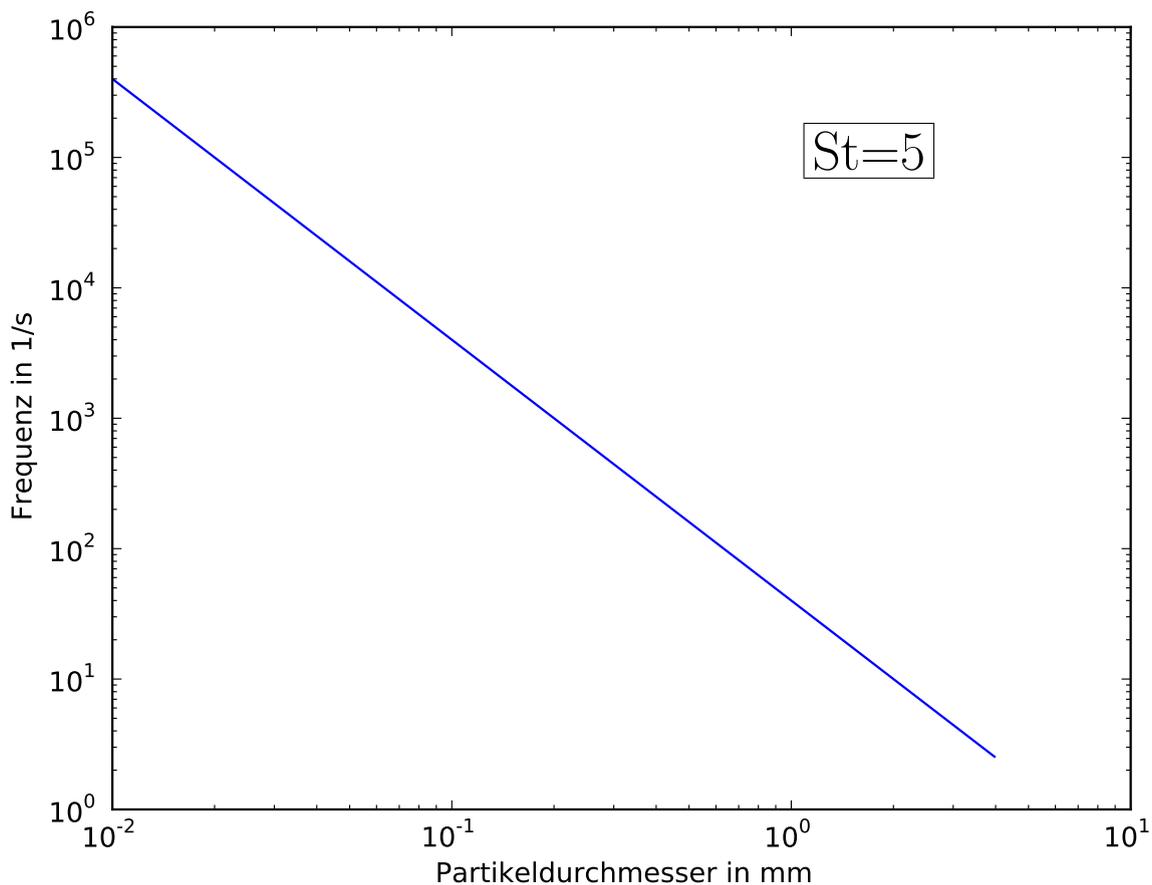
Resultierend aus der bereits oben angesprochenen analytischen Untersuchung der Abhängigkeit der Partikeltrajektorien von den verschiedenen hier vorgestellten Kräften (siehe Sommerfeld (2000b) bzw. Hjelmfeld u. Mockros (1966)) kann hier festgestellt werden, dass die Amplitude der Lösung (Verhältnis der Partikelgeschwindigkeit zur Fluidgeschwindigkeit) relativ unabhängig von der Basset-, Added-Mass- und der Druckkraft sind. Jedoch zeigt sich, dass die Phasenwinkel der Lösung (Zeitverzug der Partikelreaktion bei Anregung) insbesondere für große Partikel bzw. hohe Frequenzen der Fluidbewegung weiterhin stark von der Druck- und der Added-Mass-Kraft abhängt und nur die Basset-Kraft bei nicht allzu hohen Frequenzen vernachlässigbar ist. Laut Sommerfeld (2000b) zeigt sich diese nicht zu vernachlässigende Abhängigkeit bei modifizierten Stokes-Zahlen  $St$  kleiner als fünf, wobei die Stokes-Zahl wie folgt definiert wurde:

$$St = \frac{\mu_F}{\rho_F \omega d_p^2}. \quad (3.24)$$

In Gleichung (3.24) steht  $\omega$  für die Frequenz, die in den Fourieransätzen für die Fluid- und Partikelgeschwindigkeit als Parameter steht.

Als Beispiel soll hier die genannte modifizierte Stokes-Zahl von fünf gelten und untersucht werden, unter welchen Umständen (Durchmesser der Partikel, Frequenz

der Bewegung) eine Berücksichtigung der angesprochenen Kräfte notwendig wäre. Zur Berücksichtigung der Fluideigenschaften in Gleichung (3.24) wird ein Wert von  $0.0002 \text{ m}^2/\text{s}$  für die kinematische Viskosität angenommen, der in der Größenordnung des entsprechenden Wertes für Luft bei ca. 1300 K liegt. Als Partikeldurchmesser sollen Werte zwischen  $10 \mu\text{m}$  und  $4 \text{ mm}$  betrachtet werden, was ungefähr dem in dieser Arbeit maximal verwendeten Durchmesserspektrum entspricht. Abbildung 3.2 zeigt die Ergebnisse als zweidimensionale Darstellung, wobei die Frequenz  $\omega$  über den Partikeldurchmesser dargestellt ist. Aus Abbildung 3.2 kann man bei gegebenem Partikeldurchmesser ablesen, bei welcher Frequenz der Strömung sich eine modifizierte Stokes-Zahl von fünf ergibt und damit nach Sommerfeld (2000b) die Vernachlässigung obig genannter Kräfte nicht mehr akzeptabel wäre. Für große Partikel reichen offensichtlich relativ kleine Frequenzen der Strömung um die Berechnung von obig genannten Kräften notwendig zu machen.



**Abbildung 3.2:** Frequenz der Bewegung über den Partikeldurchmesser bei gegebener modifizierter Stokes-Zahl von fünf nach Gleichung (3.24)

In der Arbeit von Zhong u. a. (2006) wird der Fall eines Strahlbettes untersucht und dabei der Einfluss der Widerstands-, Gewicht-, Magnus-, Saffmann- und Kontaktkräfte auf die Partikel untersucht. Andere Kräfte wurden nicht berücksichtigt. Der prozentuale Anteil der einzelnen Kräfte wird entsprechend den sehr heterogenen Verhältnissen in einem Strahlbett über den Radius des Bettes dargestellt, um bei kleinen Radien die Verhältnisse im Jet und bei großen Radien die Verhältnisse im dichten Bett zu untersuchen. Dabei stellt sich heraus, dass die Kontaktkräfte im wandnahen Bereich klar dominieren (ca. 80 % der Gesamtkraft) und die Widerstandskraft im Jet dominiert (ca. 65 % der Gesamtkraft). Die Gewichtskraft zeigt ausgeprägte Minima im Jet und an der Wand mit einem Maximumplateau zwischen Jet und Wand (ca. 25 % der Gesamtkraft). Magnus- und Saffmannkraft haben hier deutlich geringere Auswirkungen und haben eigentlich nur an der Grenze von Jet und dichtem Bett Werte von ca. 6 % der Gesamtkraft, da hier die größten Geschwindigkeitsgradienten auftreten (der Volumenanteil der festen Phase springt hier entsprechend stark).

#### Relevante Kräfte vs. Modellierung in dichten Strömungen

Trotz der auf den letzten Seiten dargestellten Einschränkungen bzgl. der Gültigkeit der Ansätze der verschiedenen Partikelkräfte werden diese häufig auch für dichte Bereiche verwendet und wie in Zhong u. a. (2006) z.B. dazu verwendet, die relativen Beiträge einzelner Kräfte auf das Partikel zu bestimmen.

Generell lässt sich hier festhalten, dass es keine gültigen Relationen für alle bis hier genannten Partikelkräfte bis auf die Widerstandskraft für dichte Partikelströmungen gibt. Der Grund liegt wohl zum einen darin, dass derartige Systeme messtechnisch sehr schwer zugänglich sind und zum anderen, dass die Komplexität der Wechselwirkungen so groß ist, dass die oben genannten semiempirischen Ansätze nicht alle wesentlichen Kraft-Potential-Paarungen richtig erfassen bzw. Abhängigkeiten bzgl. mehrerer Potentiale möglich sind.

Nichts desto trotz werden die vorhandenen und hier im Folgenden dargestellten Beziehungen erfolgreich auf inerte und reaktive Systeme angewandt und es können qualitativ Effekte wie z.B. die Entmischung bidisperser Systeme und die Blasenbildung sowie quantitativ z.B. der Druckabfall wiedergegeben werden. Die Beziehungen sind allerdings gerade daraufhin angepasst, dass Werte wie der Druckabfall wieder-

gegeben werden können. Untersuchungen bzgl. der Dynamik des Druckabfalls unter spezifischen Bedingungen sind nicht bekannt.

Die Herkunft der verfügbaren Beziehungen für die Widerstandskraft im dichten Bereich lässt sich nach Li u. Kuipers (2003) in drei Bereiche einteilen:

- Entwicklungen semiempirischer Beziehungen aufgrund von Druckabfallmessungen,
- Entwicklungen semiempirischer Beziehungen aufgrund von Bettexpansionsexperimenten,
- Entwicklungen aufgrund von Direkten Numerischen Simulationen.

Insbesondere die ersten beiden Punkte zeigen die großen Unterschiede der Modellierung der Partikelkräfte im dünnen und dichten Bereich. Die Entwicklung von semiempirischen Beziehungen aufgrund von Druckabfallmessungen und Bettexpansionsexperimenten wird in den meisten Fällen eindimensionale Abhängigkeiten des Druckabfalls von den hier als unabhängig angenommenen Variablen hervorrufen, das heißt, dass dann eine skalare Größe (der Druckabfall in axialer Richtung) dazu dient, das komplexe Verhalten von Partikelschwärmen zu beschreiben.

Aus der Gruppe der Korrelationen aufgrund von Druckabfallmessungen sind die bekanntesten die Beziehungen von Ergun (1952) und Wen u. Yu (1966). Die Arbeit von Ergun (1952) stammt aus dem Bereich der Festbetten und sollte daher nur verwendet werden, wenn entsprechende Zustände herrschen. Die Arbeit von Wen u. Yu (1966) basiert auf der gültigen Widerstandskorrelation für einzelne Partikel und erweitert die Formel entsprechend mit einem Korrekturfaktor für die dichtere Packung:

$$\mathbf{F}_W = \underbrace{\frac{3\rho_F m_P C_W (\mathbf{u}_F - \mathbf{u}_P) |\mathbf{u}_F - \mathbf{u}_P|}{4\rho_P D_P}}_{\text{Gleichung der Einzelkugel}} \underbrace{f(\alpha)}_{\text{Korrekturfaktor}} \quad (3.25)$$

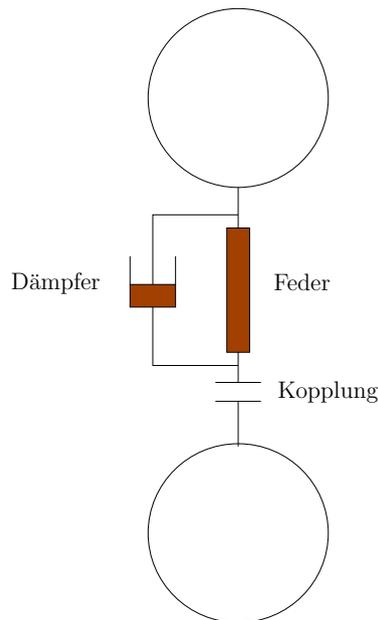
Der Korrekturfaktor kann dabei unter anderen den Arbeiten von Wen u. Yu (1966), Happel (1958) und Felice (1994) entnommen werden.

Ein Modell mit Druckexpansionsexperimenten als Basis ist z.B. die Arbeit von Richardson u. Zaki (1954), die auch in Euler-Euler-Modellen (MFIX (2007)) imple-

mentiert ist. Bettexpansionsexperimente sind allerdings für Gas-Feststoff-Systeme deutlich weniger aussagekräftig als bei Fest-Flüssig-Systemen.

Eine weitere Arbeit, die den Einfluss verschiedener Widerstandsbeziehungen quantitativ auf Basis dimensionsloser Größen untersucht, ist Boyalakuntla (2003). Dabei werden mit identischen Werten des Volumenanteils Unterschiede der verschiedenen Beziehungen (hier Wen u. Yu (1966), Syamlal u. a. (1994), Tsuji u. a. (1993)- vom Typ Ergun (1952)) mit Faktor 10 und größer festgestellt. Auffällig an den in Boyalakuntla (2003) dargestellten Werten ist, dass der Unterschied zwischen den Arbeiten Wen u. Yu (1966) und Tsuji u. a. (1993) sich fast ausschließlich in einer Abhängigkeit des Volumenanteils ausdrückt, jedoch nicht in einer Abhängigkeit von der Partikelreynoldszahl. Der Grund liegt wohl in der sehr ähnlichen Datenbasis.

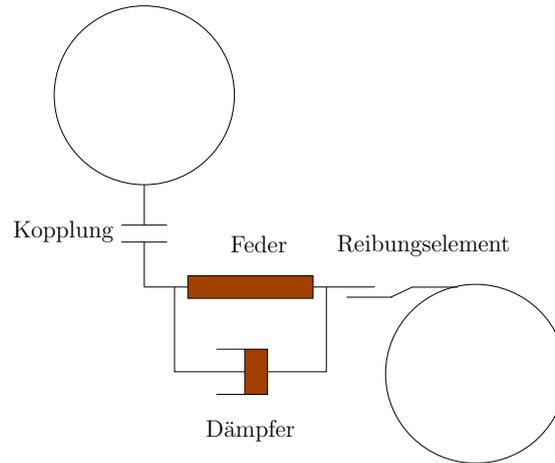
### 3.2.3 Partikelkollisionen



*Abbildung 3.3: Darstellung des Feder-Dämpfer-Modells für die Normalkraft*

Grundlage dieses Kapitels ist das "Distinct Element Model" von Cundall u. Strack (1979), welches u.a. in Boyalakuntla (2003) ausführlich besprochen wird.

Dieses Modell geht im Gegensatz zu vielen anderen Kollisionsmodellen davon aus, dass es nach einem zeitlichen Schritt der Partikelbewegung zu Überlappungen der



**Abbildung 3.4:** Darstellung des Feder-Dämpfer-Modells für die Tangentialkraft

Partikel kommt. Dabei ist es unerheblich, ob sich zwei Partikel oder mehrere Partikel überlappen. Die Idee des Modells zeigt Abbildung 3.3 bzw. 3.4 getrennt für die tangentialen und normalen Komponenten der zwischen den Partikeln entstehenden Kräfte bzw. Momente. Sobald eine Überlappung registriert wird, nutzt man diese Überlappung, um damit eine Feder zu spannen, die dafür sorgt, dass sich die überlappenden Partikel im nächsten Zeitschritt wieder auseinander bewegen. Zusätzlich zu diesem Mechanismus sind die überlappenden Partikel mit einem Dämpfer ausgestattet, der für die Dissipation der kinetischen Energie der Partikel sorgt. Im Folgenden wird das Modell kurz skizziert.

Die Bewegungsgleichungen der Partikel (siehe Kapitel 3.2.1) werden durch zwei Arten auf die Partikel wirkenden Kräfte (bzw. Momente) bestimmt. Zum einen handelt es sich dabei um Wechselwirkungen der Partikel mit dem Fluid  $\mathbf{F}_{Fluid}$  bzw.  $\mathbf{T}_{Fluid}$ , welche bereits in Kapitel 3.2.2 beschrieben sind und zum anderen um Kontaktkräfte (oder Kontaktmomente)  $\mathbf{F}_{Kontakt}$  bzw.  $\mathbf{T}_{Kontakt}$ , die zwischen dem betrachteten Partikel und seinen Nachbarn durch deren Überlappung zu Stande kommen. Die Kontaktkräfte und -momente der Partikel werden dabei in normale und tangentiale Komponenten zerlegt und getrennt behandelt. Die Normalkraft ist gerade die Kraft in Richtung des Vektor  $\mathbf{n}$ , der wie folgt definiert ist:

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i}{|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i|}. \quad (3.26)$$

Die relative Geschwindigkeit der beiden Partikel ist durch

$$\mathbf{v}_r = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j \quad (3.27)$$

definiert, womit sich auch die normale Komponente der Relativgeschwindigkeit als  $\mathbf{v}_{r,normal,ij} = \mathbf{v}_r \mathbf{n}$  berechnen lässt. Die Normalkraft selbst ergibt sich zu:

$$\mathbf{F}_{Kontakt,normal,ij} = -k_n \boldsymbol{\delta}_{normal,ij} - \eta_n \mathbf{v}_{r,normal,ij}, \quad (3.28)$$

wobei es sich bei  $k_n$  und  $\eta_n$  um die Federsteifigkeit bzw. um die Dämpfungskonstante in normaler Richtung handelt. Die normale Überlappung wurde durch  $\boldsymbol{\delta}_{normal,ij} = \Delta_t \mathbf{v}_{r,normal,ij}$  berechnet. Analog dazu wird die tangentielle Überlappung nach Sadd u. a. (1993) zu  $\boldsymbol{\delta}_{tangential,ij} = \Delta_t \mathbf{v}_{r,tangential,ij}$  berechnet.

Die tangentielle Kraft lässt sich analog zur normalen Kraft als

$$\mathbf{F}_{Kontakt,tangential,ij} = -k_t \boldsymbol{\delta}_{tangential,ij} - \eta_t \mathbf{v}_{r,kontakt,ij} \quad (3.29)$$

berechnen, wobei  $\mathbf{v}_{r,kontakt,ij}$  durch folgenden Ausdruck gegeben ist:

$$\mathbf{v}_{r,kontakt,ij} = \mathbf{v}_{r,ij} - \mathbf{v}_{r,normal,ij} + (r_i \boldsymbol{\omega}_i + r_j \boldsymbol{\omega}_j) \times \mathbf{n} \quad (3.30)$$

und  $k_t$  und  $\eta_t$  die Federsteifigkeit und die Dämpfungskonstante in tangentialer Richtung sind.

Die Dämpferkonstanten werden nach Tsuji u. a. (1993) berechnet:

$$\eta = 2\gamma \sqrt{m_P k}, \quad \gamma = \frac{\alpha}{1 + \alpha^2}, \quad \alpha = \frac{1}{\pi} \ln \frac{1}{e}, \quad (3.31)$$

wobei  $m_P$  für die Partikelmasse,  $k$  für die Federsteifigkeit und  $e$  für den Verlustbeiwert der Kollision steht.

Falls für die nach Gleichung (3.29) bestimmte tangentielle Kraft die Bedingung in Gleichung (3.32) erfüllt ist, wird die tangentielle Kraft nach Gleichung (3.33) bestimmt.

$$|\mathbf{F}_{Kontakt,tangential,ij}| \geq |\mathbf{F}_{Kontakt,normal,ij}| \mu \quad (3.32)$$

Dieser Fall entspricht der Gleitreibung und  $\mu$  steht für den Reibungsbeiwert.

$$|\mathbf{F}_{Kontakt,tangential,ij}| = -\mu |\mathbf{F}_{Kontakt,normal,ij}|, \quad (3.33)$$

Sind alle Überlappungen des Partikels  $i$  mit seinen Nachbarn  $j$  berechnet worden, kann man die gesamten auf das Partikel  $i$  wirkenden Kräfte und Momente wie folgt aufsummieren:

$$\mathbf{F}_{Kontakt,i} = \sum_j (\mathbf{F}_{Kontakt,normal,ij} + \mathbf{F}_{Kontakt,tangential,ij}), \quad (3.34)$$

$$\mathbf{T}_{Kontakt,i} = \sum_j (r_i \mathbf{n} \times \mathbf{F}_{Kontakt,tangential,ij}). \quad (3.35)$$

### 3.2.4 Numerische Verfahren zur Lösung der Bewegungsgleichungen

Die Genauigkeit von Euler-Lagrange-Verfahren ist abhängig von dem Integrationsverfahren der Bewegungsgleichungen. Dies ist insbesondere dann von Bedeutung, wenn wie in dem hier vorliegenden Fall, das zweiphasige System mit einem einfachen Splittingverfahren behandelt wird (siehe Kapitel 4.1), da sich in diesem Fall wesentliche Größen des Fluidfeldes (z.B. Volumenanteile der Phasen) direkt aus der Bewegung bzw. dem Ort der Partikel ergeben.

Die Frage nach einem geeigneten Verfahren wird auch in der Literatur zunehmend diskutiert. Dabei geben die folgenden Beiträge einen Einblick in die Problematik und liefern viele weitere wichtige Literaturstellen (siehe z.B. Kruggel-Emden u. a. (2008), Fraige u. Langston (2004), Asmar u. a. (2003), Peters (2003)). Wichtige Aspekte der Auswahl eines geeigneten Verfahrens sind zum Beispiel der numerische Aufwand des Verfahrens, die Stabilität, die Konsistenz (also im wesentlichen die Frage nach der numerischen Ordnung), die Fähigkeit energieerhaltend, impulserhaltend und auch erhaltend bzgl. der Phasenraumdichte zu integrieren (häufig mit dem Begriff eines symplektischen Verfahrens verbunden), die zeitliche Reversibilität und nicht zuletzt die Frage nach einer geeigneten Kombination aus Tracking- und Integrationsverfahren.

Die Auswahl eines geeigneten Verfahrens ist dabei wesentlich mit der diskreten Elemente Methode verbunden, da diese bedingt durch die numerische Auflösung von Partikelkollisionen nach sehr kleinen Zeitschritten verlangt. Kruggel-Emden u. a. (2008) berichtet von einer Kollisionsdauer von  $12.5 \mu\text{s}$  bis  $34 \mu\text{s}$ . Betrachtet wurden dabei  $0.26 \text{ g}$  schwere Aluminiumoxidkugeln mit einer Anfangsgeschwindigkeit von  $3.85 \text{ m/s}$ . Generell gilt es bei der Integration der Bewegungsgleichungen (3.10)

diesen Prozess der Kollision numerisch so fein aufzulösen, dass der numerische Fehler akzeptabel wird. Zum anderen berichtet zum Beispiel Fraige u. Langston (2004) davon, dass die Integration der Bewegungsgleichungen einen Großteil einer (inerten) DEM Rechnung ausmacht und insofern nur Verfahren in Frage kommen, die einen hinreichend einfachen Aufbau haben.

Sowohl Kruggel-Emden u. a. (2008) als auch Asmar u. a. (2003) führen ausführliche Untersuchungen bzgl. der zeitlichen Änderungen der Energie eines Partikelsystems durch. Dabei werden die Unterschiede bzgl. der oben genannten Eigenschaften offensichtlich. Des Weiteren stellen sich z.B. explizite Einschrittverfahren höherer Ordnung (z.B. Runge-Kutta-Verfahren 4(5)) sowie Prediktor-Korrektor Verfahren (typischerweise Adams-Moulton verbunden mit Adams-Bashford Verfahren) als numerisch sehr zeitaufwändig heraus. Der Zeitaufwand ist häufig direkt an die Zahl der Auswertungen der rechten Seite von Gleichung (3.10) gebunden.

In der Arbeit von Sundaram u. Collins (1996) wird der Einfluss von Mapping-Algorithmien zwischen den Phasen (siehe Kapitel 3.3) als einer der Gründe benannt, mit Verfahren mindestens dritter Ordnung die Bewegungsgleichungen zu integrieren, da das Mapping ebenfalls mindestens dritter Ordnung sein muss.

Generell spiegelt keine der Untersuchungen ein Szenario wieder, welches dem in dieser Arbeit gleicht. Einige Autoren konzentrieren sich auf die Integration der Bewegungsgleichungen an sich (z.B. Sommerfeld (2000b)), die Integration der Partikeltrajektorien mit Kollisionen aber ohne Fluidwechselwirkung (z.B. Kruggel-Emden u. a. (2008) und Fraige u. Langston (2004)) oder auf eine komplette Analyse eines Systems aus Partikeln gekoppelt mit einem Navier-Stokes-System für das Fluidfeld, jedoch mit der Annahme dünner Strömungen (also z.B. unter Vernachlässigung der Volumenanteile der festen Phase).

In dieser Arbeit wurde, wie auch in vielen anderen Publikationen, mit dem expliziten Euler-Verfahren gerechnet. Die zeitliche Schrittweite der Integration der Bewegungsgleichungen wird explizit vorgegeben (siehe Kapitel 4.1). Jedoch wird eine Neuberechnung der rechten Seite von Gleichung (3.10) vorgenommen, sobald das Partikel in eine neue Zelle eintritt. Die exakte Schrittweite kann also nicht angegeben wer-

den, da sie von der Bewegung des Partikels abhängt. Alle in Kapitel 5 gezeigten Ergebnisse beruhen auf Berechnungen mit dem expliziten Euler-Verfahren.

### 3.2.5 Massen- und Energiebilanz der Partikel

Die Massen- und Energiebilanz der Partikel werden hier zusammen dokumentiert, da beide durch die betrachtete Trocknung, Pyrolyse und heterogenen Reaktionen (siehe Kapitel 3.2.6 und 3.2.7) und deren energetischen Effekte recht stark gekoppelt sind und somit in dieser Arbeit gemeinsam als ein Differentialgleichungssystem gelöst werden. Die notwendigen Zeitschritte sind wegen der Steifheit des Systems und den Genauigkeitsanforderungen unter Umständen noch kleiner als die Zeitschrittweite des dem Verfahren zugrunde liegenden Kollisionsmodells.

Die in dieser Arbeit verwendete Massenbilanz für die Masse eines Partikels  $m_p$  teilt sich auf in die Bilanzen der Holzmasse  $m_{Holz}$ , der Holzkohlemasse  $m_{Holzkohle}$  und der Wassermasse  $m_{Wasser}$  eines Partikels. Die Aschebildung während der Pyrolyse bzw. der Vergasung wird hier nicht berücksichtigt, kann aber ggf. leicht als zusätzliche Komponente der Biomasse ergänzt werden. Die Energiebilanz für die Partikeltemperatur  $T_p$  ist zum einen durch die Quellterme der ablaufenden Reaktionen und zum anderen durch die Wechselwirkungsterme mit der Umgebung bestimmt. Beide Bilanzen sind in Gleichung (3.36) dokumentiert.

$$\begin{aligned}
 \frac{dm_{Holz}}{dt} &= -(\dot{r}_{Holzgas} + \dot{r}_{Teer(g)} + \dot{r}_{Holzkohle}) m_{Holz}, \\
 c_{p,Biomasse} m_p \frac{dT_p}{dt} &= \sum_i (\Delta h_i \dot{r}_i) + \alpha A (T_p - T_g), \\
 \frac{dm_{Holzkohle}}{dt} &= -(\dot{r}_{H_2O} + \dot{r}_{O_2} + \dot{r}_{CO_2}) m_{Holzkohle} + \dot{r}_{Holzkohle} m_{Holz}, \\
 \frac{dm_{Wasser}}{dt} &= -\dot{r}_{Verdampfung,H_2O}.
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

Die Terme  $\dot{r}_{H_2O}$ ,  $\dot{r}_{O_2}$  und  $\dot{r}_{CO_2}$  in Gleichung (3.36) stehen stellvertretend für Quellterme der Holzkohlevergasung mit den Gasen  $H_2O$ ,  $O_2$  und  $CO_2$  und werden im Kapitel 3.2.6 näher erläutert. Die Kinetik der Pyrolyse wird durch die Bildungsraten der Holzkohle  $\dot{r}_{Holzkohle}$ , des Holzteeres  $\dot{r}_{Teer(g)}$  und des Holzgases  $\dot{r}_{Holzgas}$  spezifiziert. Weitere Größen in Gleichung (3.36) sind die Wärmekapazität des Partikels

$c_{p,Biomasse}$ , der Newton'sche Wärmeübergangskoeffizient  $\alpha$  sowie die Summe der Reaktionsenthalpien der ablaufenden chemischen Konversionsprozesse  $\sum_i(\Delta h_i \dot{r}_i)$ .

Die Änderung des Durchmessers, die primäre Pyrolyse und die Trocknung eines Partikels sind in Kapitel 3.2.7 dokumentiert. Zusätzlich zu den hier vorgestellten Bilanzen in Gleichung (3.36) wird für jede mit dem Partikel wechselwirkende Komponente der Gasphase eine Massenbilanz berechnet, die einen Teil der das Partikel umgebenden Gasphase abdecken. Die Bilanzierung betrifft die Komponenten  $C_2H_2$ ,  $CH_4$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ,  $H_2$  und die bei der primären Pyrolyse entstehenden Teere. Die Masse an Stickstoff kann hier als konstant angesehen werden, da das Partikel im Rahmen des hier vorgestellten Modells weder Stickstoff aufnimmt noch abgibt. Da beide Phasen getrennt berechnet werden, kann es Situationen geben, in denen der Umsatz einer Gasphasenkomponente an einem Partikel größer ist als die tatsächliche Menge dieser Komponente in der Umgebung eines Partikels. Eine Bilanzierung dieser Komponenten kann also limitierend auf den Gesamtumsatz dieser Komponenten wirken. Zudem ändern sich die Anteile der Gasphasenkomponenten durch die Umsätze am Partikel, was ebenfalls mit einer Bilanzierung dieser Komponenten innerhalb des Partikelmodells berücksichtigt werden kann.

Ein weiterer Grund für die Verwendung von Massenbilanzen für alle Gasphasenkomponenten innerhalb des Partikelmodells soll im Folgenden dargelegt werden. Die Anwesenheit vieler Partikel innerhalb einer Gebietszelle verlangt eigentlich nach einer parallelen Berechnung der Partikelbewegung bzw. des Partikelabbrandes für alle Partikel, da ansonsten unter Umständen die Partikel sehr unterschiedlichen Umgebungsbedingungen ausgesetzt sind. Am Beispiel einer Gasphasenkomponente, wie zum Beispiel  $CO_2$ , die während der Vergasung durch heterogene Reaktionen am Partikel abreagiert, lässt sich dies gut verdeutlichen. Die Konzentration dieser Komponente nimmt während der sequentiellen Berechnung des Partikelabbrandes aller Partikel in einer Zelle ab (unter entsprechenden Bedingungen). Sind die Reaktionsbedingungen so gewählt, dass diese Komponente durch den Abbrand der Partikel abreagieren würde, bevor die letzten Partikel dieser Zelle bzgl. des Partikelabbrandes berechnet worden sind, entsteht eine Situation, die mit der zusätzlichen Bilanz berücksichtigt werden kann. Dementsprechend kann die betroffene Reaktion nur an

einigen wenigen Partikeln innerhalb der Zelle stattfinden. Diese Situation kann über einen Stoffübergangskoeffizienten allein nicht abgebildet werden, da physikalisch u.U. alle Partikel reagieren würden - allerdings in Konkurrenz zueinander. Die für ein Partikel verfügbare Menge an z.B. CO<sub>2</sub> ist durch die Zahl der Partikel in einer Zelle und deren Zustand bestimmt. Um zu verhindern, dass ein Partikel eine Komponente einer Gebietszelle komplett aufbraucht (z.B. CO<sub>2</sub>), wurde jedem Partikel nur ein Zehntel des verfügbaren Gasvolumens in einer Zelle zur Verfügung gestellt. Dieses Gasvolumen ist damit das mit den Partikelbilanzen (3.36) integrierte System an Massenbilanzen der Gasphasenkomponenten. An sich wäre eine dynamische Berechnung des verfügbaren Gasvolumens (hier ein Zehntel des Zellvolumens) für ein Partikel wünschenswert, jedoch sind weder die Partikelanzahl noch die integralen Partikeleigenschaften innerhalb einer Gebietszelle bevor oder während der Berechnung des Abbrandes eines Partikels bekannt, so dass hier davon ausgegangen wurde, dass die größtmöglichen Partikel vorliegen. Das häufig empfohlene Umkehren der Partikelliste in einer Zelle nach jeder Berechnung ändert an sich nichts an der Problematik. Auf eine dynamische Bestimmung der Partikelanzahl bzw. der integralen Partikeleigenschaften in Abhängigkeit der Vorgänge einzelner Partikel (also während eines Zeitschrittes) wurde aus rechenzeitlichen Gründen verzichtet.

Die Wärmekapazität  $c_{p,Biomasse}$  des Partikels in Gleichung (3.36) wird als Mischung der Wärmekapazitäten von Holz, Holzkohle und Wasser modelliert. Gleichung (3.37) zeigt die der Berechnung zugrunde liegende Formel:

$$c_{p,Biomasse} = \frac{m_{Holz} + m_{Holzkohle}}{m_p} (\eta c_{p,Holz} + (1 - \eta) c_{p,Holzkohle}) + \frac{m_{Wasser}}{m_p} c_{p,Wasser}, \quad (3.37)$$

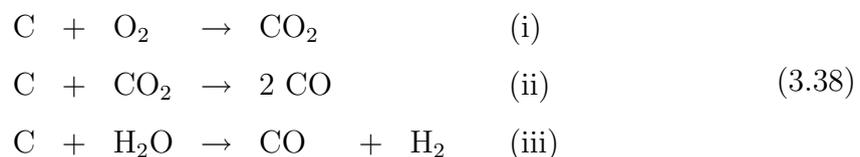
wobei  $\eta = \frac{m_{Holz}}{m_{Holz,0}}$  ist.  $m_{Holz,0}$  ist die Holzmasse zu Beginn der Partikelhistorie. Die Wärmekapazitäten von Holz und Holzkohle werden durch polynomiale Ausdrücke entsprechend der Arbeiten von Grønli (1996) und Raznjevic (1976) modelliert, während für Wasser ein fester Wert von 4.2 kJ/kg K angesetzt wurde. Die Ansätze für Holz und Holzkohle sind in Tabelle 3.4 aufgezeigt.

$c_{p,Holz} = 1.5 + 1 \cdot 10^{-3}T$
$c_{p,Holzkohle} = 0.42 + 2.09 \cdot 10^{-3}T + 6.85 \cdot 10^{-7}T^2$
$c_{p,i}$ in kJ/kgK, $T$ in K

*Tabelle 3.4: Ansätze für die Wärmekapazitäten von Holz und Holzkohle*

### 3.2.6 Heterogene Chemie

Da das Bettmaterial in dem hier betrachteten Wirbelschichtverfahren zu großen Teilen aus Holzkohle besteht, kommt der Modellierung der heterogenen chemischen Reaktionen auf den Holzkohlepartikeln besondere Bedeutung zu. Der Artikel von DiBlasi (2009) gibt eine Übersicht zum Thema Vergasung bzw. Verbrennung von Kohlen, die aus Biomasse entstanden sind und diskutiert aktuelle Probleme der entsprechenden Forschung. Die hier zur Modellierung der heterogenen Reaktionen verwendeten Kinetiken werden alle in DiBlasi (2009) diskutiert und mit anderen Quellen bzgl. der Größe der Ratenausdrücke der einzelnen Reaktionen verglichen. Dabei zeigt sich, dass die Bandbreite der Ratenausdrücke für alle hier berücksichtigten Reaktionen (siehe Gleichung (3.38)) etliche Größenordnungen ausmacht und damit offensichtlich eine starke Unsicherheit bzgl. der Gültigkeit der verwendeten Kinetiken zu erwarten ist.



Die in dieser Arbeit verwendeten Kinetiken für die Vergasung mit  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$  stammen aus den Publikationen von Aarsen u. a. (1985) und Hawley u. a. (1983) und gehören, verglichen mit anderen in der Arbeit von DiBlasi (2009) vorgestellten Kinetiken, tendenziell zur Gruppe der schnelleren Ratenausdrücke. Der verwendete Ratenausdruck der Reaktion von Holzkohle mit Sauerstoff stammt aus der Arbeit von DiBlasi (1999) und gehört bzgl. der Größe des Ratenausdruckes zum Mittelfeld der in DiBlasi (2009) verglichenen Arbeiten.

Die verwendeten Kinetiken sind in Tabelle 3.5 aufgelistet. Die tabellierten Raten-  
ausdrücke in Tabelle 3.5 sind in der zeitlichen Änderung des Holzkohleumsatzgrades  
 $X(t)$  geschrieben, der nach DiBlasi (2009) wie folgt definiert wurde:

$$X(t) = \frac{M_0 - M(t)}{M_0 - M_\infty}, \quad (3.39)$$

wobei  $M(t)$  für die aktuelle Masse,  $M_0$  für die initiale Masse und  $M_\infty$  für die Masse  
des Holzkohlepartikels nach der Vergasung steht.  $M_\infty$  ist in dieser Arbeit zu Null  
gesetzt, da keine Asche innerhalb der Biomasse modelliert wird.  $M_0$  ist das Maximum  
der Holzkohlemasse im Partikel während der gesamten Partikelhistorie.

Die Ratenausdrücke der heterogenen Reaktionen in Tabelle 3.5 sind durch die De-  
finition in Gleichung (3.39) selbst Funktionen des Umsatzgrades der Holzkohle und  
spiegeln damit die sich ändernde innere Struktur während der Vergasung wider. Ei-  
ne Umrechnung der dimensionslosen Ratenausdrücke der Vergasungsreaktionen nach  
Tabelle 3.5 in dimensionsbehaftete Ratenausdrücke ergibt sich mit Hilfe von

$$r_{\text{dimensionslos}} = -\frac{1}{m_{\text{Holzkohle}}} \frac{dm_{\text{Holzkohle}}}{dt} = \frac{1}{1-X} \frac{dX}{dt} \quad (3.40)$$

zu

$$r_C = r_{\text{dimensionslos}} \cdot m_{\text{Holzkohle}}, \quad (3.41)$$

wobei  $r_C$  der Umsatz der Holzkohle in Masseneinheiten pro Zeit ist und damit die  
Summation über alle in Gleichung (3.38) gezeigten Reaktionen den Gesamtmassen-  
umsatz an Holzkohle ergibt (siehe Kapitel 3.2.5). Um die Ratenausdrücke der Gas-  
phasenkomponenten aus Kapitel 3.2.5 zu erhalten, wird die Massenabbaurate einer  
Vergasungsreaktion aus Gleichung (3.41) mit Hilfe der Molmassen der an der Reakti-  
on beteiligten Stoffe und den stöchiometrischen Koeffizienten der Reaktionsgleichung  
aus Gleichung (3.38) umgerechnet. Der Massenumsatz einer Gasphasenkomponente  
 $i$  aufgrund des Holzkohlemassenumsatzes  $r_{C,j}$  in der  $j$ -ten Reaktion nach Gleichung  
3.38 ergibt sich damit zu:

$$r_{i,j} = r_{C,j} \frac{M_i}{M_C} \nu_{i,j}, \quad (3.42)$$

wobei hier schon davon ausgegangen wurde, dass der stöchiometrische Koeffizient  
des Kohlenstoffs in den Reaktionsgleichungen nach Gleichung (3.38) eins ist. In Glei-  
chung (3.42) stehen  $M_C$  für die molare Masse des Kohlenstoffs,  $M_i$  für die molare

Masse der Komponente  $i$  und  $\nu_{i,j}$  für den stöchiometrischen Koeffizienten dieser Komponente  $i$  in der  $j$ -ten Reaktion nach Gleichung (3.38).

Alle Ratenausdrücke der in den Gleichungen (3.38) zusammenfassend gezeigten Reaktionen basieren auf Arrhenius-Ansätzen bzgl. der Kinetik und berücksichtigen damit nicht den Einfluss der Produkte auf die Kinetik (die Produkte ändern natürlich die Zusammensetzung des mit den Partikeln integrierten Gasvolumens). Generell werden in DiBlasi (2009) deutlich mehr globale (meist Arrhenius- oder Langmuir-Hinshelwood-Ansätze) als elementare Kinetiken gezeigt.

Die bloße Existenz elementarer Mechanismen für die Vergasungsreaktionen in DiBlasi (2009) sollte nicht über den Fakt hinwegtäuschen, dass zum Beispiel keine der in DiBlasi (2009) vorgestellten Kinetiken die Tatsache widerspiegelt, dass Holzkohle keineswegs nur aus Kohlenstoff besteht, sondern ein je nach Herstellungsgeschichte variierendes Gemisch aus den Elementen Kohlenstoff, Sauerstoff und Wasserstoff ist. Zusätzlich beinhaltet Holzkohle diverse andere Elemente in kleineren Mengen, die sich je nach Bedingungen durch den Abbau der Holzkohle anreichern können. In der Arbeit von Klose u. Wölki (2005) wird beispielsweise die Elementarzusammensetzung (Massenanteile) von Holzkohle aus Buche zu 89 % Kohlenstoff, 1.7 % Wasserstoff, 9 % Sauerstoff und 0.3 % Stickstoff angegeben. Bildet man aus den genannten Zahlen die Molenanteile ergibt sich für Wasserstoff ein Wert von ca. 17.5 % und für Sauerstoff ein Wert von ca. 5.8 %. Holzkohle besteht offensichtlich zu beachtlichen Stoffmengenanteilen aus Wasserstoff und Sauerstoff. Der Aschegehalt in der Holzkohle scheint in gewisser Weise mit den Ratenausdrücken der Vergasungsreaktionen zu korrelieren (siehe dazu z.B. Mermoud u. a. (2006)), auch wenn meist modellhaft davon ausgegangen wird (wie in dieser Arbeit auch), dass die über den Umsatzgrad der Holzkohle variable Reaktionsrate der Vergasungsreaktionen nur durch die Änderung der inneren Oberfläche bzw. der Porosität bestimmt wird.

Abgesehen von den schon genannten Problemen der in der Literatur verfügbaren Kinetiken, ist es für die Reaktionen von Biomasse generell erstrebenswert, Kinetiken für alle in (3.38) genannten Reaktionen aus einer Publikation zu erhalten, um die hohen Modellunsicherheiten zu reduzieren. Es gibt aber leider praktisch keine Auto-

Reaktionsnummer und Ratenausdruck für $\frac{dX}{dt} \frac{1}{1-X}$	Literaturreferenz
(i) $1.51 \cdot 10^2 e^{\frac{-109}{RT}} \cdot (1 - X)^{1.2} \cdot P_{O_2}$	DiBlasi (1999)
(ii) $9.1 \cdot 10^6 e^{\frac{-166}{RT}} T^{-0.8} (1 - X)^{\frac{2}{3}} P_{CO_2}^{0.8}$	Aarsen u. a. (1985)
(iii) $6.57 \cdot 10^3 e^{\frac{-156}{RT}} \cdot P_{H_2O}$	Hawley u. a. (1983)
Ratenausdruck ist dimensionslos, Einheiten: Aktivierungsenergie in kJ/mol, P in kPa	

**Tabelle 3.5:** Kinetische Daten der heterogenen Reaktionen der Holzkohle

ren, die alle drei hier berücksichtigten heterogenen Reaktionen untersucht haben und sehr wenige die zwei der drei Reaktionen untersuchen (z.B. Klose u. Wölki (2005)).

Eine weitere Einschränkung der Gültigkeit der verwendeten Kinetiken ergibt sich durch die Arbeit von Roberts u. Harris (2007), in der der parallele Ablauf zweier Vergasungsreaktionen und die gegenseitige Behinderung der Vergasungsmittel durch die limitierten freien Oberflächenplätze (sogenannte "active sites") untersucht wird. Der Einfluss ist bedeutend, wird aber in dieser Arbeit aufgrund mangelnder Daten vernachlässigt.

Aufgrund der hohen Temperaturen im unteren Bereich des Reaktors tendieren auch Partikel in diesem Bereich zu hohen Temperaturen und damit großen Umsatzraten der heterogenen Reaktionen. Aus diesem Grund wurde bei der Berechnung der effektiven Reaktionsrate der Reaktion von Kohlenstoff mit Sauerstoff auch der Stoffübergang zwischen Gasphase und Partikel berücksichtigt, was eine Limitierung der effektiven Umsatzrate durch den Stofftransport ermöglicht. Diese Limitierung (siehe zum Beispiel Baehr u. Stephan (2002)) ist ohne großen Rechenaufwand möglich, da es sich bei dieser Reaktion um eine Reaktion erster Ordnung handelt (siehe Tabelle 3.5). Der Einfluss der Stoffübergangskoeffizienten für die anderen heterogenen Reaktionen wurde vernachlässigt.

### 3.2.7 Aufheizung, Trocknung, primäre Pyrolyse und Schrumpfung der Partikel

Will man Biomasse (in dieser Arbeit Holz) zur Vergasung nutzen, durchlaufen die einzelnen Holzpartikel verschiedene Stufen während sie durch die im Reaktor herr-

schen Bedingungen aufgeheizt werden. Wird das Holz mit Raumtemperatur in den Reaktor eingebracht, heizt es sich zuerst auf, bis eine Partikeltemperatur erreicht wird, bei der das Wasser im Partikelinneren verdampft und dann durch die Poren des Holzes nach außen konvektiert wird. Während der Aufheizung (aber noch unter einer gedachten Verdampfungstemperatur) verdunstet Wasser aufgrund des Partialdruckgefälles aus dem feuchten Holz. Die Verdunstung wird allerdings in dieser Arbeit nicht berücksichtigt, da die Heizraten so hoch sind, dass das Partikel sehr schnell die gedachte Verdampfungstemperatur erreicht. Während der Verdampfung wird der dem Partikel von außen zugeführte Wärmestrom zur Verdampfung des Wassers benötigt und damit in Form der Verdampfungsenthalpie des Wassers gebunden. Die Temperatur bleibt hier weitestgehend konstant. Ist das Partikel getrocknet, heizt es sich entsprechend den äußeren Bedingungen weiter auf, bis die Pyrolyse des Holzes beginnt. Unter Pyrolyse versteht man die thermochemische Zersetzung der langkettigen Bestandteile des Holzes in eine Matrix aus Restfeststoffen (Holzkohle) und in gasförmige Bestandteile ohne Zufuhr von Sauerstoff. Die entstehenden Gase werden meist in Teere und Holzgase unterschieden. Die Pyrolyse findet über einen breiten Temperaturbereich statt. Nach der Pyrolyse wird die aus dem Holz entstandene Holzkohle weiter aufgeheizt, bis die Holzkohle Temperaturen erreicht hat, bei denen die Vergasungsreaktionen der Holzkohle (siehe dazu 3.2.6) relevante Geschwindigkeiten erreichen. Die Endtemperatur der Partikel hängt stark von den äußeren Bedingungen ab. So ist es durchaus möglich, dass die Partikel Temperaturen erreichen, die deutlich über denen im umgebenen Wirbelbett liegen können (siehe z.B. Zhou u. a. (2004b)).

Der oben beschriebene Ablauf der Aufheizung eines Partikels findet so nur an infinitesimal großen Holzpartikeln statt, da bei Berücksichtigung der Raumdimensionen des Partikels Trocknungs- und Pyrolysefronten in das Holzpartikel laufen, die für das gesamte Partikel betrachtet einen parallelen Ablauf der verschiedenen oben beschriebenen Prozessschritte ermöglichen. Da dieser Arbeit ein nulldimensionales Partikelmodell zugrunde liegt (siehe Kapitel 3.2.5), laufen die einzelnen Prozessschritte sequentiell ab. Während der Trocknung, der Pyrolyse und der anschließenden Vergasung schrumpft das Partikel in unterschiedlicher Art und Weise.

Zentraler Punkt der Trocknung ist die Frage in welcher Rate sie von statten geht. Kraume (2004) unterscheidet zwei Teilabschnitte der Trocknung feuchter Güter. Der erste Teilabschnitt ist von einer konstanten Rate der Verdampfung gekennzeichnet, die durch den Wärmeübergang an das feuchte Gut bestimmt wird. In dieser Phase wird das in den Kapillaren des feuchten Gutes vorliegende Wasser verdampft. Die zweite Phase ist von einer sinkenden Verdampfungsrate gekennzeichnet, die bei hygroskopischen Gütern wie Holz eines ist, in einem Wert der Verdampfungsrate endet, der häufig durch die Diffusion der Feuchtigkeit aus der festen Phase heraus dominiert wird. Der zweite Abschnitt ist stark von inneren Zuständen bzw. Eigenschaften des Partikels bestimmt und kann daher im Sinne der Modellierung der Holzpartikel nach Kapitel 3.2.5 nicht so wiedergegeben werden, wie es vielleicht wünschenswert wäre für die Modellierung der Trocknung feuchter Güter.

Die Modellierung der Kinetik der Trocknung kann nach Peters (2003) in zwei Typen unterschieden werden: ein als heterogene Reaktion modellierter Prozess (siehe z.B. Chan u. a. (1985)) und ein auf Basis von (Energie-)Bilanzen modellierter Prozess, ähnlich wie in Kraume (2004). Da die Modellierung als heterogene Reaktion diverse Nachteile liefert (siehe dazu Peters (2003)), wird hier der folgende isotherme Ansatz aus Peters (2003) verwendet:

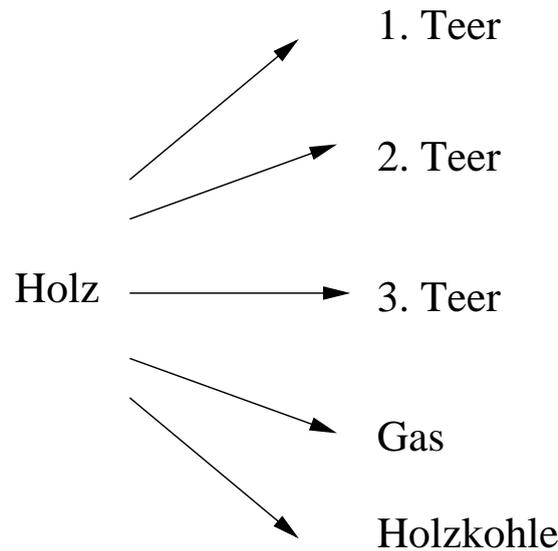
$$\dot{V}_{\text{Verdampfung}, H_2O} = \begin{cases} \frac{(T_p - T_{\text{Verd.}}) \rho_{\text{Partikel}} c_{p, \text{Partikel}}}{\Delta h_{\text{Verd.}} \delta t} & T_p \geq T_{\text{Verdampfung}} \\ 0 & T_p < T_{\text{Verdampfung}} \end{cases} \quad (3.43)$$

wobei  $T_p$  die Temperatur des Partikels ist,  $T_{\text{Verd.}}$  die Temperatur bei der die gesamte Verdampfung stattfindet,  $\rho_{\text{Partikel}}$  die scheinbare Dichte des Partikels,  $c_{p, \text{Partikel}}$  die isobare Wärmekapazität des Partikels,  $\Delta h_{\text{Verd.}}$  die Verdampfungsenthalpie und  $\delta t$  der Integrationszeitschritt. In dieser Arbeit wurde die Dichte der Biomasse durch die Masse der Biomasse ersetzt, was, da keine Schrumpfung während der Trocknung berücksichtigt wird, keinerlei weitere Auswirkungen hat. Der wesentliche Nachteil von Gleichung 3.43 ist die Unstetigkeit bzgl. der Temperatur, welche Integratoren erfordert, die damit umgehen können.

In einem aktuellen Übersichtsartikel von DiBlasi (2008) werden diverse Modelle für die primäre Pyrolyse von Biomasse vorgestellt und miteinander verglichen. Es gibt demnach vier Typen von Reaktionsmechanismen für die primäre Pyrolyse. Der ein-

fachste Typ, der auch in dieser Arbeit gewählt wurde, modelliert die Biomasse als einheitliches Material und berücksichtigt den Zerfall der Biomasse in Holzkohle, Holzgas und Teere (siehe Abbildung 3.5). Der zweite Typ der Mechanismen unterteilt die Biomasse in mehrere (Pseudo)-Komponenten. Dabei werden meist Cellulose, Hemicellulose und Lignin als die Hauptbestandteile der Biomasse identifiziert und deren Zerfall in getrennten Reaktionen modelliert. Darüber hinaus werden häufig zusätzliche virtuelle Komponenten betrachtet (siehe z.B. Diaz (2006)). Der große Nachteil dieser Modelle ist die Notwendigkeit der Angabe der Produkte im Vorhinein. So müssen nach Grønli (1996) sowohl die Holzkohleanteile als auch die Teeranteile bekannt sein. Der dritte Typ der Pyrolysemechanismen geht von einer Reihe aufeinander folgender Reaktionen aus, die meist mit virtuellen Zwischenprodukten modelliert werden. Dieser Typ kann wie die Mechanismen des ersten Typs die konkurrierenden Produktausbeuten an Holzkohle, Holzgas und Teeren wiedergeben. Der letzte Typ an Mechanismen berücksichtigt explizit die Tatsache, dass die Pyrolyse von Biomassen offensichtlich nicht durch einige wenige Komponenten der Biomasse gekennzeichnet ist, sondern es sich bei der Pyrolyse um komplexe Zersetzungs Vorgänge mit vielen Produkten und Zwischenprodukten handelt. In diesem Sinne werden die Aktivierungsenergien als Gauß-verteilt angenommen, um eine Summe an Reaktionen abbilden zu können. Die Modelle werden in der Literatur häufig als "distributed activation energy"-Modelle bezeichnet.

Die primäre Pyrolyse des Holzes wird in dieser Arbeit mit Hilfe des Modells von DiBlasi u. Branca (2001) berechnet, wobei hier entgegen den Darstellungen in DiBlasi u. Branca (2001) anstelle eines Teeres drei Teerkomponenten mit einem festen Verhältnis entstehen. Die Summe der Raten der drei entstehenden Teere ist damit wieder eine Gesamtteerrate wie in DiBlasi u. Branca (2001). Der Grund für diese Modifikation liegt in der Tatsache, dass Teer ein Gemisch aus vielen Komponenten ist und somit der Abbau des Teeres bzw. einzelner Teerkomponenten durch komponentenspezifische Kinetiken wiedergegeben werden kann bzw. sollte. Der Pyrolysemechanismus ist in Abbildung 3.5 aufgezeigt. Die Verhältnisse der Teere wurden mit Hilfe der normierten Maximalwerte der Ausbeuten der drei Teere aus der Arbeit von Rath u. Staudinger (2001) ermittelt und sind in Tabelle 3.8 aufgelistet. Die verwendeten Kinetiken der primären Pyrolyse sind zusammen mit der Reakti-



**Abbildung 3.5:** Reaktionsschema der primären Pyrolyse

onsenthalpie der primären Pyrolyse in Tabelle 3.6 dargestellt. Das Holzgas besteht aus einer festen Mischung an Gasen entsprechend den Darstellungen in Seebauer (1999). Die Zusammensetzung des Holzgases ist in Tabelle 3.7 aufgezeigt. Die in der Arbeit von Seebauer (1999) vorgestellten Daten sind bzgl. der Zusammensetzung der bei der primären Pyrolyse des Holzes entstehenden Gase an sich variabel und verwenden pro entstehende Komponente eine Maximalausbeute dieser Komponente. Die in Tabelle 3.7 gezeigten Werte beziehen sich auf die normierten Maximalwerte der Komponenten. Die Daten aus der Arbeit von Seebauer (1999) sind während der Vermessung der Pyrolyse mit Hilfe einer TGA (Thermogravimetrische Analyse) mit einer Heizrate von  $5\text{ K}/\text{min}$  entstanden. Das verwendete Holz hatte eine Größe von  $1\text{ mm}$  während die Messung eine maximale Temperatur von  $1173\text{ K}$  hatte. Da während der primären Pyrolyse bei hohen Heizraten die Ausbeute an Teer deutlich größer ist als die der Holzgase und die Unsicherheiten bzgl. des Teerabbaus bzw. der Teerentstehung sehr groß sind, ist die hier getroffene Vereinfachung bzgl. der Konstanz der Holzgaszusammensetzung als ausreichend. Es gibt allerdings sehr wenige in der Literatur verfügbare Kinetiken der primären Pyrolyse, die komponentenweise aufgeschlüsselt sind.

Die Reaktionsenthalpie der primären Pyrolyse ist mit einigen Unsicherheiten verbunden, was zum Beispiel in Rath u. a. (2003) dokumentiert ist. In Rath u. a. (2003) wird von einer starken Abhängigkeit der Reaktionsenthalpie der primären Pyroly-

se vom Holzkohleanteil nach Vollendung der primären Pyrolyse berichtet und dies durch die eventuelle Konkurrenz zwischen endothermen und exothermen Prozessen innerhalb des Partikels erklärt. In dieser Arbeit wurde dennoch der in Tabelle 3.6 dargestellte Wert (Annahme einer endothermen Reaktion) als fester Wert verwendet, da die Masse an Holzkohle am Ende der primären Pyrolyse nicht zu Beginn der Simulation bekannt ist.

In der Arbeit von DiBlasi (2008) wurde das in dieser Arbeit verwendete primäre Pyrolysemodell von DiBlasi u. Branca (2001) bzgl. der Ausbeuten an Holzgas, Teer und Holzkohle mit diversen anderen Modellen verglichen. Dabei stellte sich heraus, dass zumindest für die in DiBlasi (2008) untersuchten Modelle ohne Aufschlüsselung der Holzbestandteile das Modell von DiBlasi u. Branca (2001) als einziges qualitativ und quantitativ den Erwartungen entspricht. Qualitativ sind mit steigender Heizrate mehr Teere und Holzgase sowie weniger Holzkohle zu erwarten. Insbesondere die Holzkohleausbeute ist dabei maßgeblich dafür verantwortlich, dass die scheinbaren Dichten des Holzes in Abhängigkeit der Heizrate mit experimentellen Daten übereinstimmen.

Reaktion Holz zu:	E	A in $1/s$
Gas	153	$4.4 \cdot 10^9$
Holzkohle	112	$3.3 \cdot 10^6$
Teer	148	$1.1 \cdot 10^{10}$
Ratenausdruck der Form $r = A \cdot e^{-\frac{E}{RT}} \cdot [Holz]$		
Einheiten: Aktivierungsenergie $\text{kJ/mol}$		
Kinetische Daten von DiBlasi u. Branca (2001)		
Reaktionsenthalpie der Pyrolyse $\text{kJ/m}^3$ nach Grønli (1996)		

**Tabelle 3.6:** Kinetische Daten der primären Pyrolyse

Die Schrumpfung von Partikeln ist ein in der Literatur leider schlecht dokumentiertes Phänomen. Es werden für gewöhnlich nur Zersetzungskinetiken publiziert, die der Art der Messung wegen, meist nur die Massenabnahme über die Zeit abbilden. Letztendlich ist es aber die Partikeldichte und nicht nur die Masse eines Partikels, welche maßgeblichen Einfluss auf das Fluidisierungsverhalten der Partikel

Gaskomponente	Massenanteil
CO	0.27
CO <sub>2</sub>	0.386
CH <sub>4</sub>	0.056
H <sub>2</sub>	0.032
H <sub>2</sub> O	0.256

**Tabelle 3.7:** Massenanteile der bei der primären Pyrolyse entstehenden Gase nach Seebauer (1999)

Teerkomponente	Massenanteil
Ethanol	0.327
Propanol	0.496
Benzol	0.177

**Tabelle 3.8:** Massenanteile am Gesamtteer der bei der primären Pyrolyse entstehenden Teerkomponenten nach Rath u. Staudinger (2001)

hat. Um dennoch ein Schrumpfen der Partikel zu ermöglichen, wurde der Prozess des Schrumpfens für die Trocknung, Pyrolyse und die Vergasung getrennt implementiert. Während der Trocknung wird keinerlei Schrumpfung des Partikels modelliert und das Partikel behält sein ursprüngliches Volumen bei. Während der Pyrolyse wird das Partikelvolumen um einen festen Prozentsatz geändert, unabhängig von der Heizrate des Partikels. Als Basis dient das Modell von Hagge u. Bryden (2002). Entgegen den Annahmen hier werden in Hagge u. Bryden (2002) auch Schrumpfungen in Abhängigkeit von der Heizrate genannt, aber eben auch ohne diese Abhängigkeit. Entsprechend den Darstellungen von Mermoud u. a. (2006) für Heizraten im Bereich von 2.6 K/min bis 900 K/min wird eine Schrumpfung der Partikel während der Pyrolyse um den Faktor drei berücksichtigt. Die Partikelschrumpfung wird dabei entsprechend Gleichung (3.44) umsatzgewichtet berechnet, so dass am Ende der Pyrolyse das Partikel auf ein Drittel des ursprünglichen Volumens geschrumpft ist.

$$V_{\text{Partikel}} = \eta V_{\text{Partikel,Holz}_0} + \frac{1}{3}(1 - \eta)V_{\text{Partikel,Holz}_0} \quad \eta = \frac{m_{\text{Holz}}}{m_{\text{Holz},0}} \quad (3.44)$$

Die Vergasung hingegen wird durch einen massenproportionalen Ansatz für die Schrumpfung beschrieben, was dem Gedanken folgt, dass während der Vergasung

tendenziell eher Holzkohle der äußeren Schichten vergast wird und nicht homogen über das gesamte Partikelvolumen vergast wird.

Der Wärmeübergang an das Partikel wurde entsprechend den Darstellung in der Arbeit von Zhou u. a. (2004b) wie folgt modelliert:

$$\alpha_{Newton} = 2\varepsilon + 0.69Re_P^{\frac{1}{2}}Pr^{\frac{1}{3}}, \quad (3.45)$$

wobei die Reynoldszahl  $Re_P$  als

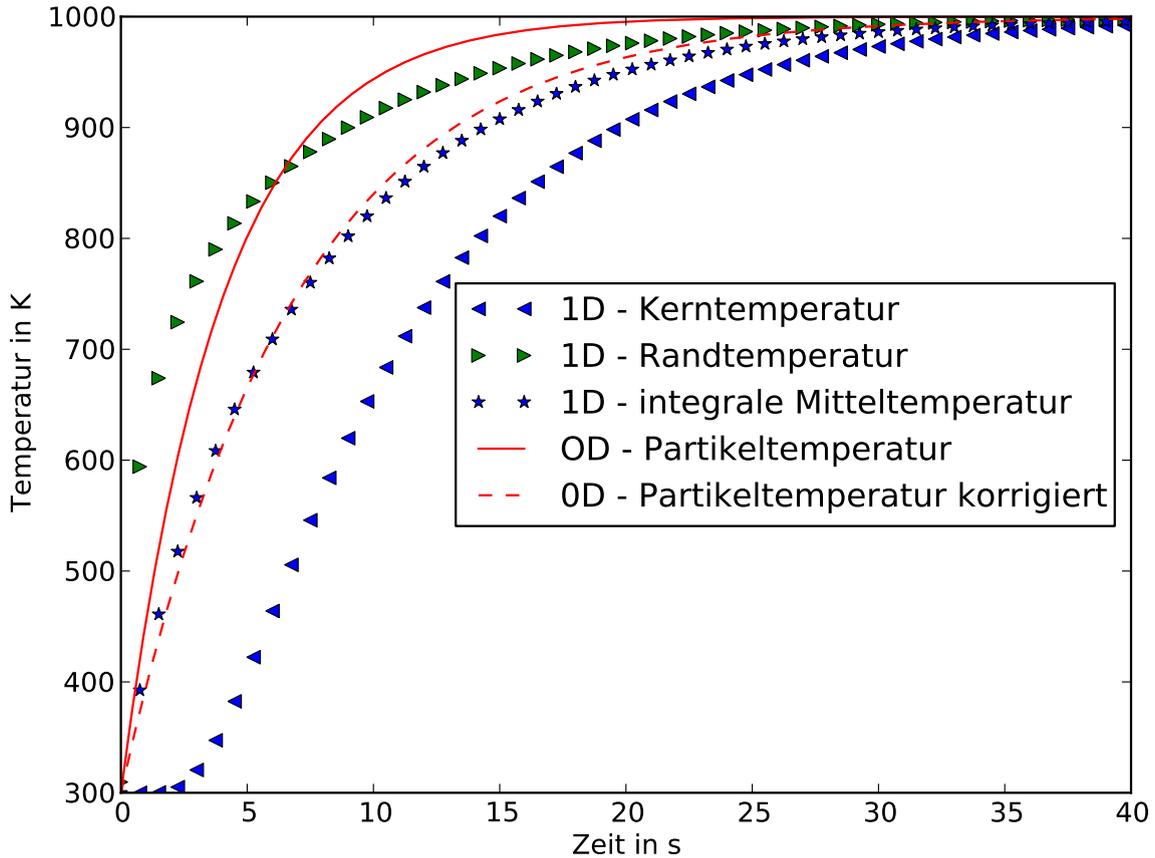
$$Re_P = \frac{\varepsilon d_P |\mathbf{u} - \mathbf{u}_P|}{\nu_F} \quad (3.46)$$

definiert ist. Diese Darstellung ist eine Adaption der ursprünglich von Ranz (1952) publizierten Gleichung für den einphasigen Wärmeübergang. Da aber die Trocknung und Pyrolyse im Wesentlichen durch den Wärme- und Stoffübergang limitiert werden, führt eine nulldimensionale Modellierung der Partikel zu einer deutlich kürzeren Aufheizzeit (im Vergleich zu einer eindimensionalen Modellierung). Aus diesem Grund wurde in dieser Arbeit eine modifizierte Form des Wärmeübergangs berücksichtigt. Der Gesamtwärmeübergangskoeffizient wurde dabei als

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{1}{\alpha_{Newton}} + \frac{d_P}{4\pi\lambda_P} \quad (3.47)$$

angenommen. Um eine Bewertung dieser Modifikation zu ermöglichen, zeigt Abbildung 3.6 vergleichend die Aufheizung eines Partikels mit Hilfe verschiedener Modelle. Verglichen werden in Abbildung 3.6 das nulldimensionale Modell mit einem festen Wärmeübergangskoeffizienten, das nulldimensionale Modell mit einem festen Wärmeübergangskoeffizienten, aber mit Berücksichtigung der Wärmeleitfähigkeit nach Gleichung (3.47) und die integrale Mitteltemperatur der eindimensionalen Wärmeleitgleichung mit einem festen Wärmeübergangskoeffizienten. Zusätzlich werden die Rand- und Kerntemperaturen der eindimensionalen Wärmeleitgleichung in Abbildung 3.6 gezeigt. Die Lösung der kugelsymmetrisch eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung wurde dem Standardwerk von Baehr u. Stephan (2002) entnommen (es wurden die ersten 100 Nullstellen der transzendenten Gleichung in der Biotzahl berücksichtigt).

Wie man deutlich in Abbildung 3.6 sieht, wird durch die Korrektur des äußeren Wärmeübergangskoeffizienten nach Gleichung (3.47) die integrale Mitteltemperatur



**Abbildung 3.6:** Vergleich der zeitlichen Temperaturentwicklung mit Hilfe verschiedener Modelle,  $d_p=4$  mm,  $c_p=1700$  J/kgK,  $\rho=700$  J/kgK,  $\alpha=200$  W/m<sup>2</sup>K,  $\lambda=0.1$  W/mK, 300 K Anfangstemperatur, 1000 K Umgebungstemperatur

des Partikels deutlich besser beschrieben als mit dem einfachen nulldimensionalen Modell. Die Kerntemperatur des Partikels hingegen wird weiterhin nur unzureichend beschrieben, was allerdings aufgrund des für die numerische Auflösung des Partikels notwendigen Rechenaufwandes nicht weiter betrachtet wird. Der Vorteil in Gleichung (3.47) liegt gerade darin, dass wie bei einem einfachen nulldimensionalen Partikelmodell nur eine Gleichung für die Partikeltemperatur gebraucht wird.

Die Wärmeleitfähigkeit des Partikels in Gleichung (3.47) wird als umsatzgewichtete Mischung der Wärmeleitfähigkeiten von Holz und Holzkohle berechnet:

$$\lambda_P = \eta\lambda_{Holz} + (1 - \eta)\lambda_{Holzkohle} \quad \eta = \frac{m_{Holz}}{m_{Holz,0}}, \quad (3.48)$$

wobei  $m_{Holz,0}$  die Anfangsmasse des Holzes im betrachteten Partikel ist. Die Wärmeleitfähigkeiten von Holz ( $\lambda_{Holz}$ ) und Holzkohle ( $\lambda_{Holzkohle}$ ) werden als feste, temperaturunabhängige Werte angenommen und haben entsprechend den Darstellungen

aus der Arbeit von Grønli (1996) eine Höhe von  $0.35 \text{ W/mK}$  und  $0.1 \text{ W/mK}$ . Der Wassergehalt des Partikels und die Wärmestrahlung innerhalb des Partikels werden bei der Berechnung der partikelinternen Wärmeleitfähigkeit nicht berücksichtigt.

### 3.2.8 Integration des Partikelmodells

Zur Integration des in Kapitel 3.2.5 vorgestellten nulldimensionalen Partikelmodells stehen in OpenFOAM drei verschiedene Verfahren zur Verfügung: ein fünfter Ordnung Runge-Kutta-Verfahren (Cash u. Karp (1990)), ein vierter Ordnung Runge-Kutta-Verfahren (Kaps u. Rentrop (1979)) und ein Bulirsch-Stoer Verfahren (Bader u. Deuffhard (1983)), wobei die letzten beiden für steife Differentialgleichungen in Frage kommen. Generell haben sich alle drei als wenig zuverlässig in Bezug auf die Integration des nulldimensionalen Partikelmodells erwiesen.

Aus diesem Grunde wurde nach anderen geeigneten Integratoren gesucht. Als eine nützliche Arbeit in Bezug auf die Beurteilung verschiedener Integratoren hat sich die Arbeit von Bauer (1999) herausgestellt. Hier werden an einigen Beispielen diverse, zum Teil frei verfügbare Integratoren für ODE (ordinary differential equations) und DAE (differential algebraic equations) Probleme mit Anwendung aus der Verfahrenstechnik getestet. In den Darstellungen von Bauer (1999) sind häufig sogenannte implizite Mehrschrittverfahren unter den effizientesten Verfahren, weshalb zu Beginn der Arbeit mit der SUNDIALS Bibliothek gearbeitet wurde. Das Verfahren hat sich als sehr stabil und genau herausgestellt, hat jedoch entscheidende Nachteile. Durch die unterschiedliche Geschichte der einzelnen Partikel (aus Sicht des Integrationsverfahrens handelt es sich um die Anfangsbedingungen), muss das CVODE-Verfahren für jedes Partikel neu initialisiert werden, was im Verhältnis zur eigentlichen Integrationszeit die Gesamtrechenzeit zum Teil dominierte.

Als Alternative wurde das implizite Runge-Kutta-Verfahren RADAU5 gewählt. Der Source Code ist sowohl für FORTRAN als auch für C++ frei zugänglich (Homepage von E. Hairer). Eine Beschreibung des Verfahrens und Aussagen über die Stabilitätseigenschaften von RADAU5 gibt das Buch von Hairer u. Wanner (1996) und zeigt, dass es sich um ein auch bei fünfter Ordnung stabiles Verfahren handelt. Der frei verfügbare Source Code musste in einigen Punkten angepasst werden, um ihn in

die von OpenFOAM für ODE Integratoren vorgesehenen Klassen einzubetten. Die während der Integration benötigten Jacobi-Matrizen werden in RADAU5 numerisch über finite Differenzen approximiert, falls sie nicht analytisch vorgegeben werden. Die analytische Vorgabe von Jacobi-Matrizen bei Systemen größer als zehn erschien wenig zielführend, da es gerade Teil dieser Arbeit ist, einfache Modelle zu entwickeln und sie dementsprechend auch oft zu modifizieren. Um dennoch nicht bei jedem Partikel und jedem Zeitschritt numerisch Jacobi-Matrizen bestimmen zu müssen, wurde die Neuberechnung der Jacobi-Matrizen an einige Parameter gebunden, was bedeutet, dass jedes Partikel während der Simulation eine Kopie der zuletzt berechneten Jacobi-Matrix speichert. Diese Matrizen werden aus Platzgründen weder von der Festplatte gelesen noch auf die Festplatte geschrieben, sondern bei jedem Start bzw. Neustart der Simulation neu berechnet. Zusätzlich werden die Matrizen neu berechnet, wenn Partikel von einem Prozessor zu einem anderen wechseln (also in parallelen Simulationen), um unnötige Netzwerkkommunikation zu vermeiden. Da während der Pyrolyse und Verdampfung die Partikeleigenschaften in einem stetigen Wandel sind, werden für Partikel, die diese beiden Prozesse noch nicht abgeschlossen haben, in jedem Zeitschritt neue Jacobi-Matrizen berechnet und gespeichert. Aufgrund der Schnelligkeit von Trocknung und Pyrolyse im Vergleich zur Vergasung der Holzkohlepartikel, besteht der Reaktor überwiegend aus Holzkohlepartikeln, was eine stetige Neuberechnung der Jacobi-Matrizen für Holzpartikel begünstigt. Die gewählte Strategie bzgl. der Neuberechnung der Jacobi-Matrizen hat die Gesamtrechenzeit fast halbiert und hat somit wesentlich zur Effizienz der in dieser Arbeit vorgestellten Simulation beigetragen.

### 3.3 Mapping Algorithmen zwischen den Phasen

Als Mapping zwischen den Phasen wird der Algorithmus bezeichnet, der zum einen die Interpolation der Fluiddaten auf die Partikelposition vornimmt und zum zweiten die Partikeldaten wieder auf das Fluidfeld projiziert.

### 3.3.1 Euler $\rightarrow$ Lagrange Mapping

Im ersten Fall werden Daten wie die Geschwindigkeit, die Temperatur etc. während der Berechnung der Trajektorie eines Partikels zum Beispiel zur Auswertung der Gleichungen (3.10) und (3.36) benötigt. Der Algorithmus ist also maßgeblich dafür verantwortlich, welche Bedingungen das Partikel während eines Zeitraumes spürt. Es stehen Ansätze verschiedener Güte zur Verfügung, die hier kurz dargestellt werden sollen.

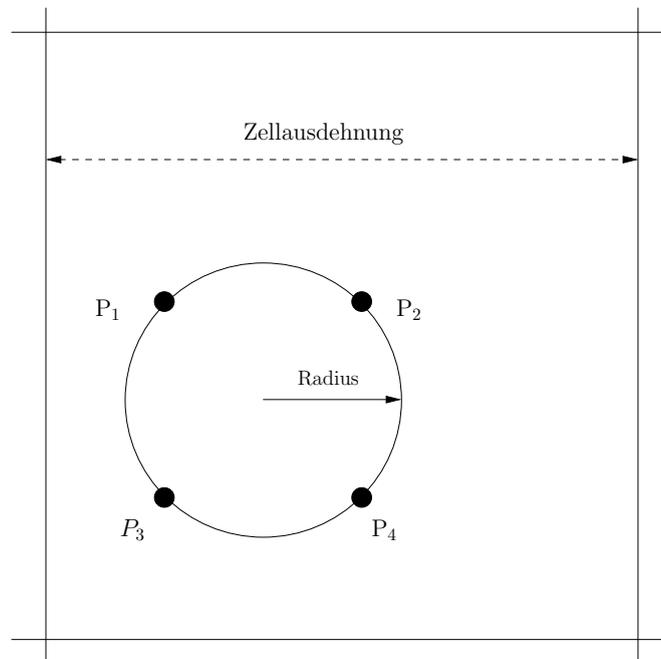
Das denkbar einfachste Schema verwendet dabei die Fluiddaten der Zelle, in dem sich gerade das Partikel aufhält, ohne Berücksichtigung des tatsächlichen Aufenthaltsortes des Partikels innerhalb der Zelle. Der Ansatz hat zwar aufgrund seiner Einfachheit und Schnelligkeit Vorzüge, jedoch überwiegen die Nachteile klar. Mit diesem Ansatz ergibt sich insbesondere ein Schachbrettfeld an Fluidwerten, d.h., das Partikel unterliegt beim Wechsel zwischen verschiedenen Gebietszellen einem unstetigen Fluidfeld. Des Weiteren ist dieser Ansatz insbesondere für große Partikel extrem vereinfachend, da im Allgemeinen nur die Position des Zellmittelpunktes den interpolierten Wert der Fluiddaten beeinflusst. Im dreidimensionalen Fall auf kartesischen Gittern kann dies dazu führen, dass nur ein Achtel eines Partikels in einer Zelle ist und der Wert der Fluiddaten in dieser Zelle daher kein gutes Maß für die tatsächlich auf der Partikeloberfläche geltenden Bedingungen ist. Im Zweidimensionalen beträgt der minimale Anteil eines Partikels, welcher gemeinsam in einer Zelle mit dem Mittelpunkt des Partikels liegt, ein Viertel. Auch dieser Wert ist sicherlich zu klein, um sinnvoll interpolierte Werte zu erwarten.

Ein Ansatz, der auch in dieser Arbeit Anwendung findet, bestimmt den Wert der zu interpolierenden Fluiddaten innerhalb einer Gebietszelle aus einem gewichteten Mittel der Werte der Nachbarzellen:

$$\phi(x) = \frac{1}{\sum_i \gamma_i} \sum_i (\gamma_i \phi_i) \quad \gamma_i = \frac{1}{\max(\delta, |x - c|)}, \quad (3.49)$$

wobei  $\phi(x)$  für die interpolierte Größe in Abhängigkeit vom Mittelpunkt  $x$  des Partikels,  $i$  für den Index der Nachbarzellen (inklusive der Zelle, die das Partikel beherbergt),  $\delta$  für eine kleine Zahl, die die Division durch Null verhindern soll, und  $c$  für die Zellzentren der Zellen steht, an denen die Größen  $\phi$  gespeichert werden. Dieser

Ansatz ist ebenfalls in Nordin (2001) dokumentiert. Dabei werden die Fluiddaten wiederum am Mittelpunkt des Partikels interpoliert, jedoch als Mittel der naheliegenden Zellwerte. Der Ansatz liefert zwar ein unstetiges Feld von Fluiddaten an den Gebietszellengrenzen, aber die oben genannten Probleme treten nicht bzw. nur abgeschwächt auf.



**Abbildung 3.7:** Partikel in einer Zelle mit ähnlicher Ausdehnung (die Punkte  $P_1$  bis  $P_4$  sind beispielhaft für eine verbesserte Interpolation auf der Partikeloberfläche anstelle des Partikelmittelpunktes gewählt worden)

Der im Verhältnis zur Gitterweite relativ große Partikeldurchmesser verursacht bzgl. der Interpolation ein weiteres Problem, dessen Einfluss auf die Modellgenauigkeit auch in der Literatur nicht dokumentiert ist. Die größten im System befindlichen Partikel haben einen Durchmesser der häufig der Hälfte bzw. einem Drittel der Zellausdehnung entspricht, womit der Radius zwischen einem Viertel bzw. einem Sechstel der Zellausdehnung liegt und somit in der selben Größenordnung wie die Zellausdehnung selbst ist. Der Fehler von Interpolationsverfahren skaliert ebenfalls mit einer Potenz der Gitterweite (je nach Verfahren). Somit ist die Annahme, den Partikelmittelpunkt als Referenzort für die Fluideigenschaften zu verwenden, interpolatorisch mit einem Fehler gleicher Größenordnung behaftet, denn die exakten Fluiddaten auf der Partikeloberfläche ergeben sich aus den integralen Mittelwerten

der Fluidfelder auf der Partikeloberfläche und sind somit in dem hier verwendeten Verfahren an einem um einen halben Partikeldurchmesser versetzten Ort berechnet worden. Eine Berechnung der Fluidfelder an symmetrisch auf der Partikeloberfläche angeordneten Punkten mit nachträglicher gleichgewichteter Summation sollte im Allgemeinen bessere Werte liefern. Abbildung 3.7 zeigt beispielhaft vier Punkte auf der Partikeloberfläche, die eine bessere Interpolation gegenüber der Verwendung des Partikelmittelpunktes erlauben, wenn der Partikelradius in der selben Größenordnung wie die Zelle selbst ist. Der Wert einer Fluidgröße  $\phi$  (z.B. der Fluidtemperatur), die das Partikel zur Berechnung der Interaktion mit dem Fluidfeld verwendet (z.B. Wärmeaustausch), kann entsprechend den obigen Bemerkungen und der Darstellung in Abbildung 3.7 mit Hilfe von

$$\phi = \frac{\phi_{P_1} + \phi_{P_2} + \phi_{P_3} + \phi_{P_4}}{4} \quad (3.50)$$

berechnet werden. In dieser Arbeit wird nicht berücksichtigt, dass zum Beispiel Sundaram u. Collins (1996) angeben, dass die Interpolation mit mindestens dritter Ordnung durchzuführen ist.

An dieser Stelle sei auf typische asymmetrische (z.T. auch inhärent instationäre) Wirbelstrukturen im Nachlauf von Partikeln hingewiesen (siehe z.B. Brauer (1971)), die deutlich machen, dass der Partikelmittelpunkt nicht unbedingt die geeignete Stelle zur Interpolation der Fluiddaten ist. Auf der anderen Seite sollte man sich darüber im Klaren sein, dass innerhalb einer Euler-Lagrange-Simulation keine Auflösung der Partikelgrenzsichten bzw. einer Partikel-individuellen Strömung erfolgt und somit auch keine Wirbelphänomene auf dieser Skala aufgelöst werden können. Lokal stark veränderliche Fluiddaten (z.B. am Rand des Reaktors mit gesetzter Haftbedingung der Impulsbilanz 3.3) erfordern jedoch theoretisch ein detaillierteres Interpolationschema, als es oben beschrieben wurde.

### 3.3.2 Lagrange $\rightarrow$ Euler Mapping

Das Mapping der Partikeldaten auf das zugrundeliegende Fluidgitter ist ungleich schwerer dem obigen inversen Problem, da erstens die Infrastruktur von OpenFOAM diesbezüglich deutlich schlechter ausgebaut ist (Standard-OpenFOAM-Löser

vernachlässigen in den momentan vorliegenden Versionen den Volumenanteil der Lagrange'schen Partikel, es ergibt sich also mehr Implementationsaufwand) und zweitens die benötigten Ergebnisse eines Mappings materieller Partikel Daten auf ein Gebiet gewisse Eigenschaften der sich ergebenden Felddaten implizieren (Stetigkeit, Beschränktheit der zeitlichen Änderungen dieser Felder etc.). Das Interpolieren von Felddaten auf der Partikeloberfläche ist nur rechenaufwändig, wohingegen der hier diskutierte Rückweg diverse Probleme mit sich bringt, wie im Weiteren gezeigt wird. Auch in der Literatur ist dieses Problem deutlich weniger dokumentiert als das inverse Mapping, da für eine große Zahl von Anwendungen (Spray's, molekulardynamische Simulationen etc.) die Partikelgröße häufig sehr klein im Verhältnis zur Zellgröße ist und somit ohnehin meist mit repräsentativen Konzepten gearbeitet wird. Dadurch wird der Einfluss der Partikelgröße auf die netto in einer Zelle auftretenden Quellterme meist sehr klein.

Der in der Literatur häufig beschrittene Weg des Mappings ist das sogenannte "Particle source in cell"-Modell von Crowe u. a. (1977). Dabei werden die über die Zeit und bei entsprechender Partikelbewegung auch über den Ort entstehenden Austauschgrößen zwischen den Partikeln und der fluiden Phase der Zelle zugeordnet, in der der Mittelpunkt des Partikels liegt. Die Nachteile sind bei der inversen Problematik bereits oben angedeutet worden.

In der hier vorgestellten Arbeit sind einzelne Partikel potentiell so groß, dass ein Aufteilen des Partikelvolumens eines Partikels auf verschiedene Zellen zwingend notwendig ist. Dies ergibt sich aus mehreren Gründen, die hier näher erläutert werden.

Insbesondere die Volumenfraktion der Festphase (und damit auch der Fluidphase) kann zu extrem großen zeitlichen Sprüngen neigen, wenn man nicht spezielle Maßnahmen ergreift, um dies zu verhindern. Angenommen, man verfolgt das "Particle source in cell"-Konzept und berücksichtigt das Volumen des Partikels nur in der Zelle, in der der Mittelpunkt des Partikels gerade liegt, so wird ein Partikel, das sehr dicht vor dem Verlassen einer Zelle ist, seinen kompletten Volumenbeitrag nur dieser einen Zelle entziehen (obwohl wie oben dargelegt u.U. nur 12.5 % des Partikel tatsächlich in dieser Zelle sind). Im Fall des Übergangs des Partikelmittelpunktes in die Nachbarzelle wird dann schlagartig das komplette Partikelvolumen der neuen

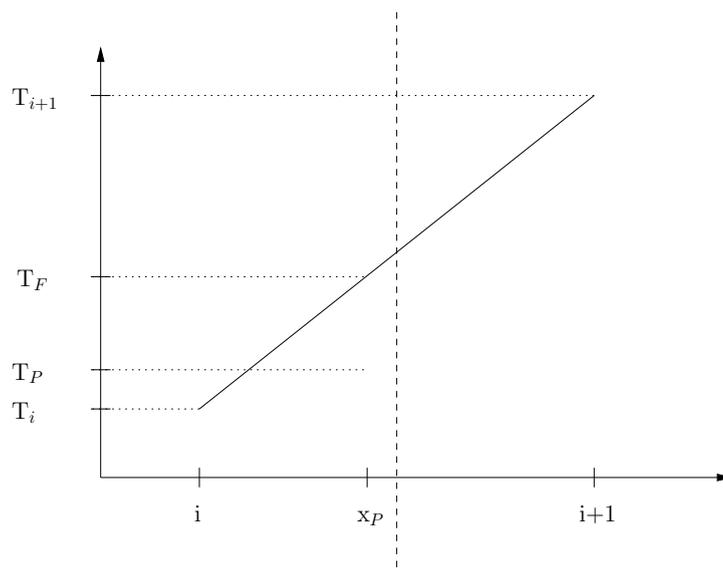
Zelle zugeordnet. Dies ist insbesondere deswegen numerisch instabil, da der Partikelwechsel in die Nachbarzelle für jeden finiten Zeitschritt möglich ist (z.B. wenn das Partikel direkt auf der Zellwand liegt) und damit das übergehende Volumen fix ist (das gesamte Volumen des Partikels), jedoch der Zeitschritt zur Berechnung der Volumenänderungsrate (Zeitschritt der Feldgleichungen) beliebig klein werden kann. Bei der Berechnung der echten Volumenänderungsrate einer Zelle würde bei kleiner werdenden Zeitschritt auch das übergehende Volumen kleiner werden und damit die Änderungsrate finit bleiben.

Da, wie im Kapitel 4.1 dargestellt, die Kopplung der Phasen nicht iterativ gestaltet ist, richtet sich der Massenfluss in ganz wesentlichen Teilen nach der Änderungsrate der Volumenanteile. Eine zu abrupte Änderung der Volumenanteile zieht dementsprechend einen lokal sehr großen Massenfluss nach sich, um die vom oben dargestellten Szenario betroffenen Gebietszellen mit Fluid aufzufüllen bzw. zu entleeren und damit die Massenbilanz zu erfüllen. Dieser Effekt ist schon in der Arbeit von Gerber (2006a,b) für eine zweiphasige Strömung mit einem dichtekonstanten Fluid klar ersichtlich. In der Literatur ist dieser Effekt nur sehr selten dokumentiert bzw. erwähnt (siehe z.B. Darmana u. a. (2006)).

Ein Aspekt, der in der bisherigen Diskussion der Interpolationsverfahren vollkommen außer Acht gelassen wurde, ist die thermodynamische Gültigkeit der erzielten Interpolationsergebnisse. In der Arbeit von Nordin (2001) wird dieser Aspekt betrachtet und soll hier, da er die bisherigen Ergebnisse zum Teil konterkariert, ebenfalls näher beschrieben werden. Aufgrund des etwas komplexeren Interphasentransportes in dieser Arbeit (die in Nordin (2001) behandelten Dieselsprays betrachten typischer Weise nur Massentransport vom Spray in die Fluidphase, wohingegen die Vergasung naturgemäß einen Massentransport in beide Richtungen hervorruft) soll die Diskussion hier nicht nur für die Fluidgeschwindigkeit und die Fluidtemperatur, sondern auch für die an den heterogenen Reaktionen beteiligten Stoffe etwas ausführlicher durchgeführt werden.

Angenommen, die Geschwindigkeit des Fluids an einem Partikel wird über die Werte der Nachbarzellen und der Zelle interpoliert, die das Partikel beherbergt, so sind Situationen denkbar, bei denen die Partikelgeschwindigkeit gerade zwischen den Wer-

ten der beiden betroffenen Gebietszellen (es wird hier, ohne Beschränkung der Allgemeingültigkeit, vereinfachend angenommen, dass das Partikel nur von zwei Zellwerten beeinflusst wird) liegt. So kann die interpolierte Fluidgeschwindigkeit oberhalb der Partikelgeschwindigkeit liegen, was zum Beschleunigen des Partikels führt. Der für diese Beschleunigung notwendige Impulsaustausch muss folgerichtig den beiden Gebietszellen entzogen werden. Nun tritt dann aber die Situation auf, dass der Zelle, die eine Geschwindigkeit unterhalb der Partikelgeschwindigkeit hat, Impuls entzogen werden muss. Dies verstößt offensichtlich gegen den thermodynamischen Grundsatz, dass eine Wirkung proportional zu dem ihr zugrundeliegenden Potential sein soll. Man kann dies hier je nach Betrachtungsweise auch als mechanisches Prinzip deuten. Das Potential ist in diesem Fall die Geschwindigkeitsdifferenz des Fluids und des Partikels und die Wirkung ist der Impulsaustausch zwischen den Phasen. Dieses Phänomen tritt dabei unabhängig von dem verwendeten Interpolationsverfahren höherer Ordnung auf. Verwendet man hingegen als für das Partikel wesentliche Fluidgeschwindigkeit den Wert der Zelle, in dem der Mittelpunkt des Partikels liegt, wird dieses Problem vermieden. Insofern scheint hier eine an sich bessere Interpolation die schlechtere Abbildung des physikalischen Geschehens zu liefern.



**Abbildung 3.8:** Partikel mit der Temperatur  $T_P$  zwischen zwei Zellen  $i$  und  $i+1$  mit den Temperaturen  $T_i$  und  $T_{i+1}$  ( $T_F$  ist die am Partikelort  $x_P$  interpolierte Fluidtemperatur)

Ein ähnliches Problem wird auch für die Temperatur in der Arbeit von Nordin (2001) dargestellt und soll hier ebenfalls dargelegt werden. Wiederum wird eine Situation angenommen, in der zwei Zellen Temperaturen an ihren Zellzentren haben, die jeweils größer bzw. kleiner als die Temperatur des Partikels sind und aus denen eine interpolierte Fluidtemperatur hervorgeht, die oberhalb der Partikeltemperatur liegt. Das Partikel würde also wärmer werden und den damit verbundenen Wärmestrom den beiden Zellen (angenommen man verteilt den entstehenden Quellterm) entziehen. Dies führt dann für die kältere Gebietszelle zu einem direkten Verstoß gegen den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik, da Wärme in diesem Fall offensichtlich vom kälteren Körper zum wärmeren fließen würde. Die hier diskutierte Situation wird in Abbildung 3.8 veranschaulicht, wobei  $T_P$  die Partikeltemperatur kennzeichnet,  $T_F$  die am Partikelort interpolierte Fluidtemperatur und  $T_i$  und  $T_{i+1}$  die Fluidtemperaturen in den Zellen  $i$  und  $i+1$ .

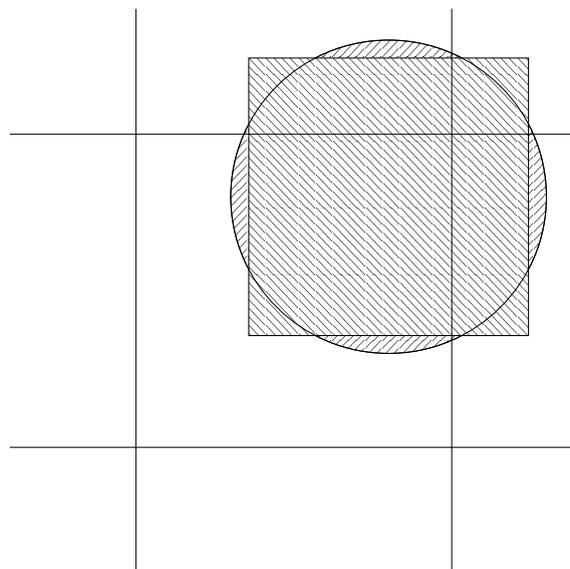
Auch bzgl. der Spezies ergibt sich ein ähnliches Bild, da im Fall heterogener Reaktionen auf der Partikeloberfläche (z.B. Vergasungsreaktionen) der Gasphase die Edukte dieser Reaktionen entzogen werden und die Produkte zugeführt werden müssen. Dabei kann die Situation entstehen, in der eine Gebietszelle kein Edukt enthält, jedoch der interpolierte Wert dieses Eduktes im Partikelzentrum ungleich Null ist, da eine (mehrere) Nachbarzelle(n) dieses Edukt enthalten. Folglich würde die Vergasungsreaktion dieses Edukt verbrauchen und den damit entstehenden Massenfluss zumindest teilweise aus der Zelle beziehen, die dieses Edukt gerade nicht mehr enthält. Man würde also de facto eine Komponente umsetzen, die lokal nicht vorhanden ist. Die Pyrolyse spielt in dieser Betrachtung eine untergeordnete Rolle, da dabei hauptsächlich Material vom Partikel in die Gasphase übergeht und nicht umgekehrt (ähnlich wie bei einem Dieselspray).

Die hier dargestellten Probleme der Interpolation innerhalb einer reaktiven zweiphasigen Strömung sind allesamt durch Verwenden des Wertes der Zelle, die den Mittelpunkt eines Partikels enthält, gelöst. Leider bringt dieser Ansatz relativ große Interpolationsfehler mit sich (siehe oben).

### 3.3.3 Mapping Algorithmen dieser Arbeit

Die in dieser Arbeit verwendete Methode, um aus den Partikelpositionen ein Feld für die Volumenfraktionen der Phasen zu erhalten, geht von einem dem Partikel volumengleichen Quader aus. Da das hier vorgestellte Verfahren im derzeitigen Zustand nur auf einem kartesischen Gitter arbeitet, bietet sich die Form eines Würfels naturgemäß an. Die Verwendung von Quadern führt zwangsläufig zu Fehlern in der Darstellung der Volumenfraktion, hat jedoch den Vorteil, dass der Volumenanteil des Partikels in einer Zelle direkt mit dem Zeitschritt der Simulation skaliert und somit abrupte Änderungen der Volumenanteile in den Gebietszellen vermieden werden, wenn denn der Zeitschritt klein genug ist und damit auch die Ortsänderung.

Die exakte Aufteilung der Kugel ist zumindest für den dreidimensionalen Fall recht aufwändig (siehe Wu u. a. (2009)) aber für den zweidimensionalen Fall durchaus praktikabel (siehe Uhl (1999)). Die Approximation einer Kugel durch einen volumengleichen Würfel vereinfacht nicht nur die Berechnung der Volumenanteile in Bezug auf die formelmäßige Auswertung, sondern auch bzgl. der betroffenen Zellen. Es sind Situationen denkbar auf einem kartesischen Gitter, in der die Kugel Volumenanteile in einer Zelle hat, die nicht von der Würfelapproximation betroffen ist und der somit in dieser Arbeit kein Volumenanteil zugeordnet wird.



**Abbildung 3.9:** *Volumenverteilung eines kugelförmigen Partikels anhand eines volumengleichen Würfels*

Ein bei zweidimensionalen Euler-Lagrange-Simulationen inhärentes Problem ist die Frage nach der Berücksichtigung dreidimensionaler Körper in einer zweidimensionalen Strömung. Die Unterschiede werden klar, wenn man die dichteste Packung von Kugeln in einem Volumen vergleicht mit der dichtesten Packung von Kreisen in einer Fläche (für monodisperse Systeme). Im ersteren Fall beträgt der größtmögliche Volumenanteil der Kugeln  $\frac{\pi}{\sqrt{18}}$ , also ungefähr 0.74. Dies ist ein Mittelwert, welcher lokal, je nach Aufteilung des Gebietes, übertroffen werden kann. Die dichteste Packung von Kreisen in einer Fläche beträgt  $\frac{\pi}{\sqrt{12}}$ , also ungefähr 0.91. Nimmt man an, dass diese beiden dichtesten Packungen einander zuzuordnen sind und das nicht Vorhandensein der festen Phase im Zweidimensionalen auch selbiges im Dreidimensionalen bedeutet, ergibt sich die in der Arbeit von Hoomans u. a. (1996) publizierte Gleichung (3.51), die auch dieser Arbeit, trotz der Polydispersität der Festphase verwendet wurde.

$$\alpha_{3D} = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi\sqrt{3}}} \cdot (1 - \alpha_{2D})^{\frac{3}{2}} \quad (3.51)$$

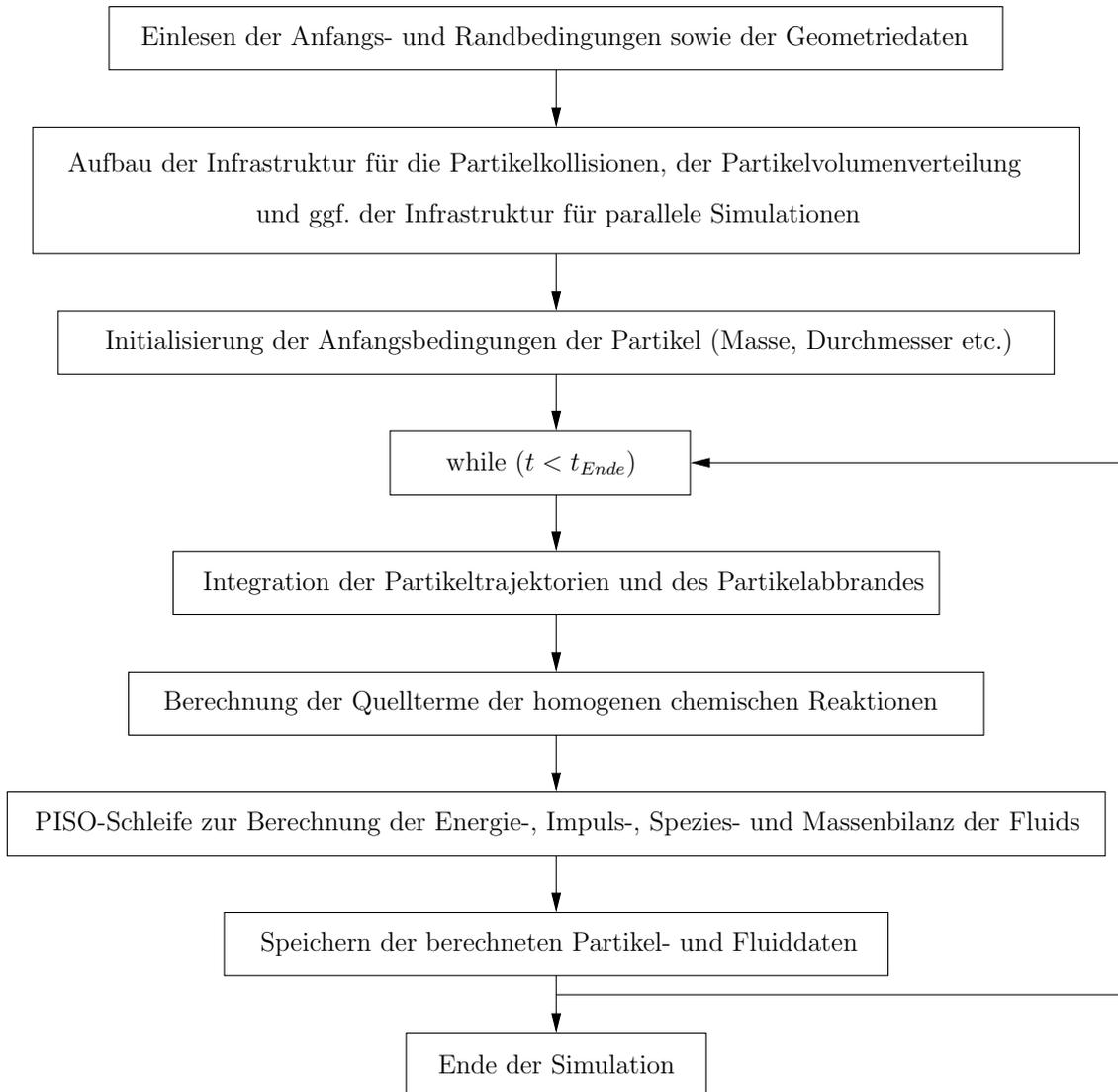
In OpenFOAM werden zweidimensionale Gebiete so behandelt, als handele es sich um dreidimensionale mit einer Gebietszelle in Tiefenrichtung. Korrigiert man die Volumenfraktionen nicht mit Gleichung (3.51), so ergeben sich zu kleine Volumenanteile der Partikelphase und das Wirbelbett fluidisiert nicht bei den entsprechenden Gasgeschwindigkeiten. Eine ähnliche Umrechnung müsste auch für die anderen volumenbezogenen Quellterme der festen Phase berücksichtigt werden, jedoch gibt es in der Literatur darüber keine Aussagen und so wurde in dieser Arbeit nur die Volumenfraktion selbst korrigiert. Die Interpolation der Fluidgrößen am Ort des Partikelmittelpunktes wurde wie in Kapitel 3.3.1 dargelegt bewerkstelligt.

# Euler-Lagrange-Simulation

## 4.1 Programmablauf

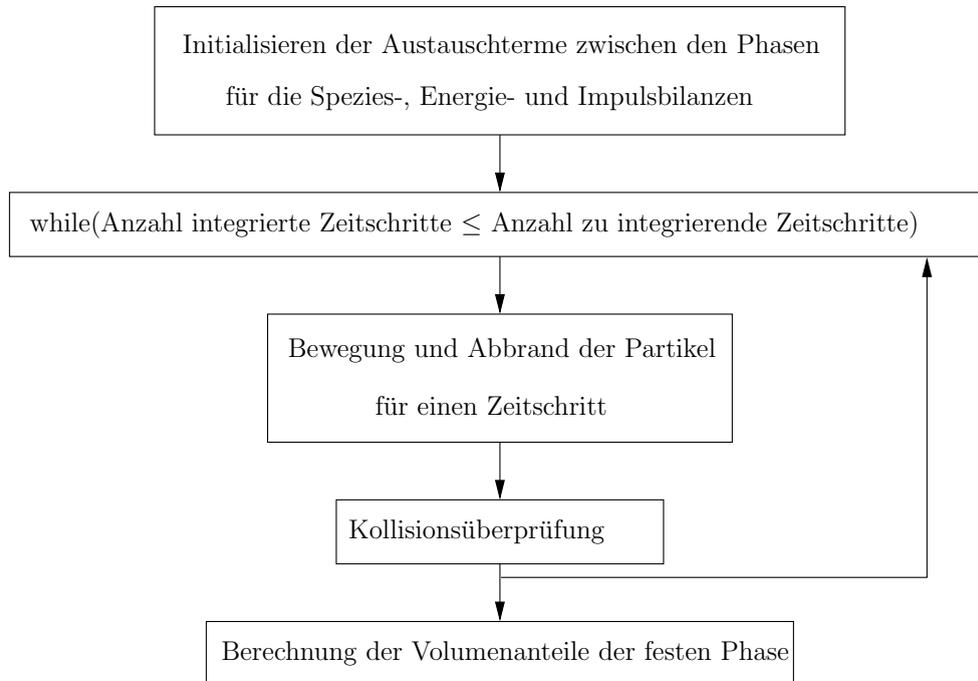
Der Ablauf des in dieser Arbeit implementierten Euler-Lagrange Verfahrens ist in Abbildung 4.1 dokumentiert. Zu Beginn der Simulation werden die Geometriedaten, Anfangs- und Randbedingungen eingelesen. Danach wird eine Infrastruktur auf Basis der lokalen Gitter erstellt, die das Berechnen der Volumenaufteilung eines Partikels (siehe Abbildung 3.9), die Kollisionsüberprüfung und die Parallelisierung der beiden zuletzt genannten Teilprozesse erlaubt. Je nachdem ob das Programm neu gestartet wird oder eine bereits begonnene Rechnung weitergeführt werden soll, werden dann die Partikel initialisiert und deren Anfangsdaten festgelegt (Masse, Durchmesser etc.) bzw. die entsprechenden Daten eingelesen.

Das Einfügen der Partikel bei einem Neustart ist relativ aufwändig, da der Ort der Partikel nicht beliebig frei gewählt werden kann. So sollten die Partikel mit einem Mindestabstand zueinander aber auch zu den Berandungen der Geometrie versehen werden, damit der Kollisionsalgorithmus (siehe Kapitel 3.2.3) nicht unrealistisch große Überlappungen der Partikel mit anderen Partikeln bzw. Geometriewänden detektiert und damit dann entsprechend große resultierende Kräfte entstehen, die unter Umständen deutlich kleinere Zeitschritte erfordern, als für die Simulation eigentlich angedacht. Es ist also darauf zu achten, dass die initialen Partikeldaten physikalisch sinnvoll sind, d. h. das beispielsweise die initialen Partikelpositionen so gewählt werden sollten, dass sich keine Partikelüberlappungen ergeben.



**Abbildung 4.1:** Ablauf des Hauptprogramms

Nachdem alle Größen initialisiert worden sind, beginnt die eigentliche Simulation, welche den Ablauf der Geschehens in der Wirbelschicht vom Anfangszeitpunkt bis zum Simulationende mit einem konstanten Zeitschritt  $\Delta t_{\text{Feldgleichungen}}$  berechnet. Für jeden Zeitschritt  $\Delta t_{\text{Feldgleichungen}}$  wird zuerst die Partikelbewegung bzw. der Partikelabbrand berechnet, dann die Feldgleichungen der fluiden Phase gelöst und zuletzt werden die berechneten Daten gespeichert. Die Unterteilung in Partikelbewegung bzw. Partikelabbrand und der Berechnung der Fluidfeldgleichungen impliziert ein zeitliches Splitting dieser beiden Prozesse. Das Splitting ist erster Ordnung bzgl. der zeitlichen Schrittweite  $\Delta t_{\text{Feldgleichungen}}$ . Die Berechnung der Fluidfeldgleichungen unterteilt sich gemäß Abbildung 4.1 in die Berechnung der homogenen Gasphasen-



**Abbildung 4.2:** Ablauf der Partikelbewegung aus 4.1

reaktionen und der PISO-Schleife zur Berechnung der Bilanzen der Spezies, der Energie, der Gesamtmasse und des Impulses der fluiden Phase.

Die homogenen Gasphasenreaktionen werden wiederum mit einem zeitlichen Splitting erster Ordnung bzgl. des Zeitschrittes  $\Delta t_{Feldgleichungen}$  getrennt von den eigentlichen Bilanzgleichungen gelöst. Der Zeitschritt dieser getrennten Integration richtet sich nur nach den vorgegebenen Toleranzen und ist damit unabhängig vom Zeitschritt  $\Delta t_{Feldgleichungen}$ . Nachdem alle Zeitschritte  $\Delta t_{Feldgleichungen}$  berechnet wurden, endet die Simulation.

Der zeitliche Aufbau der Partikelbewegung bzw. des Partikelabbrandes wird in Abbildung 4.2 verdeutlicht. Zunächst werden die Datenstrukturen initialisiert, die die Quellterme der festen Phase aufnehmen sollen. Der Zeitschritt der Partikelbewegung  $\Delta t_{Partikelbewegung}$  ist typischer Weise nicht identisch mit dem Zeitschritt der Feldgleichungen  $\Delta t_{Feldgleichungen}$ , sondern nur ein Bruchteil davon. In dieser Arbeit wurde der Zeitschritt der Partikelbewegung  $\Delta t_{Partikelbewegung}$  immer als ein Drittel des Zeitschrittes  $\Delta t_{Feldgleichungen}$  angenommen, so dass pro Zeitschritt der Feldgleichungsberechnung drei gleichgroße Zeitschritte der Partikelbewegung berechnet werden. Nach jedem einzelnen Zeitschritt  $\Delta t_{Partikelbewegung}$  wird, wie in Abbildung 4.2

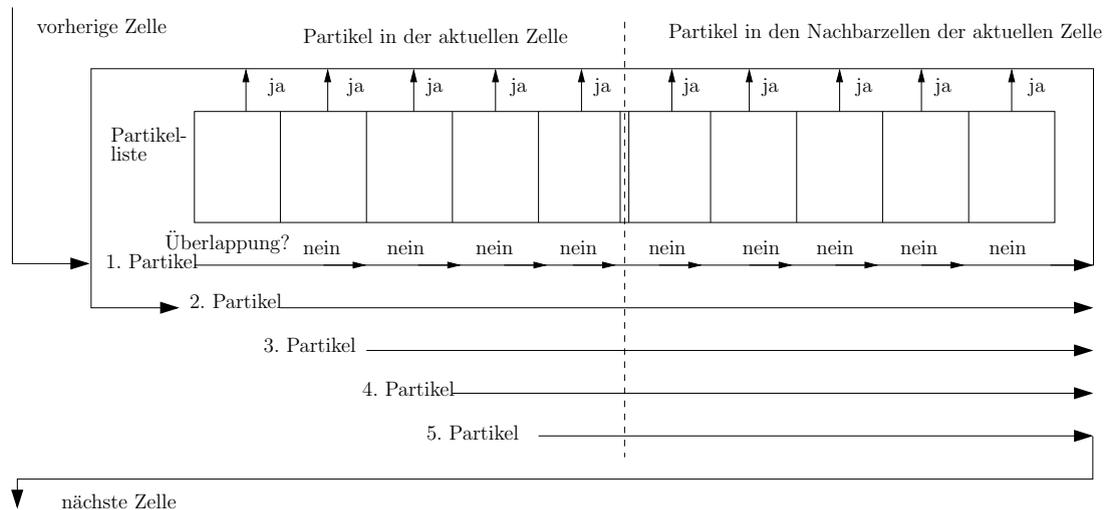
dargestellt, eine Kollisionsüberprüfung durchgeführt. Diese Maßnahme garantiert eine enge Kopplung des Kollisionsmodells an die Partikelbewegung und garantiert die für die Partikelkollisionen notwendigen kleinen Zeitschritte, ohne die Berechnung der fluiden Phase unnötig aufwändig zu machen. Alle Partikel in einem Rechengebiet werden innerhalb eines Zeitschrittes der Partikelbewegung sequentiell abgearbeitet. Der Partikelabbrand wird mit dem in Kapitel 3.2.8 vorgestellten Verfahren durchgeführt, das wiederum einen eigenen durch Fehlertoleranzen beeinflussten Zeitschritt verwendet. Die Partikel bewegen sich auf stationären Feldern der fluiden Phase für die Temperatur, die Dichte, die Geschwindigkeit, den Druck und den Volumenanteil.

Während der Bewegung der Partikel werden jedoch die eben genannten stationären Felder durch die in den Zellen registrierten Quellterme der Partikel korrigiert, um zu garantieren, dass das  $i$ -te bewegte Partikel in einer Zelle anhand der Bedingungen in der Zelle spürt, dass bereits  $i-1$  Partikel in der Zelle bewegt wurden (die Korrektur wird nur für die Spezies und die Temperatur durchgeführt).

Nachdem alle Zeitschritte der Partikelbewegung berechnet worden sind, wird anhand der neu berechneten Positionen der Partikel der Volumenanteil der festen Phase (und damit auch der fluiden Phase) in den einzelnen Zellen berechnet. Danach wird entsprechend Abbildung 4.1 weiter verfahren.

Die in Abbildung 4.2 genannte Kollisionsüberprüfung besteht aus zwei Teilen. Zum einen müssen potentielle Kollisionspartner gefunden werden und zum anderen die Kollisionen berechnet werden. Die Berechnung der Kollisionen ist in Kapitel 3.2.3 dokumentiert. In dieser Stelle soll auf das eigentliche Suchverfahren eingegangen werden. Generell kann ein Partikel  $n$  in einer Zelle  $z$  mit allen anderen Partikeln dieser Zelle und den Partikel der direkten Nachbarzellen kollidieren. Im Zweidimensionalen (auf kartesischen Gittern) kommen damit acht Nachbarzellen in Betracht, die potentielle Kollisionspartner des Partikels  $n$  beherbergen können. Wird die Suche nach Kollisionspartner so durchgeführt, dass zellweise das Gebiet durchlaufen wird, kann man die Nachbarschaftsbeziehungen der Zellen, wie in Abbildung 4.7 gezeigt, vereinfachen. Es müssen de facto pro Zelle nur vier Nachbarzellen mit den darin enthaltenen Partikeln bzgl. eines Kollisionsvorfalls überprüft werden, was den Aufwand fast halbiert (der Suchaufwand innerhalb einer Zelle bleibt davon natürlich unberührt).

Der Ablauf der Kollisionssuche für eine Zelle ist in Abbildung 4.3 verdeutlicht. Für alle Partikel einer Zelle wird zum einen nach potentiellen Kollisionspartnern in der betreffenden Zelle selbst gesucht und zum anderen in den vier Nachbarzellen. Die richtigen Nachbarzellen werden durch die in Abbildung 4.1 gezeigte und zu Beginn der Simulation erstellte Infrastruktur bereitgestellt.



**Abbildung 4.3:** Ablauf der Suche nach Kollisionspartnern

## 4.2 Parallelisierung

Die Parallelisierung der Lösung verschiedenster mathematischer Probleme ist in den letzten Jahren immer wichtiger geworden, da die Leistungsfähigkeit einzelner CPU's von einer Entwicklungsstufe zur nächsten nicht mehr so anwächst, wie dies in den frühen Jahren der Prozessorentwicklung erfolgte. Daraus resultierend sind verschiedene Wege der Parallelisierung sowohl auf Hardware- als auch auf Softwareseite realisiert worden.

Die Arbeit von Frank (2002) gibt einen guten Überblick bzgl. bestehender Techniken und Aktivitäten diverser Forschungsgruppen. Frank (2002) unterscheidet generell drei verschiedene Ansätze um Euler-Lagrange Simulationen zu parallelisieren: die Quasi-Serielle Methode, die Statische Domain Decomposition Methode und die Dynamische Domain Decomposition Methode. Bei der Quasi-Seriellen Methode wird das zugrundeliegende Rechengebiet nicht aufgeteilt und alle an der Simulation der

Partikelbewegung beteiligten Prozessoren arbeiten auf dem selben globalen Rechengebiet. Die eigentliche Parallelisierung findet nur auf Ebene der Berechnung der Partikelbewegung statt. Die Partikel, die einem bestimmten Prozessor zugeordnet sind, können sich beliebig im gesamten Rechengebiet bewegen ohne den zugeordneten Prozessor wechseln zu müssen, da alle Prozessoren Zugriff auf die globalen Felddaten haben. Das Bereitstellen der globalen Felddaten für jeden Prozessor ist zum Beispiel bei großen Rechengebieten mit vielen Rechenzellen und Felddaten eine sehr speicherintensive wenn überhaupt mögliche Situation, was diese Methode einschränkt.

Die Statische und die Dynamische Domain Decomposition Methode (SDD und DDD Methoden) basieren beide auf der Idee der Domain Decomposition von Feldgleichungssystemen. Bei dieser Methode handelt es sich um ein Verfahren, bei welchem das betrachtete Rechengebiet in Teilstücke zerlegt wird und dann auf jedem Gebiet getrennt nach ein und dem selben Verfahren gelöst wird. Jedem Gebiet wird typischerweise auch eine physikalische Recheneinheit zugeordnet, wobei es hier grundsätzlich keine Rolle spielt, ob diese Recheneinheit in der selben CPU, dem selben Knoten oder im selben Rack zu finden ist. Statisch und dynamisch werden Methoden dieser Art genannt, wenn die Aufteilung des Rechengebietes statisch ist (d.h. sich nicht über die Rechenzeit ändert) oder sich in Abhängigkeit der Rechenbelastung der einzelnen Prozessoren dynamisch anpasst, um eine möglichst ausgeglichene Gesamtrechenlast und damit hohe parallele Effizienzen zu ermöglichen.

In Frank (2002) wird jedoch die Rechengebietsverteilung für die Feldgleichungen als generell statisch angenommen, da es sich hier um über die Rechenzeit konstante Belastungen handelt, welche sehr gut zu Beginn der Simulation gleichmäßig aufgeteilt werden können. Generell sind natürlich auch Fälle möglich bei denen die Lastanteile eines Prozessors zum Beispiel durch bewegte Gitter und /oder adaptive Gitterveränderung variieren und sich somit auch für die Domain Decomposition der Feldgleichungen ein dynamisches Aufteilen des Rechengebietes anbieten würde. Diese Aspekte werden in der hier vorliegenden Arbeit nicht näher betrachtet.

SSD und DDD Methoden in der Arbeit von Frank (2002) sind Methoden bei denen nur die Partikellast entweder statisch oder dynamisch verteilt wird. SSD Metho-

den verwenden die selbe Aufteilung des Rechengebietes für die Feldgleichungen als auch für die Partikelbewegung und müssen dementsprechend mit einer Kommunikationsinfrastruktur arbeiten, die den Wechsel der Partikel zwischen den Rechengebieten realisiert. Inhomogene Partikelverteilungen im globalen Rechengebiet können dementsprechend zu starken Unterschieden in der Rechenlast einzelner Prozessoren führen. Dem entgegenwirkend arbeiten die DDD Methoden nach Frank (2002) mit stark an die lokalen Rechenlasten angepassten Prozessaufteilungen. Dabei werden die bei den SSD Methoden vorhandenen Teilrechengebiete nur für die Partikelbewegung zusätzlich in kleinere Blöcke unterteilt und diese mit jeweils einem Prozessor abgearbeitet. Allerdings ist es dabei möglich, dass Prozessoren auch Partikel bearbeiten, die in Blöcken liegen, die ihnen nicht zu Beginn eines Zeitschrittes zugewiesen wurden, soweit es die lokale Rechenlast zulässt. Sobald ein Prozessor den ihm zugeordneten Block mit den darin enthaltenen Partikeln berechnet hat, wird ihm primär die Partikelbewegungsberechnung in einem Block desselben statischen Teilgebietes zugewiesen und falls hier bereits alle Partikel bewegt worden sind auch die Berechnung von Blöcken aus anderen bei der statischen Gebietsaufteilung entstandenen Teilgebieten zugewiesen. Damit kann es in extremen Situationen vorkommen, dass alle beteiligten Prozessoren simultan an der Partikelbewegung innerhalb eines Blockes arbeiten. Daraus ergibt sich ein deutlich besseres Lastverteilungsverhalten als bei SSD Methoden.

Weiterhin werden in Frank (2002) diverse Testfälle auf verschiedensten Rechenanlagen bzgl. ihrer parallelen Effizienz und des Skalierungsverhaltens getestet sowie weitere Details möglicher DDD Kommunikationsstrategien erläutert und quantifiziert. Bei stark inhomogenen Partikelverteilungen ist ein DDD ähnliches Verfahren resümierend also eine durchaus erstrebenswerte Art der Parallelisierung von Euler-Lagrange-Verfahren. Die Wirksamkeit der DDD Methode ist aber unter Umständen stark von der Latenz und der Bandbreite der verwendeten Netzwerktechnik abhängig (siehe Frank (2002)).

Darmana u. a. (2006) zeigt eine mit der "mirror domain technique" parallelisierte Applikation zur Modellierung von Blasenströmungen. Dabei werden ca.  $10^5$  Partikel auf einem Gitter von ca. 65 000 Zellen betrachtet und die Ergebnisse unter anderem

bzgl. der parallelen Effizienz analysiert. Es ergeben sich parallele Effizienzen über 0.6 bei bis zu 32 Prozessoren (der Speedup ist dann bei ca. 20). Weiterhin werden die Abhängigkeiten diverser Größen (Sauterdurchmesser, Schwankungsgeschwindigkeiten etc.) von der Blasenkoaleszens untersucht. Das Verfahren ähnelt stark dem Quasi-Seriellen Verfahren aus Frank (2002).

Im Folgenden werden die Arbeiten an der Parallelisierung des bestehenden Verfahrens dokumentiert. Die Darstellung hier sollen sich auf die softwareseitige Parallelisierung von (gekoppelten) Feldgleichungssystemen und der Parallelisierung der Partikelbewegung und des Partikelabbrandes (im weitesten Sinn) beschränken.

OpenFOAM bietet zu diesem Zwecke vollständig parallelisierte Löser für verschiedenartige Feldgleichungsprobleme nach dem Prinzip der statischen Domain Decomposition (s.o.). Die Randbedingungen dieser Teilstücke können zum einen aus wirklichen Randbedingungen des ursprünglich betrachteten unaufgeteilten Problems resultieren oder zum anderen durch die Aufteilung des Gebietes im Zuge der Parallelisierung entstehen. Im zweiten Fall sind die Randwerte nur implizit über die Lösung der Nachbargebiete gegeben, welche ihrerseits die entsprechende inverse Abhängigkeit aufweisen. Um die Werte dieser virtuellen Ränder zwischen den Teilgebieten auszutauschen, muss eine Kommunikationsinfrastruktur bereitgestellt werden, die dies leisten kann. OpenFOAM bietet auch hier eine C++ Bibliothek (libPstream, im Weiteren nur Pstream), die diese Kommunikation bewerkstelligt.

Die Partikelbewegung selbst ist ebenfalls in OpenFOAM vollständig parallelisiert implementiert. Dabei gilt es zu beachten, dass in den bereits in OpenFOAM vorhandenen Applikationen keine Berücksichtigung der Volumenfraktion der Festphase und auch keine Berücksichtigung der Kollisionen über stochastische Kollisionsmodelle hinaus erfolgt. Dementsprechend musste in dieser Arbeit sowohl eine Parallelisierung der deterministischen Kollisionsmodelle vorgenommen werden, als auch eine volumenbasierte Aufteilung von Partikeln über Prozessorgrenzen hinaus bereitgestellt werden. Der zweite Punkt ist deswegen von so eminenter Wichtigkeit, da es schon bei seriellen Rechnungen starke Konvergenzprobleme aufgrund der unzureichenden Verteilung der Partikelvolumina über die Zellgrenzen hinweg gab (siehe Kapitel 3.3). Abbildung 4.4(a) zeigt die häufig auf strukturierten Gittern verwendete

NW	N	NO	234	234	234
W		O	211	234	657
SW	S	SO	210	235	658

(a) Kompassnotation

234	234	234
211	234	657
210	235	658

(b) Beispiel für Nachbarzellindexe

**Abbildung 4.4:** Schablonen zur Orientierung auf dem Rechengitter I (zusammen mit Abb. 4.5)

0	0	0	1	1	1
0		1	1	1	2
0	0	1	1	1	2

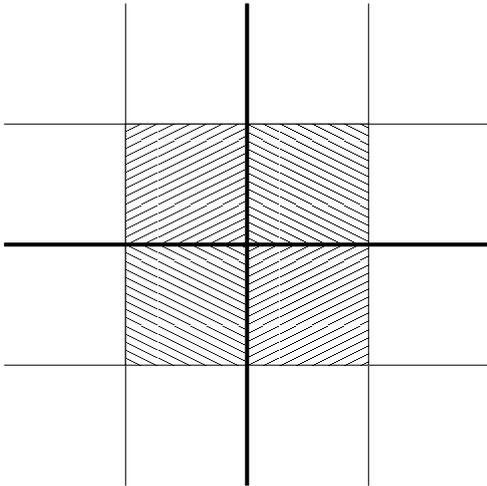
(a) Beispiel für Flag's der Nachbarzellen

1	1	1
1	1	2
1	1	2

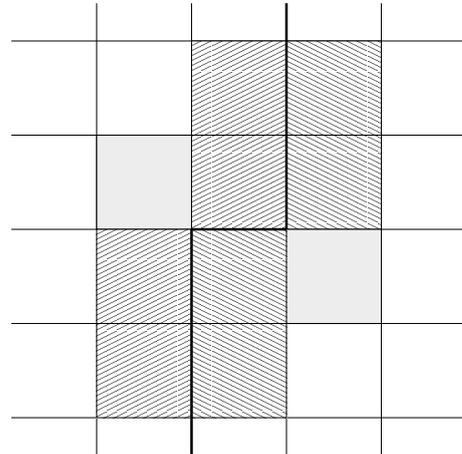
(b) Beispiel für Prozessorindex der Nachbarzellen

**Abbildung 4.5:** Schablonen zur Orientierung auf dem Rechengitter II (zusammen mit Abb. 4.4)

Kompassnotation, welche es erlaubt, mit Hilfe eines Zellindex (in Abbildung 4.4(a) entsprechend die mittlere Zelle) die Indexe der Nachbarzellen zu erhalten. Da es sich bei OpenFOAM um eine auf unstrukturierten Gittern basierende Bibliothek handelt, sind entsprechende Nachbarschaftsbeziehungen nur implizit über die Datenstrukturen des Gitters selbst gegeben. Im Zuge der Arbeit wurden Datenstrukturen erstellt (für jede Gebietszelle), die ein Zugriff ähnlich zur Kompassnotation ermöglichen.



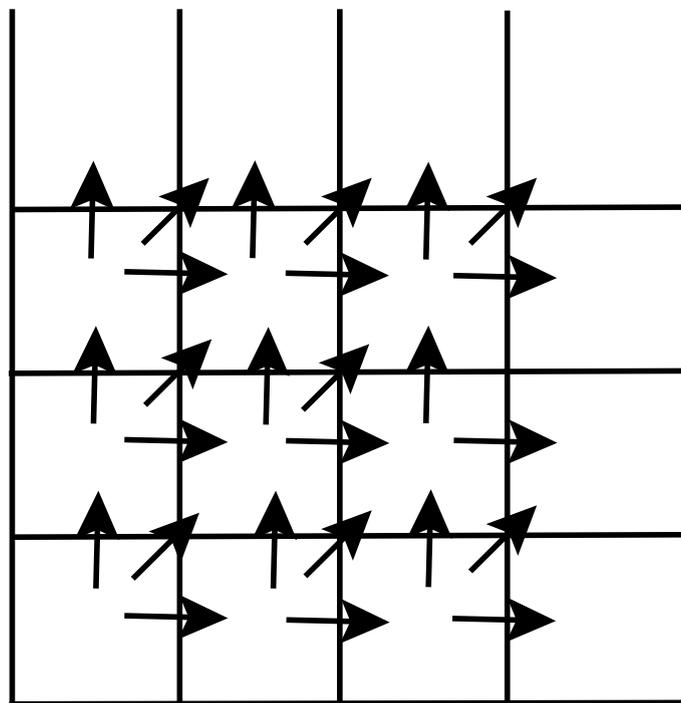
(a) Beispiel einer Nachbarschaftsbeziehung aus mehr als zwei Prozessoren (gleichschraffierte Zellen sehen sich nicht)



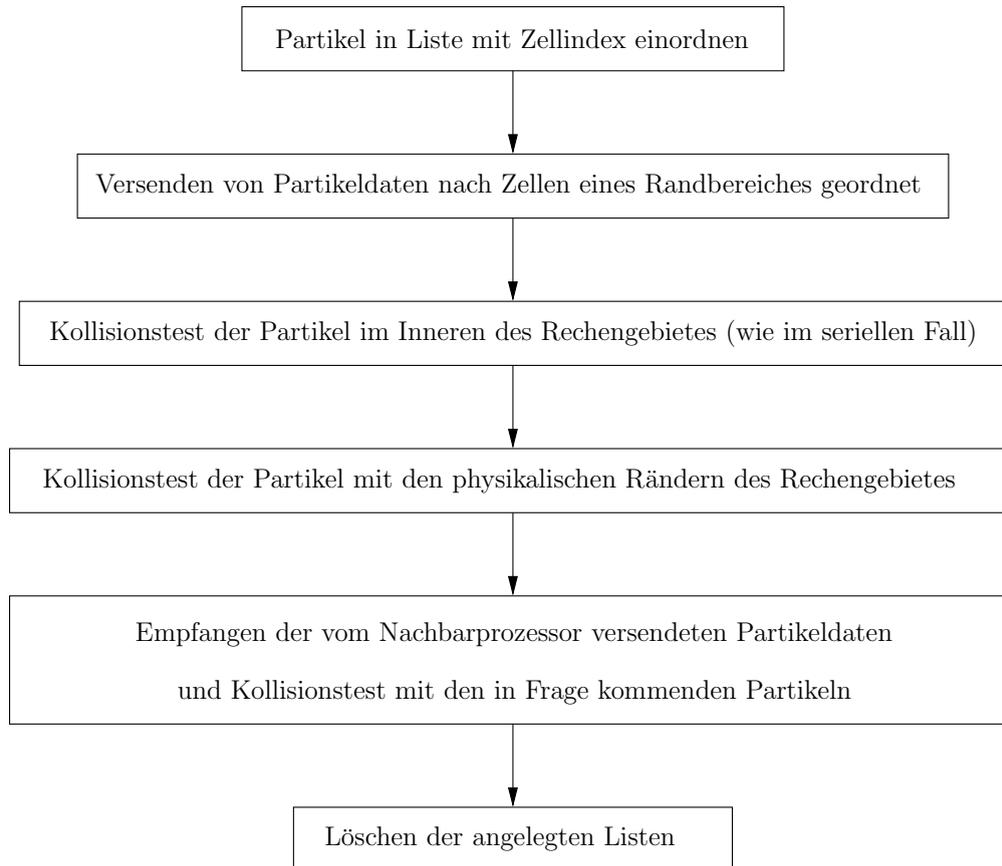
(b) Nachbarschaftsbeziehung über eine Prozessorgrenze (die unterlegten, nicht schraffierten Zellen sehen sich nicht)

**Abbildung 4.6:** Mögliche Gebietsaufteilung die in dieser Arbeit nicht abgebildet werden können (die dicken schwarzen Linien sind Gebietsgrenzen des zerlegten Gitters)

### Parallelisierung des deterministischen Kollisionsmodells



**Abbildung 4.7:** Darstellung der vereinfachten Zell-Nachbarschaftbeziehungen für die Kollisionsüberprüfung



**Abbildung 4.8:** Ablauf des Algorithmuses zur parallelen Kollisionsberechnung aus 4.2

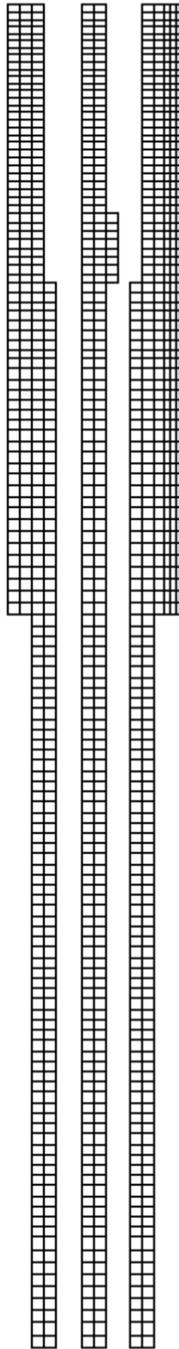
Das seriell implementierte Kollisionsmodell ist im Kapitel 3.2.3 beschrieben und bietet die Basis der Parallelisierung. Dabei werden in einer seriellen Rechnung zuerst die Partikel den Zellen zugeordnet und dann wird zellbasiert die Suche nach potentiellen Kollisionspartner begonnen. Kollisionspartner können zum einen in der betrachteten Zelle selbst liegen oder zum anderen in den betroffenen Nachbarzellen (siehe Abbildung 4.7). Die Parallelisierung erweitert dieses Bild um die in Abbildung 4.8 dargestellten Punkte, die ein Senden bzw. Empfangen oder das Berechnen der Kollisionen über die Gebietsgrenzen hinweg beinhalten. Die anfängliche Zuordnung der Partikel zu den Zellen wird im Vergleich zum seriellen Algorithmus um eine Zuordnung der Partikel zu den Randzellen der Nachbargebiete erweitert. Im seriellen Fall ist dies einfach eine Datenstruktur mit dem Index der lokalen Zellen, die entsprechend die Partikel bzw. Zeiger auf die Partikel aufnimmt. Im parallelen Fall werden zusätzlich entsprechend der Anzahl angrenzender Teilgebiete Listen eröffnet, die die für die Kollisionsberechnung notwendigen Partikeldaten (Masse, Geschwindigkeit,

Rotationsgeschwindigkeit und Ort eines Partikels) aufnehmen. Anschließend werden diese Daten dem entsprechenden Prozessor zugesandt. Dabei werden, entgegen dem Vorgehen bei der seriellen Simulation, von beiden Seiten einer Prozessorgrenze die Partikeldaten versandt und damit das Rücksenden der Partikeldaten nach Ausführung der Kollision vermieden. Die versandten Datenstrukturen mit den darin enthaltenen Partikeldaten können nach der Kollisionsberechnung verworfen werden. Nachdem die Partikeldaten den entsprechenden Prozessoren zugesandt wurden, wird wie im seriellen Fall auch, innerhalb eines Teilgebietes nach Kollisionspartnern (Partikel-Partikel und Partikel-Wand) gesucht und die Kollision ggf. berechnet.

Im seriellen Fall ist an dieser Stelle der Algorithmus zur Berechnung der Kollisionen zu Ende und es folgen die entsprechend nächsten Schritte des Programmablaufs, wie in Abbildung 4.1 und 4.2 dargestellt. Im parallelen Fall werden die Daten von den jeweiligen Nachbarprozessoren empfangen, einer Suche nach Kollisionspartnern unterzogen (nur in den betroffenen Randzellen des Empfängerprozessors) und ggf. folgt dann die Kollisionsberechnung. Der Ablauf des hier dokumentierten Vorgehens ist in Abbildung 4.3 veranschaulicht.

Die Trennung des Sendens und Empfangens von Partikeldaten über die Prozessorgrenzen hinweg garantiert hier einen möglichst zeitsparenden Ablauf des parallelierten Programms. Trotz der umfangreichen Arbeiten an der Parallelisierung der Kollisionen gibt es Situationen, die durch den beschriebenen Ablauf nicht abgebildet werden können. So kann es vorkommen, dass bei der Aufteilung des globalen Rechengebietes, Prozessorgrenzen entstehen, die trotz des verwendeten kartesischen Gitters nicht geradlinig sind, sondern einzelne Knicke aufweisen (siehe Abbildung 4.6(b)). In diesen Fällen kommt es zu nicht berücksichtigten Zellen, da diese keinen flächigen Kontakt zur Prozessorgrenze haben und somit nicht erfasst worden sind. Dies liegt im Wesentlichen daran, dass nach der Zerlegung des Gitters die einzelnen Prozessoren nur Informationen bzgl. der Geometrie des Gitters haben, die zu ihrem lokalen Teilstück gehören. Ansonsten kennt jeder Prozessor nur die direkten flächigen Nachbarzellen der Nachbargebiete an die er grenzt, so dass Zellen, die die Prozessorgrenze nur punktuell berühren, nicht erfasst werden. Diese Situation muss

entsprechend umgangen werden, indem die Aufteilung so vorgenommen wird, dass geradlinige Prozessorgrenzen entstehen.



**Abbildung 4.9:** Zeldarstellung des Rechengebietes - Aufteilung für parallele Rechnungen

Eine andere Situation, die mit dem bestehenden Algorithmus nicht abgebildet werden kann, ist das Aufeinandertreffen von mehr als zwei Prozessorteilgebieten in einem Punkt (siehe Abbildung 4.6(a)). Dabei tritt ein Problem ähnlich dem weiter oben dokumentierten auf. In den einzelnen Teilgebieten liegen wiederum nur Informationen über die Indexe flächiger Nachbarzellen der angrenzenden Prozessorgebiete vor, jedoch fehlen in diesem Fall nicht nur die Indexe der Zellen, die die Prozessorgrenze nur punktuell berühren, sondern auch die Index der Prozessoren, die an diesem Punkt nur punktuell zusammentreffen - es sind einem Prozessor nur die Prozessoren via Index bekannt mit denen ein flächiger Kontakt besteht. In der vorliegenden Arbeit wurde das Gebiet entsprechend so eingeteilt, dass diese Situation zumindest in dem für die Partikel relevanten Gitteranteil nicht auftritt (das Gebiet wurde nur in eine Raumrichtung zerlegt, siehe Abbildung 4.9).

Ein Nachteil, den auch der serielle Algorithmus hat, stellt sich in der parallelen Version als unter Umständen zusätzlich verlangsamend heraus. Alle wesentlichen Informationen der Partikel einer Randzelle, die eine Prozessorgrenze flächig berührt, werden über die Prozessorgrenze hinweg versandt, was bei kleinen grob diskretisierten Gebieten dazu führt, dass unter Umständen alle Partikel in Randzellen liegen und damit betroffen sind. Hier könnte man in weitergehenden Arbeiten nur randnahe Partikel der betrof-

fenen Randzelle versenden, was erstens die zu versendende Datenmenge verkleinert und zweitens die Suche nach Kollisionspartnern über die Prozessorgrenzen hinweg verkürzt.

### Parallele Verteilung der Partikelvolumina

Die Verteilung eines Partikels auf Basis seines Volumens über mehrere Zellen wurde bereits im Kapitel 3.3 beschrieben. Hier soll zusätzlich auf die Problematik des Verteilens über Prozessorgrenzen hinweg eingegangen werden.

Die Verteilung des Volumens eines Partikels ähnelt in vielen Punkten den obig beschriebenen Algorithmus zur parallelen Kollisionsberechnung. Im Gegensatz zur Kollisionsproblematik wird der Algorithmus nicht zellbasiert durchlaufen, sondern partikelbasiert (die Partikel werden vor der Berechnung nicht geordnet). Zusätzlich zu der bereits erwähnten Kompassnotation wurde eine Infrastruktur geschaffen, die die Nachbarn einer Zelle bzgl. ihres Randstatus einordnet (Randzelle oder nicht) und dann zusätzlich unterscheidet in Randzellen mit Kontakt zu einer Prozessorgrenze oder Randzellen mit Kontakt zu einer gewöhnlichen Gebietsgrenze. Im Sinne der Berechnung der Teilvolumina eines Partikels ist es zudem notwendig, den Index des Prozessors bereitzustellen, dem die betroffene Prozessorgrenze zugeordnet werden kann, da dieser auch der Empfänger der potentiell zu übertragenden Daten ist.

Die zur Kompassnotationen ähnliche Infrastruktur ist in den Abbildungen 4.4 bis 4.5 veranschaulicht. Abbildung 4.4(b) zeigt die möglichen Indexe von Nachbarzellen einer betrachteten Gebietszelle (mittlere Zelle). Dabei hat die betrachtete Zelle hier den Index "234". Alle drei nördlichen Zellen haben den gleichen Index, da sie außerhalb der betrachteten Geometrie liegen. Volumenüberlappungen zu diesen Zellen können durchaus vorkommen und werden analog zu Kapitel 3.3 berechnet aber letztendlich über den ihnen zugewiesenen Indexen in Abbildung 4.4(b) der mittleren Zelle mit dem Index "234" zugewiesen. Die Überlappungen entstehen aufgrund der Tatsache, dass der gesamte Kollisionsmechanismus darauf basiert, überlappenden Partikeln (entweder mit anderen Partikeln oder mit physikalischen Grenzen des betrachteten Gebietes) Kräfte und Momente zuzuordnen, die sie im nächsten Zeitschritt zur Verkleinerung dieser Überlappungen bewegen.

Um die im parallelen Fall ablaufenden Berechnungen der Volumenverteilung möglichst einfach zu halten, werden die gleichen Berechnungen wie im seriellen Fall durchgeführt, jedoch wird zusätzlich mit einem Flag bzw. dessen Differenz zu eins entsprechend der Abbildung 4.5(a) multipliziert. Notwendiger Weise ergeben sich hier zwei Felder für die lokale Volumenverteilung eines Partikels - eines für die betroffenen Zellen innerhalb des lokalen Gitters und eines für die parallele Berechnung. Die Felder für die parallele Berechnung können, bedingt durch den Flag, nur im Fall der Nachbarschaft zu einer Zelle, die nicht im lokalen Teilgebiet liegt, beschrieben werden.

Um letztendlich auch zu wissen, welcher Nachbarprozessor welche Information erhalten soll, wird zusätzlich die in Abbildung 4.5(b) gezeigte Schablone verwendet. Diese enthält die Indexe der Prozessoren, denen die Zellen der fremden Nachbargebiete zugeordnet werden können.

Zusammenfassend zeigen die Abbildungen 4.4 bis 4.5 eine Situation, in der alle nördlichen Zellen außerhalb des Gebietes liegen, alle östlichen Zellen - bis auf die nordöstliche - dem Prozessor mit dem Index "zwei" gehören.

Aufgrund des zugrundeliegenden zweidimensionalen Rechengebietes ist es häufig notwendig, statt der Volumenanteile eines Partikels die Flächenanteile zu bestimmen (siehe Kapitel 3.3), welche dann nach der parallelen Datenübertragung, mit den lokalen Flächenanteilen des betroffenen Teilgebietes verrechnet werden, um sie anschließend in Volumenanteile umzurechnen. Dadurch können nicht, wie bei der parallelen Kollisionsprüfung, erst parallel Daten versandt werden, dann die normale (serielle) Kollisionsberechnung bzw. Kollisionsprüfung durchgeführt werden und letztendlich die Daten der Nachbargebiete empfangen und lokal verarbeitet werden. Der Ablauf des Versendens bzw. Empfangens von Daten und den dazugehörigen Berechnungen ist also stärker verschachtelt.

#### Parallelisierung einer Euler-Lagrange-Simulation

OpenFOAM bietet, wie bereits erwähnt, eine volle Parallelisierung bestehender Feldgleichungsprobleme, was jedoch keineswegs zu der Annahme führen sollte, dass das Erstellen einer parallelen Applikation basierend auf einer vorhandenen funktionsfähigen seriellen Applikation eine Selbstverständlichkeit ist. Die obig dokumen-

tierten Maßnahmen zur Parallelisierung der Partikelbewegung zeigen, dass es recht aufwändig sein kann, serielle Applikationen in parallele zu überführen - nicht zuletzt durch die Mehrphasigkeit bedingt.

Der Ablauf zum Ausführen einer lauffähigen parallelen Simulation in OpenFOAM ist in OpenFoam User Guide (2008) aufgezeigt. Zuerst werden die entsprechenden Parameter (Zahl der Prozessoren, Art der Aufteilung etc.) in einer Datei namens "decomposeParDict" festgelegt. Danach kann mit dem Programm "decomposePar" der zu berechnende Fall in seine Teilgebiete zerlegt werden und mit einem entsprechenden MPI-Aufruf die Simulation gestartet werden. Nach Beendigung der Simulation wird mit dem Programm "reconstructPar" das Rechengebiet wieder zusammengesetzt und die Daten können visualisiert bzw. ausgewertet werden.

Leider führte dieser Ablauf zu starken Konvergenzproblemen während der Simulation. Kern des Problems ist dabei die Berechnung der Temperatur aus der Gesamtenthalpie mit Hilfe der Gaszusammensetzung und der entsprechenden Polynomansätze für die Wärmekapazitäten der betroffenen Spezies. Die Lösung der nichtlinearen Gleichung in der Temperatur wird durch ein Newton-Verfahren bewerkstelligt. Dabei ist es stetig zu Überschreitungen bzw. Unterschreitungen der Temperaturgrenzen der Polynome der einzelnen Spezies gekommen und damit verbunden zu einem Abbruch der Simulation. Da die Temperaturgrenzen der Polynome naturgemäß so gewählt sind, dass sie für technische Probleme geeignet sind (meist zwischen 200 und 5000 Kelvin), stellt sich natürlich die Frage, wie es zu solchen Konvergenzproblemen kommen kann. Bei systematischer Analyse des Problems stellte sich heraus, dass es keine stetige Entwicklung zu außergewöhnlich hohen bzw. niedrigen Temperaturen gibt, sondern eine abrupte Änderung der Temperatur. Dieses Problem ist durchaus bekannt im Zusammenhang mit der Anwendung von OpenFOAM (sowohl in seriellen als auch in parallelen Berechnungen), was auch als einer der Gründe angesehen werden kann, dass in den folgenden Versionen von OpenFOAM das Gesamtenthalpiemodell in ein thermisches Enthalpieproblem umformuliert wurde. Ob sich mit dieser Änderung in der Formulierung der Energiebilanz auch die obigen Probleme lösen lassen, wurde in der vorliegenden Arbeit nicht untersucht. Damit bleibt hier festzuhalten, dass eine effiziente Parallelisierung der entstandenen seriel-

len Simulation auf Basis der standardmäßig in OpenFOAM verfügbaren Strukturen nicht innerhalb dieser Promotion realisiert werden konnte und deshalb eine neue Parallelisierungsstrategie entwickelt und implementiert werden mußte.

Da aber erhebliche Arbeitsanteile an die Parallelisierung geknüpft waren, soll hier zumindest auf die wesentlichen Ergebnisse der Parallelisierungsversuche eingegangen werden. Der wesentliche Punkt bei der Beurteilung der Effizienz der Parallelisierung ist das sogenannte Scaling, also die Frage um wieviel mal ein paralleler Gesamtprozess im Vergleich zum seriellen Prozess schneller wird, wenn man ihn mit  $n$  Prozessoren bearbeitet. Abgesehen von Sonderfällen kann ein lineares Scaling, also eine  $n$ -fache Beschleunigung bei  $n$  verwendeten Prozessoren, als theoretisches Maximum angesehen werden. Dies ist dann der Fall, wenn die Kommunikation zwischen den Prozessoren und die durch den parallelen Ablauf evtl. zusätzlich entstehenden Aufgaben einen mit variierender Prozessorzahl konstanten Zeitanteil an der Gesamtrechenzeit haben.

Praktische Tests mit Hilfe von einfachen Testbeispielen (nur Strömungsprobleme, keine Partikelbewegung) zeigten jedoch, dass mit einer Gebietszellenanzahl von weit unter 10000 Zellen praktisch keine Beschleunigung bzgl. der Berechnung der Felddaten zu erreichen ist. Im Gegenteil dazu traten Fälle auf, bei denen sich mit steigender Anzahl der Prozessoren immer längere Rechenzeiten ergaben. Ähnliche Resultate ergaben auch die Versuche mit der parallelisierten Variante der in dieser Arbeit erstellten Applikation. Durch die Parallelisierung steigt zum Beispiel die Zahl der notwendigen Iterationen zur Lösung der Druck-Poisson-Gleichungen innerhalb eines PISO Verfahrens um ca. 100 %, da sich die Randbedingungen des Poisson-Problems nach der ersten Lösung der Poisson-Gleichung ändern (durch die Ergebnisse der Nachbargebiete), was im seriellen Fall nicht passiert. Da jedoch auch die Partikelbewegung einen großen Anteil an der Gesamtrechenzeit hat, kommt es je nach Partikelanzahl bei wenigen verwendeten Prozessoren zu einer mäßigen Beschleunigung des Verfahrens und bei Verwendung weiterer Prozessoren zu einer deutlichen Zunahme der Gesamtrechenzeit. Resümierend muss hier angemerkt werden, dass das Berechnen der Partikelbewegung und der Feldgleichungen auf Basis einer Gebietszerlegung zu extremer Ineffizienz der Parallelisierung führen kann.

Trotz der obig dokumentierten Probleme konnte in dieser Arbeit ein funktionsfähiges und stabiles Parallelisieren der seriellen Applikation erreicht werden. Basis des Parallelisierungsalgorithmuses ist die Trennung von Partikelbewegung und Feldgleichungsberechnung. Die Partikelbewegung wird mit Hilfe der oben beschriebenen Maßnahmen parallel auf Basis eines statischen Domain Decomposition Ansatzes berechnet. Der wesentliche Unterschied zum OpenFOAM-eigenen Ansatz liegt in der Tatsache, dass die Feldgleichungen nur auf einem Prozessor berechnet werden. Damit ist sichergestellt, dass die im seriellen Fall vorliegende Stabilität der Simulation auch bei parallelen Rechnungen zum Tragen kommt.

Der Ablauf der parallelen Applikation ist in Abbildung 4.1 aufgezeigt. Die beteiligten Prozessoren werden zur besseren Verständlichkeit der nun folgenden Erklärungen in den Masterprozessor und die Slaveprozessoren eingeteilt. Der Masterprozessor übernimmt in dieser Aufgabenteilung die Berechnung der Feldgleichungen, die Partikelbewegung wird von allen Prozessoren gemeinsam bearbeitet. Zu Beginn der Simulation wird in jedem Prozess eine Liste erstellt, die das Mapping von Daten des globalen Gitters zum lokalen Gitter und umgekehrt erlaubt. Diese Liste wird von allen Prozessen dem Master zugesandt (der Master selbst hat natürlich auch eine derartige Liste seines Teilgebietes) und dort in einer geeigneten Datenstruktur gespeichert.

Der Prozess des Masters muss zusätzlich geeignete Datenstrukturen erstellen, um im weiteren Verlauf der Simulation die Daten der Slaveprozessoren aufnehmen zu können. Zur Bewegung der Partikel müssen grundsätzlich jedem Prozess die Felder der Temperatur, der Spezies, der Dichte und des Volumenanteils der Gasphase auf seinem Gebiet zur Verfügung stehen. Aus diesem Grund werden, nachdem die Mappinginformation eingesammelt worden sind, vom Master die Felddaten den Prozessen übermittelt. Mit Hilfe dieser Daten können die einzelnen Prozesse die ihnen zugewiesenen Partikel bewegen und ggf. austauschen, nachdem sie mit Hilfe des Mapping die globalen Daten auf das betreffende Teilgitter übertragen haben. Nachdem ein Prozess die Bewegung der Partikel beendet hat, werden die aus der Partikelbewegung resultierenden Daten zum Masterprozess versandt. Die Daten bestehen aus den Quelltermen der Partikel für die Speziesgleichungen (und entsprechend in Summe

für die Gasdichte), die Energiebilanz, den neu berechneten Volumenanteilen der Gasphase und den Quelltermen für die Impulsbilanz auf den entsprechenden Teilgebieten der betrachteten Geometrie. Die einzelnen Quellterme werden vom Master empfangen, mit Hilfe der Mappinginformationen zum globalen Feld zusammengefasst und können dann zur Berechnung des Feldgleichungssystems verwendet werden. Nachdem alle Feldgleichungen berechnet worden sind, sendet der Masterprozess allen anderen Prozessen die entsprechenden Ergebnisse (wie zu Beginn der Simulation die Anfangsdaten).

Das Versenden der Daten kann auf verschiedenen Wegen erfolgen. Zum einen kann man dem Masterprozess vor dem Versenden der Daten das Mapping auf die lokalen Gitter der einzelnen Prozesse selbst vornehmen lassen oder aber man kann die globalen Daten versenden und das Mapping von den einzelnen Prozessen erledigen lassen. Selbiges gilt für die Quellterme der Partikelbewegung bzw. des Partikelabbrandes: man kann die einzelnen Prozesse sowohl ihre lokalen Daten versenden lassen und das Mapping dem Masterprozess überlassen oder aber alle Prozesse übernehmen das Mapping selbst und Versenden globale Felder für die Quellterme, die dann auf dem Master nur noch aufsummiert werden müssen.

Das Versenden globaler Felder für die Quellterme der Partikelbewegung wird mit zunehmender Anzahl der Prozessoren ineffizienter, da die Datenmenge eines Prozessors konstant bleibt, während die Zahl der Prozessoren stetig steigt. Alle Daten müssen jedoch seriell vom Masterprozess empfangen werden und aufsummiert werden. Damit würde in diesem Fall sowohl die versendete Datenmenge als auch die zum Zusammenfügen der Felder nötigen Operationen stetig mit der Zahl der beteiligten Prozessoren steigen. Aus diesem Grund werden die Quellterme der Partikelbewegung als lokale Felder versandt und auf dem Masterprozess zusammengesetzt. Der Masterprozess selbst versendet globale Daten und diese werden dann von allen Prozessen mit Hilfe des Mappings auf die lokalen Teilgitter übertragen. Dies geschieht, um die Zeit, die nur im Masterprozess verbracht wird, zu minimieren und damit den anderen Prozessen so früh wie möglich die Chance zu geben, die ihnen zugeordneten Partikel zu bewegen.

Die Idee den Masterprozess auf einem kleineren Rechengebiet arbeiten zu lassen als die anderen Prozesse, um damit die Gesamtrechenzeit weiter zu reduzieren, ist nicht sinnvoll durchzuführen, da durch die Partikelbewegung im Wirbelbett die Partikelbelastung pro Prozess stark schwankt und damit mehr oder weniger unvorhersehbar ist, wie das Gebiet aufgeteilt sein müsste. Eine statische Aufteilung innerhalb des Domain Decomposition Verfahrens für die Partikel ist somit zumindest nicht optimal. Typische Strömungssituationen im Wirbelbett lassen es durchaus vorkommen, dass ein Prozess mehr als doppelt so viele Partikel bewegt wie andere Prozesse.

### Bewertung der Parallelisierung

Bezüglich des Scaling der vorliegenden parallelen Applikation lässt sich Folgendes sagen: Die Zeit zur Berechnung der globalen Feldgleichungen ist unabhängig von der Zahl der verwendeten Prozessoren, da sie immer in einem Prozess erfolgt. Die Datenmenge während des Übersendens der Quellterme der Partikelbewegung bleibt bis auf den Overhead konstant, da nur lokale Felder versendet werden, die mit steigender Anzahl der beteiligten Prozessoren immer kleiner werden. Die benötigte Zeit zum Empfangen und Zusammensetzen der Felder der Quellterme ist schwer abzuschätzen, jedoch werden mit steigender Anzahl der Prozessoren immer kleinere Felder auf das globale Gitter abgebildet und auch immer kleinere Datenmengen pro Prozessor empfangen. Das Zurücksenden der Ergebnisse der Feldgleichungsberechnungen mit Hilfe globaler Gitter nimmt einen steigenden Anteil an der Gesamtrechenzeit mit steigender Anzahl der Prozessoren ein. Die Partikelbewegung selbst skaliert, bis auf Fälle mit sehr vielen Prozessoren und wenigen Partikeln, fast linear mit der Prozessoranzahl.

Um diese theoretischen Überlegungen mit Zahlen zu untermauern, werden im Folgenden die Abbildungen 4.10 und 4.11 erläutert. Es wurden Rechnungen über eine Sekunde Echtzeit mit 15 000, 30 000, 45 000 und 60 000 Partikeln durchgeführt. Die Anzahl der verwendeten Prozessoren wurden von eins bis sechs variiert. Es wurden keine Rechnungen mit fünf Prozessoren durchgeführt. Abbildung 4.10 zeigt den Speed-up der Simulation für verschiedene Partikelzahlen in Abhängigkeit der verwendeten Prozessoren. Es zeigt sich zum einen, dass der Speed-up mit zwei Prozessoren superlinear ist. Dieses Ergebnis war so nicht zu erwarten, da im Normalfall der

Speed-up maximal zwei betragen sollte. Ein superlineares Scaling kann nur durch Cache-Effekte der verwendeten Hardware entstehen. Mit höherer Partikelanzahl wird der superlineare Speed-up bei zwei Prozessoren kleiner, was ebenfalls die Abhängigkeit dieses Phänomens von der Hardware untermauert.

Anschließend an den superlinearen Bereich bricht der Speed-up unabhängig von der Partikelzahl ein (bei drei Prozessoren) und steigt danach wieder annähernd linear an. Die Zahl der berücksichtigten Partikel in der Wirbelschicht beeinflusst direkt den Speed-up, was sich gut an den Resultaten für sechs Prozessoren zeigen lässt. Je höher die Partikelzahl, desto höher ist auch der Speed-up. Dies ist insofern verständlich, als das der Rechenzeitanteil der nicht parallelisierten Programmteile (z.B. Feldgleichungsberechnungen) mit zunehmender Partikelzahl kleiner wird. Der Speed-up bei sechs Prozessoren liegt zwischen 3.25 und 4.

Die parallele Effizienz der durchgeführten Rechnungen ist in Abbildung 4.11 aufgezeigt. Es zeigt sich, dass die Effizienz mit höherer Partikelzahl höher wird und generell um 0.6 liegt (Ausnahme bei zwei Prozessoren, s.o.). Die erreichten Werte sind vergleichbar mit denen der Literatur (siehe Frank (2002)). Resümierend lässt sich festhalten, dass ohne die vorgenommene Parallelisierung die Berechnungen des Kapitels 5 zeitlich deutlich aufwändiger gewesen wären und somit der Zweck der Parallelisierung erfüllt wurde.

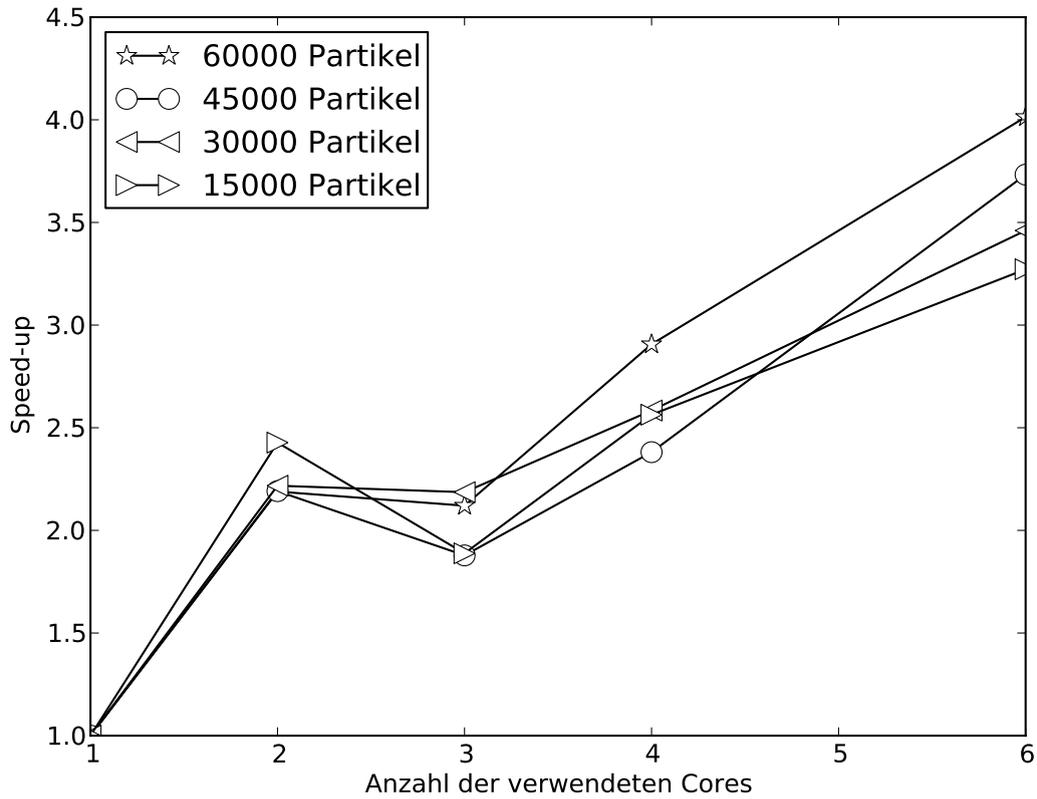


Abbildung 4.10: Speed-up der Simulation für verschiedene Partikelzahlen

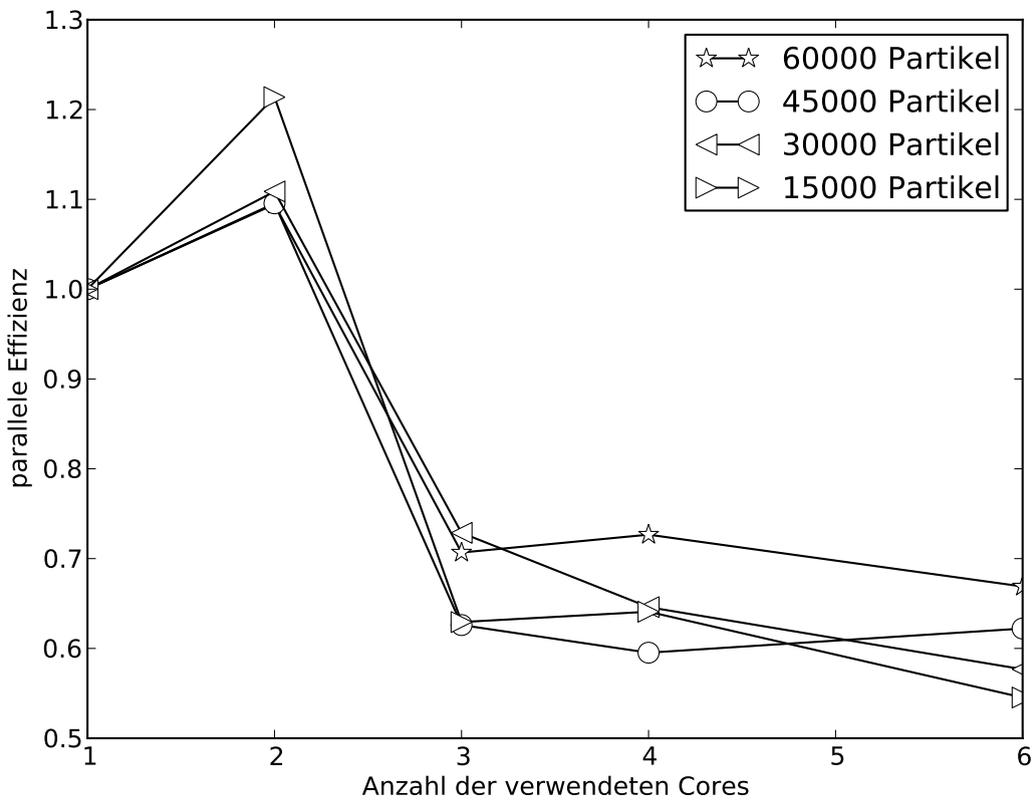


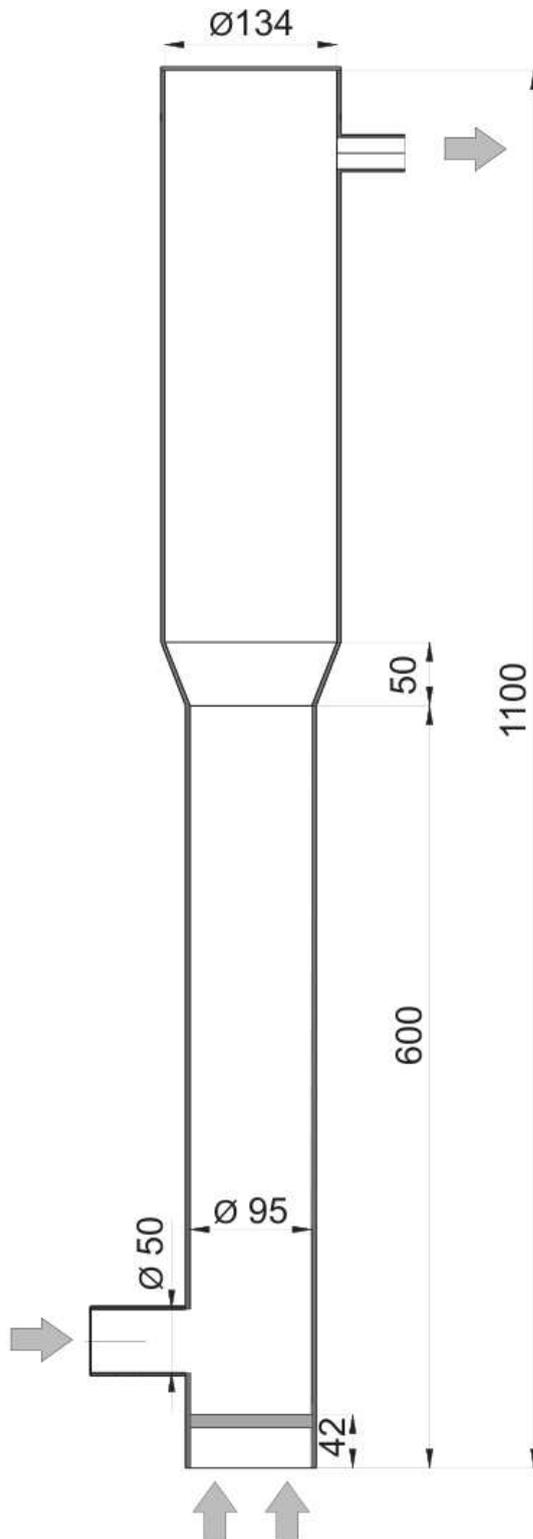
Abbildung 4.11: Parallele Effizienz der Simulation für verschiedene Partikelzahlen

# Simulationsergebnisse

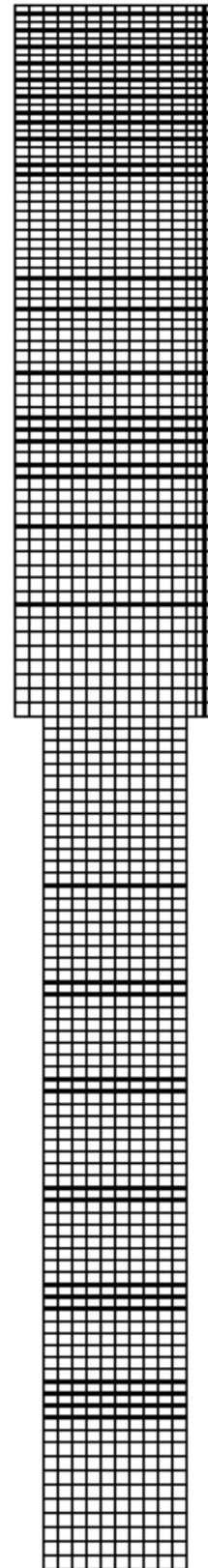
## 5.1 Rechengebiet

Der dieser Arbeit zugrunde liegende Reaktor ist schematisch in Abbildung 5.1(a) dargestellt. Der Reaktor hat zwei ausgeprägte Bereiche: den unteren im Durchmesser schmaleren Teil, in dem sich das Wirbelbett befindet und den oberen etwas breiteren Teil, in dem größtenteils nur die fluide Phase vorliegt. Wie bei Wirbelschichten üblich, erfolgt die Einströmung des Fluids von unten. Der Brennstoff wird auf der linken unteren Seite des Reaktor mit Hilfe einer Förderschnecke (hier nicht simuliert) in den Reaktor eingetragen. Der Auslass des Reaktors befindet sich im oberen rechten Teil des Reaktors. Da in dieser Arbeit nur kartesische Gitter ohne spezielle "Cut-Cell" Behandlung verwendet werden können, kann der Konus entweder mit Hilfe von stufigen Rändern oder sprungförmig abgebildet werden. Für die hier dokumentierten Simulationen wurde immer ein sprungförmiger Übergang vom unteren Reaktorteil zum oberen angenommen.

Der in Abbildung 5.1(a) gezeigte Stutzen der Brennstoffzuführung ist am realen Reaktor zum Teil mit einer Förderschnecke ausgefüllt und wurde daher, wie in Abbildung 5.1(b) zu sehen, in der diskretisierten Reaktorgeometrie nicht berücksichtigt. Das Rechengebiet wird in 1762 (Fälle 1-6) bzw. 2034 (Fälle 7-14) kartesische Zellen eingeteilt und ist für den ersten Fall in Abbildung 5.1(b) dargestellt. Der untere Teil des Reaktors wird annähernd äquidistant diskretisiert, wobei der obere rechte am Gasauslass liegende Teil des Rechengebietes zur Wand hin kleinere Zellen aufweist. Der Grund liegt größtenteils darin, dass die Zwischenergebnisse der



(a) Schema der Laboranlage

(b) Diskretisiertes Re-  
chengebiet

während dieser Arbeit durchgeführten Simulationen zeigten, dass sich aufgrund der asymmetrischen Strömungsführung ansonsten ein starkes Randverhalten im Auslass bemerkbar machen würde. Eine Verfeinerung des verwendeten Gitters ist aufgrund der berücksichtigten maximalen Partikeldurchmesser limitiert.

Die Aufteilung des Rechengebietes in diskrete Zellen geschah in dieser Arbeit zum Teil auf Basis der verfügbaren Rechenleistung. Die ersten sechs Fälle wurden mit einem aus 1762 Gitterzellen bestehenden Rechengebiet berechnet, wohingegen die letzten acht Fälle auf einem aus 2034 Gebietszellen bestehenden Rechengebiet berechnet wurden. Der Grund für diese Unterschiede liegt in der Anzahl der Gebietszellen am Reaktorboden in radialer Richtung. Das Gitter der ersten sechs Fälle hat zehn Gitterzellen im unteren Bereich des Reaktors und wurde durch fünf Prozessoren bearbeitet. Das Gitter der letzten acht Fälle hat 12 Gebietszellen in radialer Richtung am Reaktorboden und wurde auf drei Prozessoren bearbeitet. Da dieser Arbeit eine Art statisches Domain Decomposition Prinzip zugrunde liegt, wurde darauf geachtet, dass die Anzahl der Gebietszellen in radialer Richtung ganzzahlig teilbar mit der Anzahl der verwendeten Prozessoren ist, da eine möglichst ausgeglichene Lastverteilung unter den Prozessoren realisiert werden sollte. Die Unterschiede der Lastverteilung auf den beiden Gittern lassen sich anhand der Partikelzahlen in den einzelnen Teilgebieten eines Rechengebietes und an der Gesamtrechenzeit erkennen. Fälle, die mit Hilfe von drei Prozessoren berechnet wurden, neigen zu überproportional langen Gesamtrechenzeiten, da starke asymmetrische Partikelbelastungen in radialer Richtung weniger gut abgefangen werden können als bei Fällen, die mit Hilfe von fünf Prozessoren berechnet wurden. So kann es sein, dass ein Prozessor zeitweise die Hälfte aller Partikelbewegungen zu berechnen hat, in Fällen in denen nur drei Prozessoren verwendet wurden und somit die Gesamtrechenzeit deutlich steigt.

## 5.2 Simulationsergebnisse

Die Präsentation der Ergebnisse der Simulationen zur Holzvergasung in Wirbelschichten ist in einzelne Vergleichsszenarien aufgeteilt, da insgesamt 14 Fälle (Parametervariationen) berechnet worden sind. Der Basissatz an Parametern der Simula-

tion ist in den Tabellen 5.1 bis 5.3 dargestellt. Zusätzlich werden in Kapitel 5.2.11 Partikelhistorien aus einem weiteren Vergleichsszenario gezeigt und diskutiert.

In Tabelle 5.1 werden die Rand- und Anfangsbedingungen aller relevanten Größen innerhalb der fluiden Phase dargestellt. Die Anfangsdaten der festen Phasen werden in Tabelle 5.2 gezeigt. Aufgrund der enormen Rechenzeiten der Simulation kann und soll der Anfahrvorgang eines Wirbelschichtreaktors hier nicht abgebildet werden, da aus experimenteller Erfahrung heraus nicht damit zu rechnen ist, dass dieser Zeitraum im Bereich von wenigen Minuten, sondern eher von wenigen Stunden liegen wird. Eine realitätsnahe Modellierung würde entsprechend ähnliche Zeiträume des Anfahrvorganges erfordern und daher den Rechenbedarf der hier vorgestellten Simulationen deutlich übertreffen, da in dieser Arbeit Gesamtsimulationszeiten von nur 100 s gezeigt werden, was jedoch bereits deutlich länger ist, als in aktuellen Publikationen. In diesem Sinne sind die Anfangsbedingungen nahe den zum Teil vermuteten stationären Reaktorbedingungen geschätzt worden.

Der Einfluss der Anfangsbedingungen wird mit der Zeit abnehmen und es sollte sich bei gegebenen gleichen Randbedingungen immer der gleiche stationäre Zustand ergeben. Die Abklingraten des Einflusses der gewählten Anfangsbedingungen können grob als proportional zum Abstand der entsprechenden Größe zum stationären Endwert angenommen werden. Aufgrund der deutlich höheren Energiedichte der festen Phasen im Vergleich zur fluiden Phase sind die Zeitkonstanten der Dynamik der festen Phasen bestimmend für die Abklingzeit der Anfangsbedingungen. So kann beispielsweise nicht erwartet werden, aussagekräftige Aussagen bezüglich des Verhaltens einer Wirbelschicht zu erhalten, wenn die betrachteten Zeiträume nicht deutlich größer als die Abbrandzeiten einzelner Partikel sind.

Aufgrund der obigen Darstellung sind nicht alle relevanten Größen innerhalb der hier diskutierten Fälle stationär. Dies beeinflusst natürlich die Allgemeingültigkeit der Simulationsergebnisse. Ob, wie und wann das in dieser Arbeit betrachtete System stationär wird, kann aufgrund der eingeschränkten experimentellen Daten bzw. des eingeschränkten messtechnischen Zuganges nicht oder nur unzureichend beurteilt werden. Nichts desto trotz werden die hier vorgestellten Vergleichsszenarien anhand ihrer zeitlichen Verläufe und der über die letzten zehn Sekunden gemittel-

ten Ergebnisse bewertet. Der Mittelungszeitraum hat natürlich einen Einfluss auf die erhaltenen Werte, da verschiedene die Ergebnisse beeinflussende Phänomene unterschiedliche Wellenlängen haben. Der Einfluss soll in dieser Arbeit nicht näher untersucht werden.

Zu Beginn einer Simulation ist der Wirbelschichtreaktor durch Stickstoff inertisiert und die Partikel sind in ca. 75 % des Reaktors gleichmäßig verteilt - allerdings mit einem lokalen Volumenanteil der deutlich unter dem des entsprechenden Festbettes liegt. Dadurch fallen zu Beginn der Simulation die Partikel in Richtung Reaktorboden und bilden darauf folgend eine typische blasenbildende Wirbelschicht aus. Parallel dazu werden im unteren Teil des Reaktors Holzpartikel eingebracht, die die hier berücksichtigten Prozesse der Aufheizung, Trocknung, Pyrolyse und Vergasung durchlaufen. Die Holzpartikel werden aufgrund ihrer Größe und /oder ihrer Masse mehr oder weniger schnell den Reaktorboden erreichen und dort thermochemisch umgewandelt.

Anfangs- oder Randbedingungen	Typ bzw. Wert der Anfangs- oder Randbedingung	Einheit Einheit
Anfangswerte		
Temperatur	800	K
Massenanteil Stickstoff	1	-
Geschwindigkeit	0	m/s
Druck	100010	Pa
Randbedingungen der Feldgleichungen im Fluid:		
Wandtemperatur	800	K
Einlasstemperatur	670	K
Massenanteil der Spezies im Auslass	hom. NR	-
Massenanteil der Spezies an der Wand	hom. NR	-
Massenanteil Sauerstoff im Einlass	0.233	-
Massenanteil Stickstoff im Einlass	0.767	-
sonstige Spezies im Einlass	0	-
Druck im Auslass	100000	Pa
Druck im Einlass	hom. NR	-
Geschwindigkeit an der Wand	slip	-
Geschwindigkeit im Einlass	0.25	m/s
Geschwindigkeit im Auslass	hom. NR	-
Zeitschritte der Simulationsteile		
	Wert	Einheit
Fluidfeldberechnungen	$5 \cdot 10^{-5}$	s
Partikelbewegung	1/3 von $5 \cdot 10^{-5}$	s
Bilanzen des Partikels(Masse etc.)	variabel	-
homogene Chemie	variabel	-
hom. NR - homogene Neumannrandbedingung, DR - Dirichletrandbedingung		

*Tabelle 5.1: Rand- und Anfangsbedingungen der fluiden Phase*

Anfangswerte der Holzpartikel:		
scheinbare Dichte	778	kg/m <sup>3</sup>
Masse	2.61e-05	kg
Durchmesser **	4	mm
Massenanteil Wasser	0.1	-
Massenanteil Holz	0.9	-
Massenanteil Holzkohle	0.0	-
Temperatur **	300	K
Geschwindigkeit	0	m/s
Rotationsgeschwindigkeit	0	1/s
Anfangswerte der Holzkohlepartikel:		
Anzahl der Partikel insgesamt (Fälle 1-6)	12 000	-
Anzahl der Partikel insgesamt (Fälle 7-14)	11 952	-
scheinbare Dichte	450	kg/m <sup>3</sup>
Durchmesser (erste Partikelklasse)	1	mm
Durchmesser (zweite Partikelklasse)	1.5	mm
initialer Umsatzgrad	1.0	-
Massenanteil Wasser	0.0	-
Massenanteil Holz	0.0	-
Massenanteil Holzkohle	1.0	-
Temperatur **	950	K
Geschwindigkeit	0	m/s
Rotationsgeschwindigkeit	0	1/s
Kollisionsparameter Partikel-Partikel:		
Federsteifigkeit	600	N/m
Reibungsbeiwert	0.2	-
Verlustbeiwert **	0.8	-
Kollisionsparameter Partikel-Wand:		
Federsteifigkeit	300	N/m
Reibungsbeiwert	0.2	-
Verlustbeiwert **	0.6	-
** siehe Tabelle 5.3 bzgl. evtl. variiertes Parameter		

**Tabelle 5.2:** Parameter und Anfangswerte der festen Phase

Simulationsfall	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Holzkohleanfangs- temperatur in K	850	950	1050	950	950	950	950	950	950	950	950	950	950	950
Verlustbeiwert Partikel- Partikel-Kollision	0.8	0.8	0.8	0.8	0.6	0.8	0.8	0.8	0.8	0.8	0.8	0.8	0.8	0.8
Verlustbeiwert Partikel- Wand-Kollision	0.6	0.6	0.6	0.6	0.4	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6
Holzmassenstrom in Partikel pro Sekunde	1.09	1.09	1.09	1.09	1.09	1.63	0.543	2.17	1.09	1.09	1.09	1.09	1.09	8.68
Massenanteil inerter Teer	0.177	0.177	0.177	0.0177	0.177	0.177	0.177	0.177	0.177	0.177	0.177	0.177	0.177	0.177
Wandtemperatur in K	800	800	800	800	800	800	800	800	800	800	800	900	1000	800
Eingangstemperatur des Holzes in K	300	300	300	300	300	300	300	300	360	300	300	300	300	300
Einströmgeschwindigkeit der Luft	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.375	0.25	0.25	0.25	0.25
Einströmtemperatur der Luft in K	670	670	670	670	670	670	670	670	670	670	770	670	670	670
Durchmesser der Holzpartikel in mm	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	2

*Tabella 5.3: Variierte Parameter der Simulationen für alle 14 Fälle*

### 5.2.1 Das Vergleichsszenario

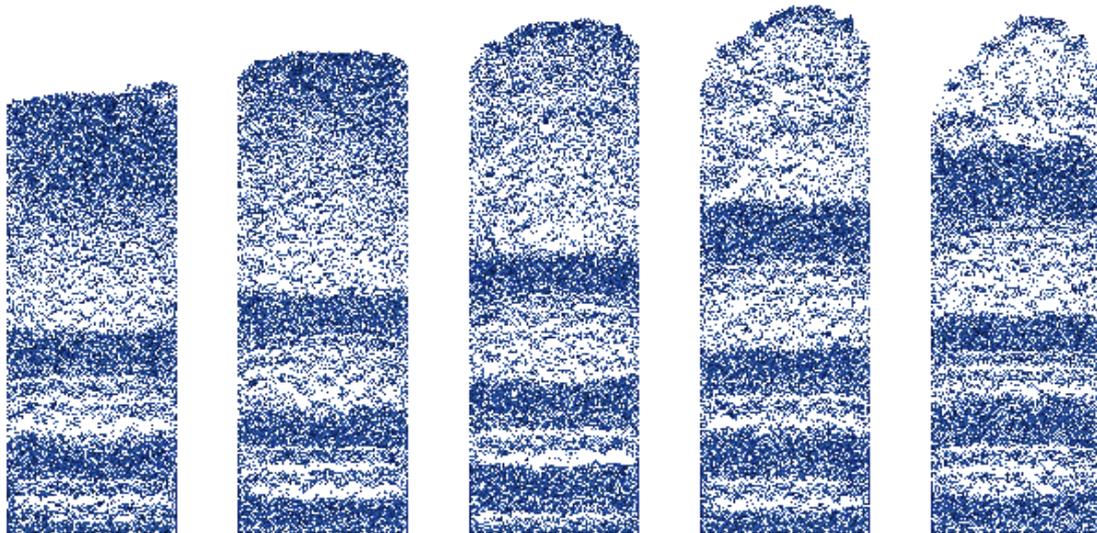
Der Basisfall, mit dem alle anderen 13 Fälle verglichen werden und auf dessen Basis die Parameter der Tabelle 5.3 variiert wurden, ist der Fall 2 der Tabelle 5.3. Einleitend sollen hier die Abbildungen 5.1 und 5.2 herangezogen werden, um die Partikeldynamik innerhalb des Bettes zu Beginn der Simulation zu veranschaulichen. Es zeigt sich, dass zu Beginn der Simulation das Geschehen im Reaktor relativ symmetrisch im Aufbau und die Betthöhe deutlich niedriger als im späteren Verlauf der Berechnungen ist. Dies liegt daran, dass noch kein bzw. wenig Holz im Reaktor vorliegt und somit die Pyrolysegase noch keinen merklichen Anteil an der Gesamtgasströmung ausmachen. Der Boden des Reaktors ist mehr oder weniger gleichmäßig mit Holzkohle bedeckt.

Die Zugabe von Holz im Laufe der Simulation führt zu größeren axialen Bettausdehnungen und zu einem asymmetrischen Geschehen im Reaktor (siehe Abbildungen 5.3 und 5.4) zum Ende der Gesamtsimulationszeit hin (Bilder bei ca. 95 s Simulationszeit). Der Boden des Reaktors ist aufgrund der einseitigen Holzzufuhr links deutlich stärker mit den größeren Holzpartikeln besetzt als im rechten Teil. Dies führt zum einen dazu, dass dort mehr Pyrolysegase entstehen und die Gasgeschwindigkeit damit lokal höher ist und zum anderen, dass dort kleinere Reaktortemperaturen vorliegen, da das Holz große Wärmeströme für die Aufheizung, Trocknung und Pyrolyse benötigt (diese Prozesse wirken allesamt wie eine endotherme Reaktion). Beide Effekte wirken also gegeneinander, da niedrigere Reaktortemperaturen zu höheren Gasdichten und damit niedrigeren Gasgeschwindigkeiten führen, wohingegen die Pyrolyse und Trocknung durch die aus den Partikeln freiwerdenden Gase höhere Gasgeschwindigkeiten bedingen (bei ansonsten festen Einlaufbedingungen).

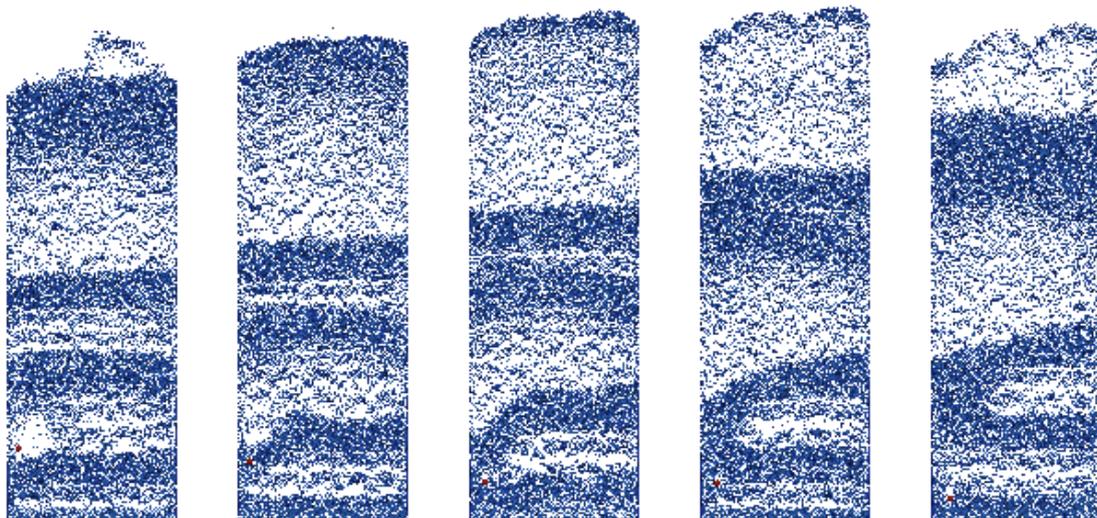
Die Holzablagerungen am Boden des Reaktors zeigen deutlich, dass die Einlaufgeschwindigkeit des Reaktors nicht groß genug ist, um die frischen Holzpartikel zu fluidisieren. Jedoch wird auch deutlich, dass aufgrund der thermischen Zersetzung der Holzpartikel die aus dem Holz entstehenden Holzkohlepartikel fluidisiert werden (die Abbildungen 5.3 und 5.4 zeigen im unteren Bereich deutlich weniger große Holzpartikel als zu diesem Zeitpunkt ohne Zersetzung zu erwarten wären). Die Blasenbildung im Reaktor bringt zumeist Blasen hervor, die fast den Reaktordurchmesser

erreichen. Der Blasendurchmesser steigt tendenziell mit zunehmender Reaktorhöhe durch das Zusammenwachsen einzelner Blasen. Analog zu den Abbildungen 5.1 und 5.2 bzw. 5.3 und 5.4 zeigen die Abbildungen 5.5 und 5.6 bzw. 5.7 und 5.8 die zeitlich korrespondierenden Situationen aus Sicht des Fluids. Es wird die Volumenfraktion der Gasphase im Reaktor gezeigt, wobei das abgebildete Verhalten in direkter Nachbarschaft zum Reaktorboden ein durch die Visualisierung hervorgerufener Effekt ist. Insbesondere das Anheben ganzer Partikelschichten über den gesamten Reaktordurchmesser hinweg und die großen Unterschiede in den Gasvolumenanteilen geht aus diesen Abbildung deutlich stärker hervor als im Fall der Visualisierung der einzelnen Partikel. Es zeigen sich stark ausgeprägte Abgrenzungen zwischen den dichten Partikelschichten und den dünnen Gasströmungen zwischen den Partikelschichten. Die Unterschiede im Fluidisierungsverhalten zu Beginn und am Ende der Simulation werden durch Abbildung 5.9 zusätzlich verdeutlicht. Es ist klar ersichtlich, dass die Betthöhe zu Beginn der Simulation deutlich kleiner ist als am Ende der Simulation. Sowohl der axiale Schwerpunkt als auch die Höhenmarke unter der 90 % der Partikelmasse liegen, zeigen stationäre Werte erst ab 30 s bis 40 s Simulationszeit. Die höheren Zeiträume, um annähernd stationäre Verhältnisse zu erreichen (verglichen mit inerten Euler-Lagrange-Berechnungen), belegen zudem die starke Abhängigkeit der Bettfluidisierung von den thermischen Vorgängen im Reaktor und damit auch den Einfluss der durch Pyrolyse, Trocknung und Vergasung entstehenden Gase auf die Gesamtgasgeschwindigkeit (und damit auch auf die Betthöhe).

Die Stoffmengenanteile der Produktgase am Auslass sind in Abbildung 5.10 dargestellt. Die Daten in Abbildung 5.10 sehen ab der 50sten Sekunde in etwa stationär aus, wobei relativ starke und hochfrequente Schwankungen aller Signale zu sehen sind. Die korrespondierenden Werte der Teere im Auslass des Reaktors sind in Abbildung 5.11 aufgezeigt. Die Teere unterliegen ebenfalls starken Schwankungen - insbesondere das als inert angenommene Benzen. Auffällig in den Abbildung 5.10 und 5.11 sind ausgeprägte Anfangsbereiche bis zur 50sten Sekunde, die damit zusammenhängen, dass zum einen der Reaktor mit Stickstoff inertisiert gestartet wurde und anfänglich kein Holz im Reaktor vorhanden war und zum anderen eine fluid-dynamische Einlaufphase existent ist. Die Stoffmengenanteile von Kohlendioxid und Kohlenmonoxid konkurrieren miteinander, was an den leicht steigenden Stoffmen-

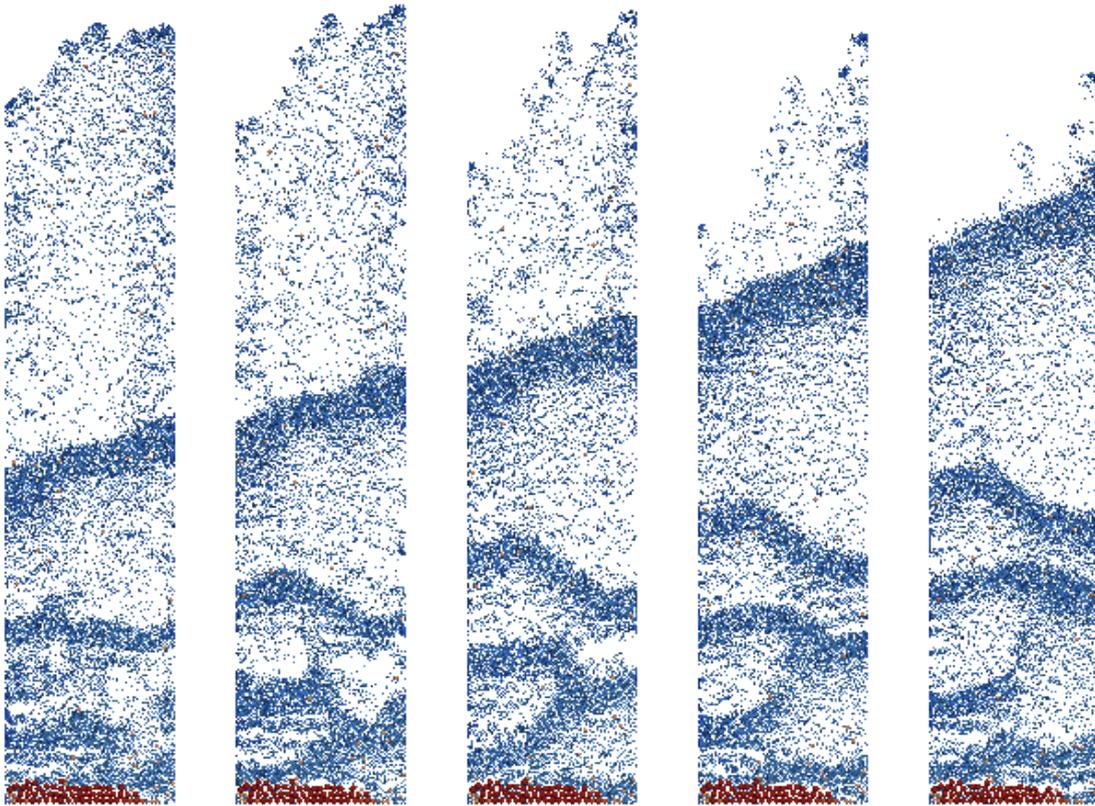


*Abbildung 5.1: Schnapshots zu Beginn der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 0.7 s und 0.9 s)*



*Abbildung 5.2: Schnapshots zu Beginn der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 0.95 s und 1.15 s)*

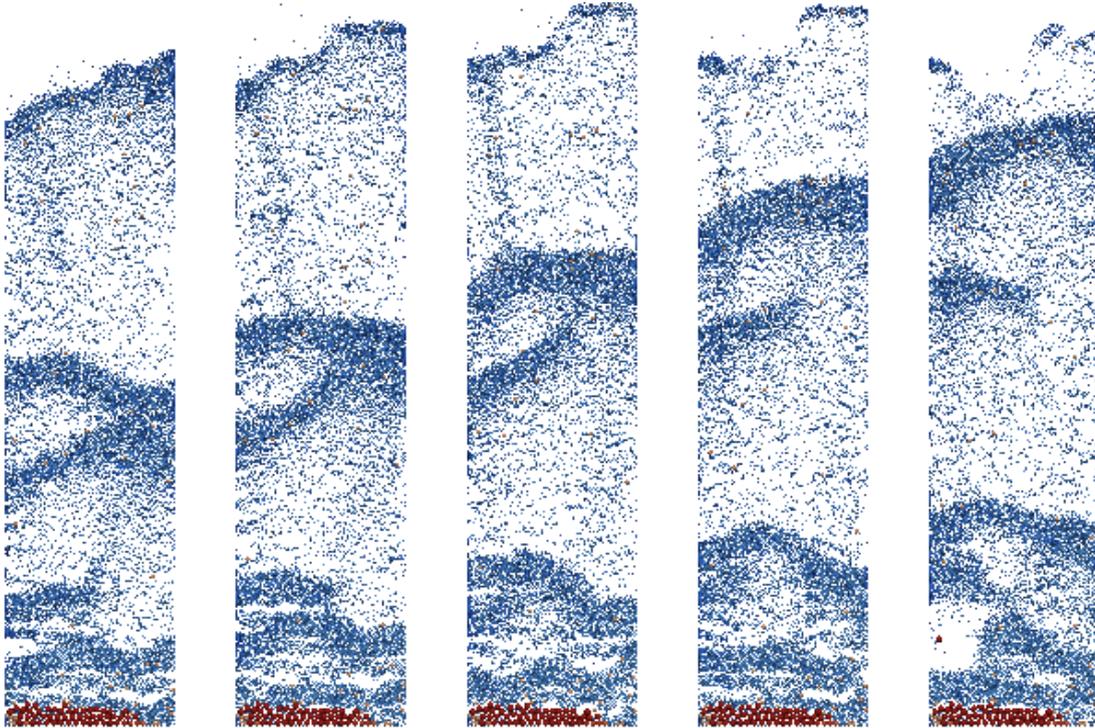
genanteilen des Kohlenmonoxids und den leicht sinkenden Stoffmengenanteilen des Kohlendioxids in Abbildung 5.10 zu erkennen ist. Ferner sind ab der 50sten Sekunde lokale Minima in den Stoffmengenanteilen des Kohlendioxids zeitlich verbunden mit lokalen Maxima der Stoffmengenanteile des Kohlenmonoxids und umgekehrt. Dieser



*Abbildung 5.3: Schnappschüsse am Ende der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 95 s und 95.2 s)*

Effekt lässt sich auf die Wassergas-Shift-Reaktion und die heterogene Vergasung des Kohlendioxids am Kohlenstoff der Holzkohle zurückführen.

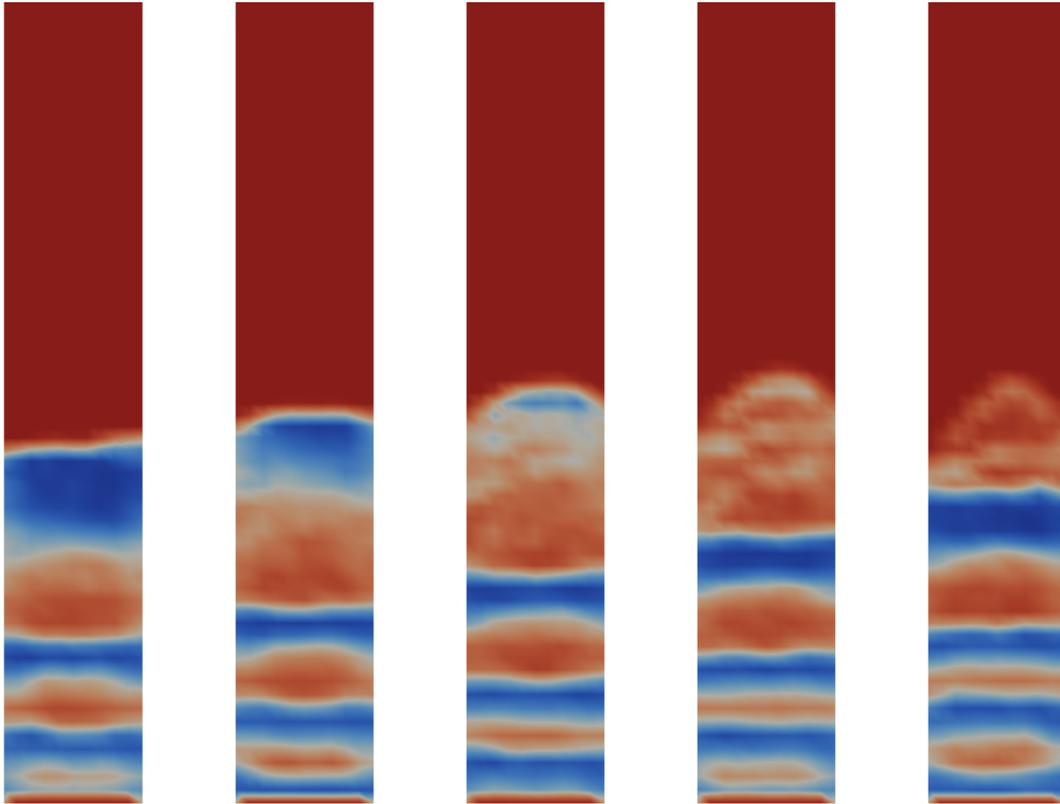
Eine fluidmechanische Startphase von ca. 10 s bis 20 s ist auch aus der Literatur bekannt und kann zum Beispiel dadurch verkleinert werden, dass das Bett zu Beginn der Simulation nicht homogen angenommen wird, sondern mit partikelfreien Bereichen initialisiert wird. Dies erleichtert die Fluidisierung des Bettes zu Beginn der Simulation. Die Konzentrationen der Teere im Auslass in Abbildung 5.11 zeigen, dass die beiden reaktiven Teerkomponenten einer deutlichen Zersetzung ausgesetzt sind, da Tabelle 3.8 einen deutlich kleineren Anteil an inerten Teeren zeigt, jedoch Abbildung 5.11 genau das Gegenteil dokumentiert. Insofern ist klar, dass ein Großteil des bei der primären Pyrolyse entstehenden Teeres im Reaktor zersetzt wird. Abbildung 5.12 zeigt die Auslasstemperatur des Reaktors über die Zeit und Tabelle 5.4 den entsprechenden Mittelwert der letzten zehn Simulationssekunden. Die bei



**Abbildung 5.4:** Schnappschüsse am Ende der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 95.25 s und 95.45 s)

den anderen Größen klar erkennbare Einlaufphase ist auch für die Temperatur zu erkennen. Die Schwankungen der Temperatur betragen ca. 30 K. Die hochfrequenten Schwankungen der Temperatur sind im Experiment so nicht zu erwarten, da die Temperatur meist mit Hilfe von Thermoelementen gemessen wird, welche eine nicht zu vernachlässigende thermische Dämpfung besitzen. Insofern werden die experimentellen Temperaturwerte immer deutlich weniger hochfrequente Anteile aufweisen, die zudem auch noch in ihren Amplituden gedämpft sind (typisches PT-Verhalten).

Weiterhin soll hier der Teerabbau und die Teerentstehung anhand der Abbildungen 5.13 bis 5.15 näher beschrieben werden. Alle drei Abbildungen zeigen die höchsten Teeranteile im untersten Teil des Reaktors, was durch die dort stattfindende primäre Pyrolyse bedingt ist. Im Bereich zwischen 150 mm und 325 mm Reaktorhöhe findet unter allen hier aufgezeigten Teerkonzentrationen bei verschiedenen Reaktorhöhen der stärkste Teerabbau statt (insbesondere wenn man berücksichtigt, dass dieser Bereich 12.5 % kleiner als die anderen Höhenabstände ist und zudem im oberen Re-

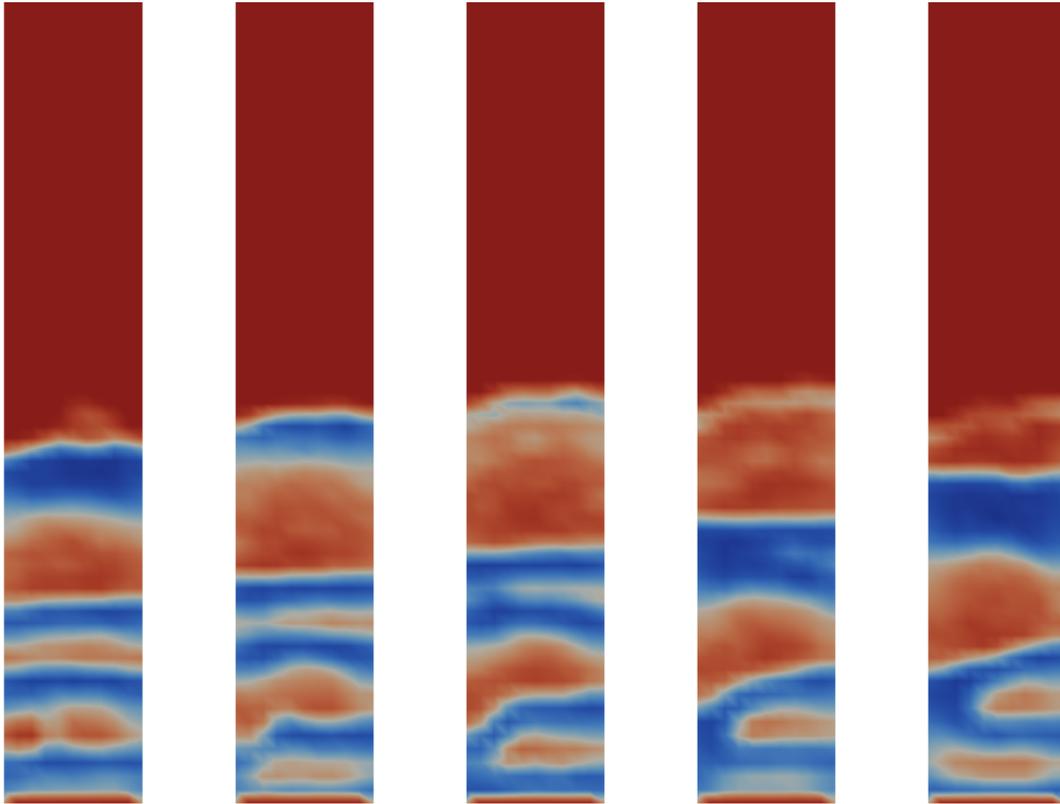


**Abbildung 5.5:** Schnappschüsse der Volumenfraktion der Gasphase zu Beginn der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 0.7s und 0.9s)

aktorteil die Verweilzeit aufgrund der Reaktordurchmessererhöhung größer ist). Die zum Teil starken Schwankungen der Teerkonzentrationen haben in ihren Extrema allesamt einen mit größer werdender Reaktorhöhe zeitliche Versetzung nach rechts, was an der Verweilzeit im Reaktor liegt. Die Teerkonzentrationen in den Höhen von 700 mm, 900 mm und dem Auslass haben alle dicht beieinander liegende Werte. Der Fakt, dass die abgebildeten Werte der Teerkonzentrationen bei 700 mm und 900 mm niedriger liegen als am Auslass, liegt in der Art der Mittelung begründet. Eine Mittelung in dieser Arbeit fand auf Basis von

$$\bar{\phi} = \frac{\int_A \phi dA}{\int_A dA} \quad (5.1)$$

statt, was allerdings dazu führt, dass die lokalen Werte der Dichte und der Geschwindigkeit keine Rolle bei der Berechnung spielen. Dabei ist  $\bar{\phi}$  der Mittelwert,  $A$  das

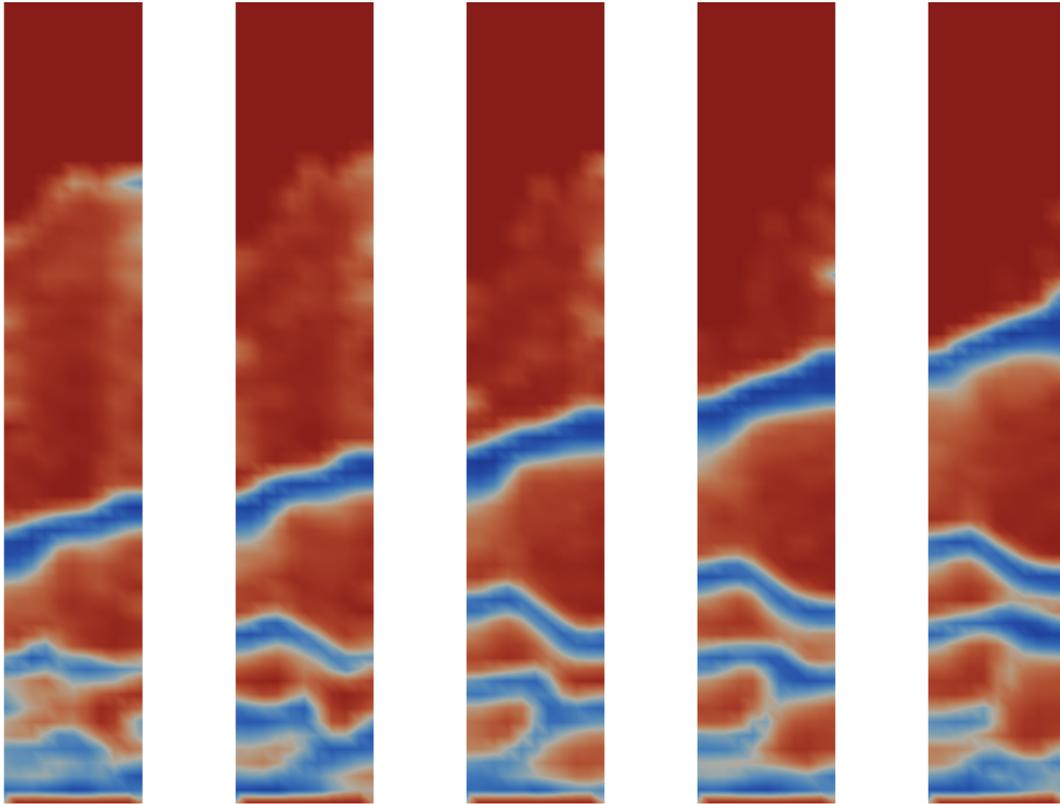


**Abbildung 5.6:** Schnappschüsse der Volumenfraktion der Gasphase zu Beginn der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 0.95 s und 1.15 s)

Gebiet über das gemittelt wird und  $\phi$  die lokale Größe, die gemittelt werden soll. Eine Mittelung, die diese Werte berücksichtigt, kann zum Beispiel mit

$$\bar{\phi} = \frac{\int_A U_A \rho \phi dA}{\int_A U_A \rho dA} \quad (5.2)$$

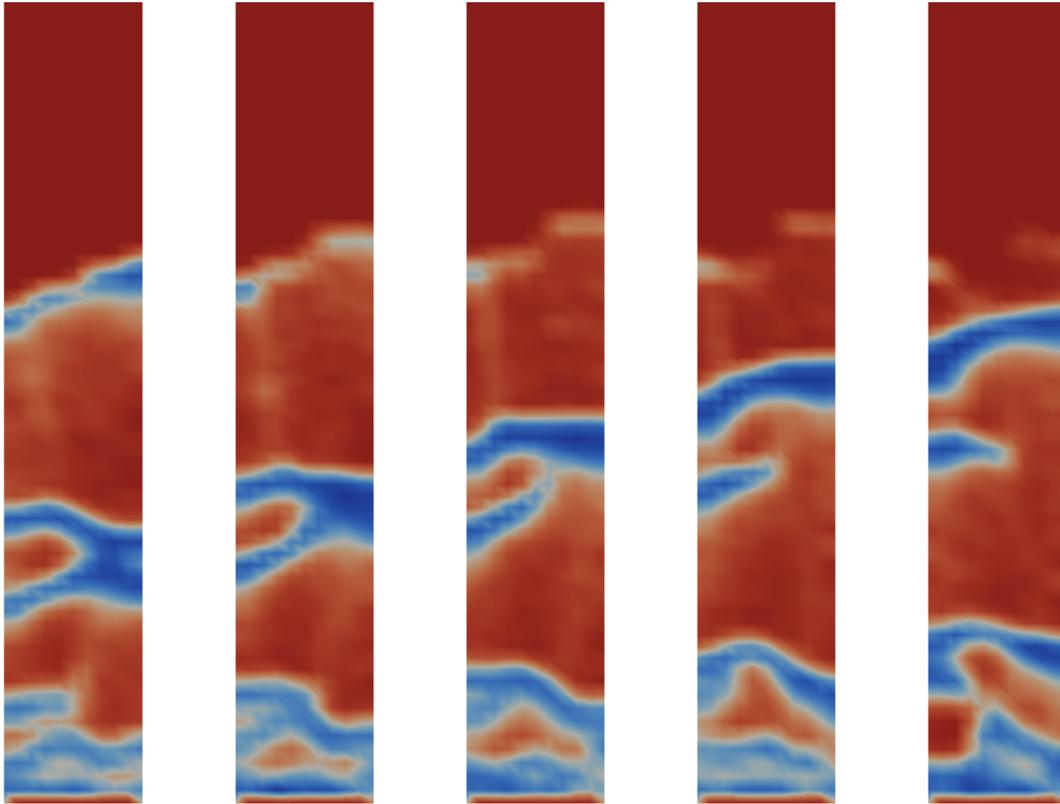
angegeben werden. Hier stehen  $U_A$  für die Geschwindigkeit senkrecht zum Gebiet  $A$  und  $\rho$  für die Dichte der Phase, aus welcher auch  $\phi$  stammt. Man sieht also, dass die Strömung, wie in Abbildung 5.16 und 5.17 gezeigt, den oberen Teil des Reaktors nicht homogen durchströmt, sondern schlauchartig auf den Auslass zuläuft. Da sowohl eine erhöhte Temperatur als auch eine gesteigerte Verweilzeit den Teergehalt des Produktgases minimieren, zeigt sich, dass im weniger durchströmten Teil des oberen Reaktors der Teergehalt aufgrund der hohen Verweilzeit niedriger ist (siehe Abbildung 5.18). Somit lässt eine Mittelung nur auf Basis der lokalen Werte (ohne Berücksichtigung der lokalen Dichte und Geschwindigkeit) der zu mittelnden Größe falsche Rückschlüsse zu. Eine Teerbildung außerhalb der primären Pyrolyse ist je-



**Abbildung 5.7:** Schnappschüsse der Volumenfraktion der Gasphase am Ende der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 95 s und 95.2 s)

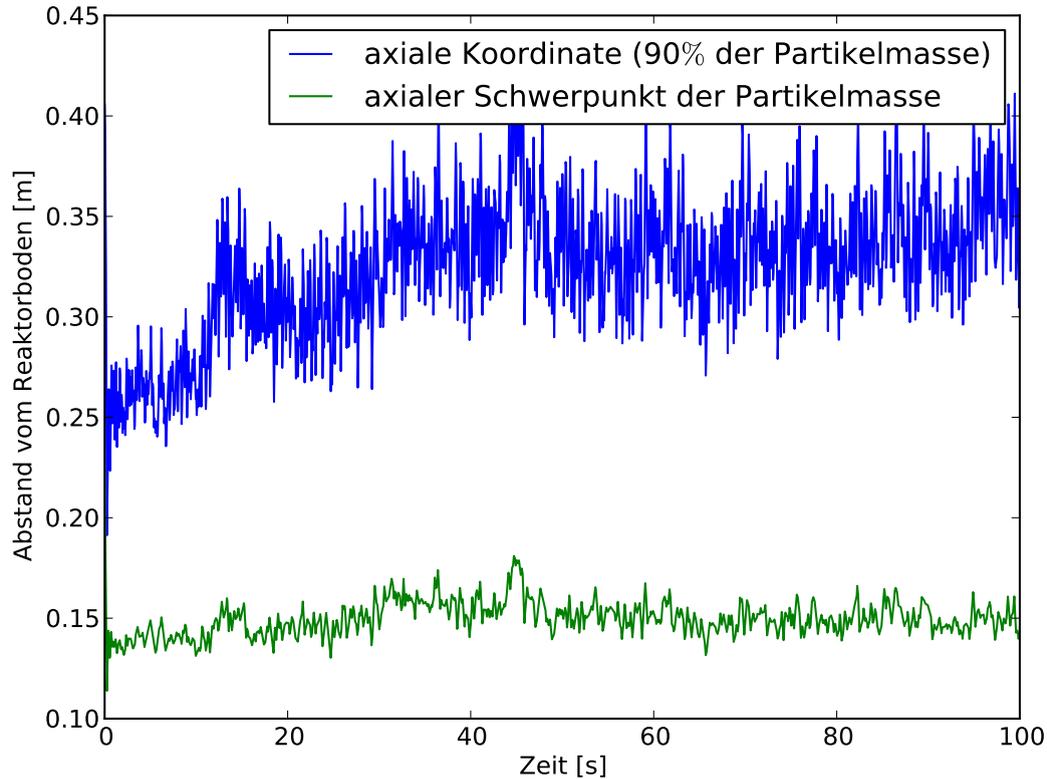
doch in dieser Arbeit nicht berücksichtigt worden, so dass die niedrigen Werte des Teergehaltes auf den Höhen 700 mm und 900 mm tatsächlich nur aufgrund der Art der Mittelung zustande kommen. Die letzten Aussagen gelten so für die Abbildungen 5.13 und 5.14, allerdings nicht für Abbildung 5.15. Der als inert angenommene Teer in Abbildung 5.15 ändert seine Konzentration über die Höhe allein aufgrund der inhomogenen Gemischzusammensetzung. Als Erklärungsansatz für diese Änderung in der Teilchenzahl kommen nur der Teerzerfall selbst, sowie die Vergasung der Holzkohle mit Kohlendioxid und Wasser in Frage, da sich nur bei diesen Reaktionen tatsächlich die Teilchenzahl der an den Reaktionen beteiligten Stoffen ändert. Die Vergasung mit Kohlendioxid und Wasser hat aufgrund der Reaktortemperaturen nur einen kleinen Anteil an der Gesamtänderung.

Als Indikatoren für die zeitlich langwelligen Änderungen innerhalb der Wirbelschicht sollen hier die Massen der Holzes und der Holzkohle innerhalb des Reaktors die-



**Abbildung 5.8:** Schnappschüsse der Volumenfraktion der Gasphase am Ende der Simulation für den Referenzfall (Zeitraum zwischen 95.25 s und 95.45 s)

nen. Beide Größen sind im Experiment nur schwer zu erfassen (Start- und Endwerte lassen sich relativ gut bestimmen) und können somit hier nur zur Beurteilung der Stationarität herangezogen werden. Abbildung 5.23 zeigt die Ergebnisse eines Vergleichsszenarios unterschiedlicher Partikelstarttemperaturen, wobei hier nur die Entwicklung der Holzmasse für den Fall 2 interessieren soll. Die Holzmasse im Reaktor steigt aufgrund der Holzzufuhr am Anfang schnell an, läuft dann zwischen der 30sten und 50sten Sekunde auf ein Plateau und steigt ab der 50sten Sekunde wieder an, jedoch weniger stark als zu Beginn der Simulation. Eine Stationarität ist nicht erkennbar. Abbildung 5.24 zeigt das gleiche Szenario für die Holzkohlemasse. Die Holzkohlemasse im Reaktor nimmt stetig ab und zeigt nur zwischen der 30sten und 50sten Sekunde eine leichte Abnahme der Rate des Holzkohleabbaus. Es zeigt sich also, dass Holz- und Holzkohlemasse innerhalb der hier betrachteten 100s nicht stationär werden. Allerdings zeigt die Arbeit von Gerber u. a. (2010),



**Abbildung 5.9:** Axialer Schwerpunkt und Höhe von 90 % der Partikelmasse über die Zeit

dass die Holzmasse potentiell ein PT-ähnliches Verhalten ausbilden wird und sich somit der stationäre Punkt zumindest der Holzmasse im Reaktor durchaus schnell einstellen kann. Mit PT-ähnlich wird hier der aperiodische Fall der Sprungantwort einer linearen Differentialgleichung beschrieben.

Der Teerabbau in den Simulationen hängt im Wesentlichen von der Verweilzeit des Gases und der Temperatur des Gases ab. Abbildung 5.16 und 5.17 zeigen, dass der größte Anteil des Gases schlauchförmig auf den Auslass zuläuft und damit kleinere Verweilzeiten realisiert werden als eigentlich möglich. Es wird nur ca. die Hälfte des vorhandenen Reaktorvolumens effektiv für die Strömung genutzt. Teile der schlauchförmigen Gasströmung können den Auslass nicht erreichen und treten in einen den gesamten oberen linken Teil des Reaktors ausfüllenden Wirbel ein. Abbildung 5.18 zeigt die Konsequenzen der Strömungsführung auf die Massenanteile des ersten reaktiven Teeres. Man kann anhand der Massenanteile des Teeres deutlich die stark und schwach durchströmten Teile des oberen Reaktorteiles voneinander trennen. Die hohen Verweilzeiten im linken oberen Teil des Reaktors reduzieren dennoch den Teergehalt.

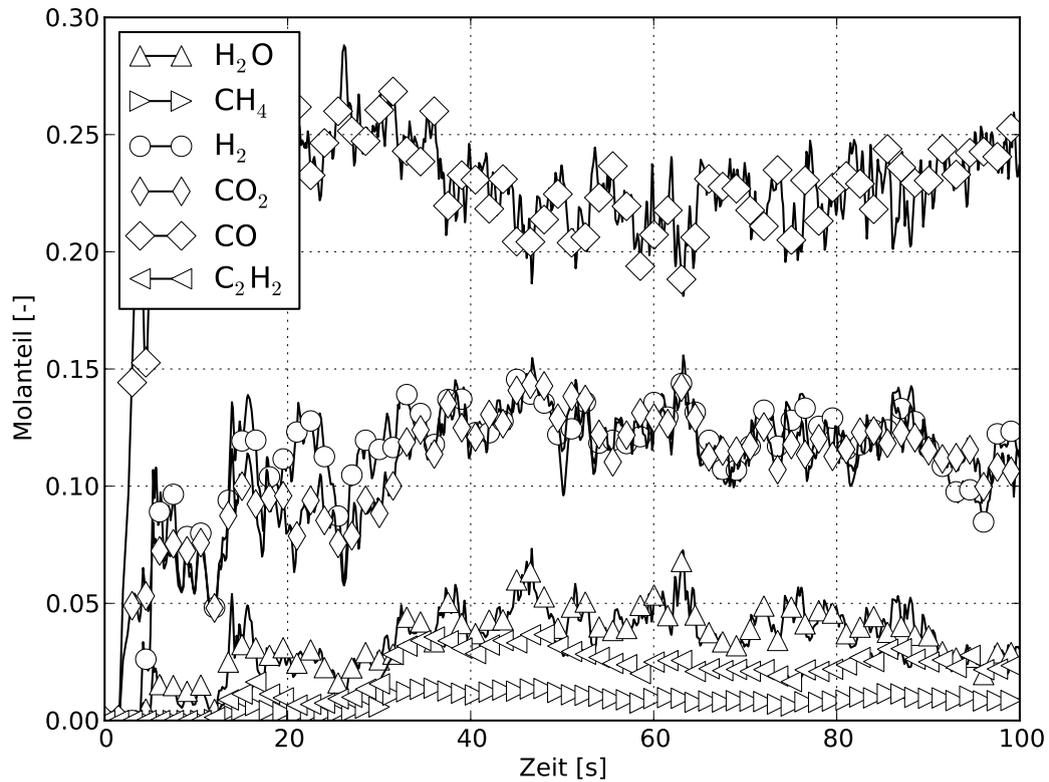


Abbildung 5.10: Zeitlicher Verlauf der Auslasskonzentrationen einiger Produktgase für den Fall

2

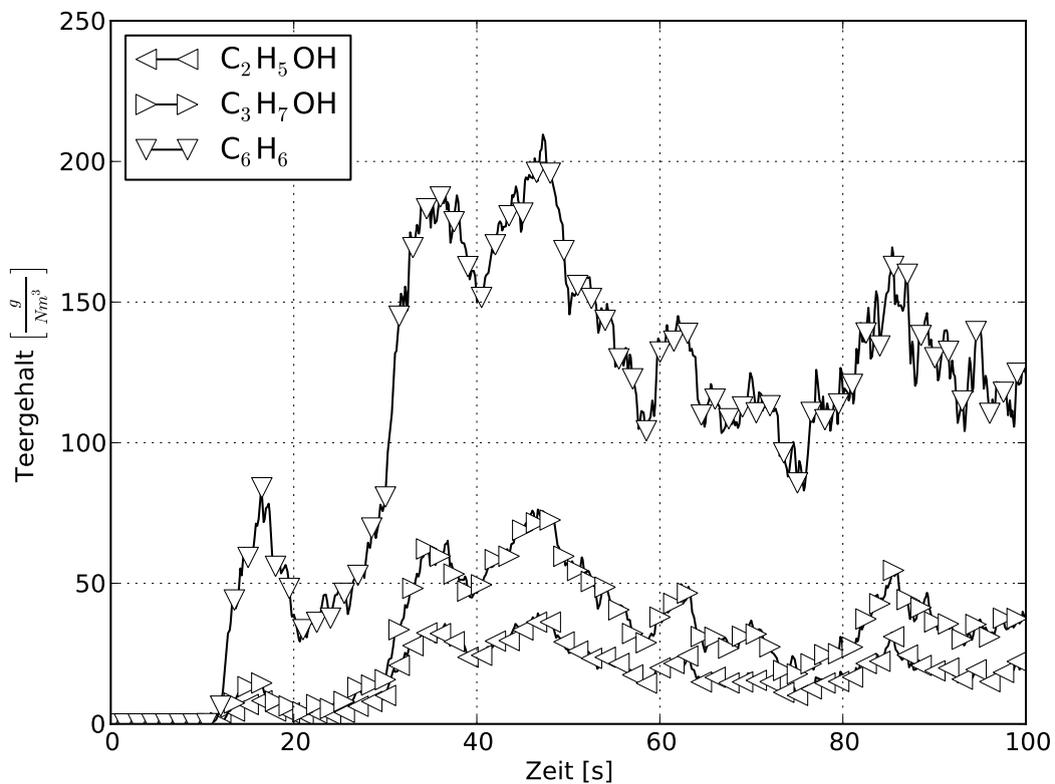


Abbildung 5.11: Zeitlicher Verlauf der Auslasskonzentrationen der Teere für den Fall 2

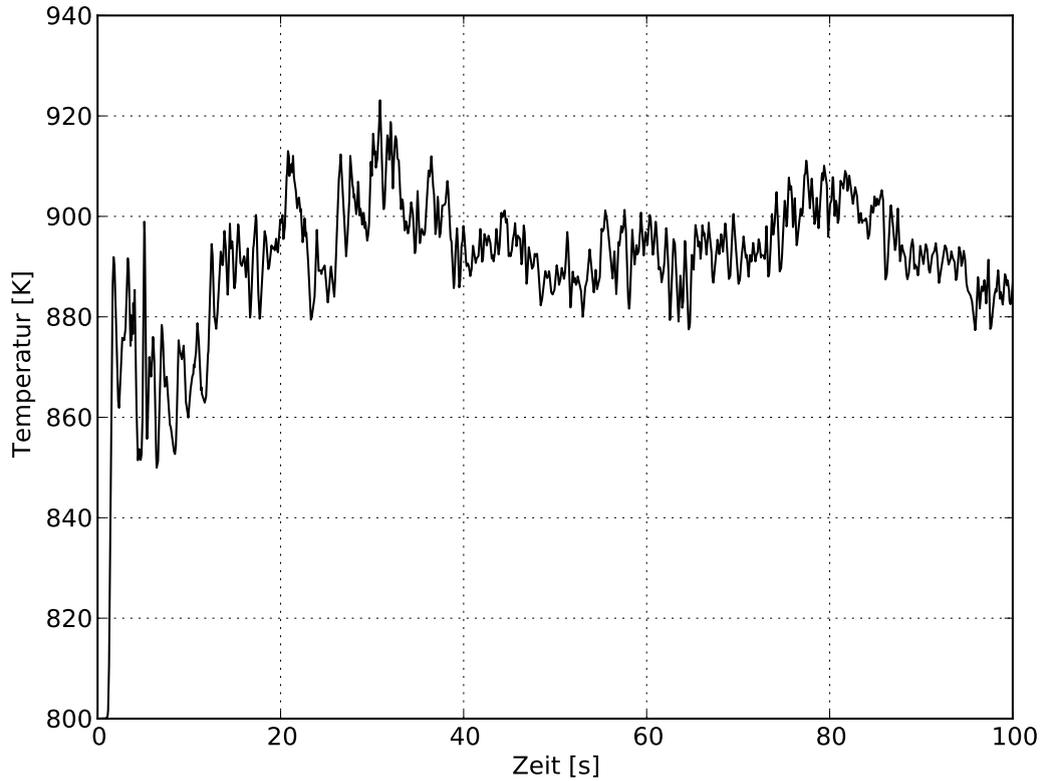


Abbildung 5.12: Zeitlicher Verlauf der Auslasstemperatur für den Fall 2

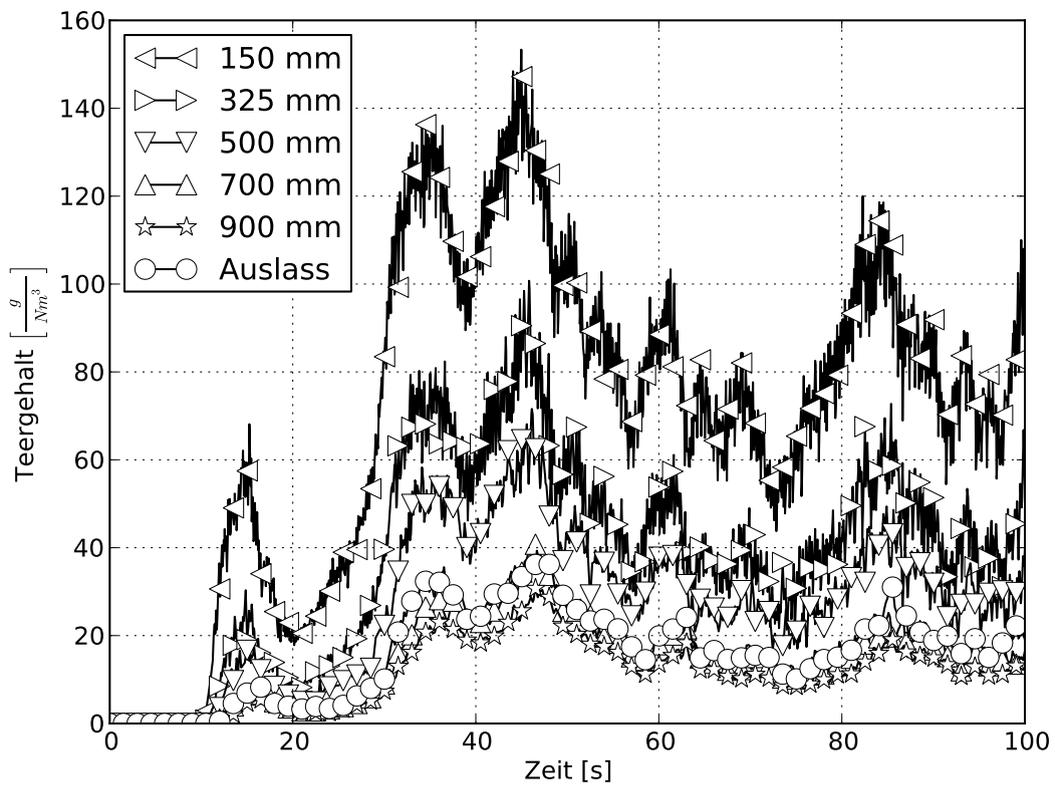


Abbildung 5.13: Teer 1 für verschiedene Höhenstufen im Reaktor über die Zeit (Fall 2)

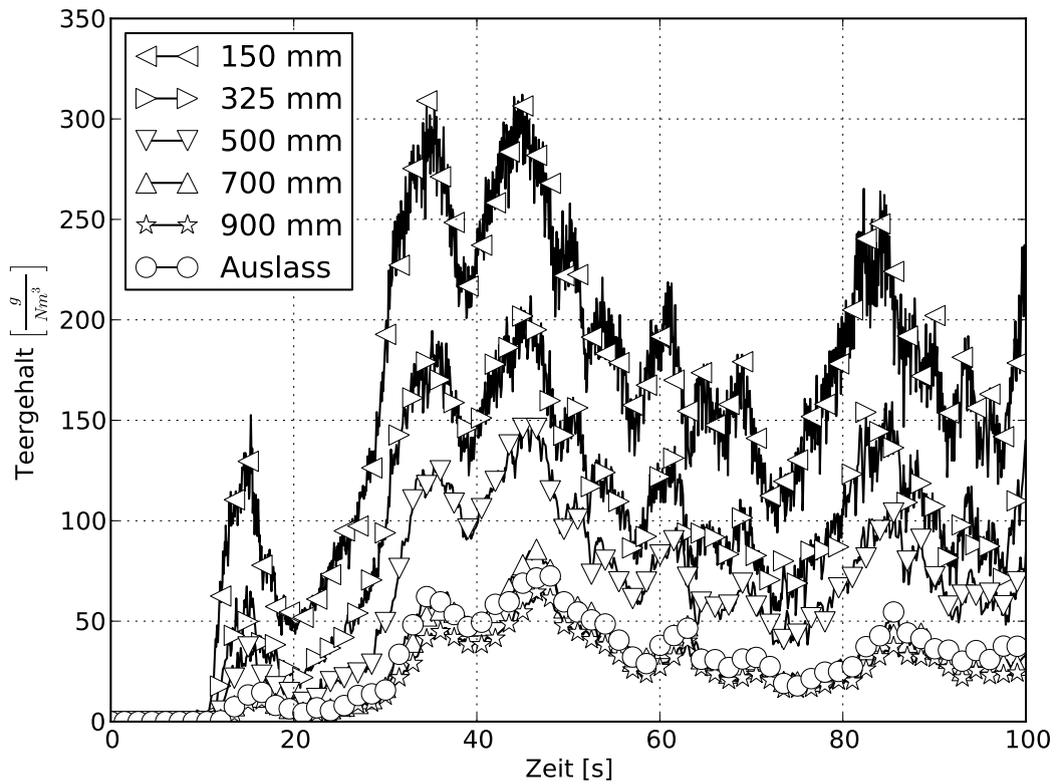


Abbildung 5.14: Teer 2 für verschiedene Höhenstufen im Reaktor über die Zeit (Fall 2)

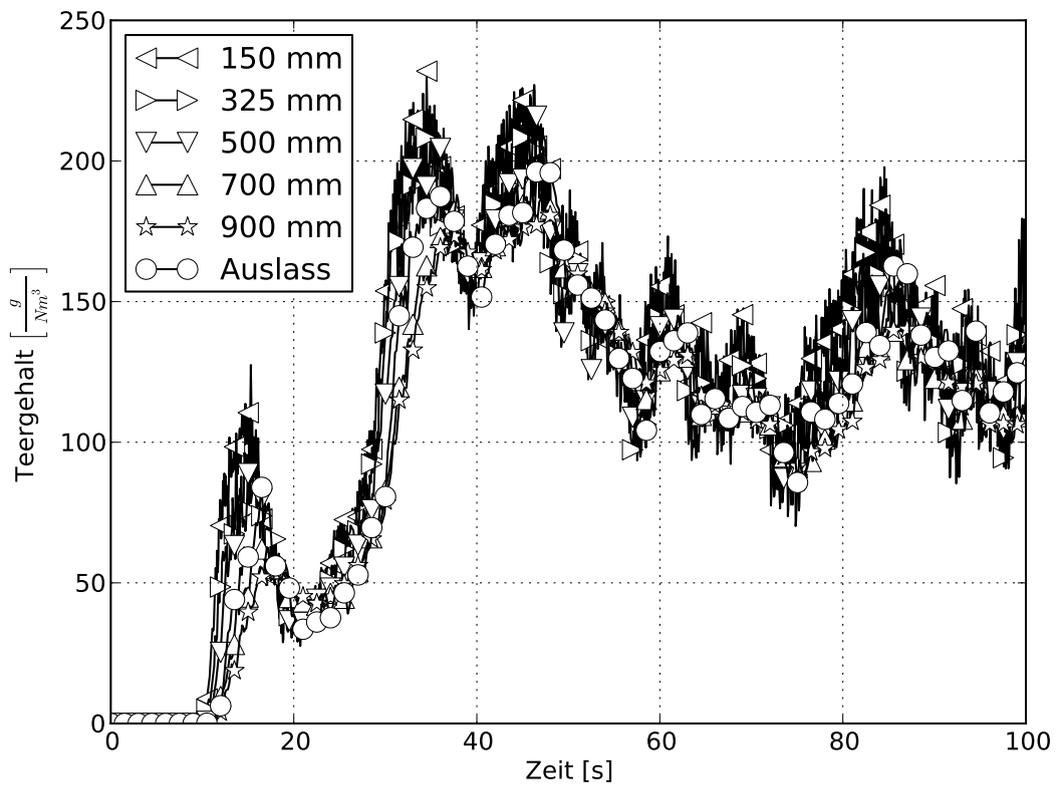
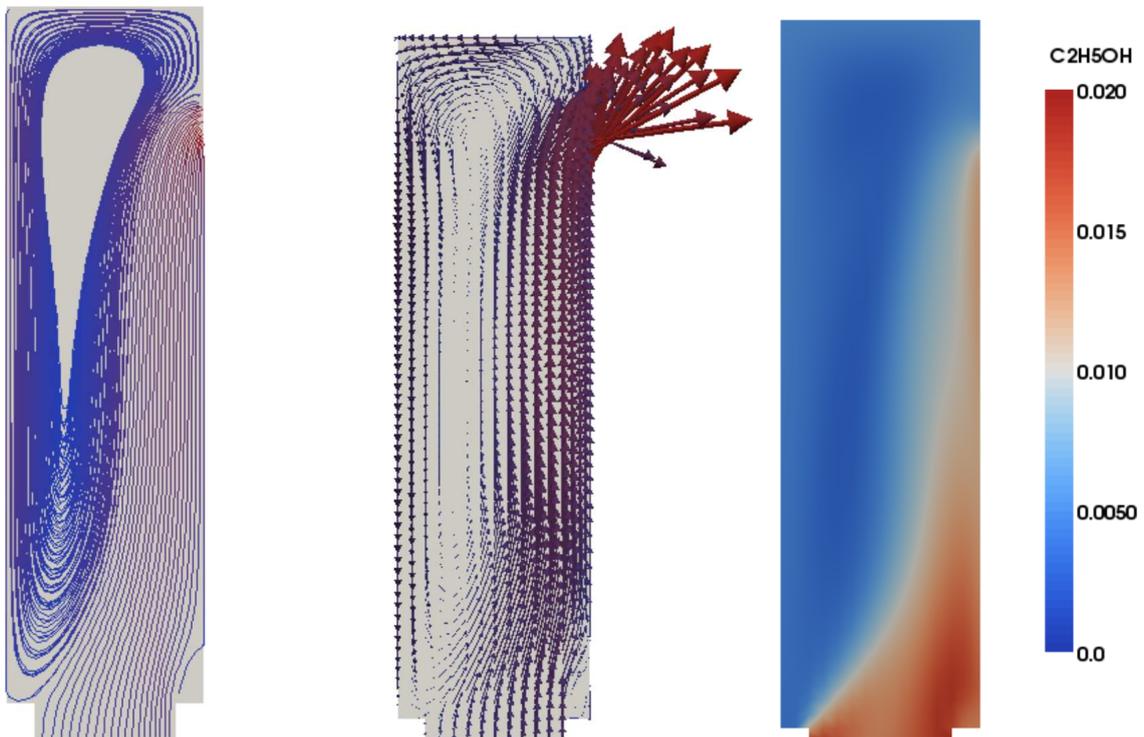


Abbildung 5.15: Teer 3 für verschiedene Höhenstufen im Reaktor über die Zeit (Fall 2)



**Abbildung 5.16:** *Stromlinien im oberen Reaktorteil*

**Abbildung 5.17:** *Richtung und Größe der Fluidströmung im oberen Reaktorteil*

**Abbildung 5.18:** *Massenanteil des ersten Teeres im oberen Reaktorteil*

Besonderes Augenmerk sollte in den folgenden Kapiteln der Instationarität der Holzmasse zukommen, da sie direkt mit der Produktgasmenge korrespondiert und somit in den im Folgenden diskutierten Vergleichsszenarien Auskunft über die Vergleichbarkeit der Ergebnisse verschiedener Szenarien gibt.

Simulationsfall	Temperaturen in K	Simulationsfall	Temperaturen in K
1	885	8	885
2	888	9	890
3	892	10	906
4	886	11	877
5	904	12	944
6	876	13	985
7	897	14	877

*Tabelle 5.4: Über die letzten zehn Simulationssekunden gemittelte Auslasstemperaturen aller Fälle*

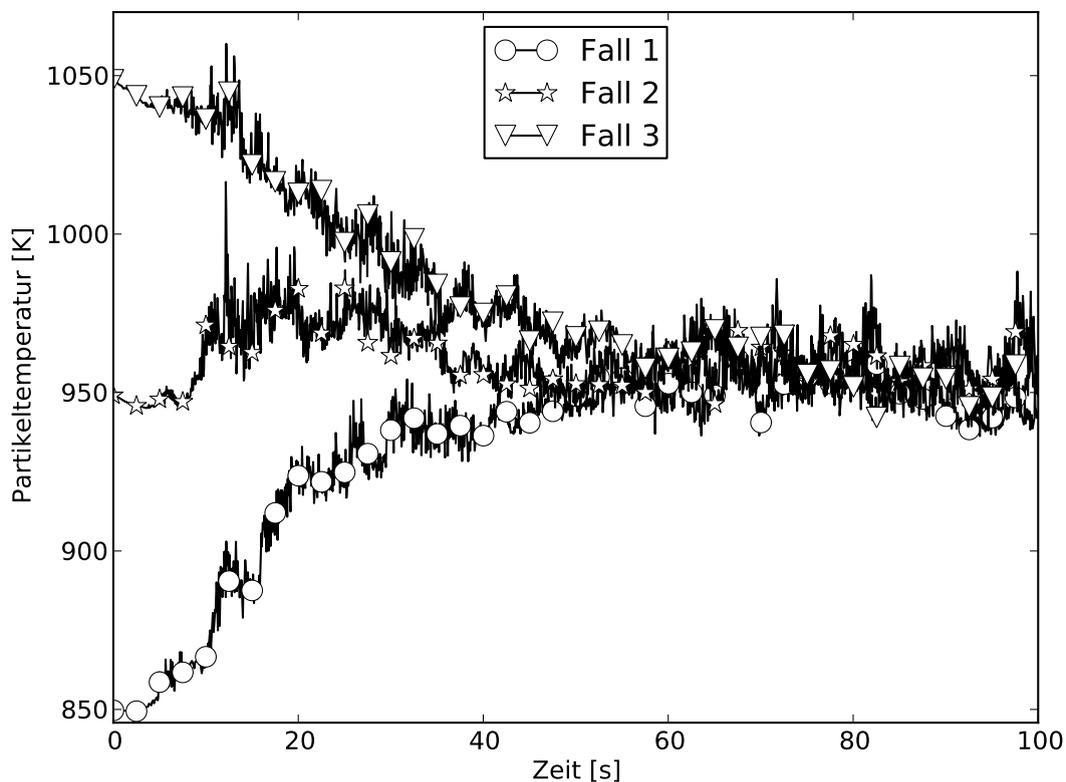
### 5.2.2 Thermische Dynamik der Wirbelschicht - Vergleich dreier Anfangstemperaturen der Festphase

In diesem Kapitel wird der Basisfall (Fall 2 in Tabelle 5.3) mit zwei bis auf die Starttemperatur der Festphase identischen Fällen verglichen (Fälle 1 und 3 in Tabelle 5.3). Die Anfangstemperatur der Festphase kann dabei als eine bezüglich der stationären Bettbedingungen abklingende Anfangsbedingung betrachtet werden, d.h., dass mit zunehmender Simulationsdauer der Einfluss der Starttemperatur abklingen sollte und die Ergebnisse der drei betrachteten Fälle auf identische Werte des stationären Betriebs zulaufen sollten. Somit lässt sich mit den in diesem Kapitel gezeigten Daten die zeitliche Dynamik des Systems beurteilen.

Abbildung 5.20 zeigt die Auslasstemperatur der drei Fälle. Deutlich ersichtlich ist, dass nach ca. 50 s alle drei Fälle Temperatursignale im gleichen Bereich aufweisen und somit die anfänglich unterschiedlichen Feststofftemperaturen abgeklungen sind. Abbildung 5.21 zeigt das zu Abbildung 5.20 korrespondierende CO-Signal am Auslass des Reaktors. Dabei ist ebenfalls ein deutliches Abklingen des Einflusses der Anfangsbedingungen nach ca. 50 s zu verzeichnen. Die relativ geringen Temperaturschwankungen nach 100 s in Abbildung 5.20 (ca. 20 K) gehen mit Schwankungen des CO-Stoffmengenanteils von ca. 5 % einher, was man durchaus als signifikant bezeichnen kann, da der Molenbruch des Kohlenmonoxids zwischen 20 und 25 % liegt und somit die Schwankungen ca. 20 bis 25 % des Gesamtsignals ausmachen. Die über die letzten zehn Sekunden gemittelten Auslasstemperaturen der drei Fälle sind in Tabel-

le 5.4 aufgelistet und zeigen nur schwache, tendenziell den Partikelstarttemperaturen folgenden Abweichungen untereinander.

Zusätzlich lässt sich aus den Abbildungen 5.20 und 5.21 die deutliche Kopplung der Reaktortemperatur und des Konzentrationsmaßes des Kohlenmonoxids erkennen. Bei höheren Temperaturen sind die Reaktionsraten der Kohlendioxidvergasung höher und damit auch die Kohlenmonoxidkonzentrationen im Auslassstrom. Anhand der über den Reaktorquerschnitt gemittelten Temperaturen auf einer Höhe von 0.146 m über dem Reaktorboden lässt sich gut erkennen, dass sowohl die Kohlenmonoxidkonzentration als auch die Temperatur im Auslass direkt an die Feststofftemperaturen gekoppelt sind (siehe Abbildung 5.19).



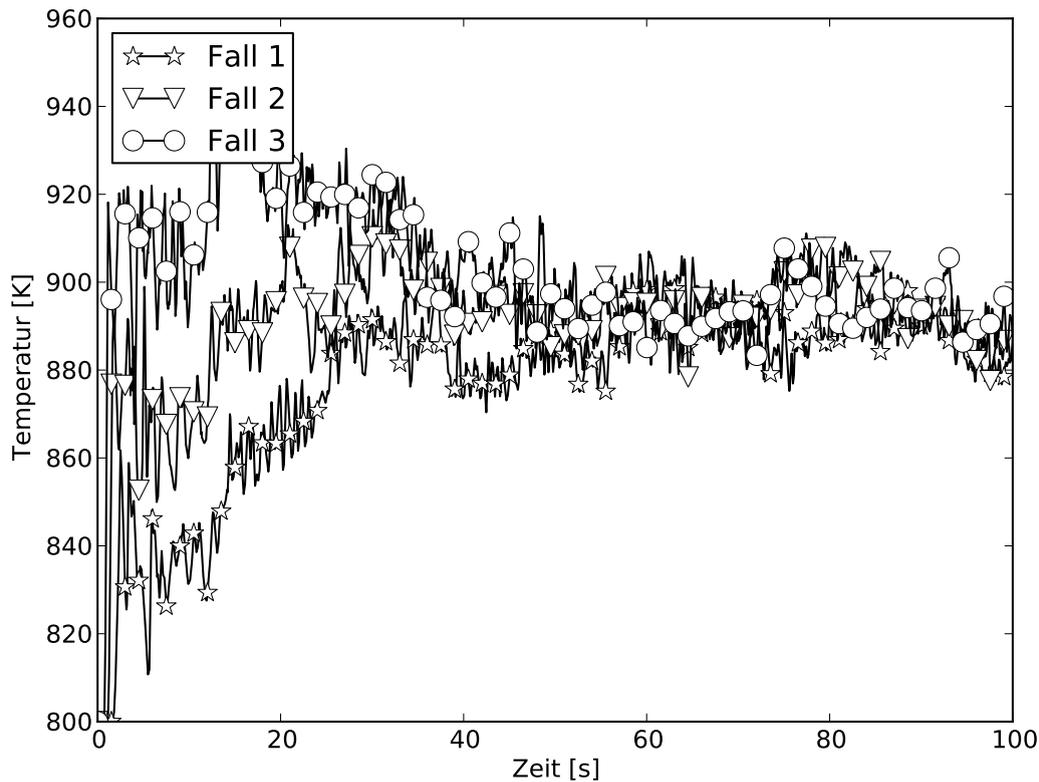
**Abbildung 5.19:** Über den Querschnitt massengemittelte Feststofftemperaturen über die Zeit aufgetragen (ca. 0.146 m über dem Reaktorboden, Fälle 1 bis 3)

Eine zeitliche Mittelung (der letzten 10 Simulationssekunden) der Auslasskonzentrationen aller relevanter Gaskomponenten der drei Fälle ist in Abbildung 5.22 dargestellt und zeigt die nach 100 s immer noch deutlichen Unterschiede in den Simulationsergebnissen. Nimmt man die Stickstoffkonzentrationen als Indikator für die Gesamtmenge an Produktgasen (Stickstoff wird ausschließlich über den Reaktorbo-

den in den Reaktor eingeschleust und unterliegt keinerlei Konversionsprozessen) ist in Abbildung 5.22 deutlich erkennbar, dass die Gesamtmenge an Produktgasen im Fall 2 kleiner ist als in den Fällen 1 und 3. Ein ähnliches Bild ergibt sich für die am Auslass feststellbaren Teerkonzentrationen. Die Fälle 1 und 3 zeigen gegenüber dem Fall 2 erheblich höhere Teerkonzentrationen. Ethin wird in dieser Arbeit ausschließlich über den homogenen Abbau der reaktiven Teere gebildet und kann daher als Indikator des homogenen Teerabbaus verwendet werden. Die Fälle 1 und 3 zeigen verglichen mit dem Fall 2 nicht nur höhere Teerkonzentrationen sondern auch höhere Konzentrationen des Ethins, d.h., dass der homogene Teerabbau in den Fällen 1 und 3 größere Umsätze generiert als im Fall 2. Selbiges gilt für die Methankonzentration, welche durch den heterogenen Teerabbau bzw. die primäre Pyrolyse erhöht wird. Der Stoffmengenanteil des Kohlenmonoxids ist im Fall 2 größer als in den Fällen 1 und 3 und deutet damit auf höhere Raten der Kohlendioxidvergasung bzw. der primären Pyrolyse hin. Der homogene Teerabbau ist wie oben schon aufgezeigt im Fall 2 kleiner als in den beiden anderen Fällen und kann damit nicht verantwortlich sein für die höheren Konzentration des Kohlenmonoxids im Auslass.

Aufgrund der zum Teil noch instationären Ergebnisse werden die zeitlichen Verläufe der Produktgase und Teere am Auslass des Reaktors für die Fälle 1 und 3 in den Abbildungen 5.25, 5.26, 5.27 und 5.28 hier aufgezeigt. Vergleicht man die Abbildungen 5.25, 5.10 und 5.26 so kann man schlussfolgern, dass je höher die Partikelstarttemperatur der Holzkohle ist, desto instationärer sieht der Verlauf der Produktkonzentrationen über die Zeit aus. Insbesondere die Kohlenmonoxidkonzentration ist ein guter Indikator. Die Teerkonzentration in den Abbildungen 5.27, 5.11 und 5.28 zeigen bei beiden vom Standardfall abweichenden Holzkohlestarttemperaturen eine weniger ausgeprägte Stationarität, was zum einen die obigen Darstellungen bestätigt und zum anderen die Wahl des Falles 2 als Standardfall untermauert.

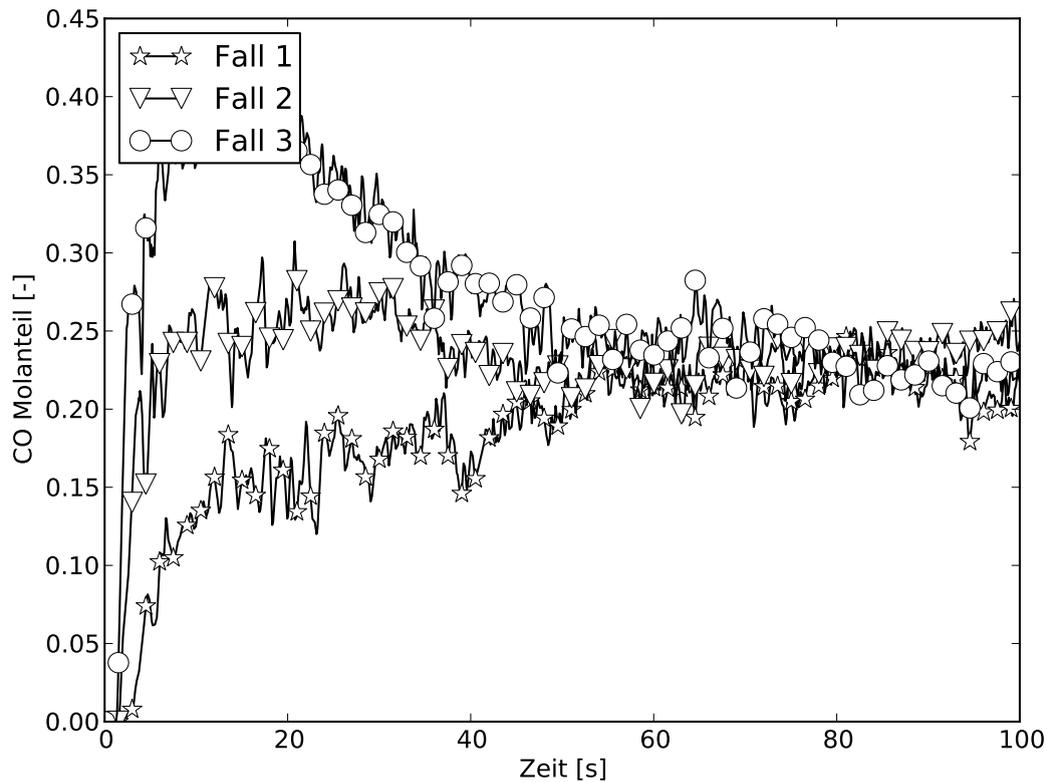
Eine mögliche Erklärung für die zum Teil sehr widersprüchlichen Ergebnisse in Abbildung 5.22 zeigen die Abbildungen 5.23 und 5.24. Abbildung 5.23 zeigt die Gesamtmasse des Holzes im Reaktor. Augenfällig ist der nicht mit der Starttemperatur der Festphase korrespondierende Verlauf der Holzmasse über die Zeit. Bei höherer Betttemperatur sollte aufgrund höherer Pyrolyseraten weniger Holz im Reaktor sein.



**Abbildung 5.20:** Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene initiale Betttemperaturen (Fälle 1 bis 3 aus Tabelle 5.3)

Dies trifft in Abbildung 5.23 sehr wohl für die Fälle 1 und 3 zu, allerdings lässt sich Fall 2 nicht entsprechend einordnen. Fall 2 zeigt nach 100 s höhere Werte der Holzgesamtmasse im Reaktor als die Fälle 1 und 3. Fall 1 zeigt aufgrund der niedrigeren Betttemperatur auch eine niedrigere Holzmasse im Reaktor als Fall 3, der von allen drei Fällen am wenigsten Holz im Reaktor aufweist. Fall 2 zeigt entgegen den Erwartungen die größte Holzmasse im Reaktor. Damit lässt sich allerdings Abbildung 5.22 besser deuten. Im Fall 2 wurde aufgrund der höheren Holzmasse im Reaktor offensichtlich weniger Holz pyrolysiert und es bildete sich entsprechend weniger Produktgas, was an den recht hohen Stickstoffkonzentrationen in Abbildung 5.22 gut sichtbar ist.

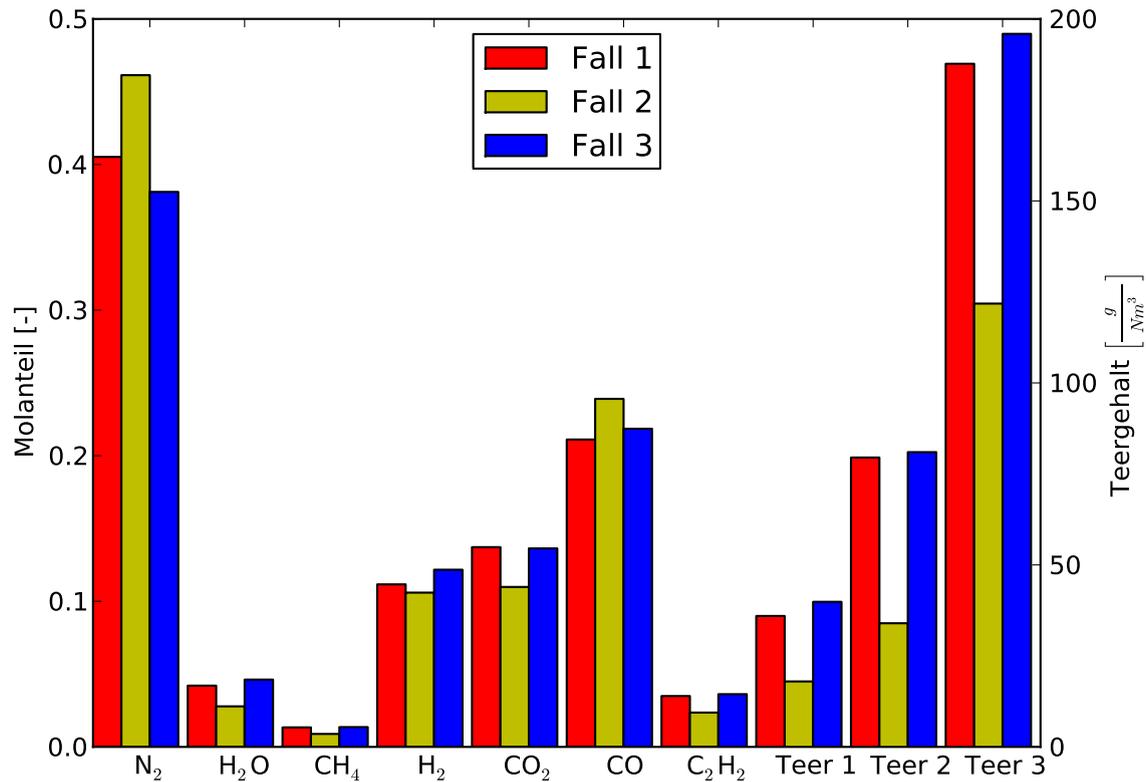
Insgesamt zeigen alle drei Fälle für die Gesamtholzmasse einen ausgeprägten transienten Verlauf. Selbiges gilt für die Holzkohlemasse im Reaktor, die für alle drei Fälle in Abbildung 5.24 aufgezeigt wird. In allen drei Fällen verringert sich die im Wirbelbett vorhandene Holzkohlemasse um ca. 8 %. Die Ergebnisse aus Abbildung 5.24 zeigen, dass weniger Holz im Reaktor (bei gleicher Holzzufuhr) mit mehr Holzkohle während



**Abbildung 5.21:** Auslasskonzentrationen des Kohlenmonoxids über die Zeit aufgetragen für die Fälle 1 bis 3

der transienten Phase einhergeht. Zusätzlich wird bei höheren Pyrolysetemperaturen weniger Holzkohle aus gegebener Holzmasse gebildet als bei niedrigeren Temperaturen. Ohne die Abhängigkeit der Produktanteile der primären Pyrolyse von der Temperatur (und bei vernachlässigbarer Vergasung) wäre aus Abbildung 5.23 zu erwarten gewesen, dass sich in Fall 3, gefolgt von Fall 1 und 2, die meiste Holzkohle gebildet hätte, da weniger Holz im Reaktor vorliegt und dementsprechend mehr Holzkohle gebildet wurde. Abbildung 5.24 zeigt allerdings aufgrund der genannten Abhängigkeiten fast das gegenteilige Ergebnis.

Die Instationarität einzelner Größen der Festphase bei scheinbarer Stationarität der Auslassgrößen wurde auch in dem dieser Arbeit ähnlichen Modell von Gerber u. a. (2010) für die Holzkohlemasse festgestellt, wobei in Gerber u. a. (2010) die Holzmasse im Reaktor stationär ist und nur die Holzkohlemasse noch transient ist. Der Grund für die Verläufe der Holzmasse in den Fällen 1 bis 3 in Abbildung 5.23 kann letztendlich nur in Verbindung mit der Fluidodynamik des Systems gesehen werden. Die dem Reaktor zugeführten Holzpartikel sind mit 4 mm recht groß und weisen



**Abbildung 5.22:** Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 1 bis 3

eine höhere Dichte als die Holzkohlepartikel auf, was bei einem fluidisierten System dazu führt, dass sich das Holz im unteren Teil des Reaktors sammelt. In dem hier betrachteten System reicht die Leerrohrgeschwindigkeit der Wirbelschicht nicht aus, um die Holzpartikel in ihrem anfänglichen Zustand zu fluidisieren, d.h. dass die Holzpartikel am Boden des Reaktors liegen bleiben. Die Frage wo genau die Partikel zum Liegen kommen, hängt maßgeblich davon ab, wie stark der Reaktor im unteren Bereich Blasen bildet bzw. fluidisiert ist, was wiederum u.a. von der Pyrolyserate abhängig ist, da das bei der Pyrolyse entstehende Produktgas maßgeblichen Anteil am Gesamtgasstrom im Reaktor hat.

Gelangt ein Holzpartikel nach der Zuführung in den Reaktor zum Beispiel in den Nachlauf einer aufsteigenden Blase so wird es tendenziell leichter den Boden des Reaktors erreichen, als wenn das Holzpartikel durch eine Blase angehoben wird. Dadurch wird auch die radiale Verteilung des Holzes auf dem Reaktorboden beeinflusst. Die radiale Verteilung des im Vergleich zur umgebenden Holzkohle kalten Holzes beeinflusst die Pyrolyserate des Holzes, da nicht beliebig große Wärmeströme innerhalb

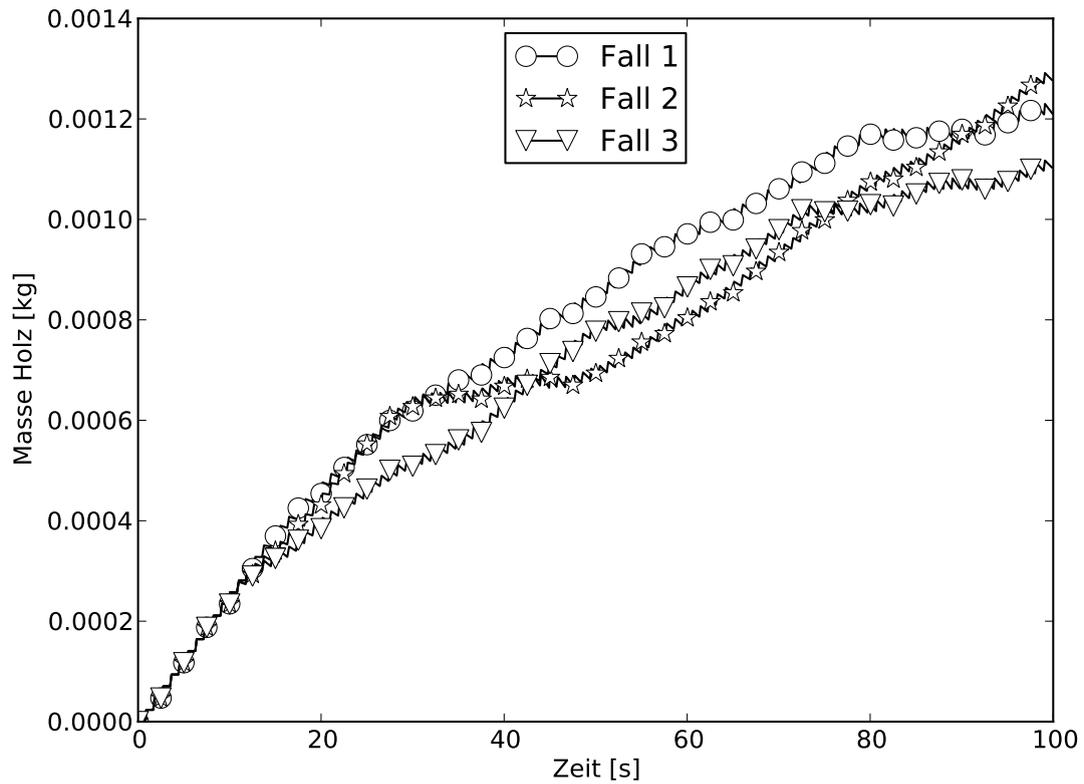


Abbildung 5.23: Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 1 bis 3)

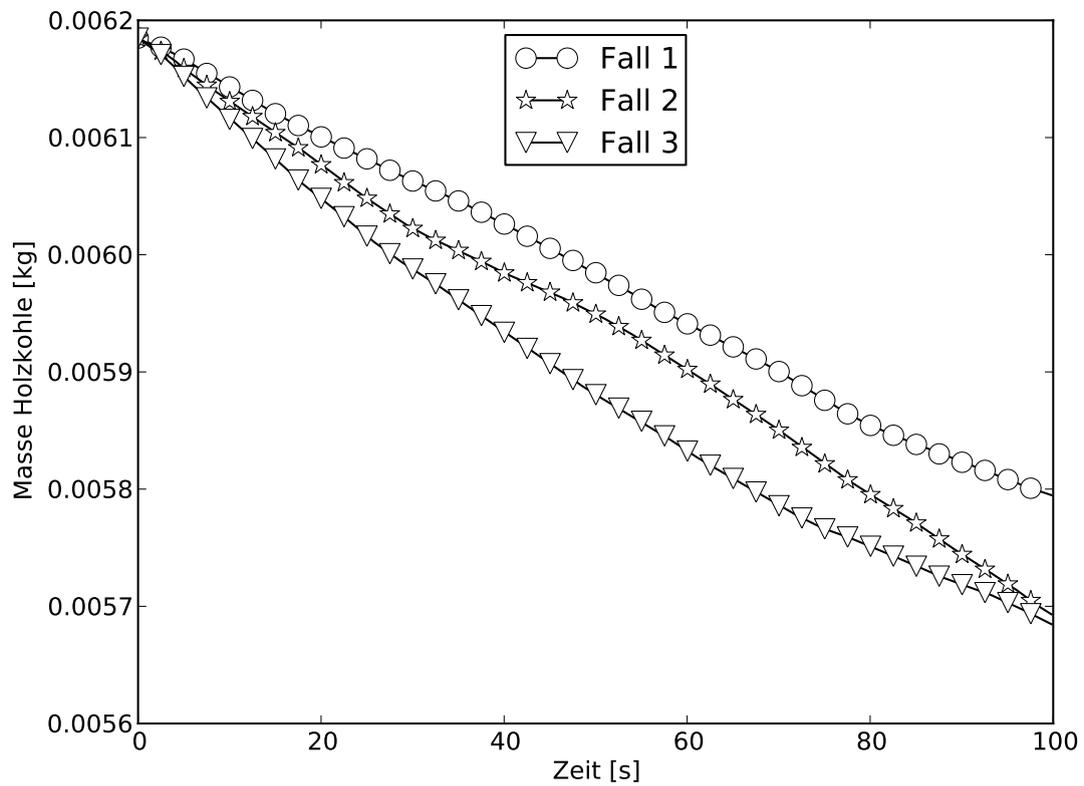


Abbildung 5.24: Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 1 bis 3)

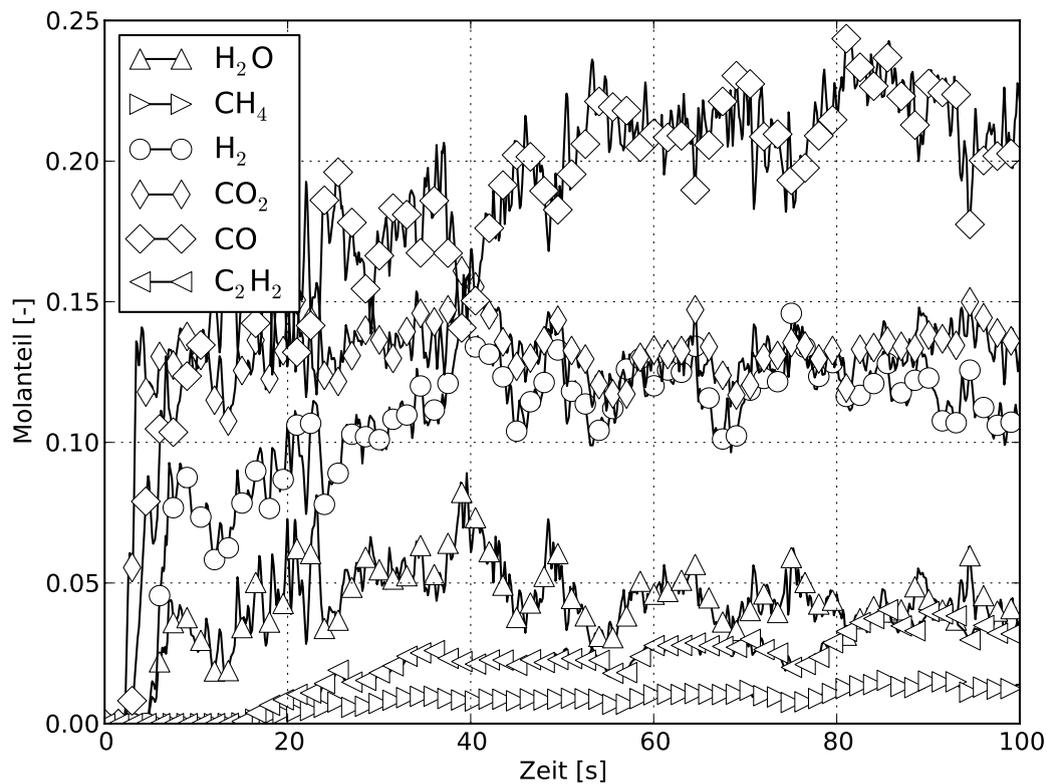


Abbildung 5.25: Zeitlicher Verlauf der Produktgase am Auslass (Fall 1)

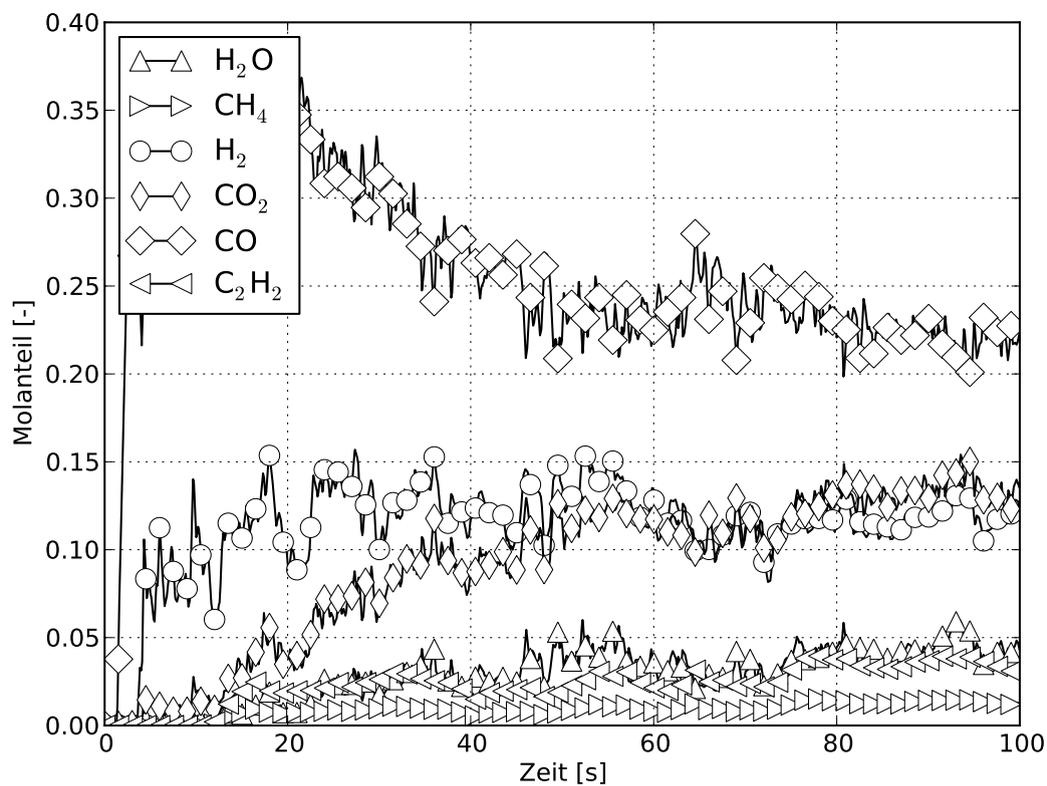


Abbildung 5.26: Zeitlicher Verlauf der Produktgase am Auslass (Fall 3)

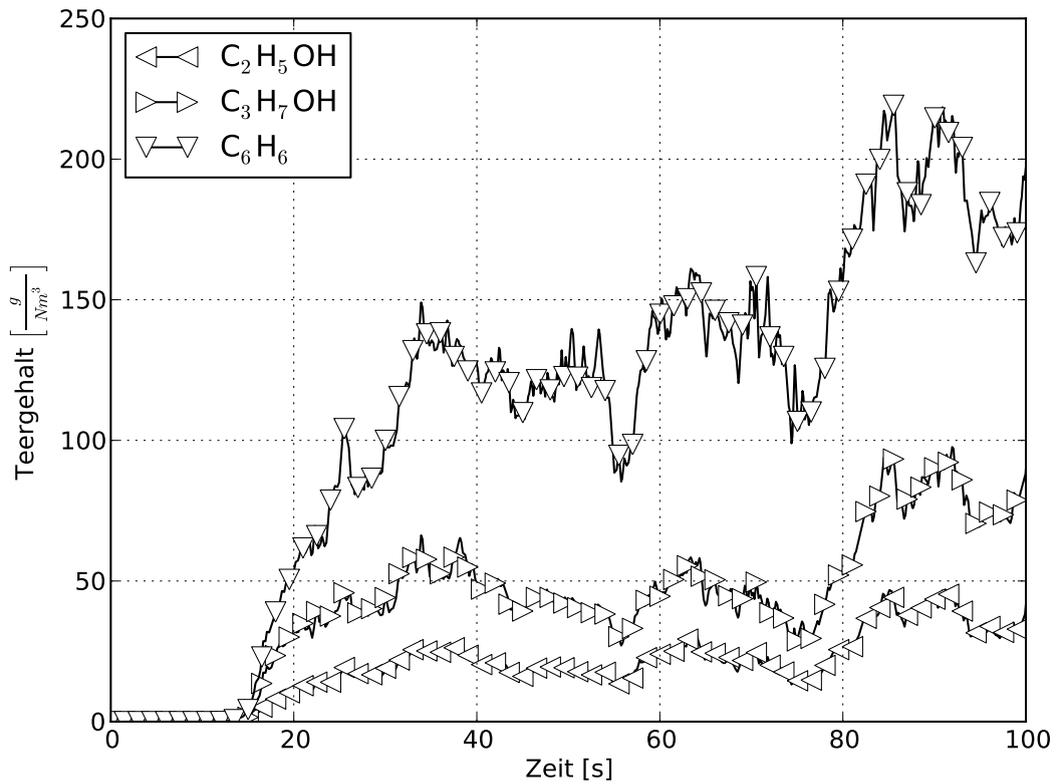


Abbildung 5.27: Zeitlicher Verlauf der Teere am Auslass (Fall 1)

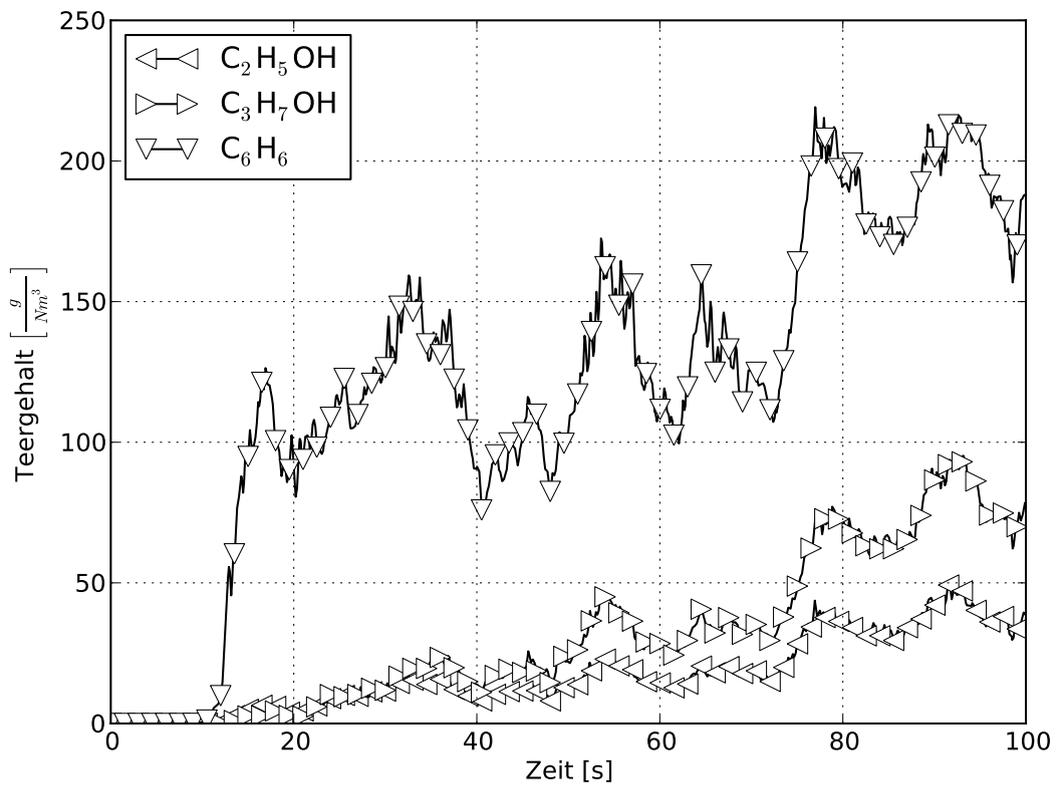
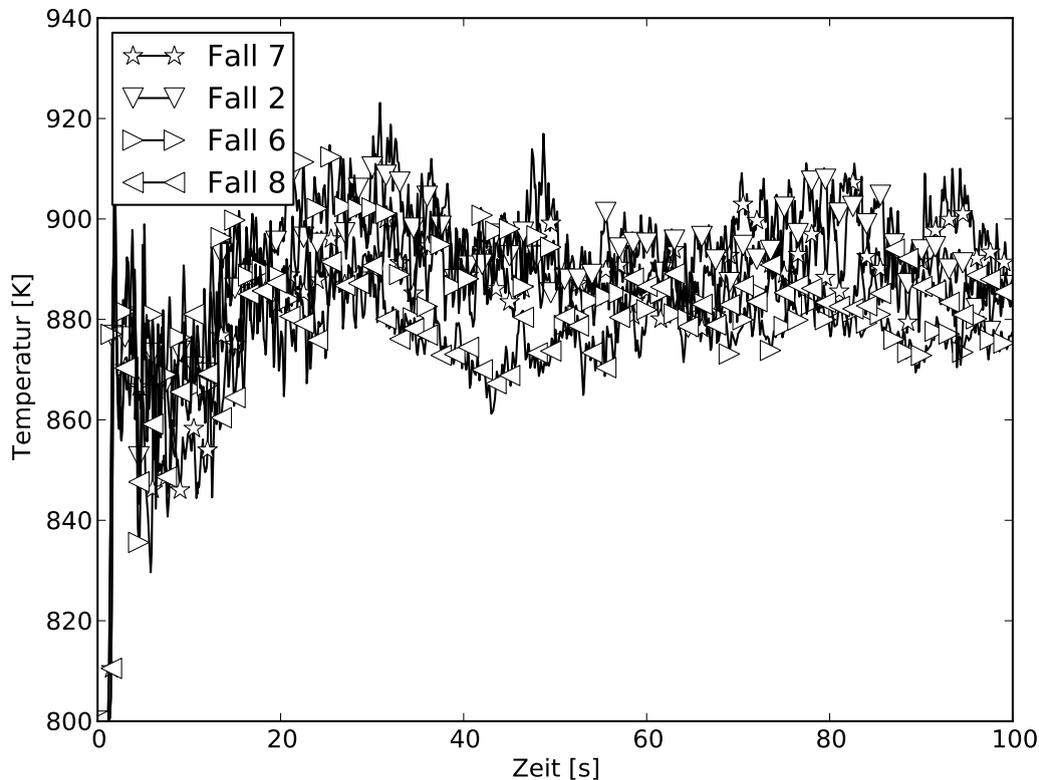


Abbildung 5.28: Zeitlicher Verlauf der Teere am Auslass (Fall 3)

des Reaktors zur Verfügung stehen und somit eine hohe Konzentration des Holzes an einer Stelle tendenziell lokal niedrigere Betttemperaturen und somit auch niedrige Pyrolyseraten hervorruft.

### 5.2.3 Variation der Holzzufuhr

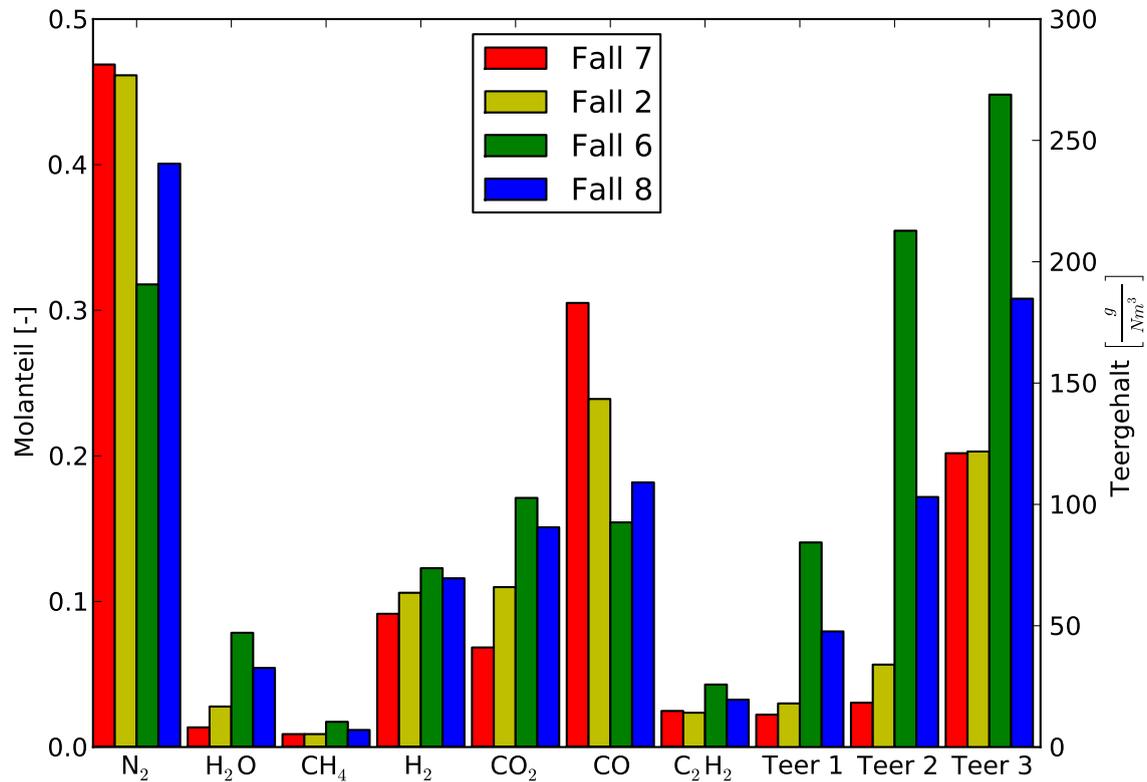


**Abbildung 5.29:** Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene Holzmassenströme (Fälle 2 und 6 bis 8 aus Tabelle 5.3)

Die Fälle 2, 6, 7 und 8 betrachten das Basisszenario mit drei davon abweichenden Massenströmen des zugeführten Holzes entsprechend den Darstellungen in Tabelle 5.3. Der Massenstrom des Holzes wurde bezogen auf den Fall 2 (Vergleichsszenario) halbiert (Fall 7), verdoppelt (Fall 8) und um 50 % erhöht (Fall 6). Abbildung 5.29 zeigt die Temperatur am Auslass des Reaktors für die vier in diesem Kapitel diskutierten Fälle. Die Auslasstemperatur aller vier Fälle ist relativ unabhängig vom Holzmassenstrom. Die zeitlich gemittelten Auslasstemperaturen sind in Tabelle 5.4 aufgelistet. Für die Fälle 7, 2 und 6 führt ein höherer Holzmassenstrom zu niedrigeren Auslasstemperaturen. Der Fall 8 (max. Holzeintrag) bricht aus diesem Trend aus und hat ähnlich hohe Auslasstemperaturen wie der Fall 2.

Die Auslasskonzentrationen der vier Fälle sind vergleichend in Abbildung 5.30 dargestellt. Es ergibt sich keine lineare Abhängigkeit der Produktgasanteile vom Holzmassenstrom, was allerdings auch nicht zu erwarten ist, wenn man sich die Entwicklung

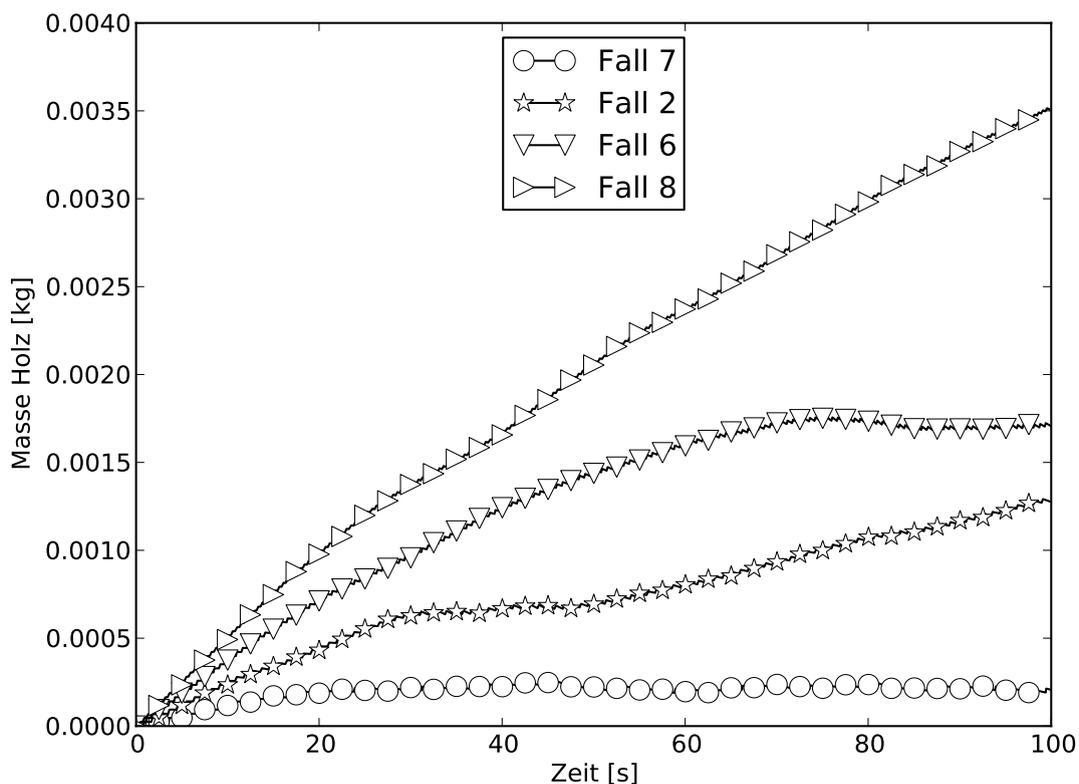
der Holz- und Holzkohlemasse in den Abbildungen 5.31 und 5.32 anschaut, da diese wie in der letzten Falldiskussion keinen stationären Charakter haben. Lediglich die Fälle 6 und 8 zeigen bezüglich der Entwicklung der Holzkohlemasse einen stationären Verlauf. In diesen beiden Fällen ist davon auszugehen, dass der größere Holzmassenstrom zur Stationarität der Holzkohlemasse führt.



**Abbildung 5.30:** Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2 und 6 bis 8

Es wird in den Fällen 6 und 8 so viel Holzkohle gebildet, dass der Holzkohleabbau durch die heterogenen Reaktionen ausgeglichen werden kann. Ein qualitativer Aspekt der auch experimentell bestätigt werden kann. Zusätzlich ist damit zu rechnen, dass höhere Massenströme des Holzes im Einlass des Reaktors zu lokal kleineren Pyrolysetemperaturen führen und somit entsprechend der verwendeten Kinetiken für die primäre Pyrolyse mehr Holzkohle pro umgesetzter Masseneinheit des Holzes entsteht. In den Fällen 2 und 7 wird so offensichtlich (siehe Abbildung 5.32) deutlich weniger Holzkohle gebildet, was dazu führt, dass die gesamte im Reaktor vorhandene Holzkohlemasse mehr oder weniger stetig abnimmt. Die Holzmasse im Reaktor ist für den Fall 7 (der Fall mit dem kleinsten Holzmassenstrom) als statio-

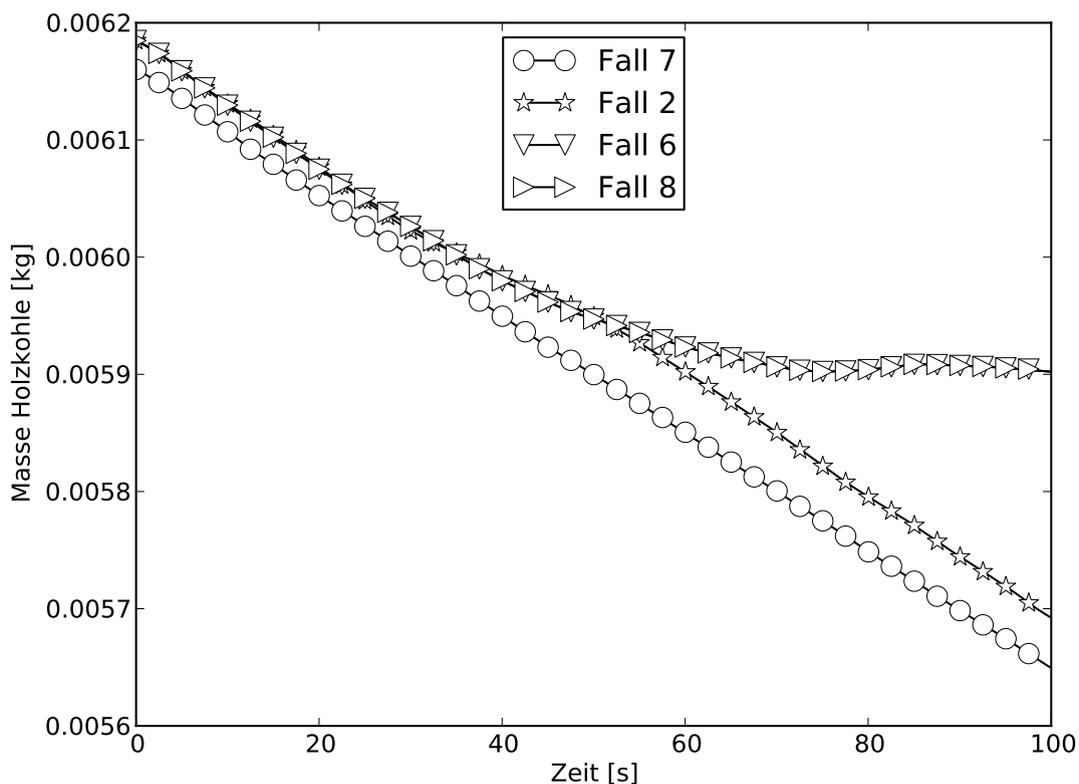
när zu betrachten. Dies verstärkt den Eindruck des vorangegangenen Kapitels, dass der verfügbare Wärmestrom zur Aufheizung des Holzes stark limitiert ist und somit kleine Massenströme des Holzes schneller in einen stationären Verlauf der Holzmasse laufen als größere (bzgl. der Holzkohlemasse ergab sich das gegenteilige Bild, s.o.). Der Fall 8 ist nach 100 s offensichtlich noch weit entfernt von einem stationären Wert der Holzmasse im Reaktor. Eine instationäre Entwicklung der Holzkohlemasse bei gleichzeitiger Stationarität der Holzmasse im Reaktor wurde auch in der Arbeit von Gerber u. a. (2010) festgestellt. Sie stellt also keine Besonderheit der Euler-Lagrange-Modellierung dar.



*Abbildung 5.31: Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2, 6, 7 und 8)*

Die Ergebnisse der Auslasskonzentrationen in Abbildung 5.30 sollten wie im letzten Kapitel nur im Zusammenhang mit der Entwicklung der Holzmasse im Reaktor betrachtet werden, da, solange die Holzmasse sich nicht eingeepegelt hat, irreführende Zahlenvergleiche entstehen können. Die Erwartungen bzgl. der Auslasskonzentration des Stickstoffes ist, dass der Stickstoffanteil stetig sinken sollte mit größer werdendem Holzmassenstrom (bei gleicher Reaktortemperatur), da immer mehr Produktgas entstehen kann. Abbildung 5.30 zeigt dies tendenziell. Allerdings sollte dann der

Fall 8 niedrigere Stickstoffkonzentrationen liefern als alle drei anderen Fälle. Da dies nicht der Fall ist (Fall 8 zeigt höhere Stickstoffkonzentrationen als Fall 6), deutet dies darauf hin, dass weitere Abhängigkeiten existieren. Da Wasser innerhalb des Reaktors ausschließlich durch die Feuchte innerhalb des Holzes eingetragen wird, kann man anhand von Abbildung 5.30 erkennen, dass für die Fälle 7, 2 und 6 ein höherer Massenstrom des Holzes auch zu größeren Wasseranteilen in der Gasphase führt. Im Fall 8 ist der Wasseranteil im Auslass deutlich kleiner als in den anderen Fällen und liegt somit entweder in Form von im Holz gebundener Feuchte vor oder wurde umgesetzt in Wasserstoff und Kohlenmonoxid (durch Vergasungsreaktionen). Allerdings deuten die Ergebnisse der Wasserstoff- und Kohlenmonoxidkonzentrationen in Abbildung 5.30 darauf hin, dass das Holz im Fall 8 langsamer pyrolysiert wird (bezogen auf den gesamten Holzmassenstrom). Eine Annahme, die auch durch die hohen Werte des im Reaktor vorhandenen Holzes in Abbildung 5.31 unterstützt wird.



**Abbildung 5.32:** Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2, 6, 7 und 8)

Die Analyse der zeitlichen Verläufe der Teerkonzentrationen der hier betrachteten vier Fälle zeigt recht deutliche Unterschiede. Der Fall 7 zeigt eine sehr frühe Sta-

tionarität (ab ca. 30 s) sowohl der Teerkonzentration als auch der Produktgase (Abbildungen 5.36 und 5.35). Die abbaubaren Teere werden zu großen Teilen innerhalb des Reaktors zersetzt, was umso erstaunlicher ist, wenn man sich Tabelle 3.8 ins Gedächtnis ruft. Der inerte Teer hat die mit Abstand größten Konzentrationen, obwohl nur ca. 17 % des bei der primären Pyrolyse entstehenden Teeres als inert angenommen wurde. Auffällig ist zudem, dass beide reaktiven Teere zu annähernd gleichen Konzentrationen am Auslass vorliegen (beide hatten unterschiedliche Anteile an der Gesamtteerproduktion und unterschiedliche Abbaukinetiken). Die Produktgaskonzentrationen sind im Fall 7 insbesondere für Kohlenmonoxid signifikant höher als in vielen anderen Vergleichsfällen (zum Beispiel ca. 20 % mehr CO als im Standardfall). Zudem sind auch die Schwankungen innerhalb der Produktgaskonzentrationen kleiner als im Vergleichsfall. Letztendlich lassen die Ergebnisse nur den Schluss zu, dass die Aufwärmung des in den Reaktor eintretenden Holzes durch den kleineren Holzmassenstrom deutlich verbessert ist und es zu höheren Temperaturen im Bett kommt (siehe auch Tabelle 5.4). Die Fälle 6 und 8 zeigen in den Abbildungen 5.34, 5.33, 5.38 und 5.37 zum Teil stark steigende Konzentrationen der Teere, wobei Fall 8, wie bereits angedeutet, nicht die erwartete Steigerung im Vergleich zu Fall 6 zeigt, da der zur Aufheizung notwendige Wärmestrom nicht zur Verfügung steht. Fall 8 zeigt, entgegen der Ergebnisse des Falles 6, bis zum Ende der Simulationszeit steigende Produktgaskonzentration. Offensichtlich ist Fall 8 also weiter vom stationären Arbeitspunkt entfernt als Fall 6. Der homogene Teerabbau in Fall 8 ist ebenfalls zum Ende hin einer stetigen Steigerung unterworfen, was mit der langsamer anlaufenden primären Pyrolyse und der steigenden Betttemperatur zusammenhängt (siehe Abbildung 5.39). Die zeitlichen Verläufe unterstützen also im Wesentlichen die obigen Darstellungen des vergleichenden Balkendiagramms (Abbildung 5.30).

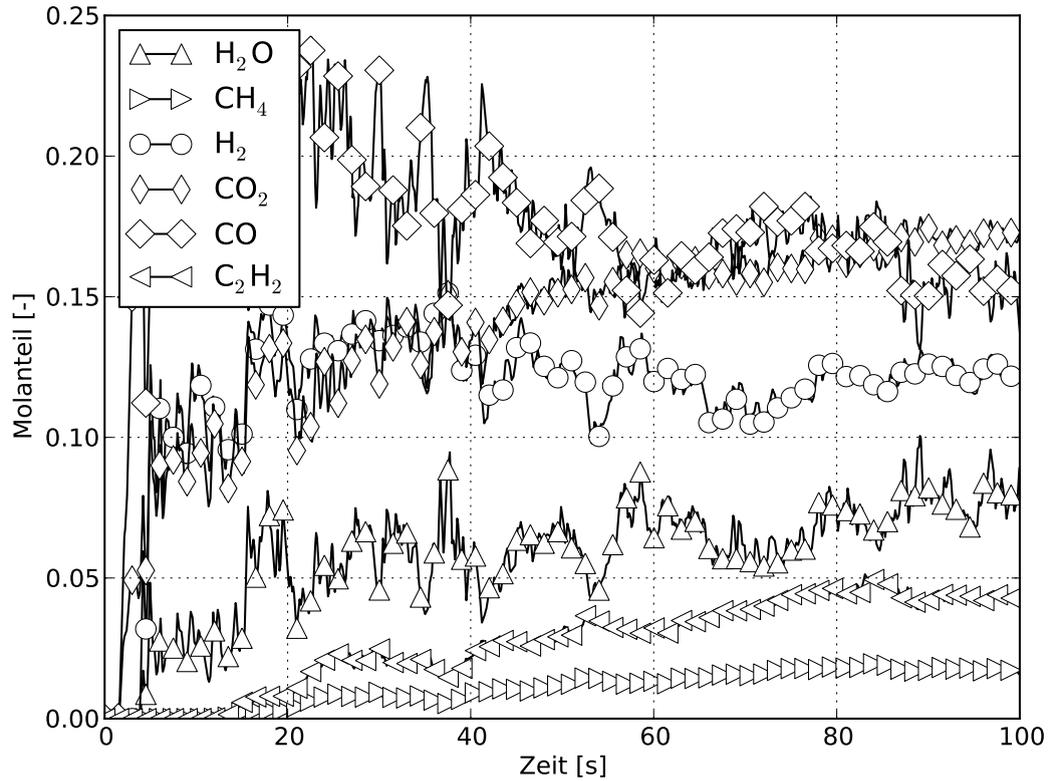


Abbildung 5.33: Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Rektorauslass (Fall 6)

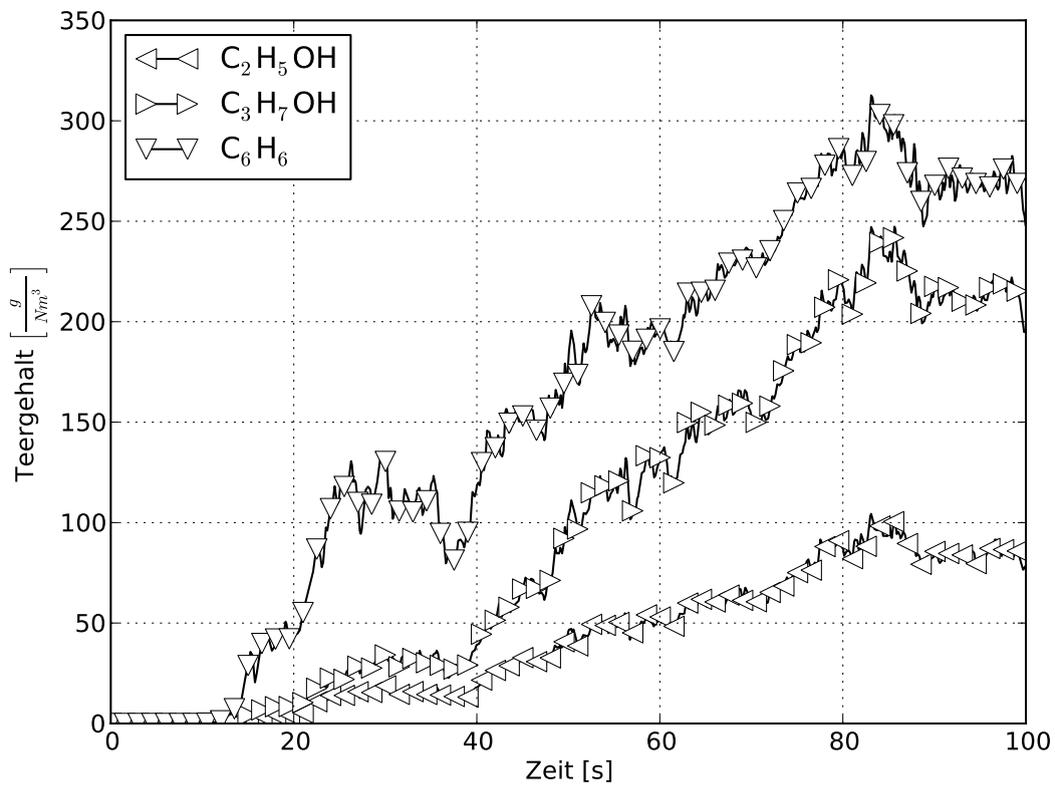


Abbildung 5.34: Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Rektorauslass (Fall 6)

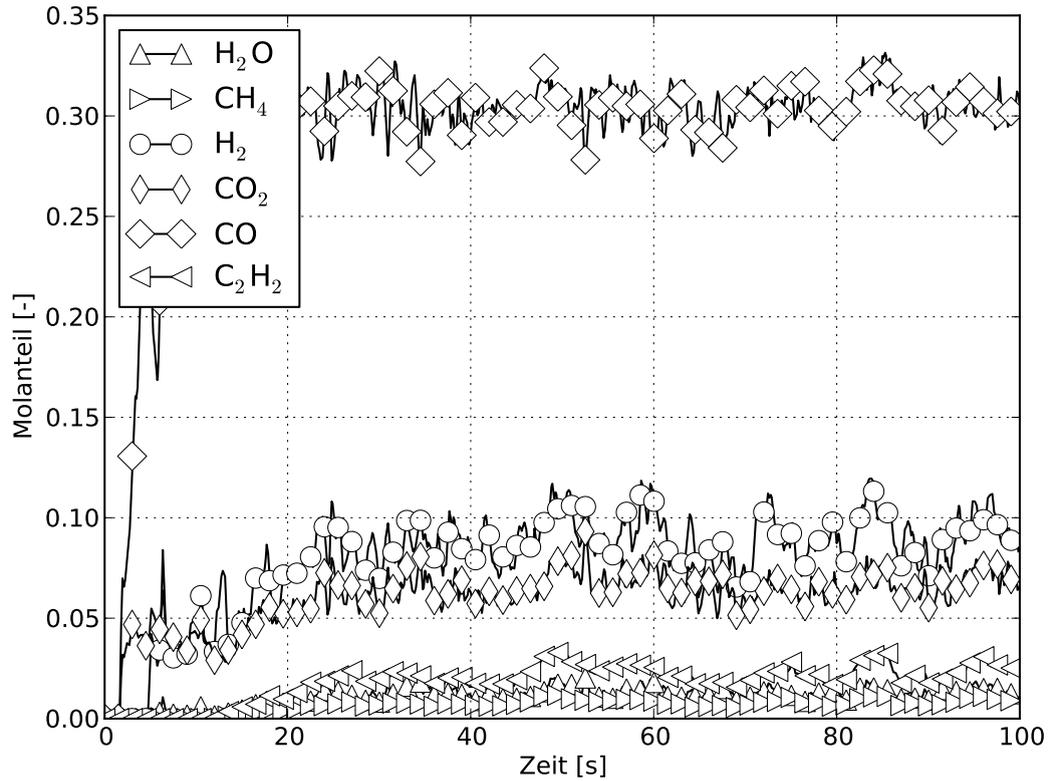


Abbildung 5.35: Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Rektorauslass (Fall 7)

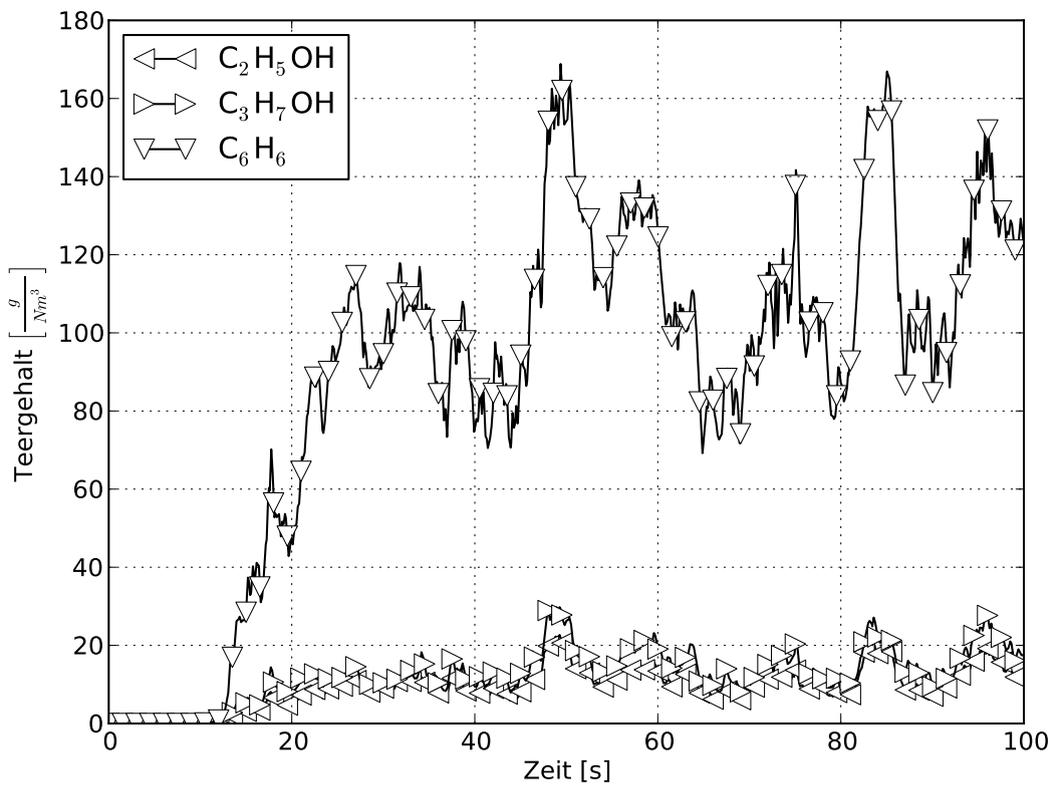


Abbildung 5.36: Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Rektorauslass (Fall 7)

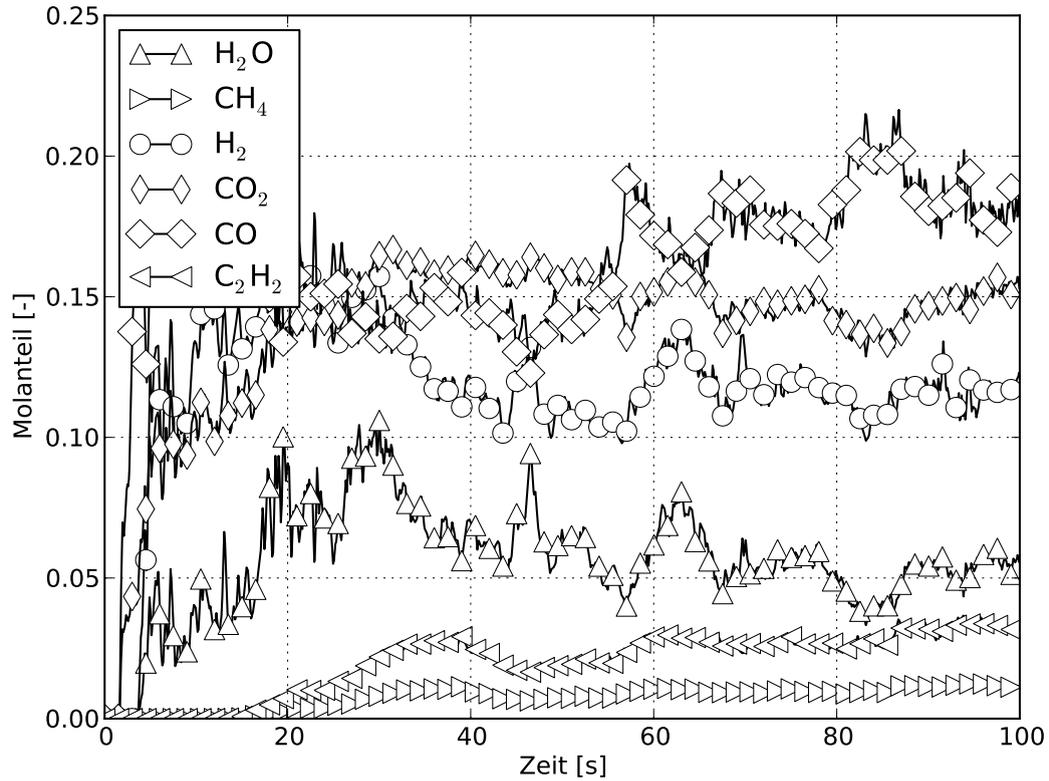


Abbildung 5.37: Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Rektorauslass (Fall 8)

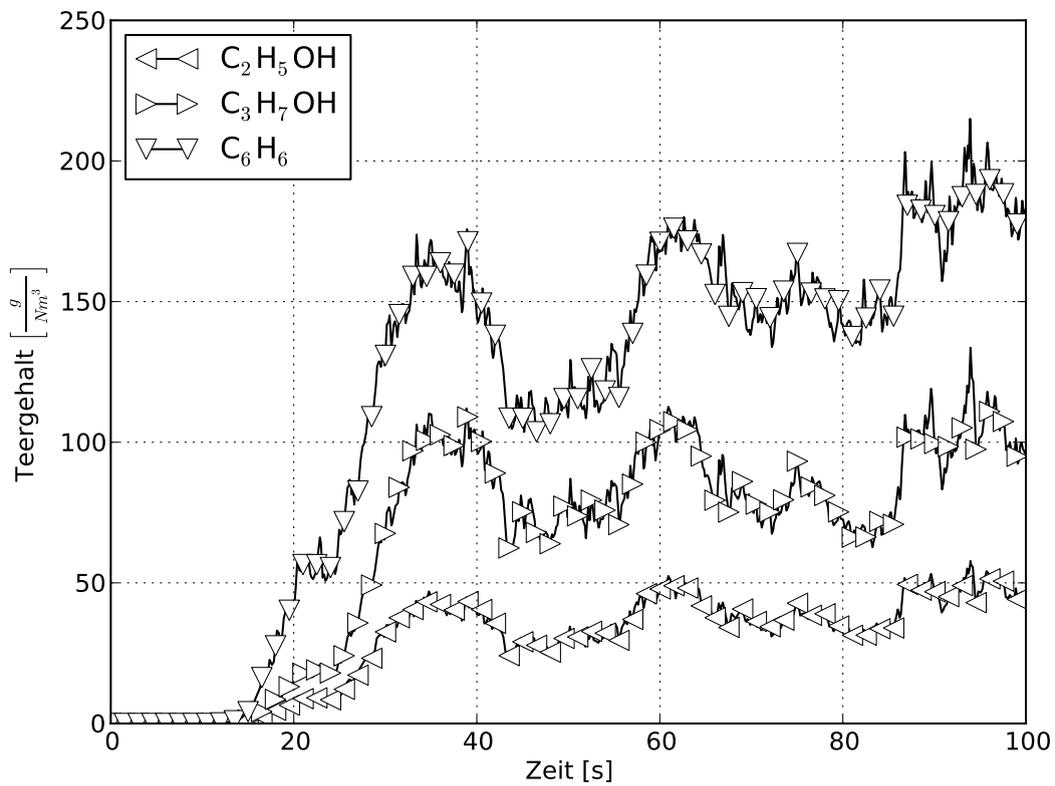
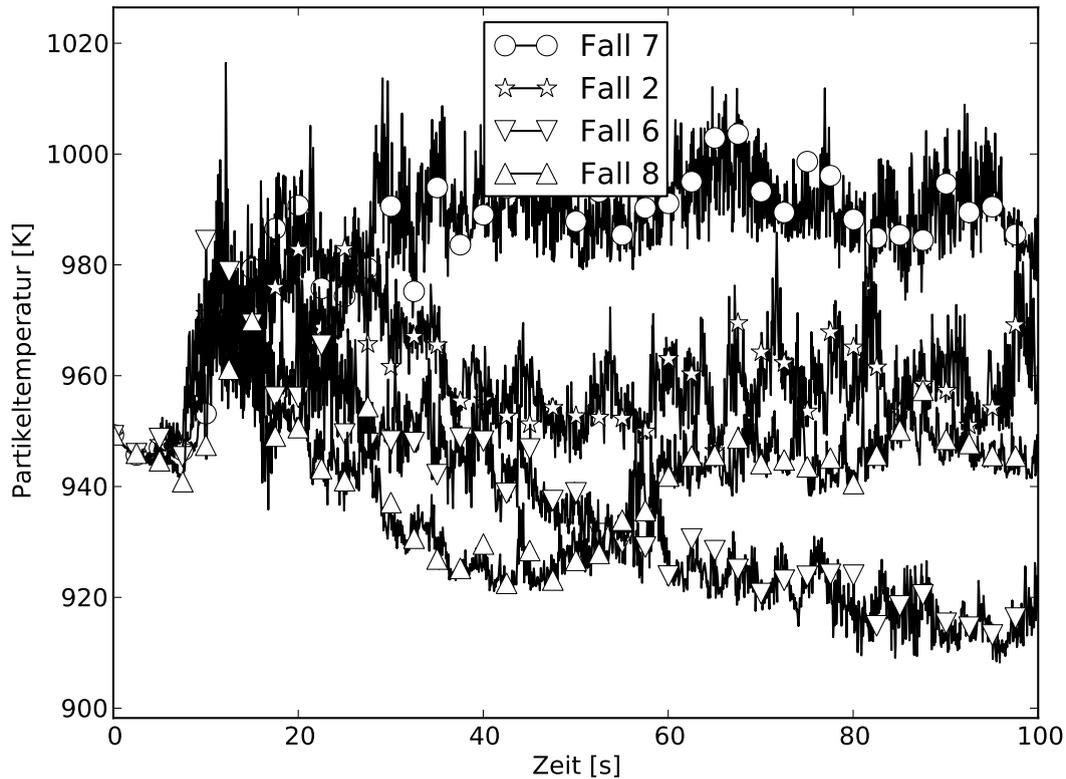


Abbildung 5.38: Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Rektorauslass (Fall 8)



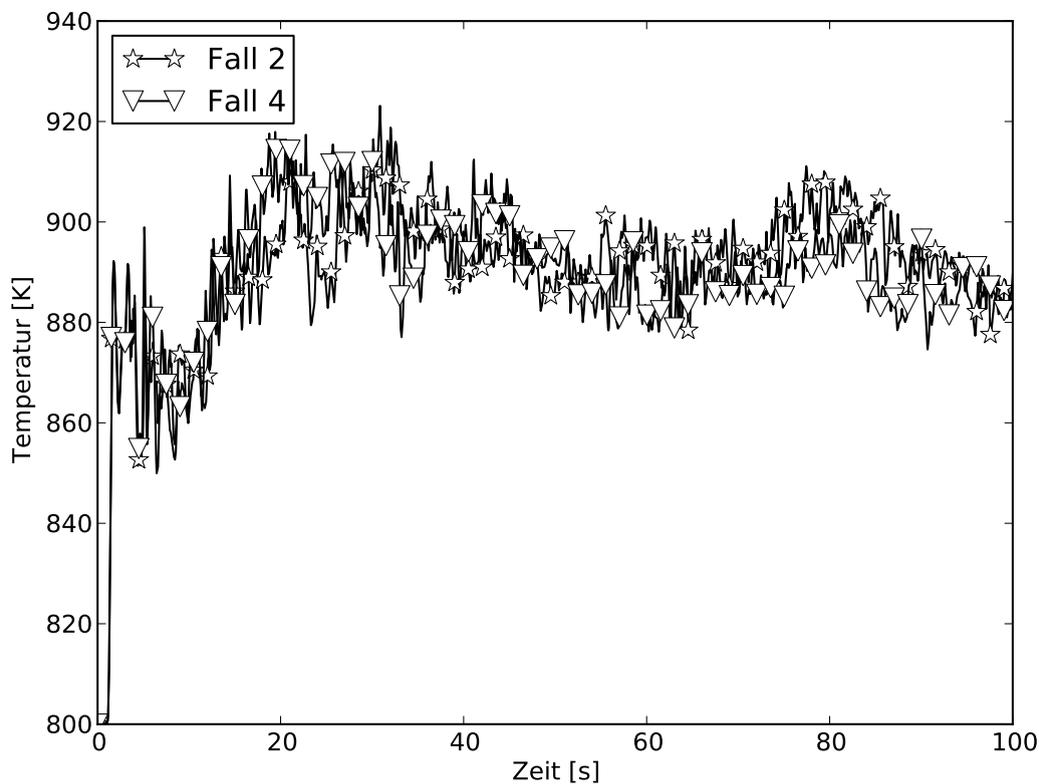
**Abbildung 5.39:** Über den Querschnitt massengemittelte Feststofftemperaturen über die Zeit aufgetragen (ca. 0.146 m über dem Reaktorboden, Fälle 2, 6, 7 und 8)

#### 5.2.4 Einfluss eines verringerten Inertteeranteils

Das in dieser Arbeit verwendete Abbaumodell für die bei der primären Pyrolyse entstehenden Teere stammt aus der Arbeit von Rath u. Staudinger (2001) und beinhaltet einen in der vorliegenden Arbeit festgelegten Anteil an inertem Teer. Der Begriff "inert" bedeutet allerdings "inert unter den gewählten Bedingungen" und nicht, dass der Teer tatsächlich nicht reaktiv ist. Bei höheren Temperaturen bzw. Verweilzeiten ist davon auszugehen, dass jegliche organische Verbindung einem Abbauprozess unterworfen sein wird. Um eine Einschätzung der Modellgültigkeit bzgl. des Teerabbaumodells geben zu können, wurde hier (Fall 4) der Anteil des inertes Teers auf ein Zehntel des ursprünglichen Wertes reduziert (und die Anteile der reaktiven Teere entsprechend erhöht). Abbildung 5.40 zeigt die Temperatur von Fall 4 im Vergleich mit dem Standardfall. Beide Signale sind fast deckungsgleich, trotz des starken Eingriffes in die Zusammensetzung des bei der primären Pyrolyse entstehenden Teers. Die gemittelten Temperaturen in Tabelle 5.4 sind praktisch identisch. Allerdings sollte

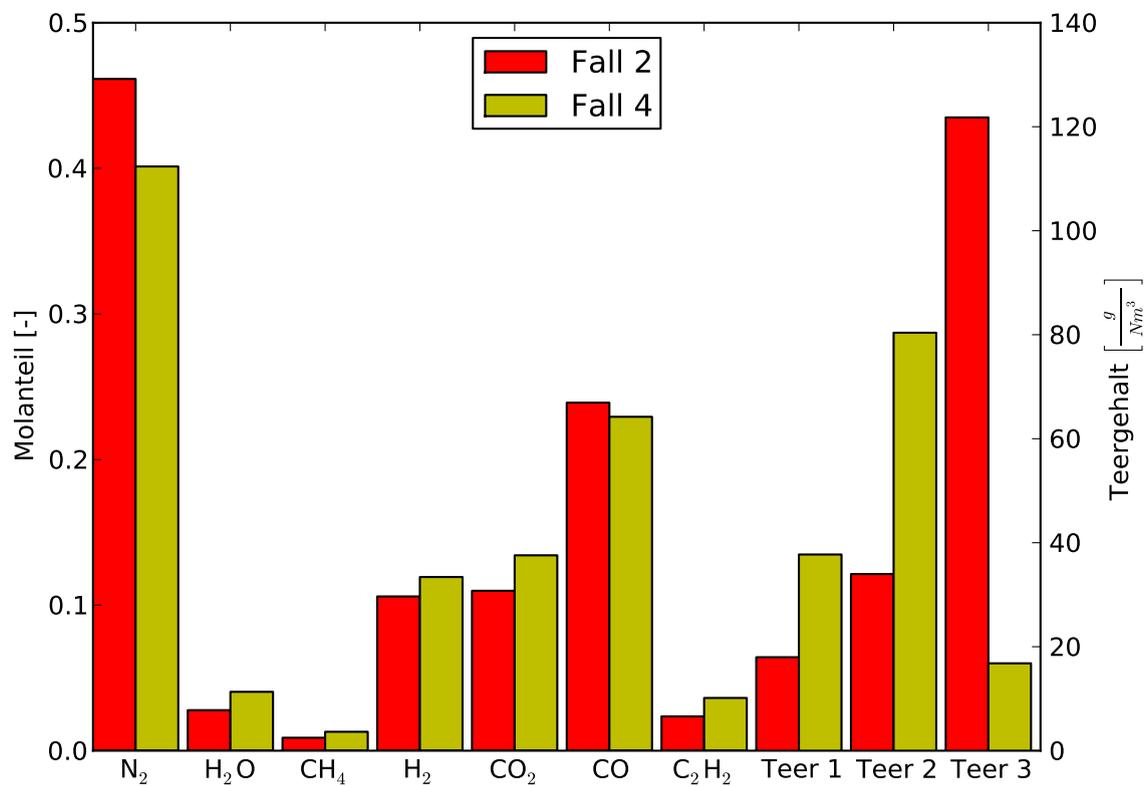
nicht vergessen werden, dass die dem homogenen Teerabbau unterliegenden Komponenten gerade so gewählt worden sind, dass nahezu keine thermischen Effekte durch die Reaktionsenthalpien dieser Reaktionen auftreten. Insofern sind thermische Effekte durch Änderung der Teerzusammensetzung weitestgehend minimiert (was ihre mögliche Zersetzung angeht).

Ein Vergleich der Teer- und Produktgaskonzentration in Abbildung 5.41 zeigt jedoch relativ große Unterschiede. So ist die Gesamtteerproduktion im Fall 4 ca. 20 % kleiner als im Standardfall, womit klar gezeigt ist, dass die Größe des fixen Anteiles an inertem Teer einer der Sensitivparameter des Modells ist. Dies ist insofern zu erwarten gewesen, da bei den hier vorliegenden Reaktorbedingungen der Großteil des Holzes zu Teer wird. Der stärkere Abbau des Teeres spiegelt sich zudem in niedrigeren Stickstoffkonzentration am Auslass wieder - ein klares Indiz für gesteigerte Produktgasausbeuten. Auf der anderen Seite zeigen die Verläufe der gesamten Holz bzw. Holzkohlemasse im Reaktor in den Abbildungen 5.42 und 5.43, dass im Fall 4 weniger Holz im Reaktor vorliegt, also auch aus diesem Grunde größere Produktgas-



**Abbildung 5.40:** Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene Inertteeranteile (Fälle 2 und 4 aus Tabelle 5.3)

konzentrationen zu erwarten wären. Da der homogene Teerabbau die Teilchenzahl erhöht, kann man hier zudem vermuten, dass die dadurch stärkere Fluidisierung zu einer besseren radialen Verteilung des Holzes führt und somit das Holz schneller pyrolysiert. Sowohl die Holz- als auch die Holzkohlemasse zeigen keinerlei stationäres Verhalten. Die Teersignale am Rektorausgang in Abbildung 5.45 zeigen ein stärker schwankendes Signal mit stark instationärem Verlauf im Vergleich mit Abbildung 5.11. Die Auslasskonzentrationen der Produktgase für den Fall 4 zeigen im Vergleich zum Standardfall (siehe Abbildung 5.41) erkennbar höhere Werte für Wasser, Ethin (mehr Teerabbau), Kohlendioxid und Wasserstoff. Erklärbar sind diese Werte durch den stärkeren Teerabbau und die niedrigeren Werte der Holzgesamtmasse im Reaktor.



**Abbildung 5.41:** Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2 und 4

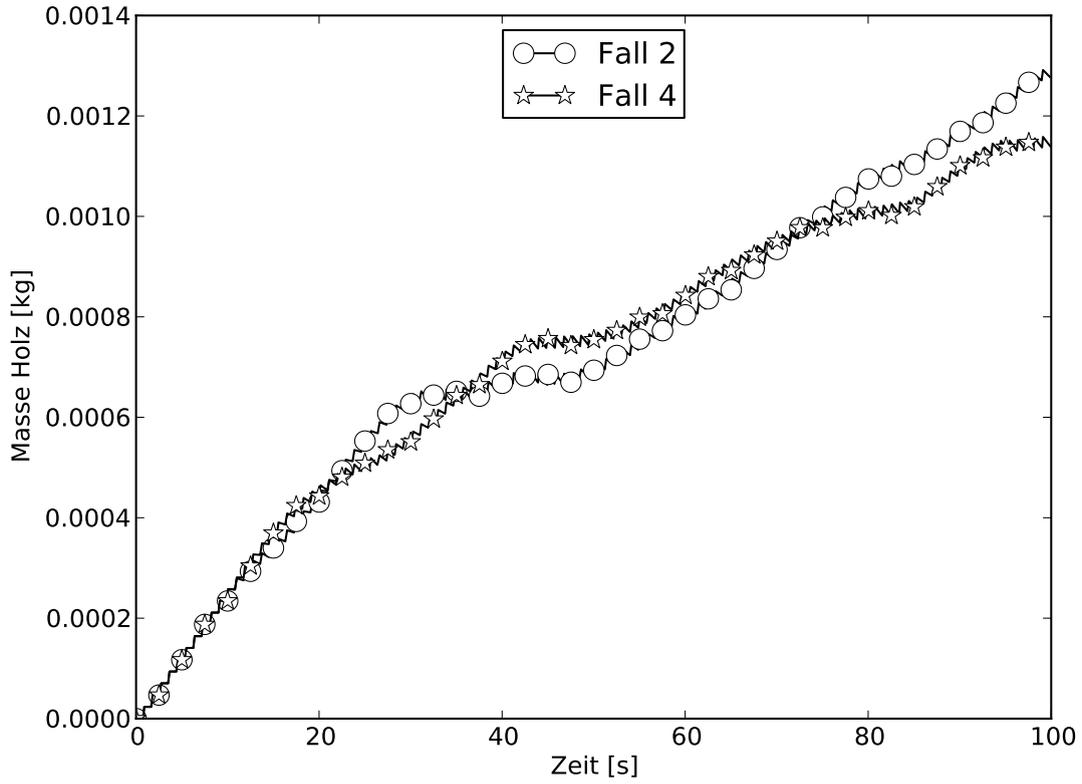


Abbildung 5.42: Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2 und 4)

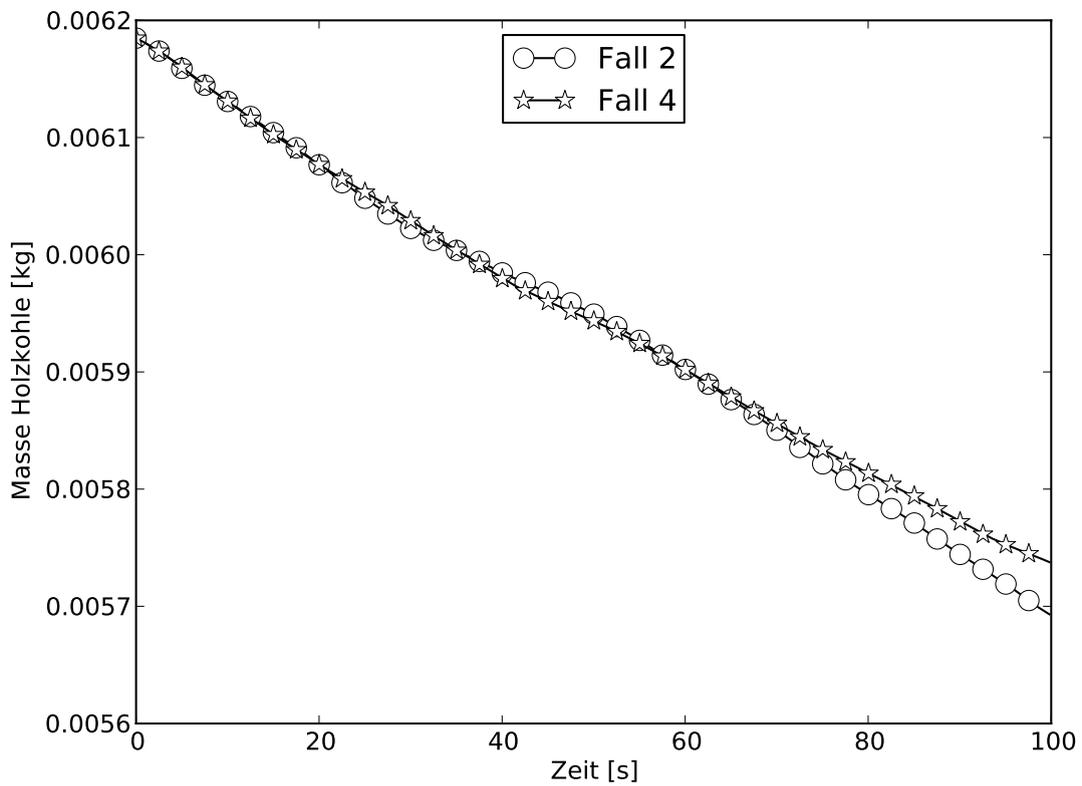


Abbildung 5.43: Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2 und 4)

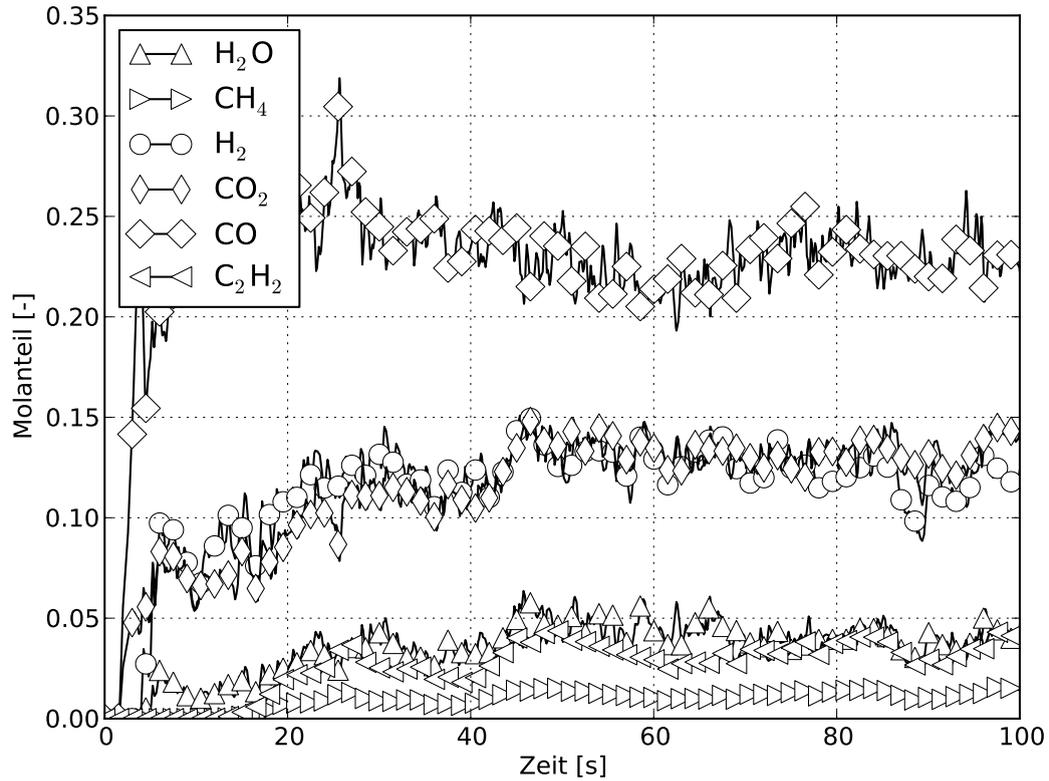


Abbildung 5.44: Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 4)

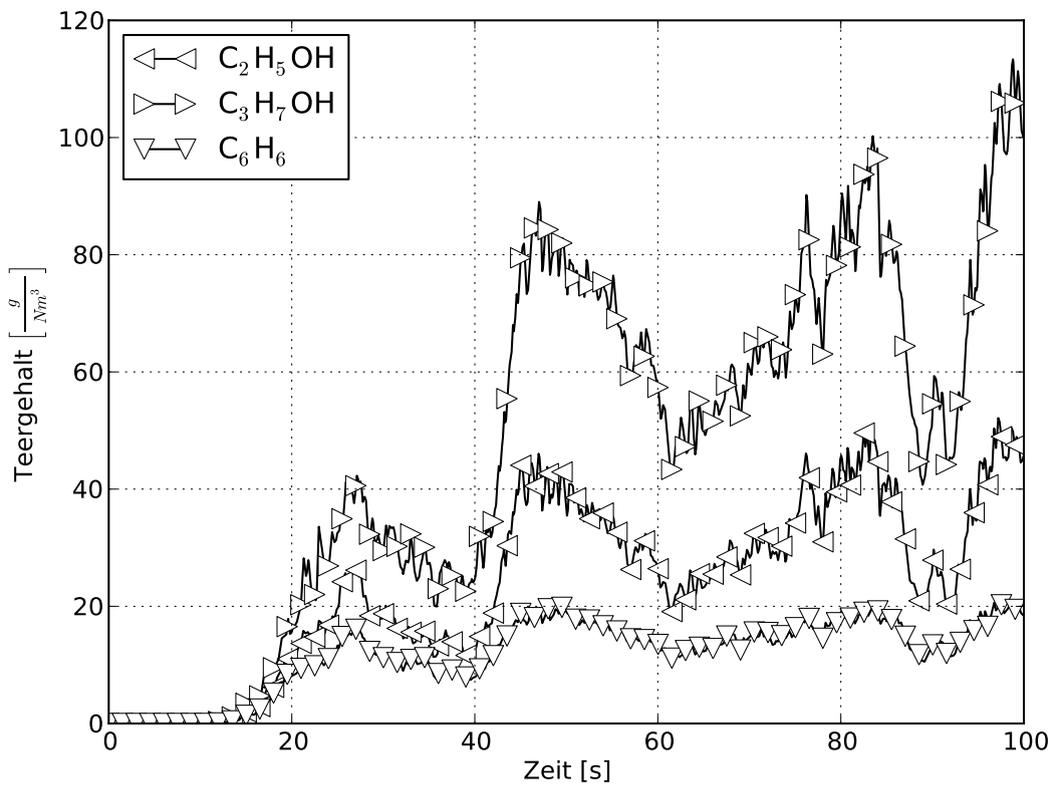
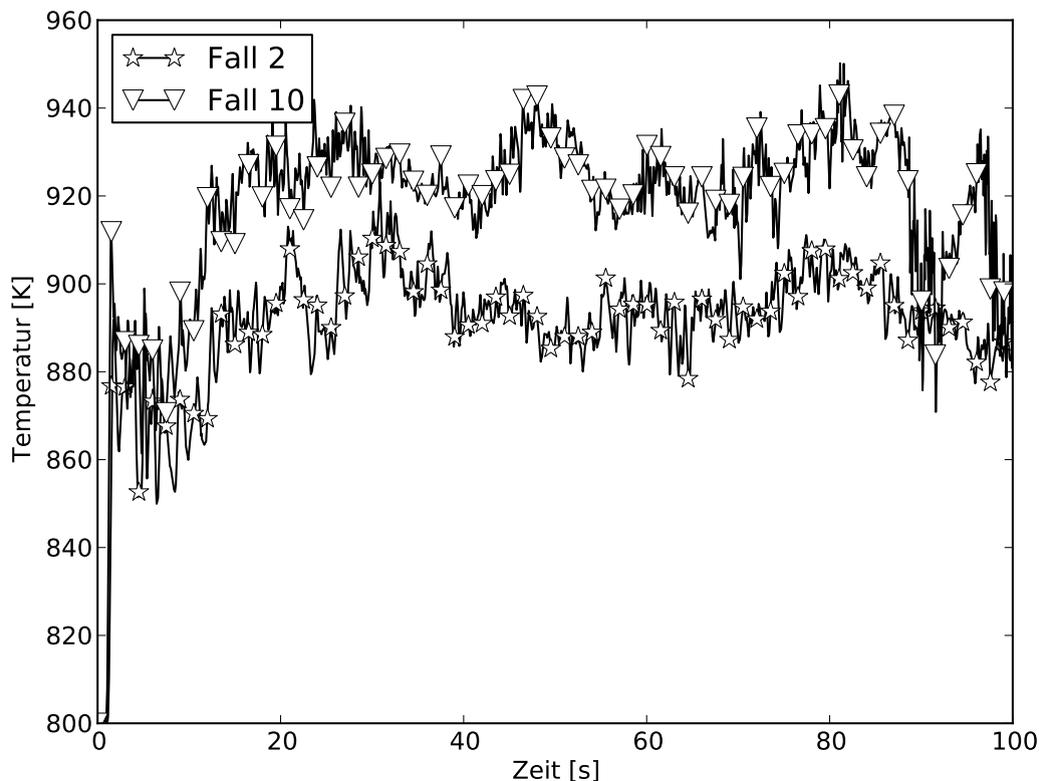


Abbildung 5.45: Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 4)

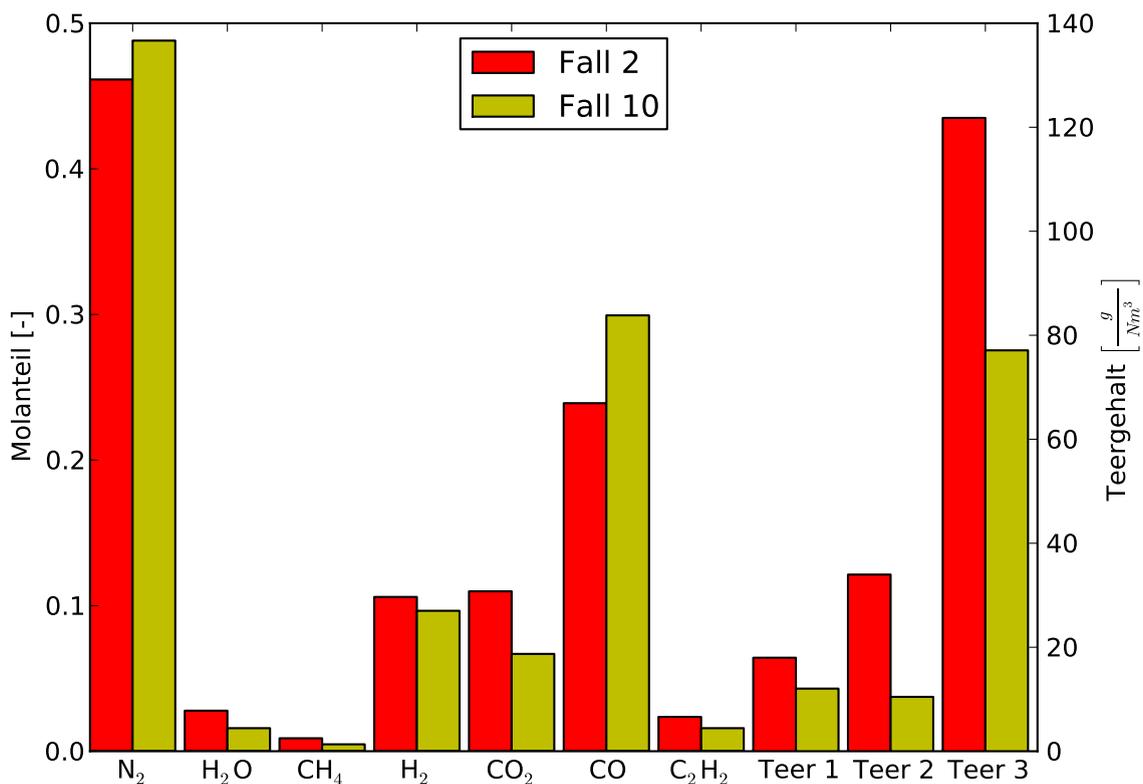
### 5.2.5 Einfluss einer erhöhten Leerrohrgeschwindigkeit im Lufteinlass



**Abbildung 5.46:** Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene Leerrohrgeschwindigkeiten (Fall 2 und Fall 10 aus Tabelle 5.3)

Die Leerrohrgeschwindigkeit ist von zentraler Bedeutung bei einer Wirbelschicht, da sie zum einen die mittlere Bett­höhe erhöht (siehe Abbildung 5.50) und zum anderen, durch die hier betrachtete reaktive Wirbelschicht, mehr Luft und damit auch mehr Sauerstoff in den Reaktor befördert. Betrachtet man die im Bett vorhandene Holzkohle als Teil des Brennstoffes dieses Reaktors, so wird durch eine Erhöhung der Leerrohrgeschwindigkeit eine höhere Betttemperatur begünstigt (siehe Abbildung 5.53). Dieser Effekt ist auch klar aus Abbildung 5.46 erkennbar. Die Auslasstemperatur beträgt nach den ersten 40 s ca. 20 K mehr als im Vergleichsfall 2. Die Auslasstemperatur des Falles 10 nimmt allerdings zum Ende der Simulation hin etwas ab. Die bei der Umsetzung des Sauerstoffs freiwerdende Reaktionsenthalpie steigert zudem die Reaktionsraten der anderen heterogenen Vergasungsreaktionen und sollte tendenziell mehr Vergasungsprodukte hervorbringen.

Abbildung 5.47 zeigt allerdings ein etwas differenzierteres Bild. Die Auslasskonzentration an Kohlenmonoxid ist zwar höher als im Standardfall, jedoch gilt dies nicht für das zweite wichtige Vergasungsprodukt Wasserstoff. Damit einhergehend sind die Kohlendioxid- und Wasserkonzentrationen am Auslass im Fall 10 kleiner als im Standardfall. Die Teerkonzentrationen im Auslass des Falles 10 zeigen in Abbildung 5.47 kumuliert ca. halb so hohe Werte wie im Standardfall. Jedoch ist die Konzentration der Teerabbauprodukte (Methan und Ethin) deutlich kleiner, was auf einen verringerten Teerabbau hindeuten kann. Das dies nicht der Fall ist, zeigt die extrem niedrige Stickstoffkonzentration im Auslass (Abbildung 5.47).



**Abbildung 5.47:** Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2 und 10

Das hier vorgestellte Szenario hat eine um 50 % erhöhte Leerrohrgeschwindigkeit und damit einen um 50 % angehobenen Massenstrom an Stickstoff, welcher von der Stoffmenge her klar in der einströmenden Luft überwiegt. Da der Holzmassenstrom in diesem Szenario unverändert blieb, zeigt Abbildung 5.47 eine niedrige Teerkonzentration durch die Verdünnung aufgrund der eintretenden Luft und der heterogenen Vergasungsprodukte. Zusätzlich ist durch den konstanten Holzmassenstrom der Was-

sereintrag in den Reaktor fast festgesetzt (das Holzgas und der Teerabbau können diesen Wert ebenfalls modifizieren) und daher entsteht keine deutliche Änderung der Wasserstoffkonzentration im Fall 10 verglichen mit Fall 2.

Eine erhöhte Leerrohrgeschwindigkeit kann bei entsprechender Größe dazu führen, dass das in den Reaktor zugeführte Holz sich nicht oder deutlich langsamer im unteren heißen Bereich ablagert. Aufgrund des höheren Eintrages an Sauerstoff erhöht sich aber auch die Betttemperatur und die Auslasstemperatur. Damit einhergehend steigt die mittlere Heizrate während der Pyrolyse, was daran zu erkennen ist, dass Abbildung 5.48 weniger Holz im Reaktor für den Fall 10 als für den Fall 2 zeigt. Die Masse der Holzkohle im Reaktor sinkt im Fall 10 deutlich schneller (mehr Sauerstoff) als im Referenzfall 2 (siehe Abbildung 5.49). Zudem führt eine höhere Leerrohrgeschwindigkeit zu einer besseren Durchmischung, insbesondere in Bezug auf die Vermischung der unterschiedlichen Partikelgrößenklassen und steht damit der Entmischung der Partikeldurchmesserklassen entgegen.

Die zeitlichen Verläufe der Produktgas und Teerkonzentration am Auslass des Reaktors sind in den Abbildungen 5.51 und 5.52 abgebildet.

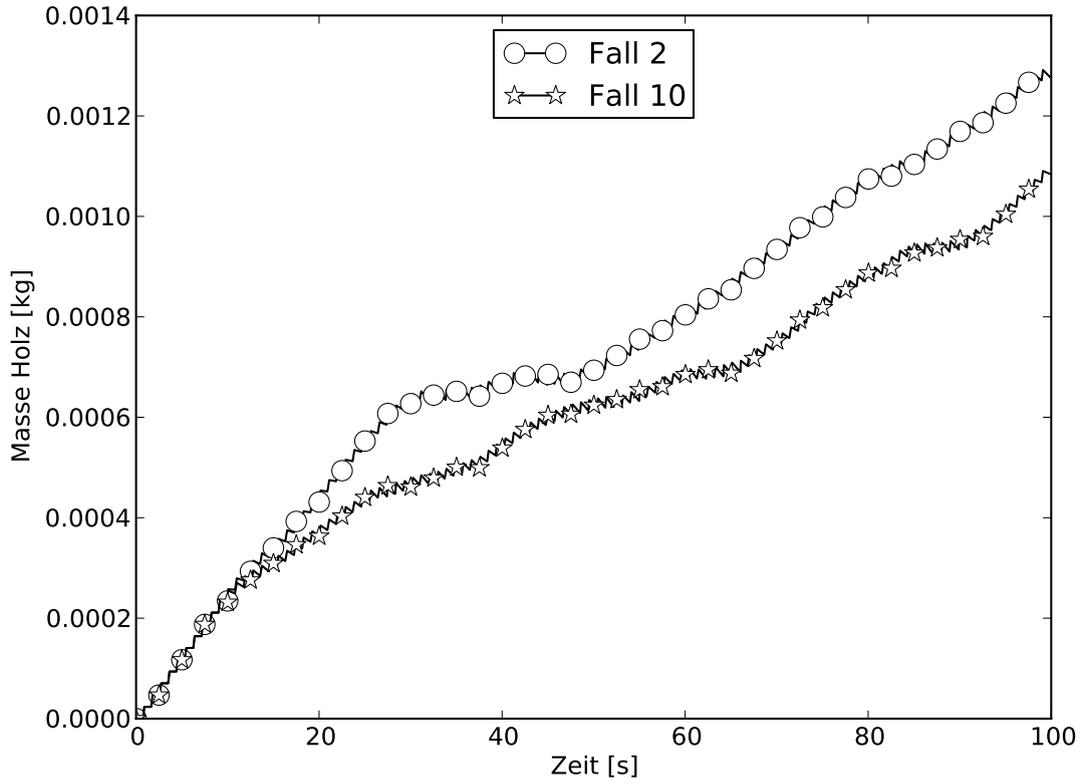


Abbildung 5.48: Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2 und 10)

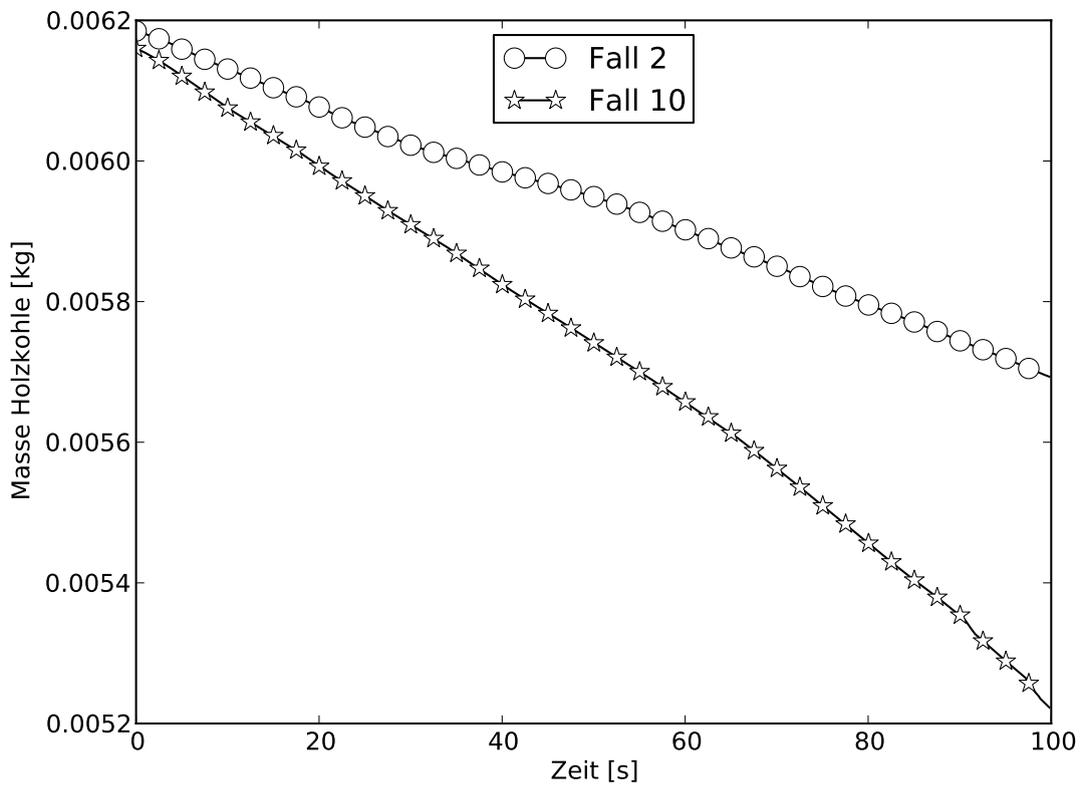
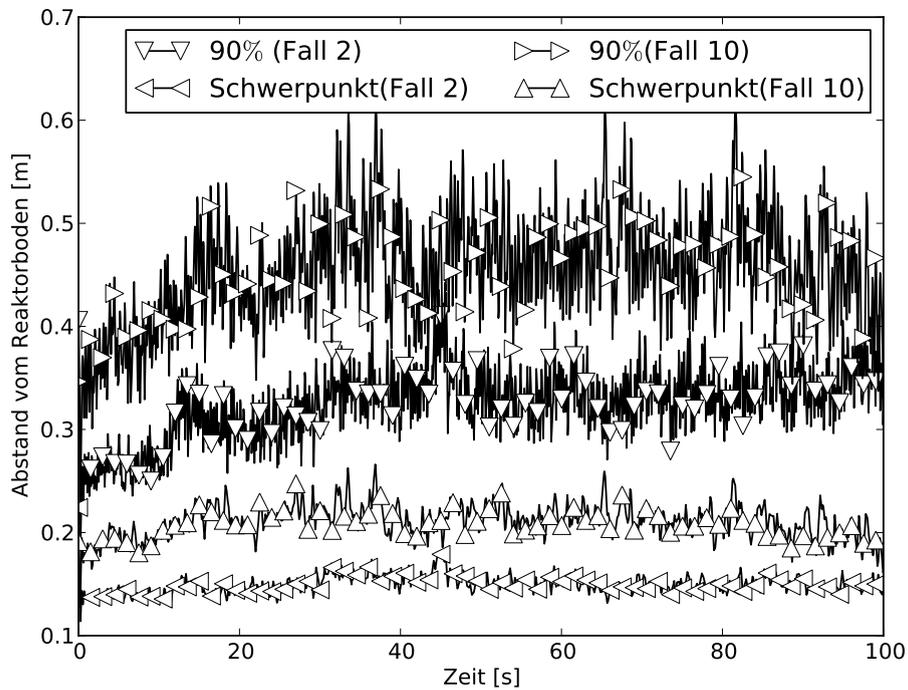
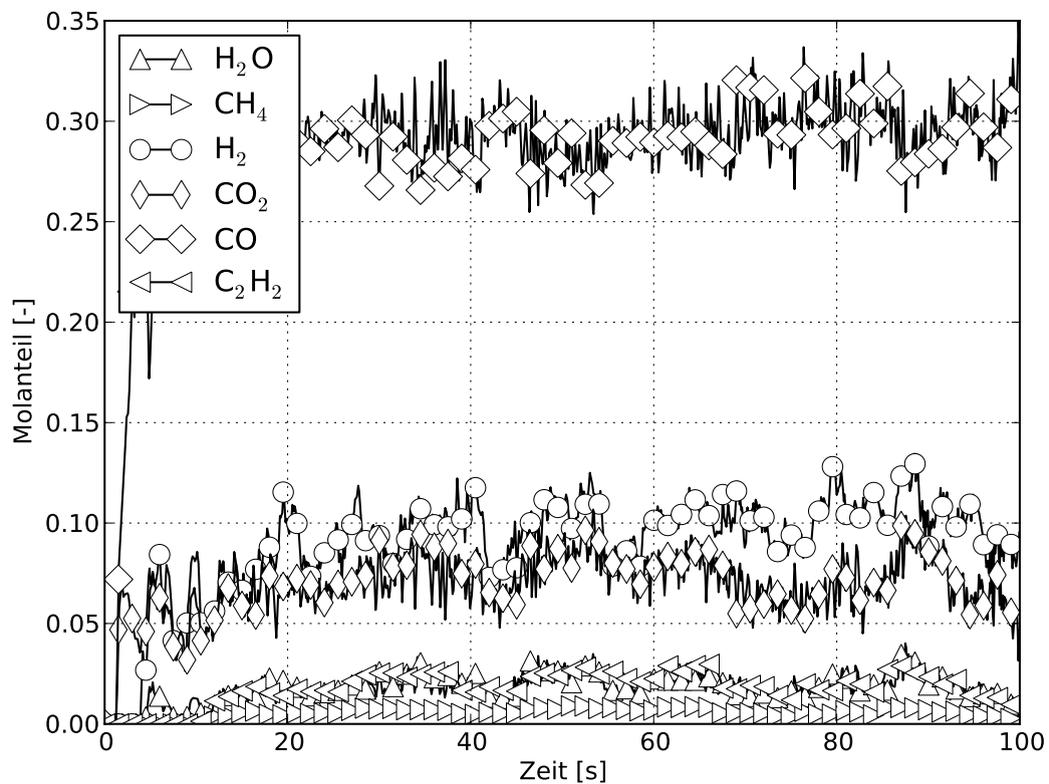


Abbildung 5.49: Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2 und 10)



**Abbildung 5.50:** Axialer Schwerpunkt und Betthöhe bei 90 % der Feststoffmasse über die Zeit (Fälle 2 und 10)



**Abbildung 5.51:** Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 10)

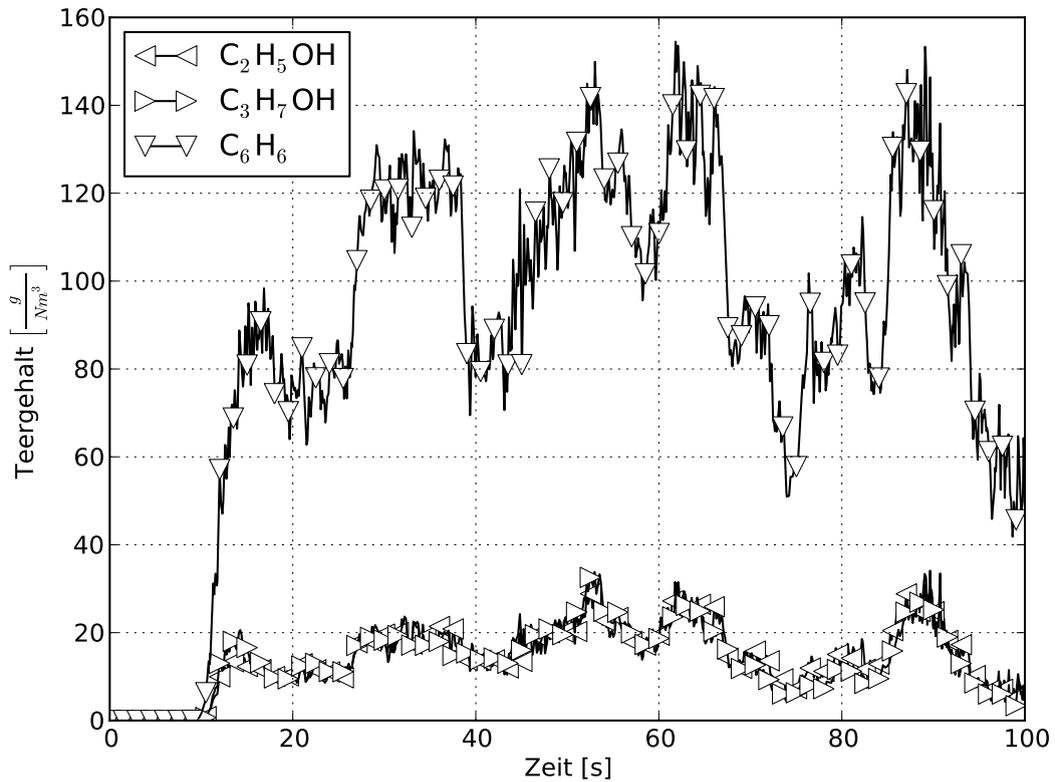


Abbildung 5.52: Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 10)

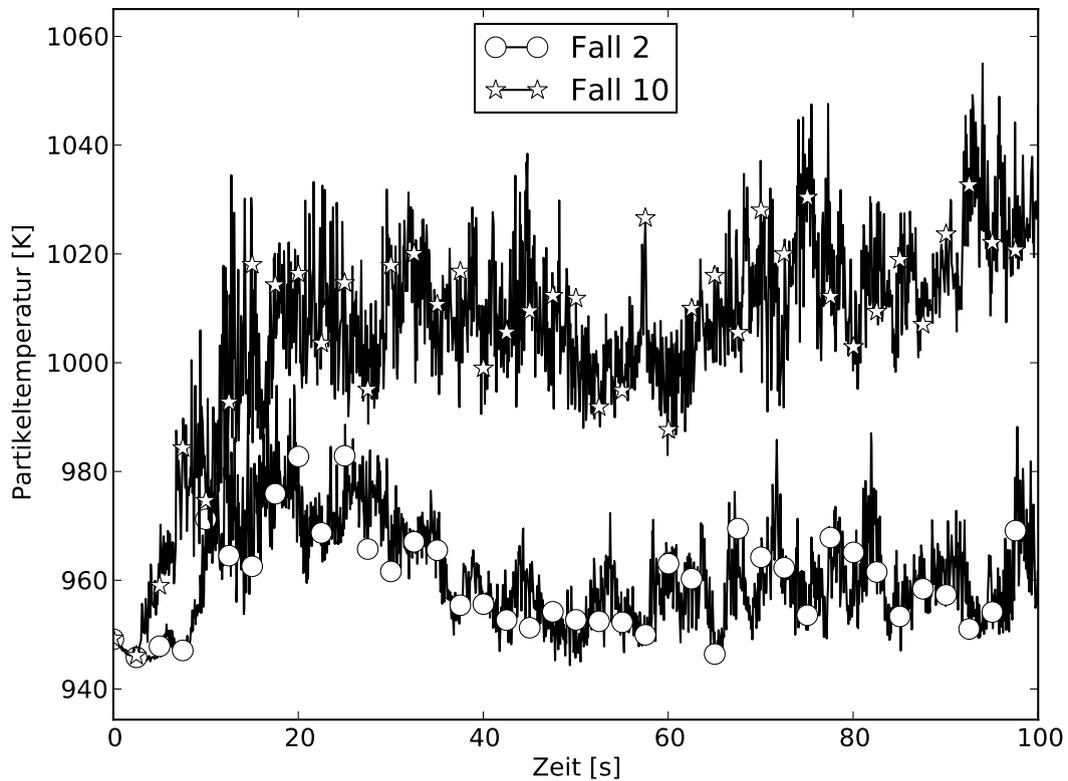
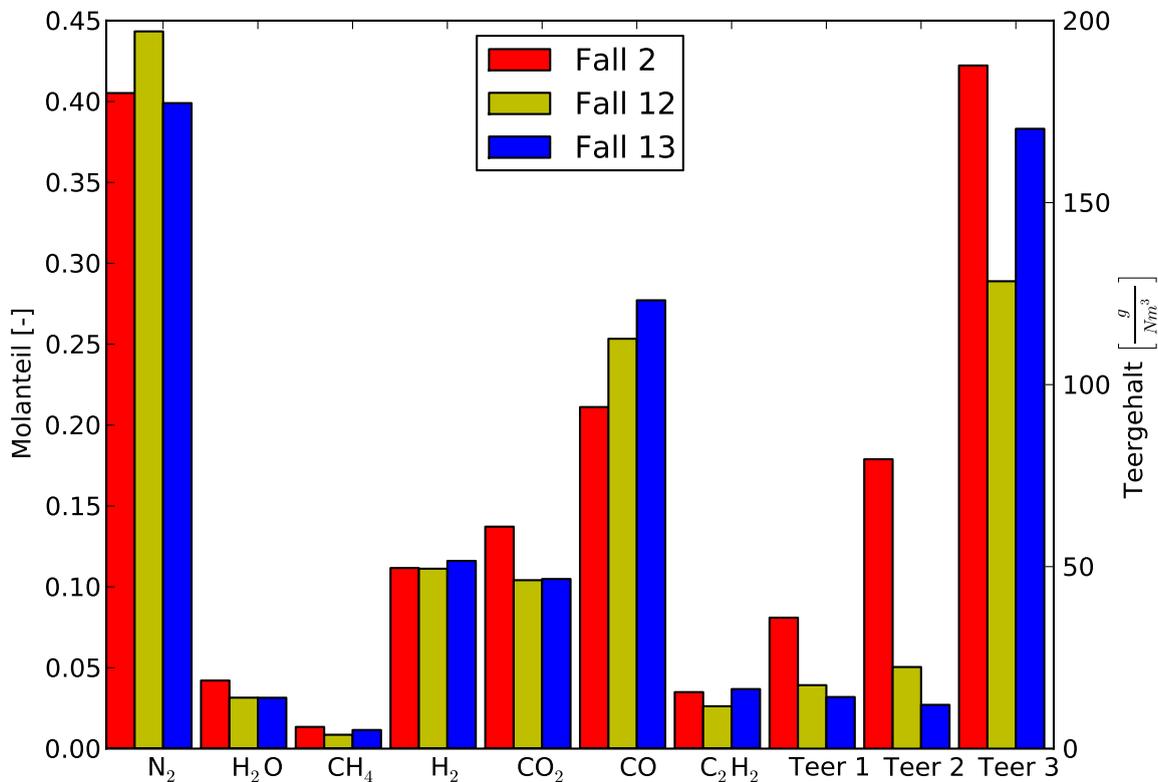


Abbildung 5.53: Über den Querschnitt massengemittelte Feststofftemperaturen über die Zeit aufgetragen (ca. 0.146 m über dem Reaktorboden, Fälle 2 und 10)

### 5.2.6 Einfluss der Wandtemperaturen des Reaktors

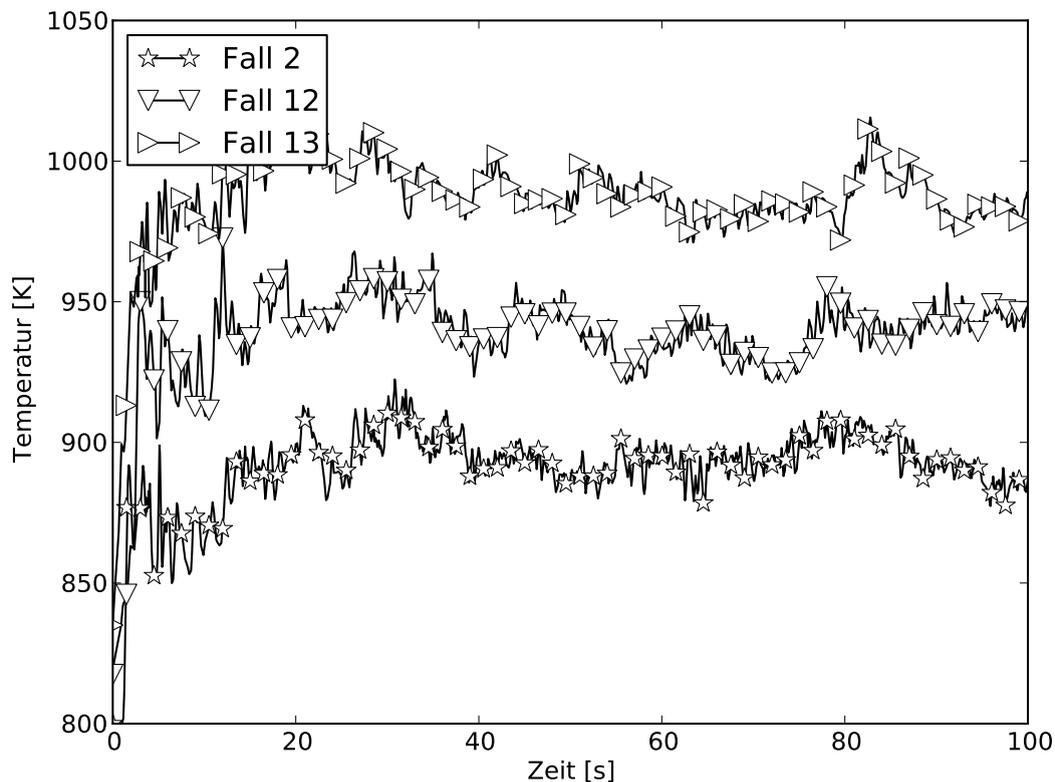
Der Einfluss der (festen) Wandtemperaturen auf das Geschehen innerhalb der Wirbelschicht ist schon in der Arbeit von Gerber u. a. (2010) als sehr komplex geschildert worden. In dieser Arbeit wird jedoch keine Wärmeleitung und Wärmestrahlung innerhalb der festen Phase betrachtet, womit sich einige Effekte einfacher deuten lassen.



**Abbildung 5.54:** Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2, 12 und 13

Abbildung 5.54 zeigt einige klar auf höhere Wandtemperaturen zurückführbare Effekte. Es zeigt sich, dass je höher die Wandtemperatur ist, desto weniger werden reaktive Teere produziert und desto mehr Kohlenmonoxid entsteht. Das Verhalten der Vergasungsmittel Wasser und Kohlendioxid korreliert weniger stark mit der Wandtemperatur, da zwar der Fall 2 anteilig mehr Wasser und Kohlendioxid hervorbringt, jedoch die Unterschiede zwischen den Fällen 12 und 13 bzgl. der Konzentration der Vergasungsmittel kaum registrierbar sind. Die gesamte Produktgasmenge hat ein Minimum für den Fall 12, da in diesem Fall die Stickstoffkonzentration um einiges

höher ist als in den Fällen 2 und 13. Aufgrund der vorliegenden Reaktortemperaturen ist davon auszugehen, dass der Einfluss der Vergasungsreaktionen auf die hier gezeigten Ergebnisse klein ist. Abbildung 5.55 zeigt den deutlichen Effekt der unterschiedlichen Wandtemperaturen auf die Temperaturen im Auslass des Reaktors. Die Erhöhung der Wandtemperatur um jeweils 100 K erhöht die Temperatur im Auslass um jeweils 50 K. Jedoch kann dieser Effekt hauptsächlich auf die Wärmeübertragung der Wand an das Fluid zurückgeführt werden, da die Temperatur der Partikel im Bett in beiden Fällen praktisch identisch über die Simulationsdauer ist (hier nicht gezeigt).

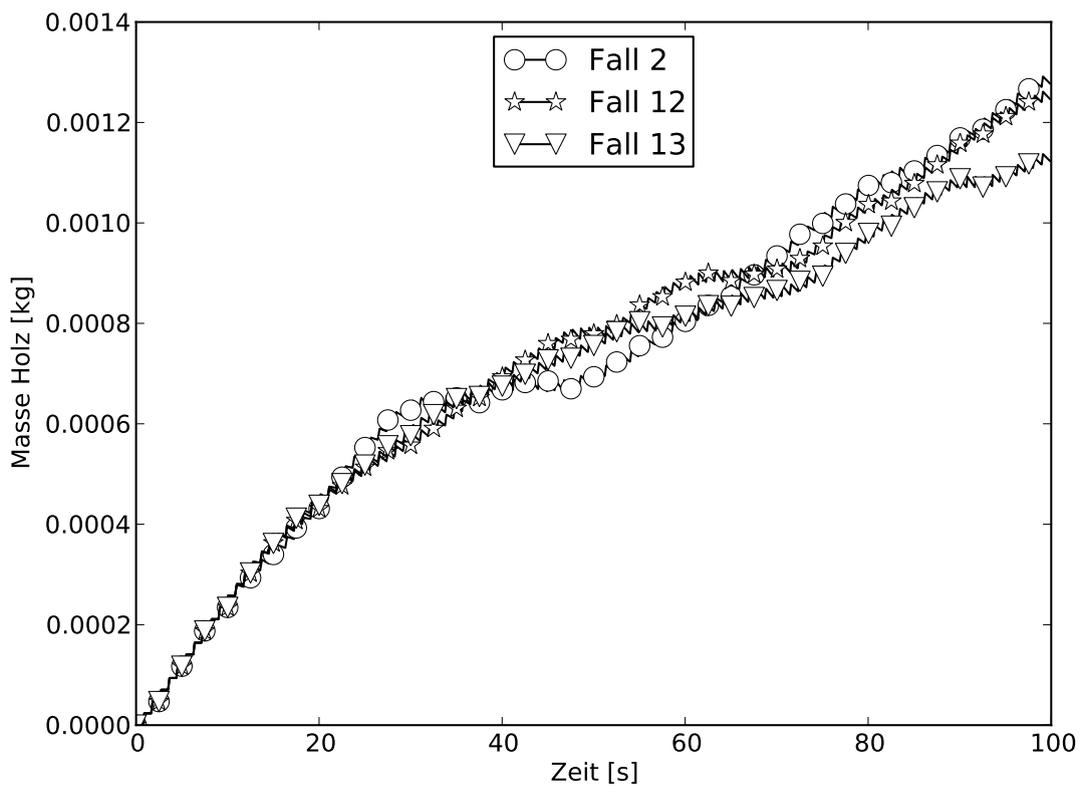


**Abbildung 5.55:** Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene Wandtemperaturen (Fälle 2, 12 und 13 aus Tabelle 5.3)

Abbildung 5.56 bestätigt die Erwartungen bezüglich der dynamischen Holzmassenentwicklung über die Zeit. Je höher die Wandtemperatur ist, desto weniger Holz befindet sich im Reaktor. Die Pyrolyse läuft also mit steigender Wandtemperatur schneller ab, obwohl die Wandtemperatur praktisch keinen Effekt auf die Betttemperatur hat. Die zeitliche Entwicklung der Holzkohlemasse in Abbildung 5.57 passt

ebenfalls sehr gut zu den Erwartungen. Mit höherer Wandtemperatur baut sich die Holzkohle im Reaktor schneller ab.

Die zeitlichen Entwicklungen der Produktgas- und Teerkonzentrationen im Reaktorauslass in den Abbildungen 5.58, 5.59, 5.60 und 5.61 im Vergleich mit dem Standardfall zeigen die Tendenz, dass insbesondere Schwankungen für die Teere durch die erhöhte Wandtemperatur gedämpft werden. Außerdem wird mit steigender Wandtemperatur der Unterschied zwischen den zeitlichen Verläufen der Teerkonzentrationen zunehmend kleiner.



**Abbildung 5.56:** Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2, 12 und 13)

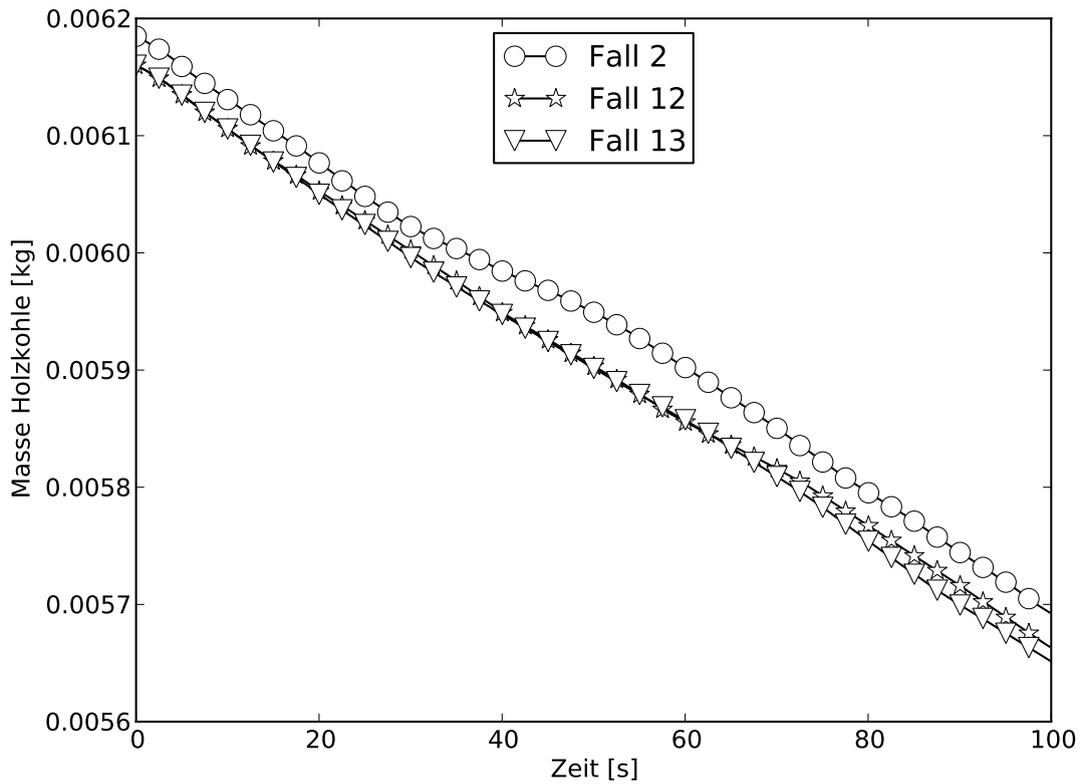


Abbildung 5.57: Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2, 12 und 13)

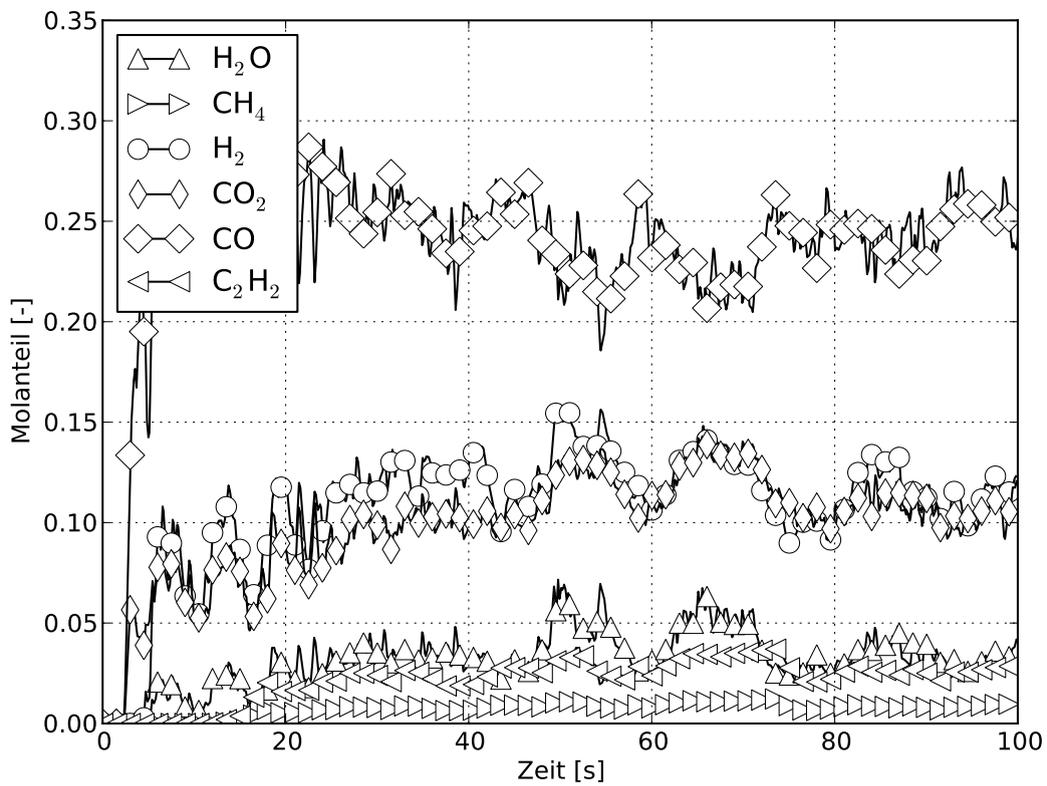


Abbildung 5.58: Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 12)

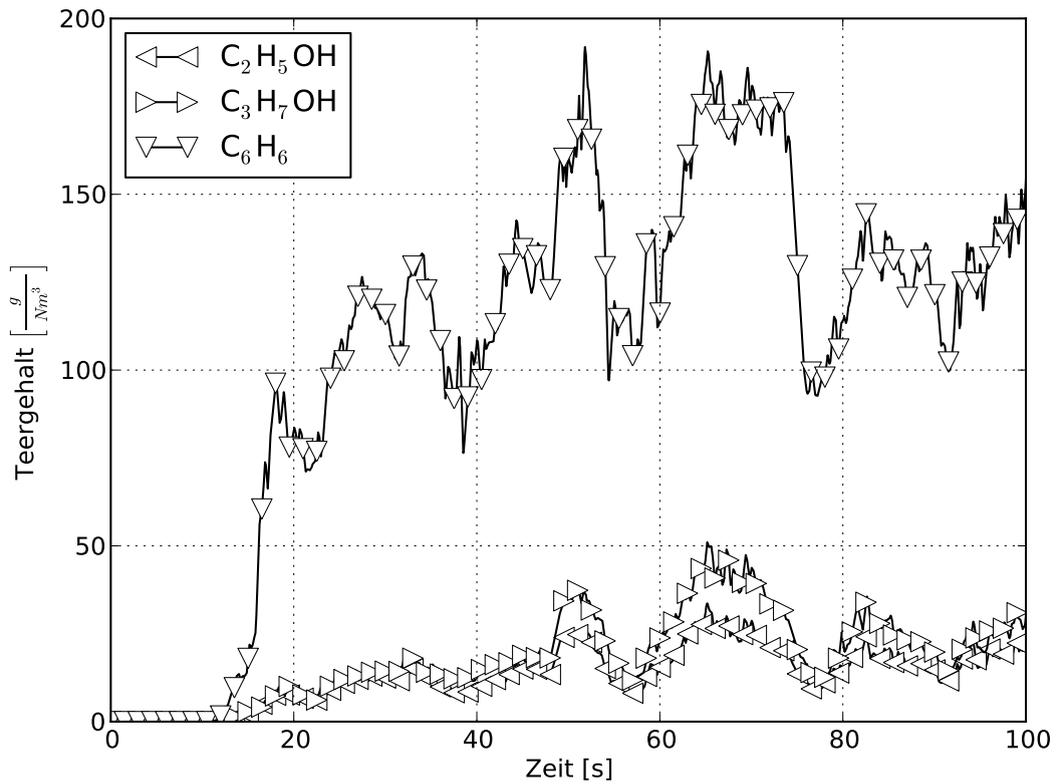


Abbildung 5.59: Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 12)

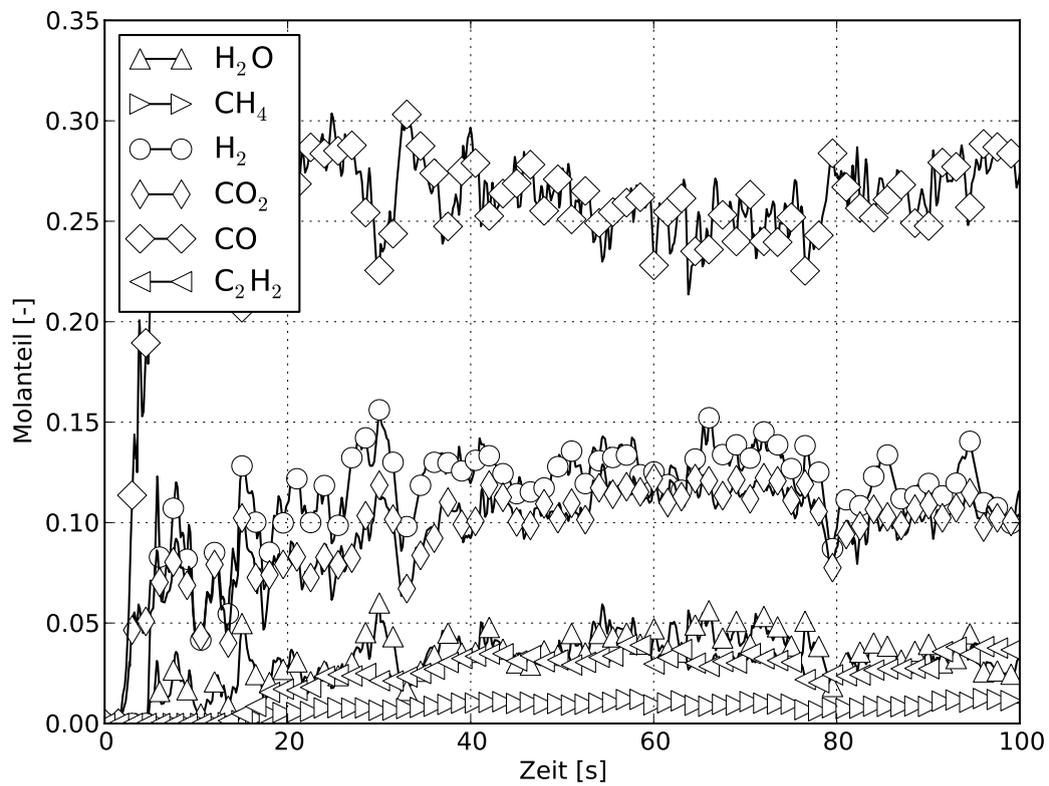


Abbildung 5.60: Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 13)

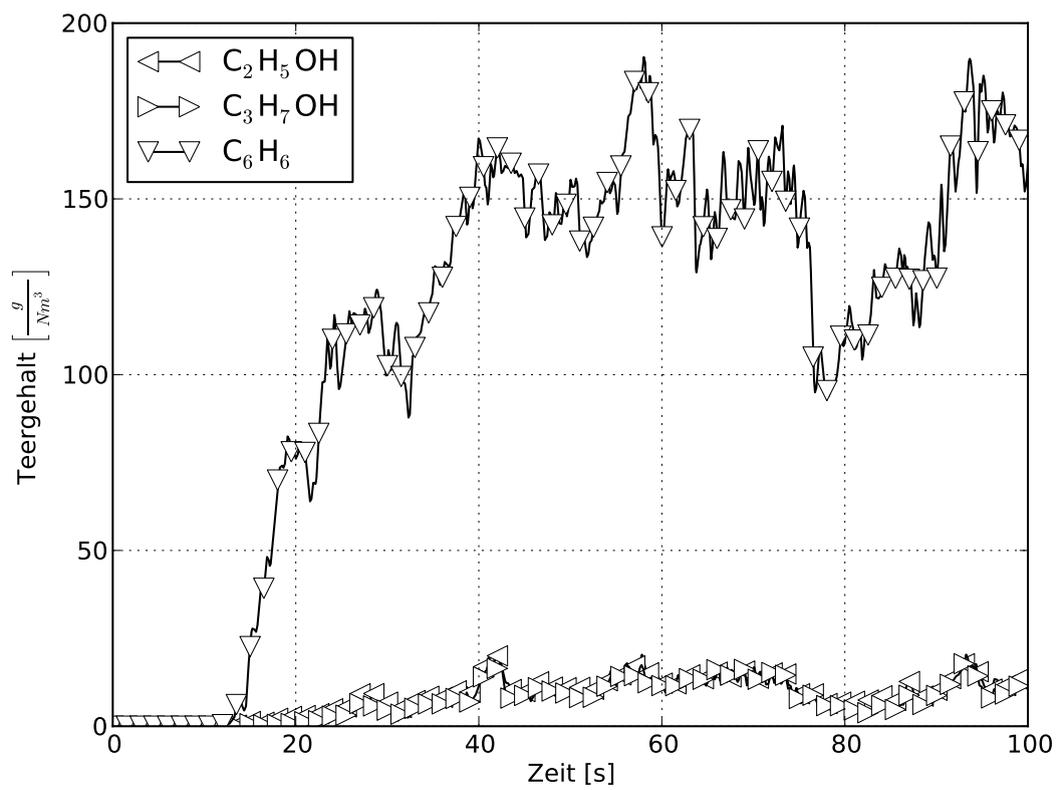
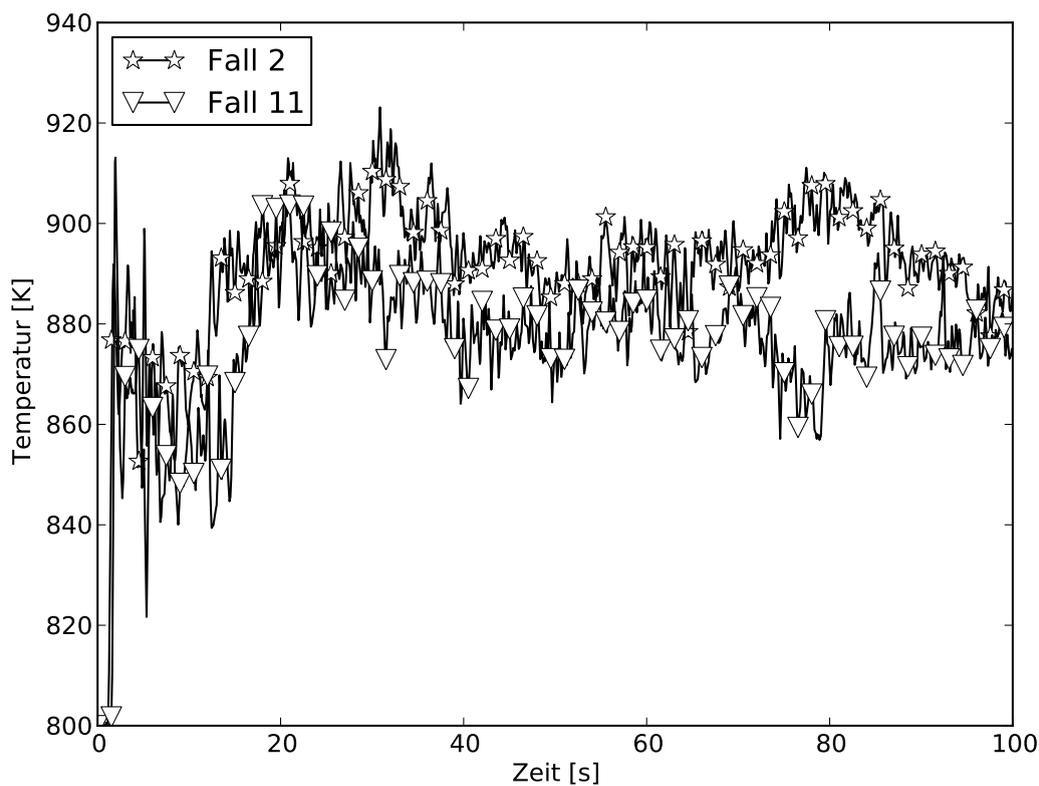


Abbildung 5.61: Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 13)

### 5.2.7 Einfluss der Einlasstemperatur der Luft

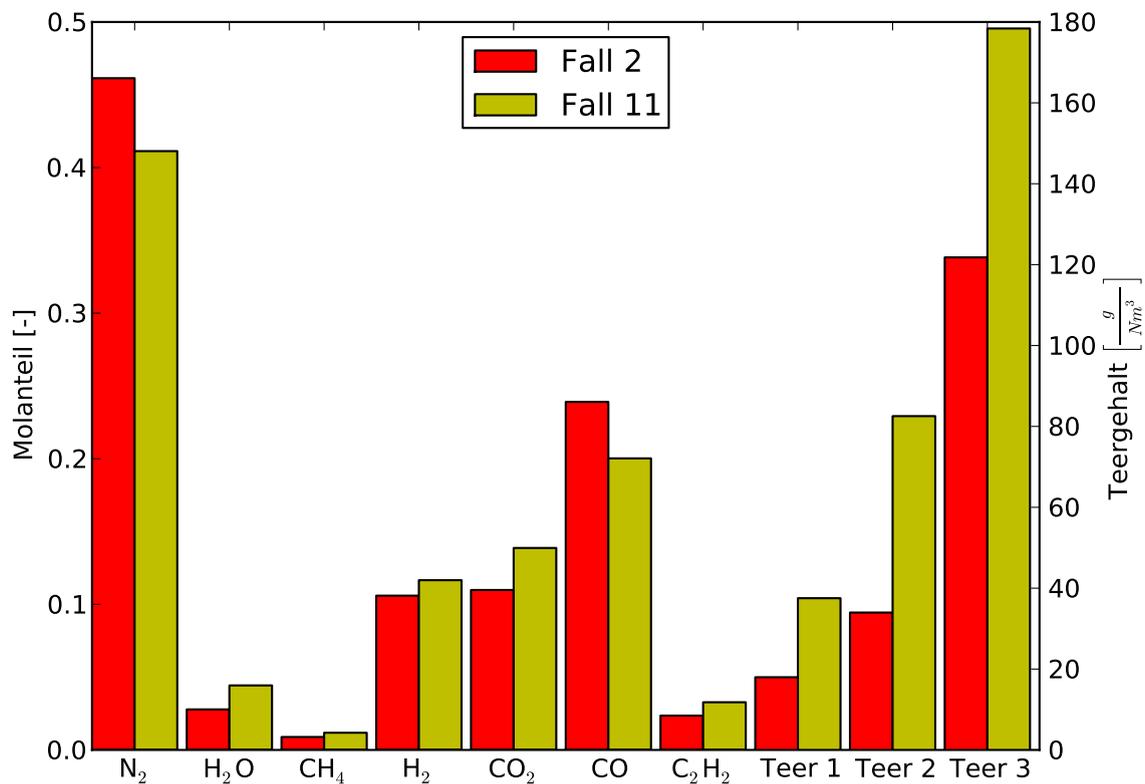
In diesem Kapitel soll der Einfluss der Einlasstemperatur der Luft auf die Vorgänge innerhalb der Wirbelschicht erläutert werden. Da, wie bereits dargelegt, das dem Reaktor zugeführte Holz die Tendenz zeigt, sich im unteren heißen Teil des Reaktors abzulagern (durch Dichte- und Größenunterschiede zu den Holzkohlepartikeln), sollte eine erhöhte Einlasstemperatur für die primäre Pyrolyse eher ungewollte Resultate zeigen. Das heißt, es sollte zu einer höheren Aufheizrate der Partikel kommen mit einer höheren Teerproduktion und verringerter Holzkohleproduktion.



**Abbildung 5.62:** Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene Einlasstemperaturen (Fälle 2 und 11 aus Tabelle 5.3)

Abbildung 5.63 zeigt die Produktgas- und Teerkonzentrationen am Auslass des Reaktors gemittelt über die letzten 10 s. Dabei wird deutlich, dass es zu einer Steigerung der Teerausbeute um ca. 60 % kommt, wobei gleichzeitig auch die Stoffmengenanteile der aus den Teerabbaureaktionen entstehenden Komponenten (Methan und Ethin) steigen. Dies lässt sich auf die erhöhten Reaktortemperaturen zurückführen, die ebenfalls am Auslass des Reaktors zu beobachten sind (siehe Abbildung 5.62).

Die zum Ende der Simulation sinkende Auslasstemperatur geht einher mit einer sinkenden Betttemperatur (siehe Abbildung 5.68). Zusätzlich zeigt Abbildung 5.63 eine niedrigere Stickstoffkonzentration am Auslass, es entstehen also absolut mehr gasförmige Produkte aus dem Betrieb der Anlage in der Simulation von Fall 11 im Vergleich zum Standardfall.

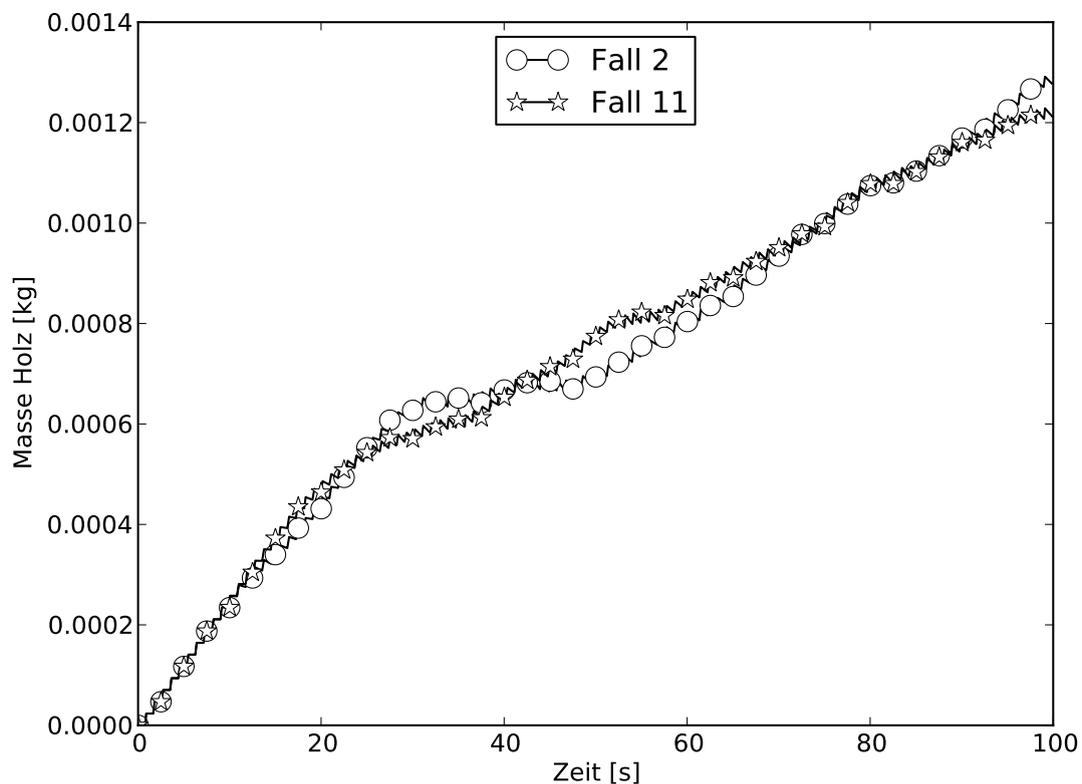


**Abbildung 5.63:** Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2 und 11

Die Abbildungen 5.64 und 5.65 zeigen die zeitlichen Verläufe der Holz- und Holzkohlemassenentwicklung des Falles 11 im Vergleich zum Standardfall. Die zeitliche Holzmassenentwicklung zeigt das erwartete Ergebnis. Es liegt im Fall 11 weniger Holz im Reaktor vor als im Standardfall. Insofern läuft die primäre Pyrolyse im Fall 11 tatsächlich schneller ab. Es fällt zudem auf, dass im Fall 11 die Holzkohle weniger stark abgebaut wurde als im Fall 2. Die Holzkohlemasse im Reaktor kann zum einen vergrößert werden durch die bei der primären Pyrolyse entstehende Holzkohle und zum anderen verkleinert werden durch die Vergasungsmittel Sauerstoff, Wasser und Kohlendioxid. Da nun die primäre Pyrolyse offensichtlich im Fall 11 schneller abläuft, deutet dies auf eine kleinere Holzkohleproduktion pro umgesetzter

Masseneinheit Holz während der primären Pyrolyse hin (eine schnellere Pyrolyse geht einher mit höheren Aufheizraten). Insofern müssen die Reaktionen, die für den Holzkohleabbau verantwortlich gemacht werden können, im Fall 11 deutlich langsamer ablaufen als im Fall 2, da ansonsten die Ergebnisse der Holzkohleentwicklung unplausibel wären. Da die Auslasstemperaturen im Fall 11 größer sind als im Fall 2, bleibt die Vermutung, dass höhere Einlasstemperaturen zu einer vermehrten Oxidation der gasförmigen Pyrolyseprodukte führt und damit weniger Holzkohle mit Hilfe des Sauerstoffs umgesetzt wird. Bestätigen lässt sich die letzte Vermutung in dieser Arbeit nicht, da die Simulation in ihrem jetzigen Zustand keine entsprechenden Daten bereitstellt. Ein Vergleich der Umsätze der einzelnen Reaktionen sollte aber diese Frage klären.

Die zeitlichen Verläufe der Produktgas- und Teerkonzentrationen sind in den Abbildungen 5.66 und 5.67 dargestellt. Der aus Abbildung 5.68 gezeigte Abfall der Betttemperaturen schlägt sich in Abbildung 5.67 auch in höher werdenden Teerkonzentrationen im Auslass nieder.



**Abbildung 5.64:** Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2 und 11)

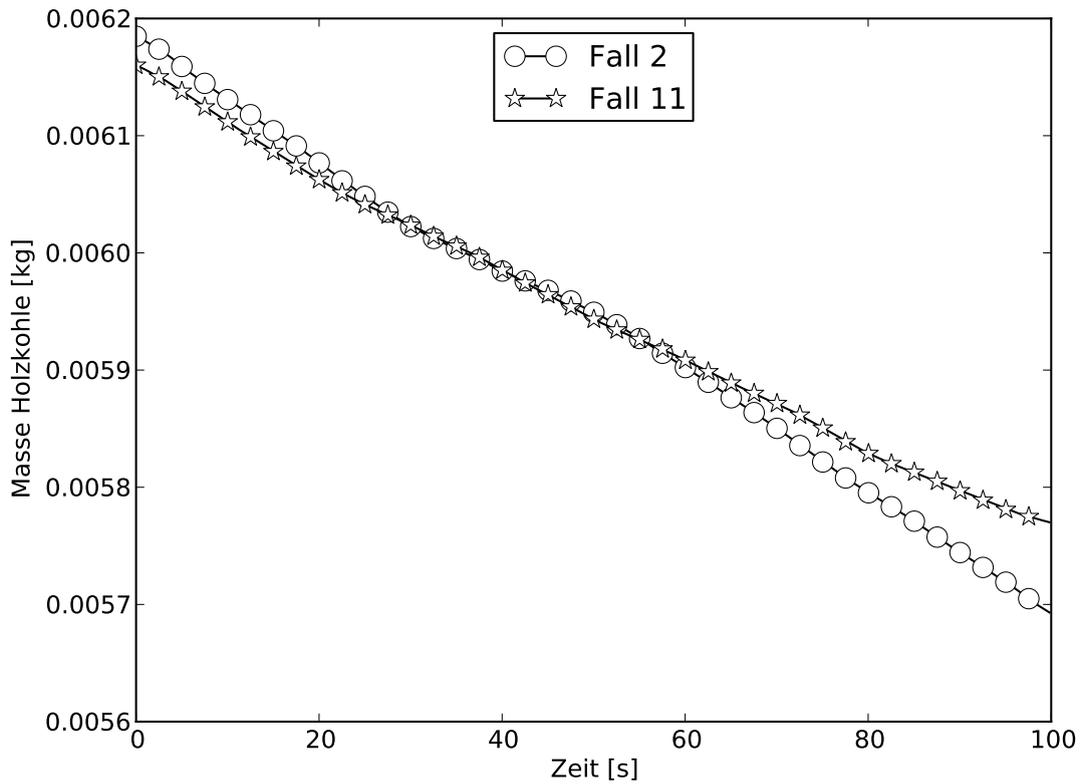


Abbildung 5.65: Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2 und 11)

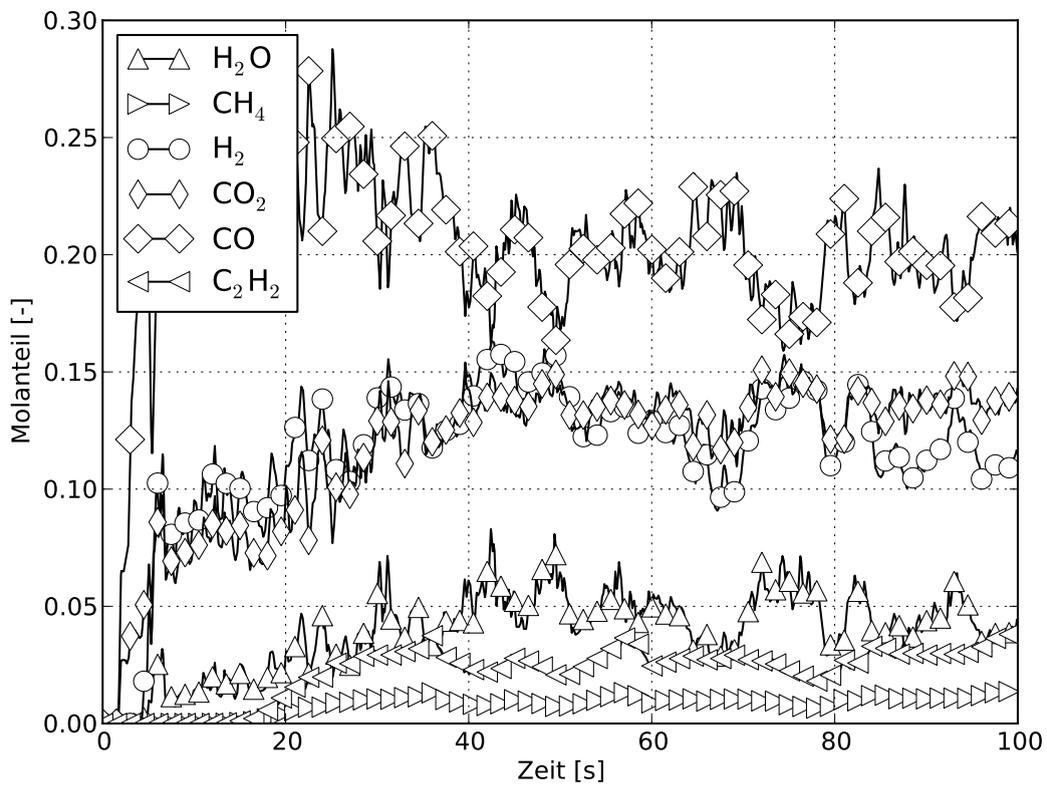


Abbildung 5.66: zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 11)

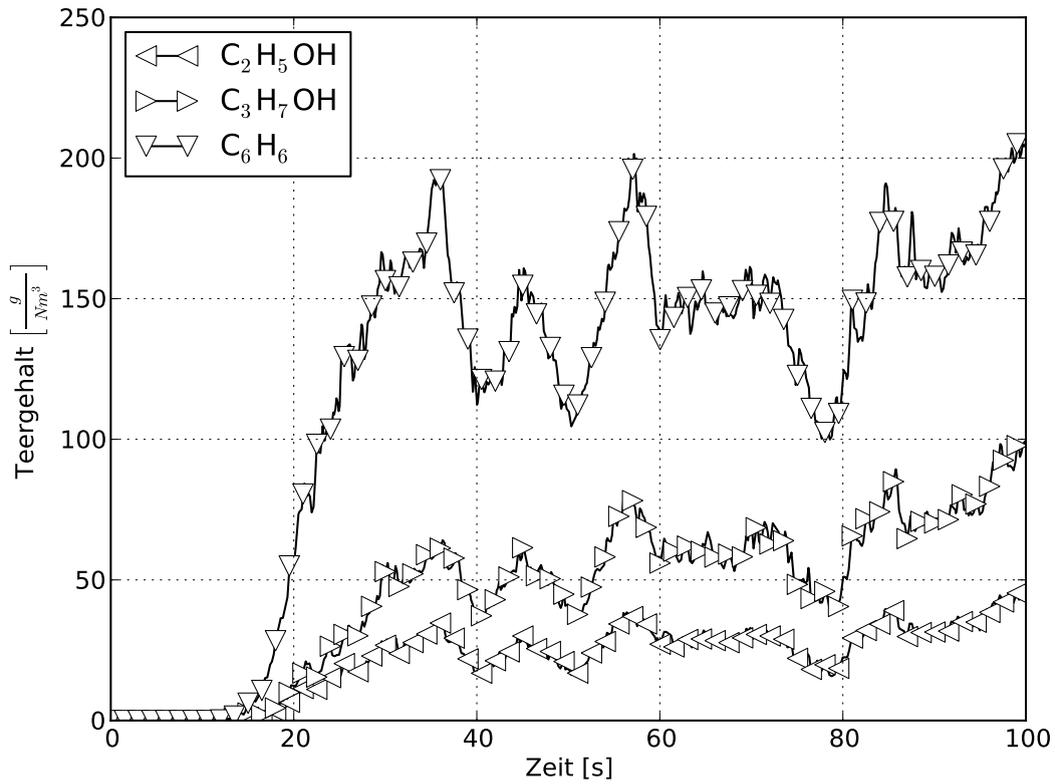


Abbildung 5.67: Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 11)

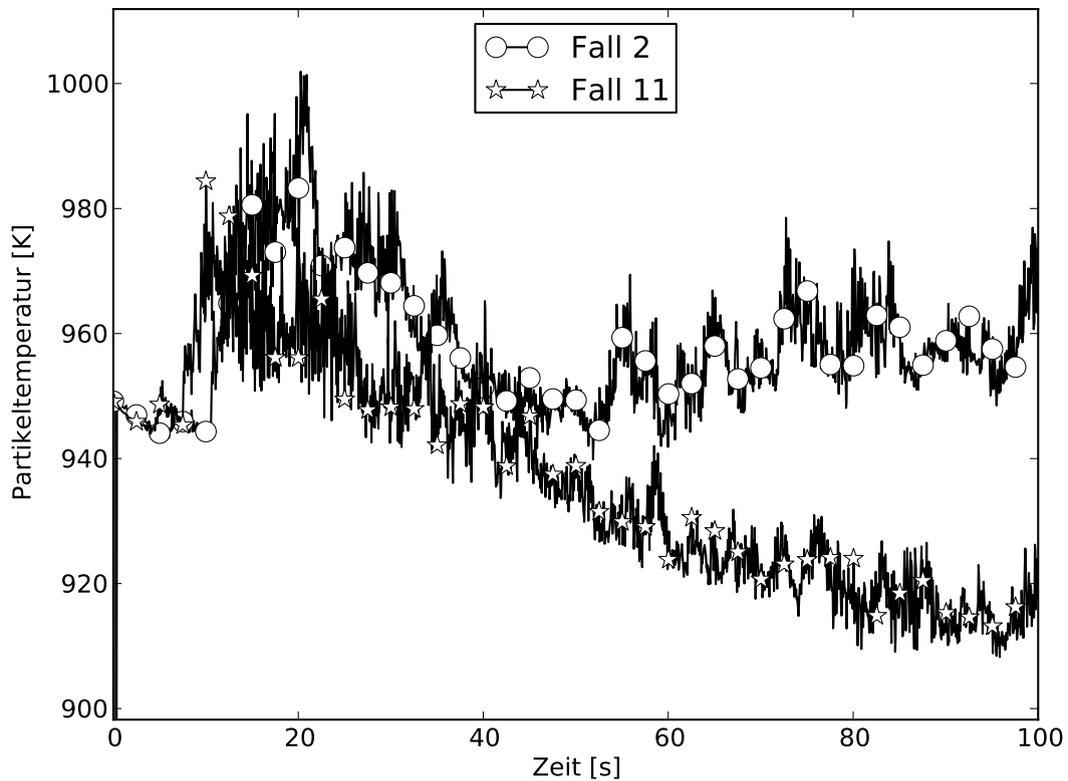
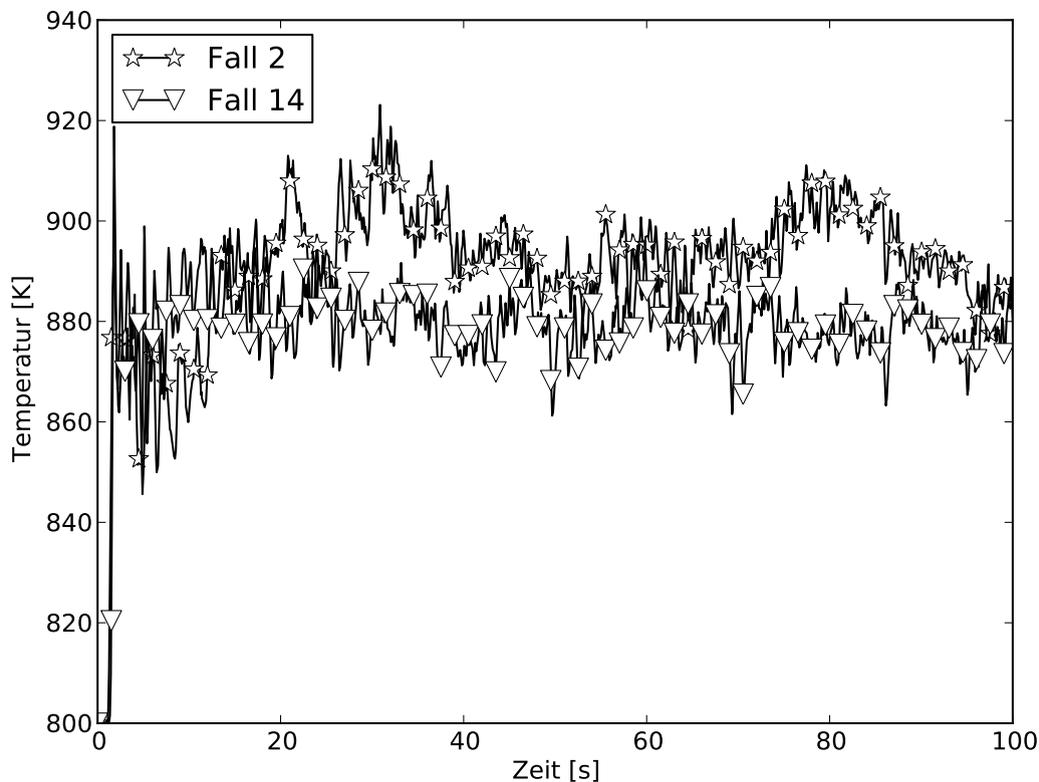


Abbildung 5.68: Über den Querschnitt massengemittelte Feststofftemperaturen über die Zeit aufgetragen (ca. 0.146 m über dem Reaktorboden, Fälle 2 und 11)

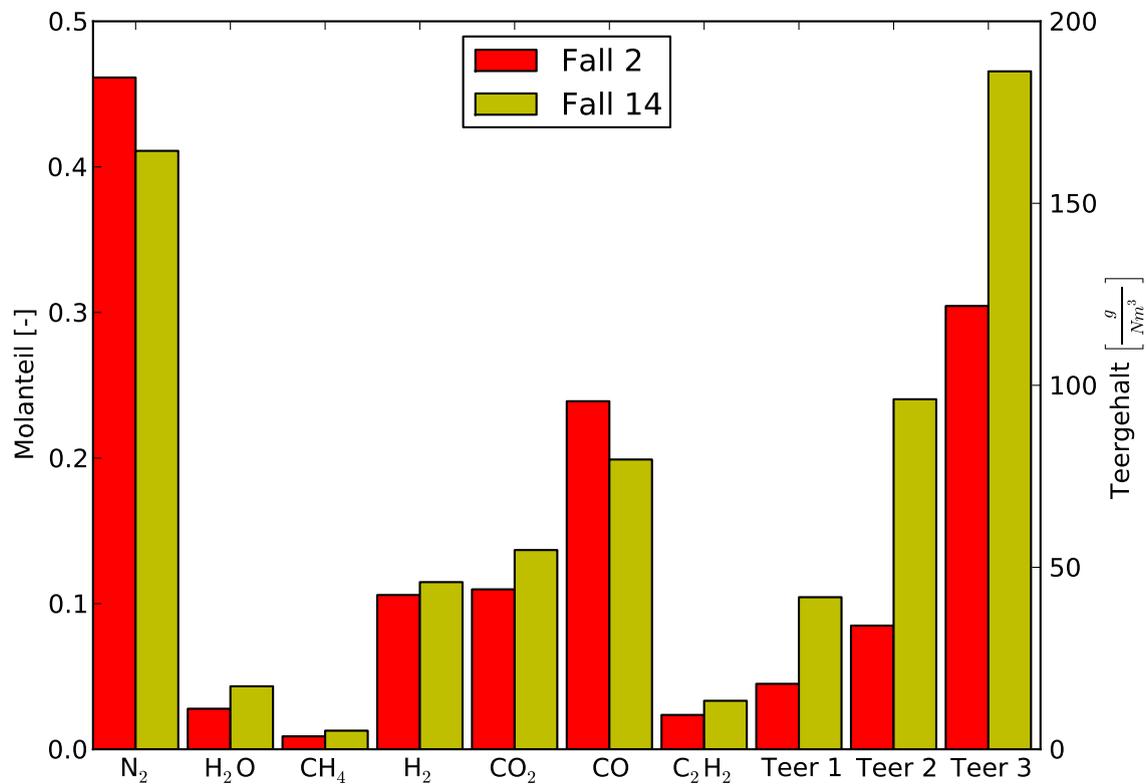
### 5.2.8 Einfluss der Partikelgröße des zugeführten Holzes



*Abbildung 5.69: Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene Partikelgrößen (Fälle 2 und 14 aus Tabelle 5.3)*

Die Partikelgröße des zugeführten Holzes ist ein in dieser Arbeit sehr stark vereinfachter Parameter. Es wurde angenommen, dass das zugeführte Holz monodispers als Kugeln zugeführt wird. Dabei wurden in allen Fällen außer dem hier vorgestellten Fall 14 ein Holzkugeldurchmesser von 4 mm angenommen. Der hier vorgestellte Fall betrachtet einen Holzkugeldurchmesser von 2 mm und damit Partikel, die nur ein Achtel des Volumens der Holzkugeln des Standardfalles haben. Um den zugeführten Massenstrom des Holzes konstant zu halten, wurden entsprechend achtmal so viele Holzpartikel im Fall 14 verwendet wie im Standardfall. Im Experiment werden natürlich keine Holzkugeln verwendet und zudem ist der Holzmassenstrom ein polydisperses Partikelgemisch. Kleinere Partikel tendieren bei ansonsten gleichen Bedingungen zu höheren Teerproduktanteilen, da die Aufheizung schneller von staten geht (mit entsprechenden Wirkungen auf die Anteile der Produkte der primären Pyrolyse). Zusätzlich wird innerhalb der Partikel die Verweilzeit reduziert, somit

kann die sogenannte sekundäre Pyrolyse nicht mehr so effektiv zur intrapartikulären Teerreduktion beitragen.

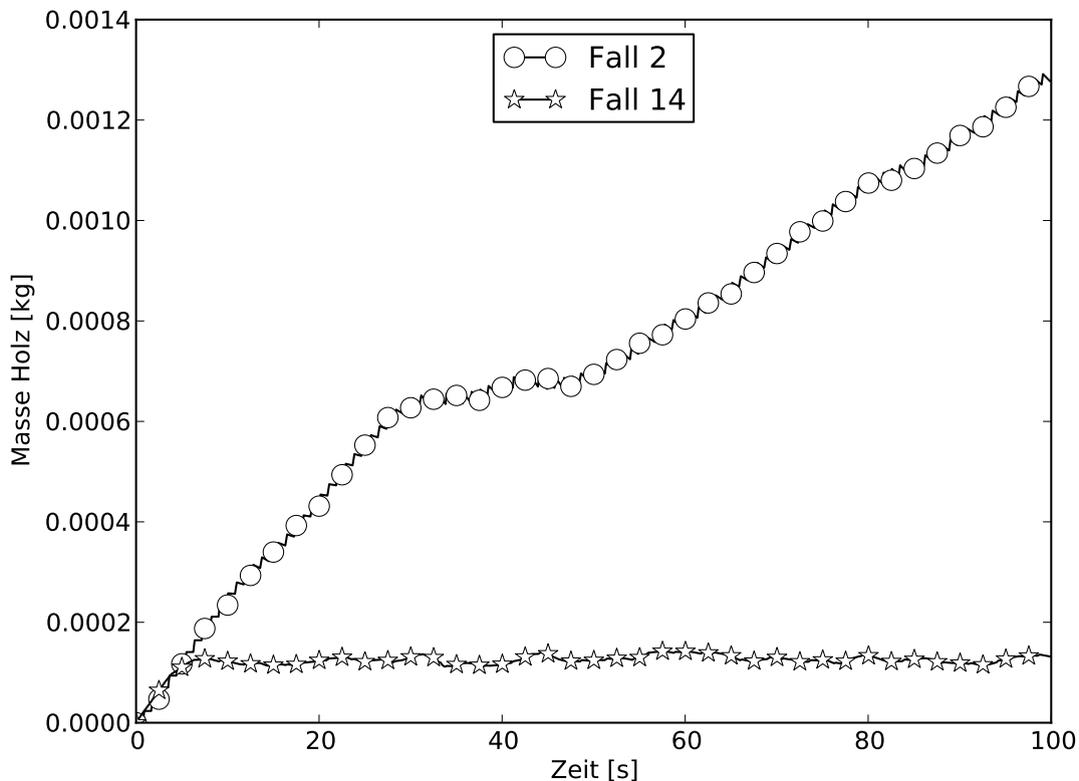


**Abbildung 5.70:** Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2 und 14

Abbildung 5.69 zeigt vergleichend die zeitlichen Auslasstemperaturverläufe für die Fälle 14 und 2. Auffällig ist die Ähnlichkeit des Temperaturverlaufes des Falles 14 zu den Ergebnissen des Szenarios mit einer erhöhten Lufteingangstemperatur (Fall 11 in Kapitel 5.2.7) und die erhöhten Temperaturen im Vergleich zu Fall 2. Abbildung 5.76 zeigt eine noch deutlichere Ausprägung unterschiedlicher, stationärer Betttemperaturen, bei denen wiederum Fall 2 höhere Temperaturen erreicht. Die zeitlich gemittelten Ergebnisse der Teer- und Produktgaskonzentrationen sind in Abbildung 5.70 aufgezeigt. Auch hier ist die Ähnlichkeit zum Fall 11 sehr stark ausgeprägt - teilweise sehen die Ergebnisse nahezu identisch aus. Im Fall 14 wird allerdings mehr Teer gebildet als im Fall 11, was direkt auf die reduzierte Holzpartikelgröße zurückzuführen ist.

Die zeitlichen Verläufe der Holz- und Holzkohlemassenentwicklung des Falles 14 unterscheiden sich deutlich von denen des Falles 2, wie es die Abbildungen 5.71 und

5.72 verdeutlichen. Die verringerte Holzpartikelgröße führt dazu, dass sich die Holzmasse im Reaktor innerhalb von ca. 10 s auf einen stationären Wert einpegelt (siehe Abbildung 5.71). Insofern bleibt hier zu bemerken, dass Simulationen mit einem polydispersen Holzmasseeintrag bei gleichem Holzmassestrom die Ergebnisse deutlich beeinflussen werden. Die zeitliche Entwicklung der Holzkohlemasse im Fall 14 führt nach 100 s Simulationszeit zu größeren Werten als im Fall 2 und auch zu höheren Werten als im Fall 11.

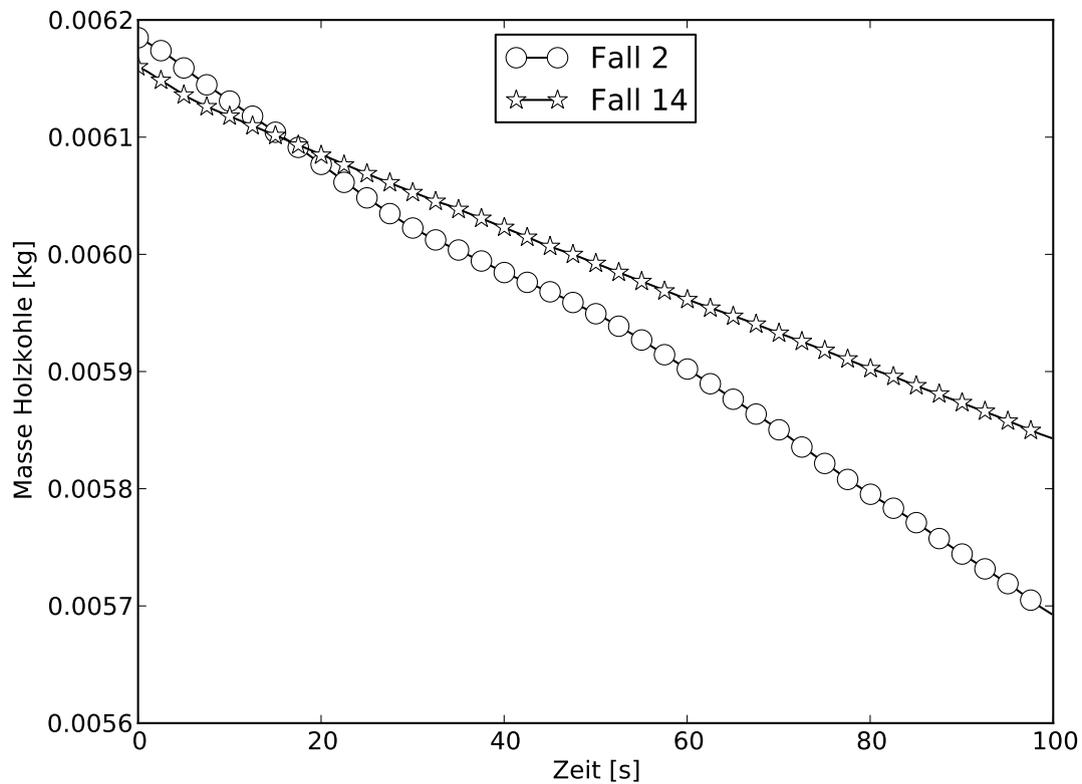


**Abbildung 5.71:** Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2 und 14)

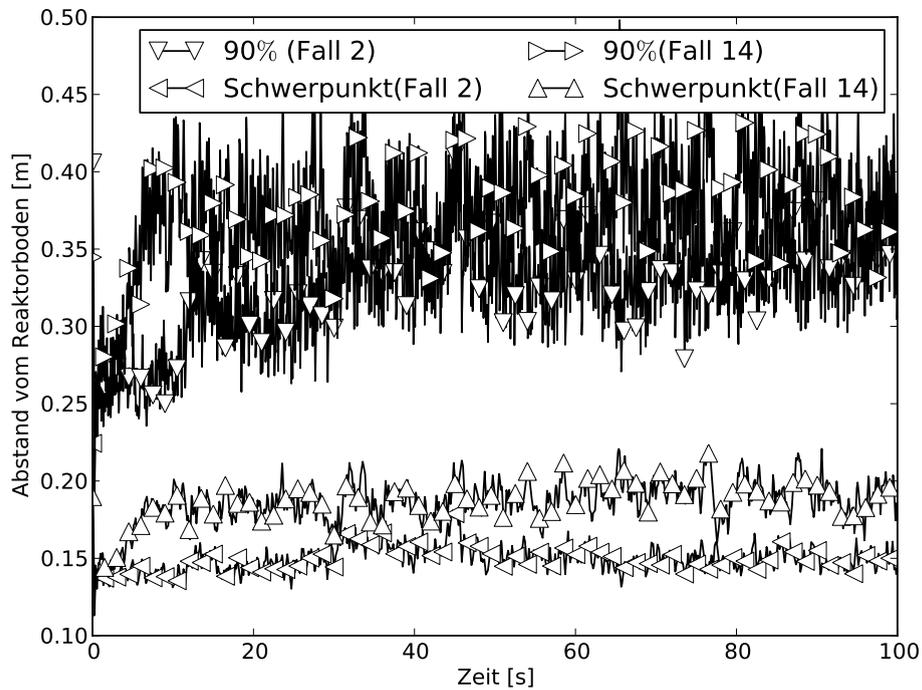
Bei Zugabe von kleineren Holzpartikeln ist, wie schon erwähnt, wegen der höheren Aufheizraten mit einer absolut größeren Produktion an gasförmigen Komponenten aus der primären Pyrolyse zu rechnen. Diese Gase tragen aufgrund ihres Molvolumens mit zur Fluidisierung der Wirbelschicht bei. Um dies zu verdeutlichen, kann der Bettschwerpunkt in Abbildung 5.73 herangezogen werden. Es zeigt sich, dass beide Maßzahlen für die Bettausdehnung (axialer Schwerpunkt und Betthöhe unter der sich 90 % der Bettmasse befinden) im Fall 14 um einiges größer sind als im Fall 2. Die Bettausdehnung ist im Fall 14 also höher, da mehr Produktgase gebildet werden (sichtbar auch in Abbildung 5.70 anhand der Stickstoffkonzentration).

Korrespondierend mit der frühen Stationarität der Holzmasse im Reaktor zeigen auch die Teer- und Produktgaskonzentrationen in den Abbildungen 5.74 und 5.75 eine sehr frühe Stationarität der Daten. An dieser Stelle kann man, da alle Größen bis auf die Holzkohlemasse ein lang anhaltendes stationäres Verhalten aufweisen, klar sehen, dass die Teerkonzentrationen, auch wenn sie über einen längeren Zeitraum gemittelt stationär aussehen, recht starke Schwingungen aufweisen. Insofern ist es plausibel, dass viele der in dieser Arbeit betrachteten Fälle bei Instationarität der Holzmasse im Reaktor sehr stark schwingende Teersignale aufweisen.

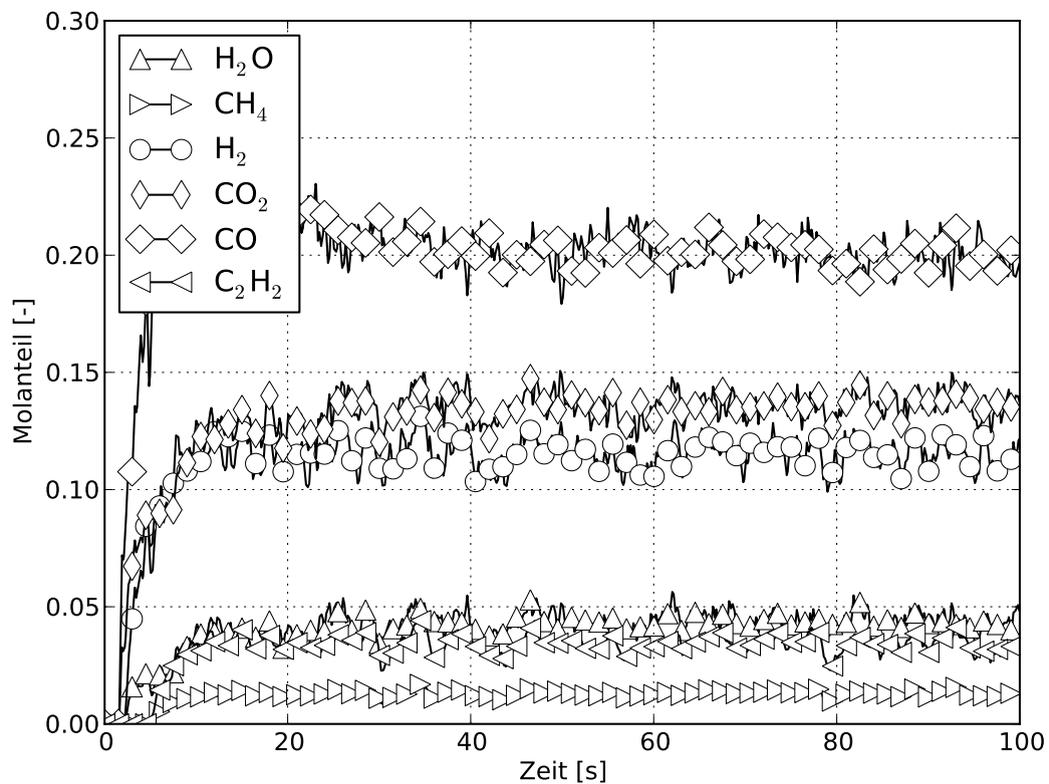
Da das Verhalten des in diesem Kapitel besprochenen Szenarios dem in Kapitel 5.2.7 so ähnlich ist, sind auch die selben Wirkmechanismen wie im Kapitel 5.2.7 heranzuziehen, um die erhaltenen Daten zu deuten.



**Abbildung 5.72:** Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2 und 14)



**Abbildung 5.73:** Axialer Schwerpunkt und Betthöhe bei 90 % der Feststoffmasse über die Zeit (Fälle 2 und 14)



**Abbildung 5.74:** Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 14)

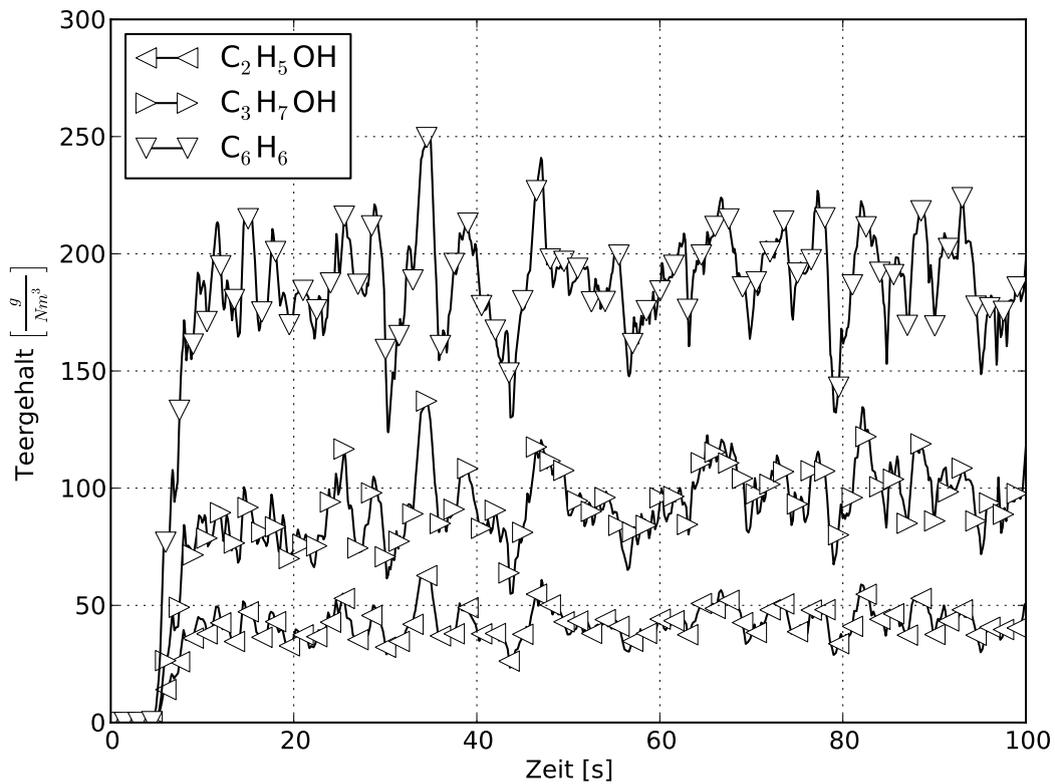


Abbildung 5.75: Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 14)

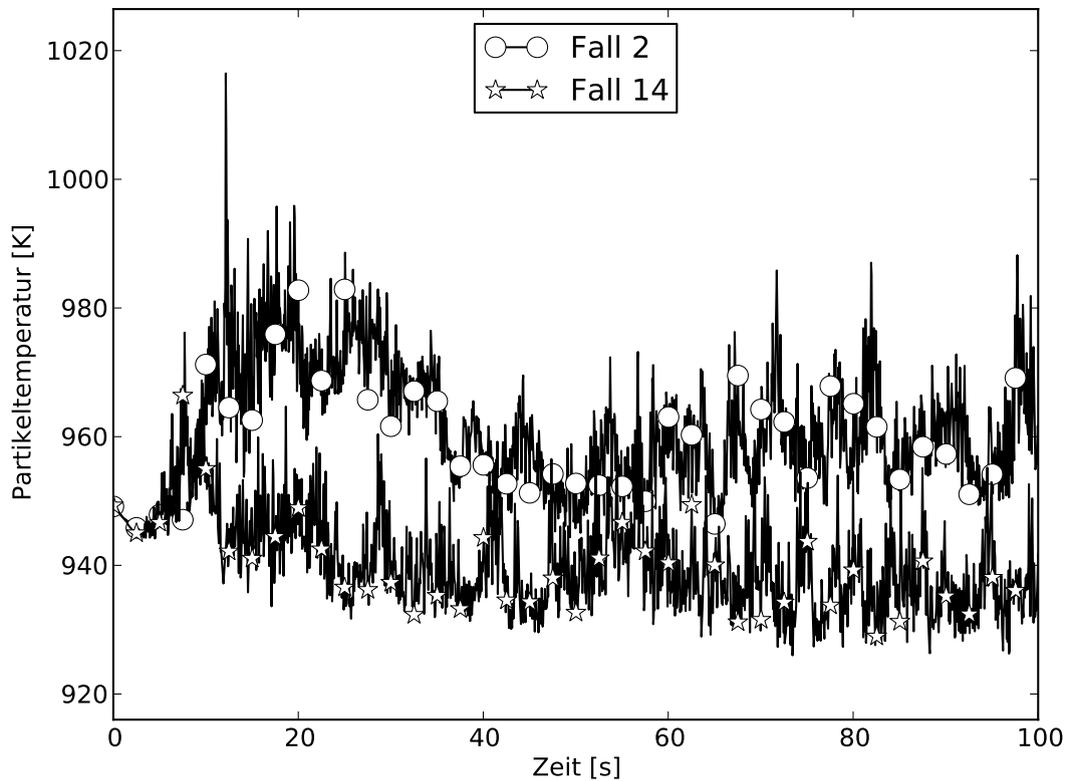
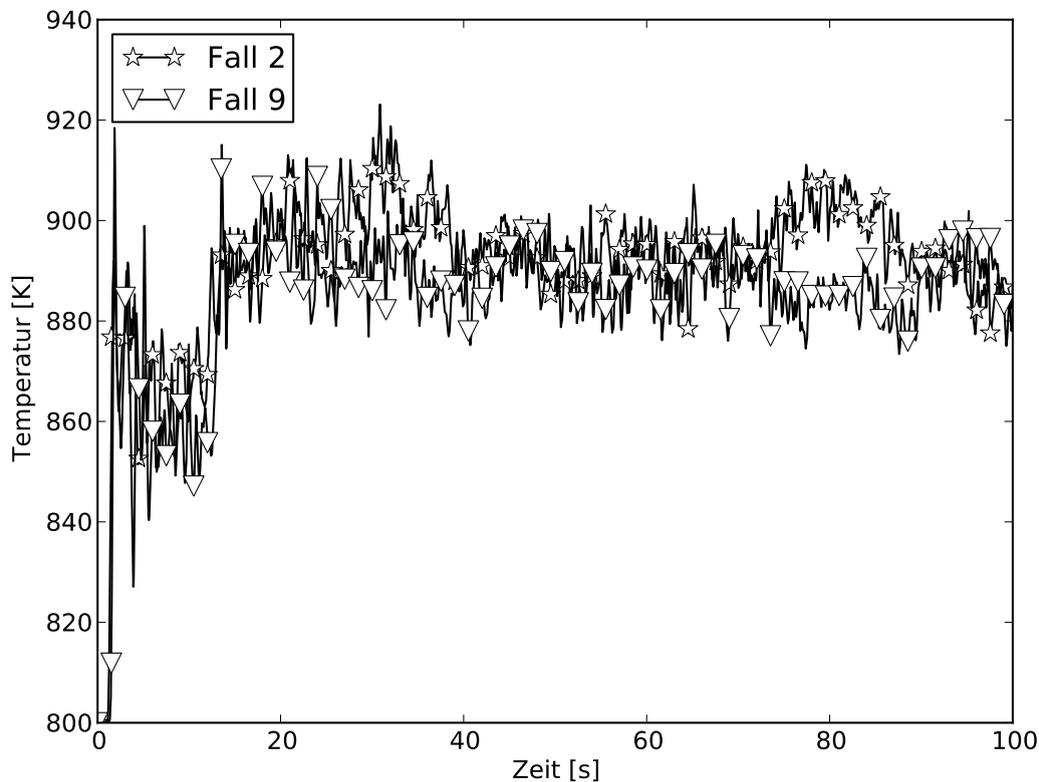


Abbildung 5.76: Über den Querschnitt massengemittelte Feststofftemperaturen über die Zeit aufgetragen (ca. 0.146 m über dem Reaktorboden, Fälle 2 und 14)

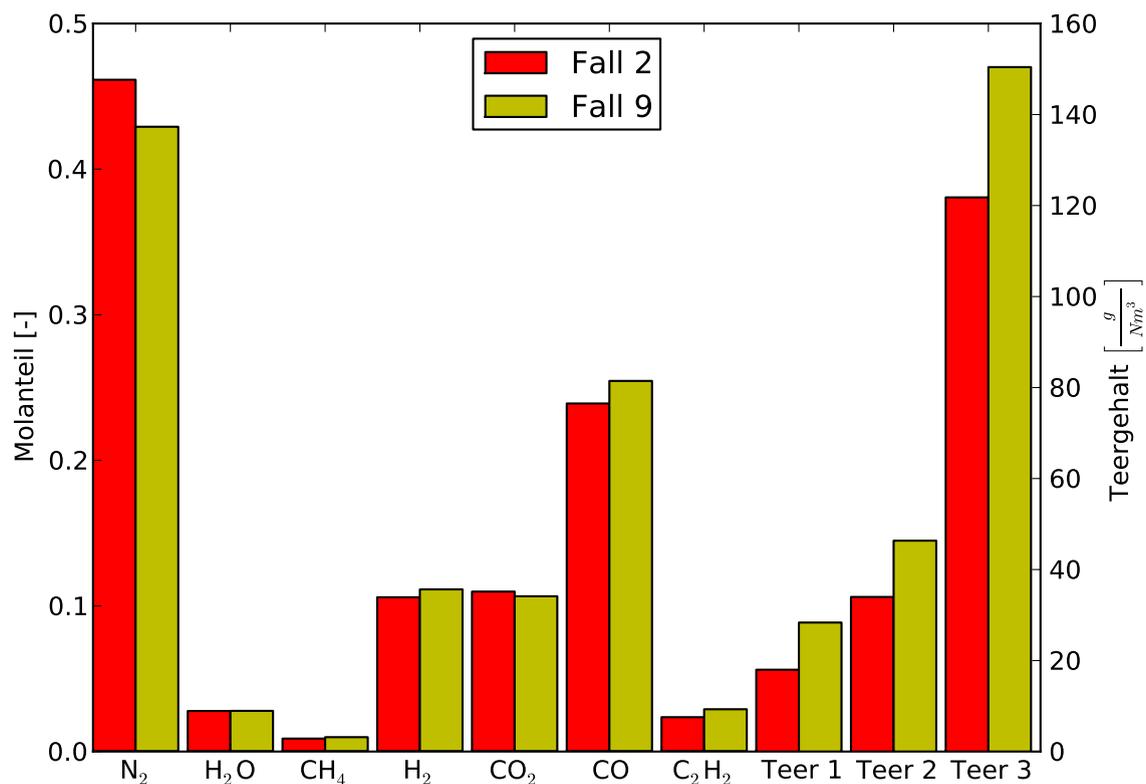
## 5.2.9 Einfluss der Partikeltemperatur des zugeführten Holzes



**Abbildung 5.77:** Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene initiale Holztemperaturen (Fälle 2 und 9 aus Tabelle 5.3)

Die Holzpartikeltemperatur zu Beginn des Abbrandes eines Holzpartikels ist in diesem Kapitel entsprechend Tabelle 5.3 auf 360 K anstelle der 300 K, die in allen anderen Fällen verwendet wurde, gesetzt worden. Der Bereich der möglichen Eintrittstemperaturen ist generell durch das in Kapitel 3.2.7 verwendete Trocknungsmodell begrenzt, da von einer isothermen Verdampfung des Wassers innerhalb des Holzpartikels ausgegangen wird. Dabei wurde die Verdampfungstemperatur auf 373.15 K gesetzt, was der Verdampfungstemperatur von Wasser bei Normaldruck entspricht. Das Thomson'sche Gesetz würde eine klare Abhängigkeit des Verdampfungsdruckes vom Durchmesser der Kapillaren verlangen, was hier nicht berücksichtigt wurde. Zudem impliziert die Verwendung des Normaldruckes, dass die Kapillaren alle nach außen offen sind und dort Normaldruck herrscht. Eine Holzpartikeltemperatur über der hier verwendeten Verdampfungstemperatur des Wasser impliziert, dass kein Wasser mehr im Holzpartikel vorhanden ist. Der Wert der Temperatur der Holzpartikel im Experiment ist nicht bekannt und kann nur geschätzt werden. Das Holz wird im

Experiment über eine Förderschnecke in den Reaktor gefahren. Bei den zahlreichen Umbauten am Reaktor wurde allerdings festgestellt, dass innerhalb der Förderschnecke kondensierte Pyrolyseprodukte abgelagert wurden, was entweder auf eine schon in der Förderschnecke beginnende primäre Pyrolyse des Holzes zurückzuführen ist oder darauf, dass Produktgas aus dem Reaktor in die Förderschnecke einströmt und dort kondensiert. Im Modell sollte die erhöhte Temperatur des Holzeintrages einen verringerten Wärmebedarf zur Aufheizung des Partikels zur Folge haben und damit zu lokal höheren Temperaturen im Reaktor führen.



**Abbildung 5.78:** Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2 und 9

Abbildung 5.77 zeigt die Auslasstemperaturen der Fälle 2 und 9 über die Zeit. Der Fall 9 zeigt tendenziell etwas niedrigere Temperaturen als der Fall 2. Die Konzentrationen der Produktgase und Teere in Abbildung 5.78 verdeutlichen, dass der Fall 9 höhere Werte an Teeren, Teerabbauprodukten und den Vergasungsprodukten Kohlenmonoxid und Wasserstoff hervorbringt als der Fall 2. Die Stickstoffkonzentration lässt den Rückschluss zu, dass in Fall 9 insgesamt mehr Produktgas frei wird.

Abbildung 5.79 und 5.80 zeigen die zeitlichen Verläufe der Holz- und Holzkohlemasse der Fälle 2 und 9. Beide Fälle zeigen nach 100 s eine in etwa gleiche Holzmasse im Reaktor, d.h., eventuelle Unterschiede in der gesamten Produktgasentwicklung können nicht an der Menge des umgesetzten Holzes liegen. Da die Holzkohleentwicklung der beiden Fälle in etwa parallel abläuft, lassen sich auch hier keine Rückschlüsse auf Unterschiede in Abbildung 5.78 ziehen.

Die höheren Werte an Wasserstoff können nur durch höhere Anteile des Holzgases an der primären Pyrolyse oder höhere Vergasungsraten der heterogenen Wasserstoffbildung durch die Vergasung von Wasser an der Holzkohle zustande kommen. Die vorliegenden Reaktortemperaturen zeigen, dass die primäre Pyrolyse den wesentlichen Einfluss hat. Tendenziell schlägt sich also die erhöhte Partikeltemperatur in einer stärkeren Produktgasbildung bei gleicher Holzmasse im Reaktor nieder. Eine signifikant höhere Betttemperatur konnte nicht nachgewiesen werden (siehe Abbildung 5.83).

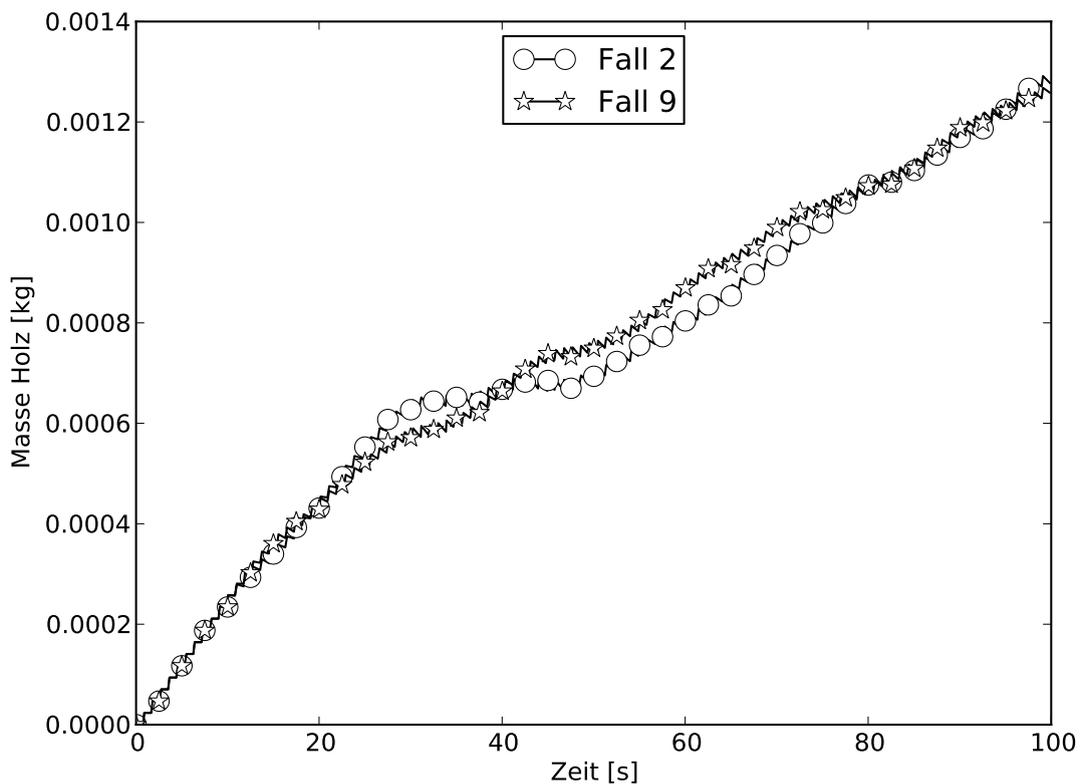


Abbildung 5.79: Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2 und 9)

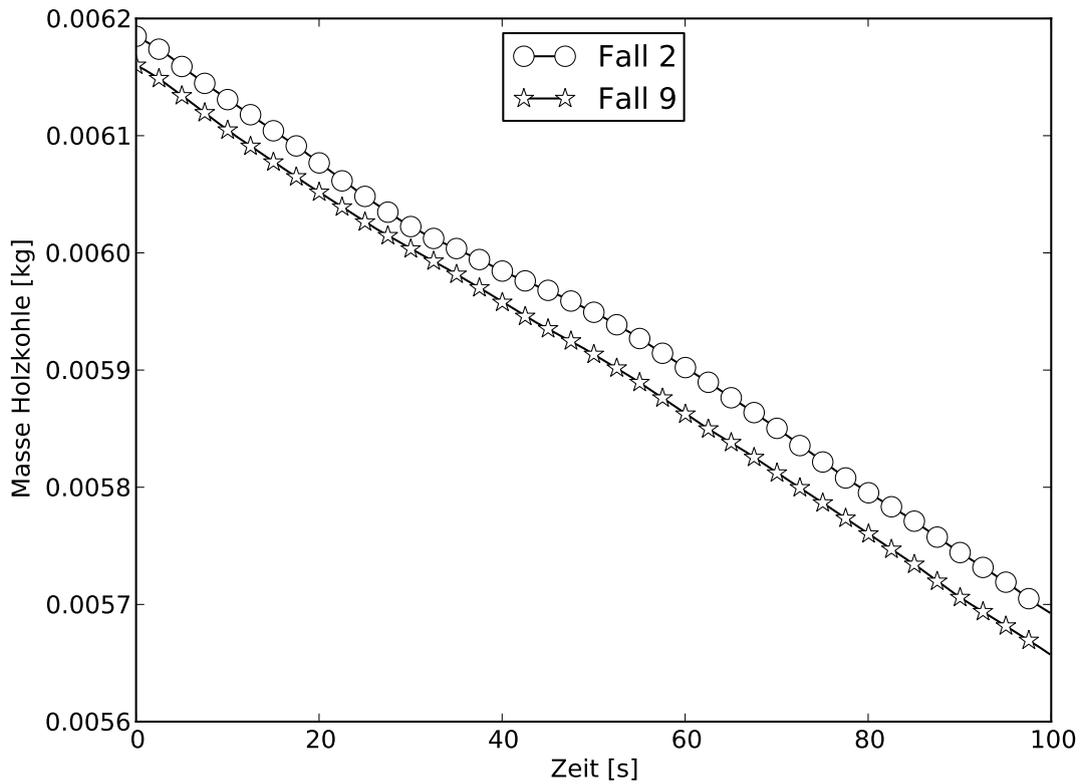


Abbildung 5.80: Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2 und 9)

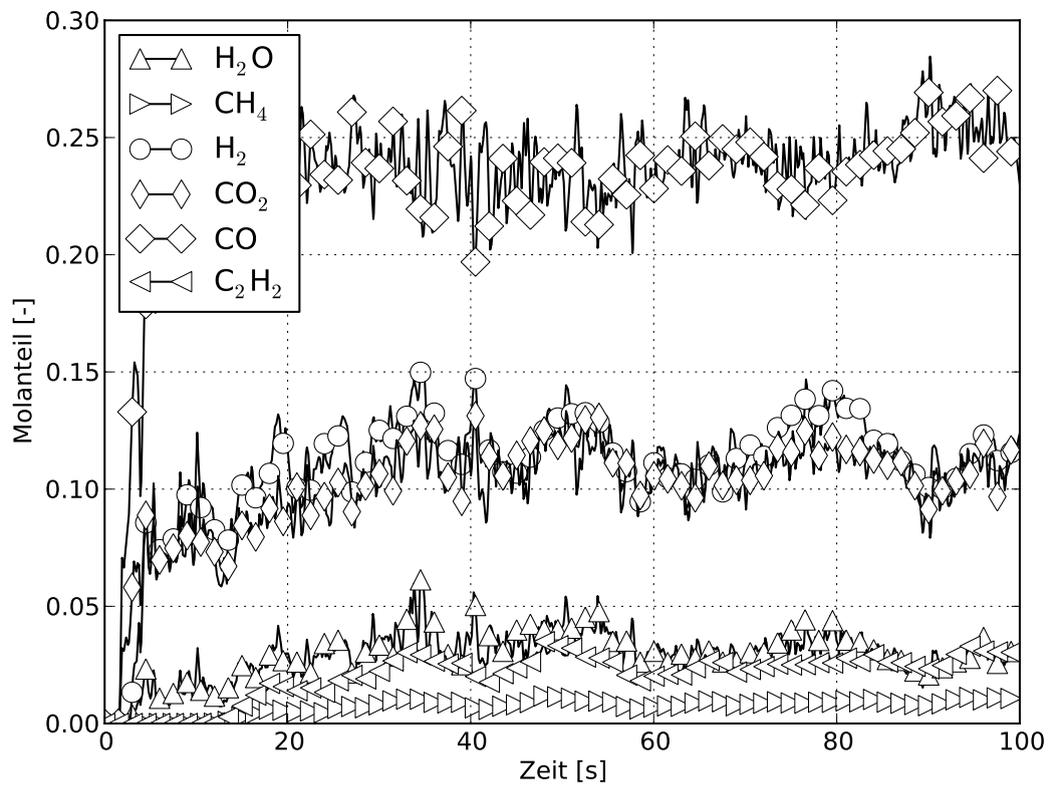


Abbildung 5.81: Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Rektorauslass (Fall 9)

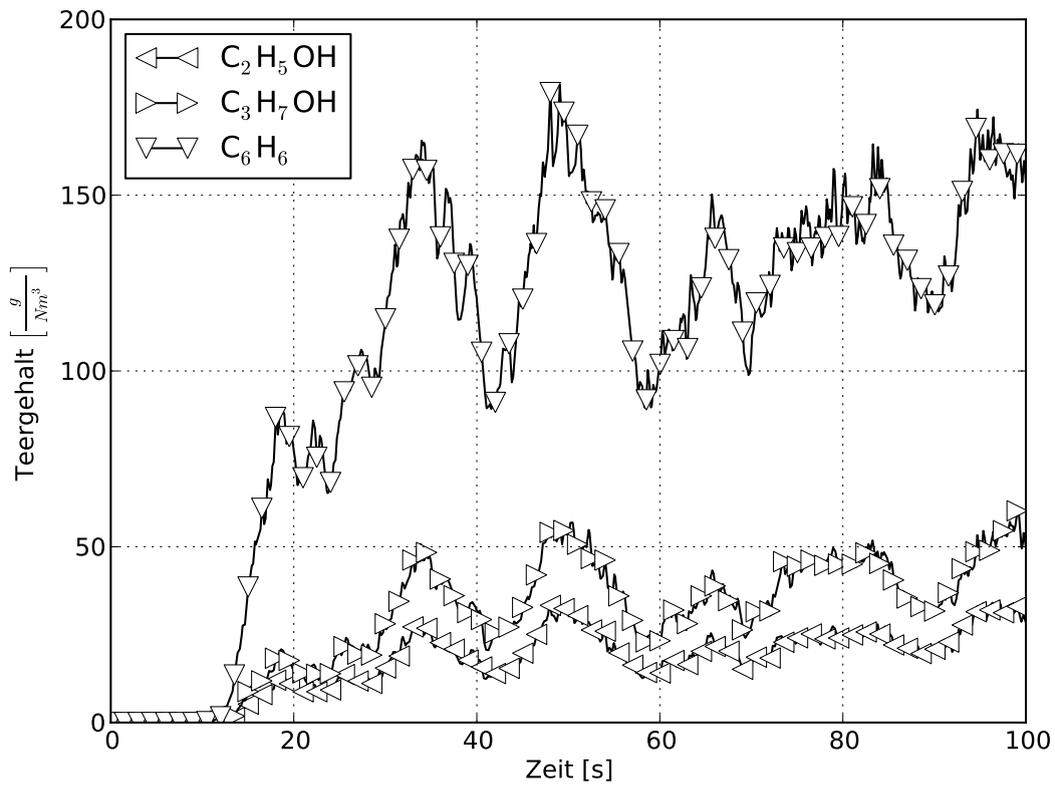


Abbildung 5.82: Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Reaktorauslass (Fall 9)

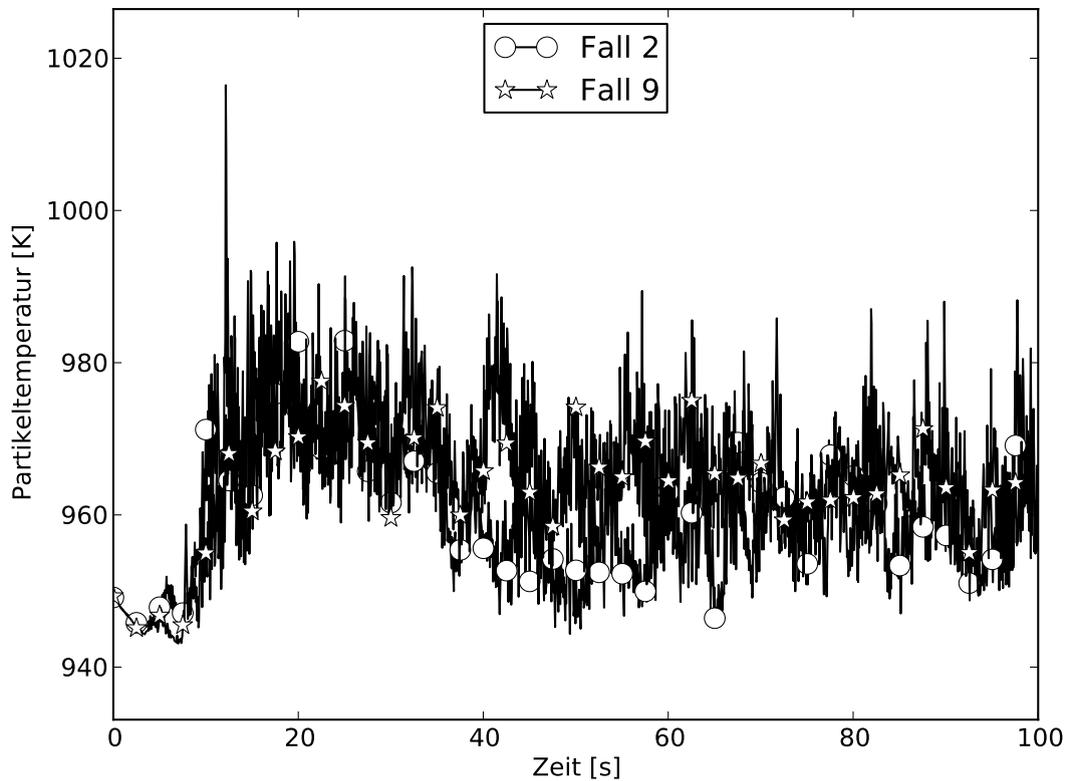
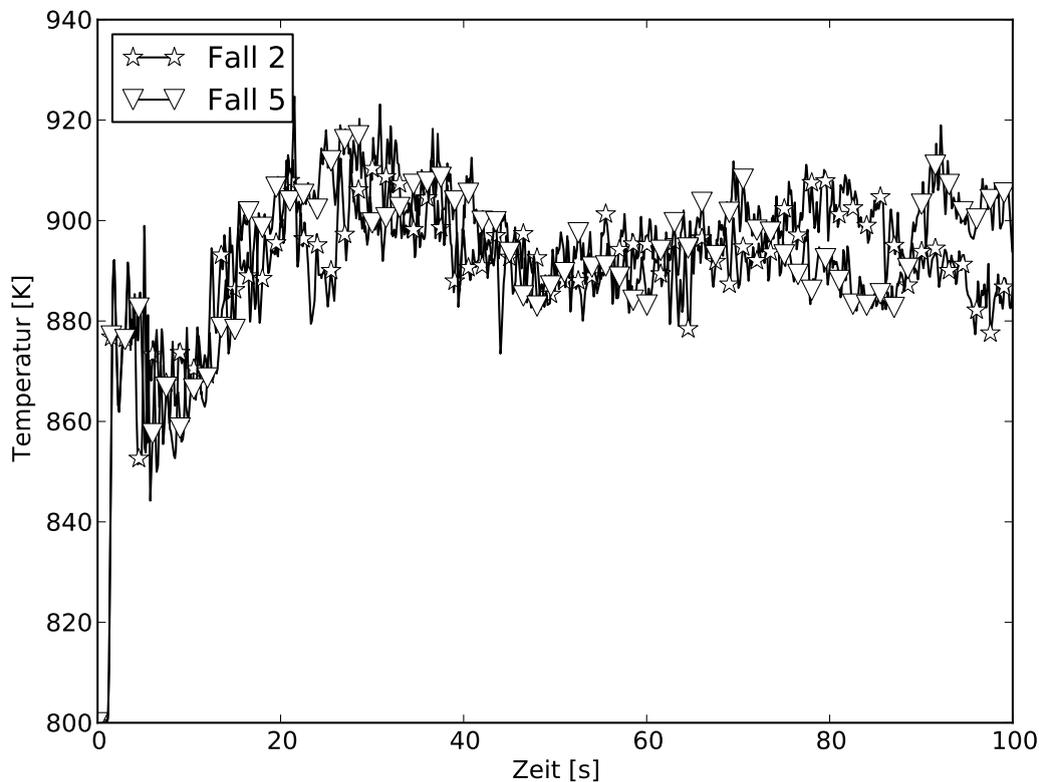


Abbildung 5.83: Über den Querschnitt massengemittelte Feststofftemperaturen über die Zeit aufgetragen (ca. 0.146 m über dem Reaktorboden, Fälle 2 und 9)

### 5.2.10 Einfluss der Kollisionsparameter

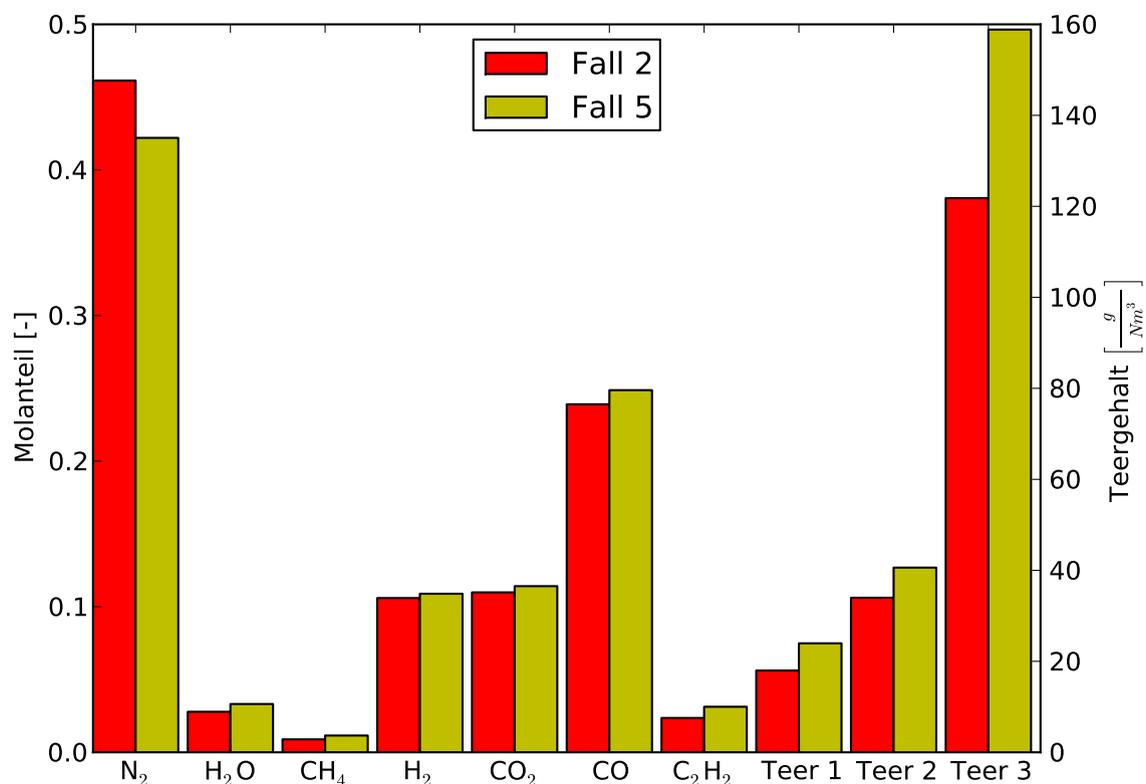


**Abbildung 5.84:** Auslasstemperaturen über die Zeit für verschiedene Kollisionsparameter (Fälle 2 und 5 aus Tabelle 5.3)

Innerhalb der Modellierung von Gas-Feststoff-Strömungen hat das Kollisionsverhalten der Partikel eine wesentliche Bedeutung. Variationen in den Kollisionsparametern können zu stark unterschiedlichen Ergebnissen bzgl. der Art und Weise der Fluidisierung führen. In dieser Arbeit ist das Kollisionsverhalten innerhalb der Simulation stark vereinfacht abgebildet worden. So wurden die Partikel als kugelförmig angenommen ohne dabei zu zerbrechen bzw. zu verkleben. Im Experiment sind die Partikel nicht kugelförmig, unter Umständen können die experimentell verwendeten Partikel nicht einmal konvex sein. Das Kollisionsverhalten beliebiger Körper ist deutlich schwieriger zu beschreiben als das von Kugeln, da je nachdem wie der Körper aussieht, damit zu rechnen ist, dass Mehrfachkontakte zwischen zwei Partikeln auftreten, dass flächige anstelle von punktuellen Berührungen vorliegen und die Orientierung der Partikel selbst eine Rolle spielt (dies zieht die Berücksichtigung weiterer Bewegungsgleichungen der Partikel für die Orientierung nach sich). Das Berücksichtigen von asymmetrischen Körpern bei der Berechnung der Kollisi-

onsdynamik führt zwangsläufig dazu, dass der Zeitschritt der Partikelbewegung an die Rotationsgeschwindigkeit der Partikel gebunden ist. Schlussfolgernd lässt sich festhalten: Kollisionsdynamiken beliebiger Körper sind daher auch beliebig kompliziert.

Um überhaupt eine Aussage über die Sensitivität der hier vorliegenden Simulation bzgl. der Kollisionsparameter der Kollision kugelförmiger Partikel zu erhalten, wurden die Parameter der Kollisionsberechnung wie in Tabelle 5.3 aufgezeigt variiert. Die Verlustbeiwerte der Partikel-Partikel- und Partikel-Wand-Kollisionen wurden von 0.8 auf 0.6 (Partikel-Partikel) bzw. von 0.6 auf 0.4 (Partikel-Wand) ausgehend vom Standardfall geändert. Niedrigere Verlustbeiwerte führen im Allgemeinen zu einer stärkeren Clusterbildung in der Wirbelschicht.



**Abbildung 5.85:** Über die letzten 10 s der Simulation gemittelte Auslasskonzentrationen der Fälle 2 und 5

Abbildung 5.84 zeigt die Auslasstemperaturen der beiden Fälle. Beide Fälle haben in den ersten 70 s ähnliche Temperaturverläufe. In den letzten 30 s entwickeln sich die Temperaturen in unterschiedliche Richtungen, wobei der Fall 5 eine um im Mittel

16 K höhere Temperatur aufweist als der Fall 2 (siehe Tabelle 5.4). Einhergehend mit der Temperatursteigerung in den letzten 30 s zeigt Abbildung 5.82 steigende Teerproduktionen und Abbildung 5.81 steigende Kohlenmonoxid- und sinkende Kohlendioxidkonzentrationen. Zusammenfassend zeigt Abbildung 5.85 den direkten Vergleich der über die letzten 10 s gemittelten Produkt- und Teerkonzentrationen am Auslass des Reaktors. Fall 5 zeigt gegenüber Fall 2 eine absolut höhere Menge an Produktgasen (siehe Stickstoff in Abbildung 5.85) und höhere Konzentrationen aller anderen beteiligten Komponenten. Die höhere Produktgasausbeute in Fall 5 ist allerdings aufgrund der höheren Holzmasse im Reaktor auch zu erwarten (siehe Abbildung 5.86). Die Holzkohlemasse im Reaktor in Abbildung 5.87 entwickelt sich in beiden Fällen sehr ähnlich und lässt daher keine weiteren Rückschlüsse zu. Die gesenkten Verlustbeiwerte schlagen sich also zumindest bezüglich des instationären Charakters dieses Szenarios in höheren Produktgasausbeuten nieder. Weder die Betttemperaturen noch die Schwerpunktdaten der Bettmasse der beiden hier diskutierten Fälle zeigen, entgegen den Erwartungen, deutliche Unterschiede zum Standardfall. Aus diesem Grund werden sie hier nicht gezeigt. Die Übertragung des Verhaltens inerter Wirbelschichten auf das reaktiver Wirbelschichten ist also in diesem Punkt zweifelhaft.

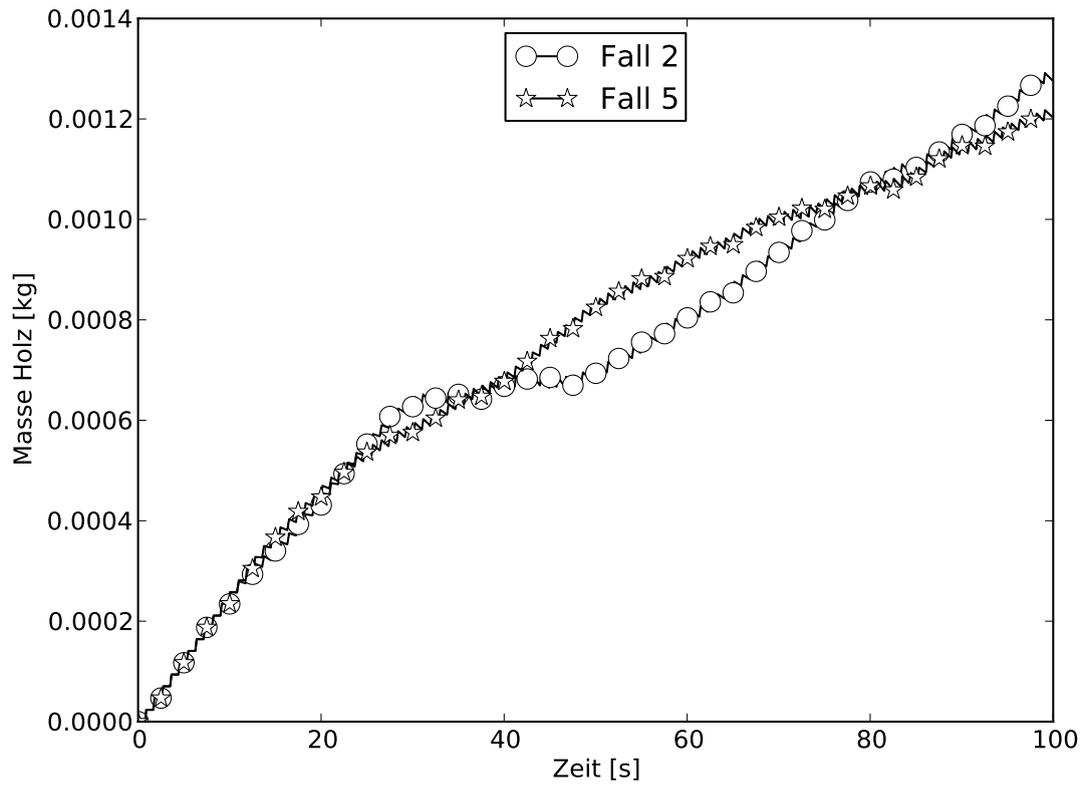


Abbildung 5.86: Gesamtholzmasse über die Zeit (Fälle 2 und 5)

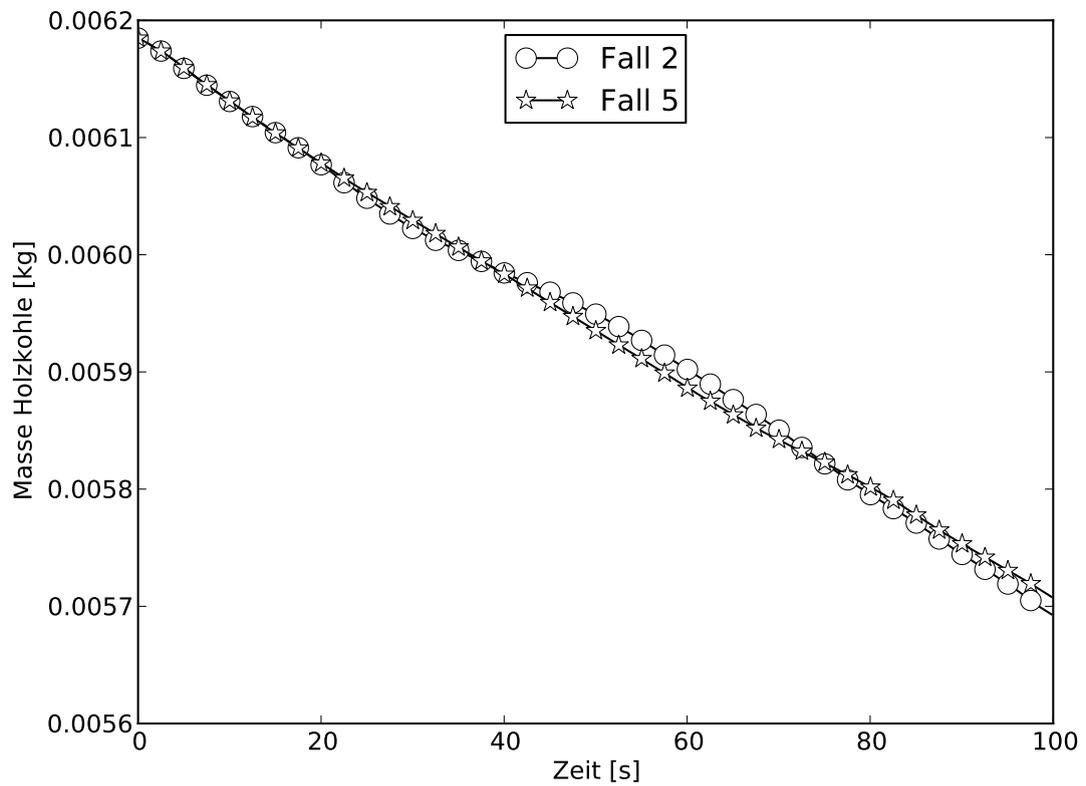


Abbildung 5.87: Gesamtholzkohlemasse über die Zeit (Fälle 2 und 5)

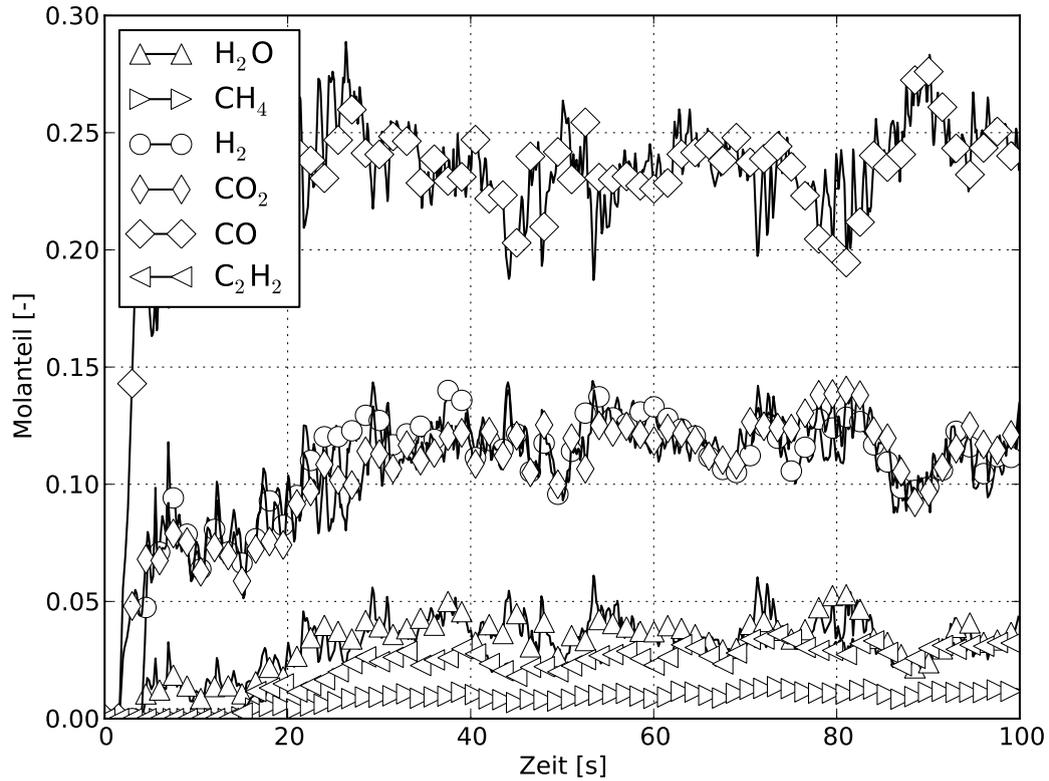


Abbildung 5.88: Zeitlicher Verlauf der Produktgaskonzentrationen am Rektorauslass (Fall 5)

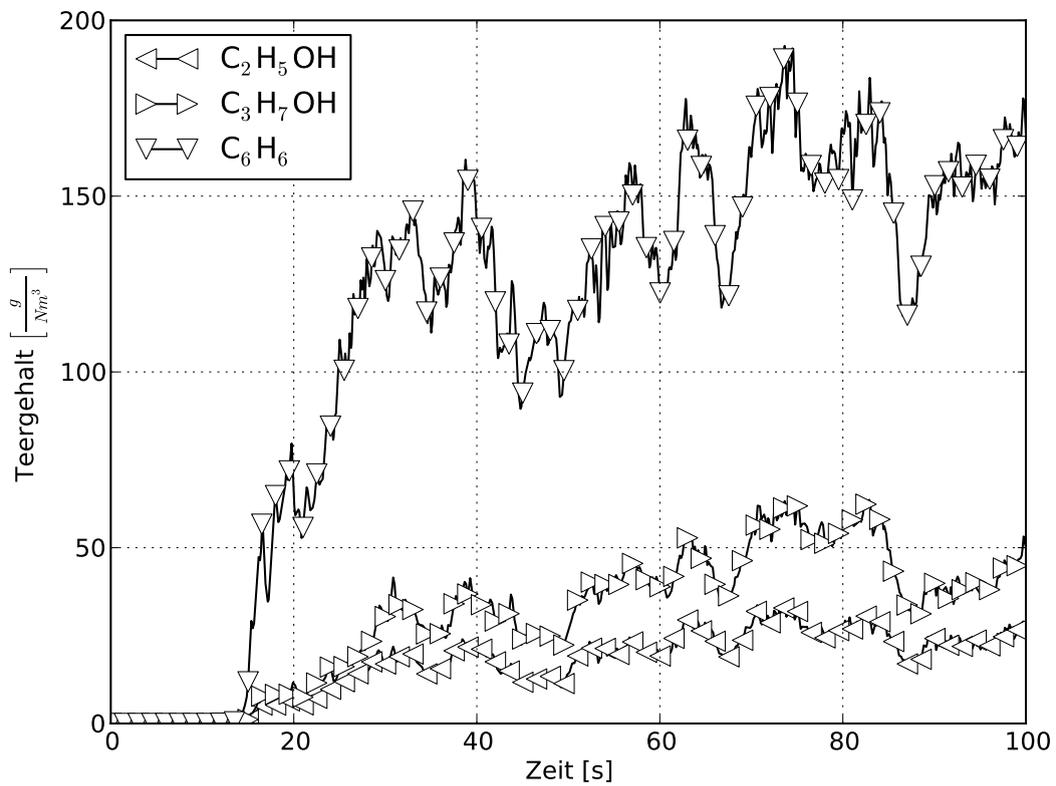
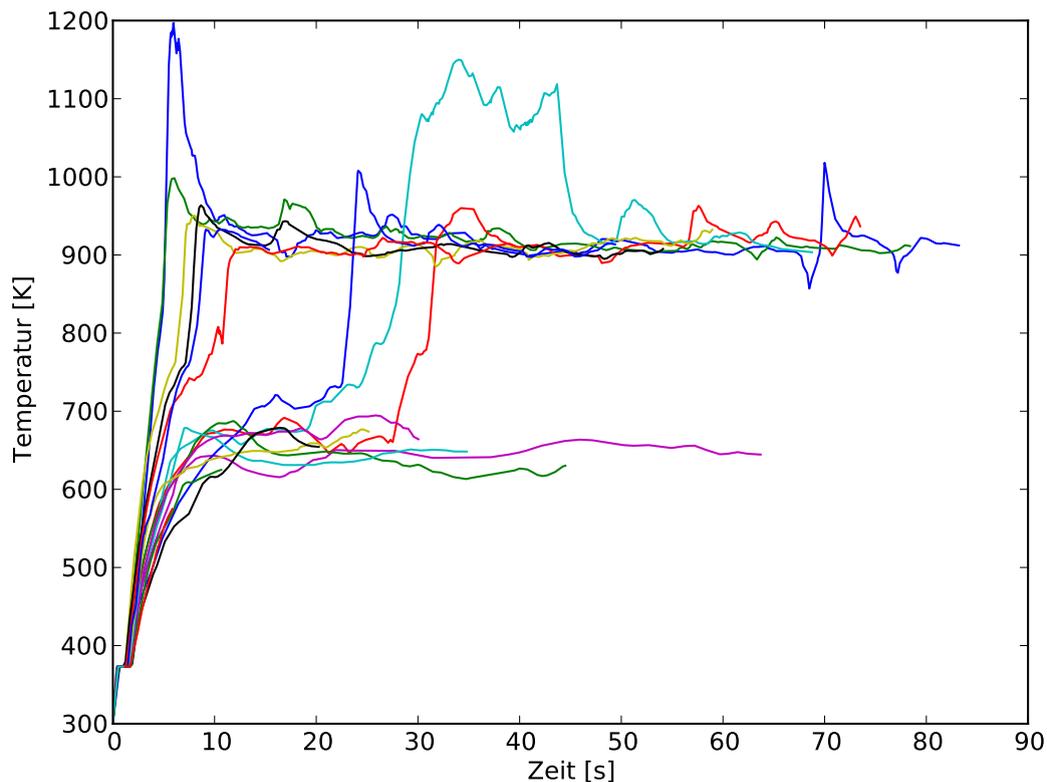


Abbildung 5.89: Zeitlicher Verlauf der Teerkonzentrationen am Rektorauslass (Fall 5)

### 5.2.11 Partikelhistorien in einer Wirbelschicht

Einer der Vorteile der Euler-Lagrange-Simulationen gegenüber anderen vereinfachten Simulationsarten (Euler-Euler, Zell- und Zonenmodellen etc.) ist der Zugriff auf die zeitlich aufgelösten Vorgänge einzelner Partikel. Dies soll hier beispielhaft anhand der Prozesse der Aufheizung, Trocknung, Pyrolyse und Vergasung gezeigt werden.

Das verwendete Szenario ist den Fällen 6 und 14 ähnlich. Es werden bei identischen Bedingungen wie im Standardfall  $10.33 \text{ Holzpartikel/s}$  eines Durchmessers von ca. 2.11 mm in den Reaktor eingebracht. Der Partikeldurchmesser wurde so gewählt, dass das Partikel nach der Schrumpfung den Durchmesser der größten verwendeten Holzkohlepartikel hat (1.5 mm), damit das Partikel zumindest nach der Pyrolyse fluidisiert werden kann. Die Simulationsdauer der hier gezeigten Daten beträgt nur ca. 84 s, da die Daten hier aus einer überarbeiteten Version der Simulation hervorgehen, die ein eindeutiges Identifizieren einzelner Partikel erlaubt.



**Abbildung 5.90:** Zeitlicher Verlauf der Partikeltemperatur (jedes 50ste Holzpartikel)

Abbildung 5.90 zeigt den Temperaturverlauf einiger Holzpartikel im Reaktor (es wird nur jedes 50ste der eingebrachten Holzpartikel gezeigt), wobei der Start der Histo-

rie aller Partikel auf einen gemeinsamen Zeitpunkt gelegt wurde, um den Vergleich zu erleichtern. Die ersten Partikel haben aufgrund der noch nicht abgeklungenen Anfangsbedingungen der Simulation noch keinen repräsentativen Charakter. Aus den Temperaturverläufen zeigt sich, dass es keinen einzelnen repräsentativen Partikelabbrandvorgang gibt. Jedes Partikel hat aufgrund der für das einzelne Partikel individuell vorliegenden Randbedingungen seine ganz eigene Historie, wobei sich natürlich starke Ähnlichkeiten ergeben, da viele Betteigenschaften durch die starke Fluidisierung nahezu homogen sind.

Grundlegend zeigt allerdings gerade in der Anfangsphase (Aufheizung und Trocknung) jedes Partikel ein ähnliches Verhalten. Mit der Anfangstemperatur beginnend heizt sich das Partikel zunächst auf Trocknungstemperatur auf. Dabei ergibt sich eine annähernd lineare Heizrate. Die Unterschiede bzgl. dieser Heizrate unter den einzelnen Holzpartikel sind minimal, wie es Abbildung 5.90 deutlich zeigt. Nach der ersten Aufheizphase folgt das Trocknen der Partikel. Abbildung 5.93 zeigt die gleichen Partikel wie in Abbildung 5.90, wobei hier der Wasseranteil der einzelnen Partikel über die Zeit aufgetragen wurde. Auch hier zeigen sich keine großen Unterschiede in den Verdampfungsraten. Der Wasseranteil sinkt annähernd linear über die Zeit.

Nachdem ein Partikel getrocknet ist, beginnt eine zweite Aufheizphase des Partikels (siehe Abbildung 5.90). Diese Aufheizung ist aufgrund der niedrigen Starttemperatur (die Trocknung wurde isotherm bei 373.15 K vollzogen) nicht sofort in der Lage, die Pyrolyse des Partikels zu starten. Abbildung 5.94 zeigt den Partikelholzanteil. Während der Trocknung steigt der Holzanteil, da der Wasseranteil in den Partikeln sinkt. Daraufhin folgt eine Periode mit konstantem Holzanteil und steigender Temperatur. In den Abbildungen 5.92 und 5.91 ist diese Periode gut anhand der konstanten Dichte bzw. der konstanten Partikelmasse erkennbar.

Sobald die Pyrolyse begonnen hat, fällt der Holzanteil und der Holzkohleanteil steigt monoton (siehe Abbildung 5.95). Nach Ablauf der Pyrolyse heizen sich die Partikel weiter auf und erreichen die Betttemperatur. Diese dritte Phase der Aufheizung ist mit einer höheren Heizrate verbunden, da die primäre Pyrolyse als endotherme

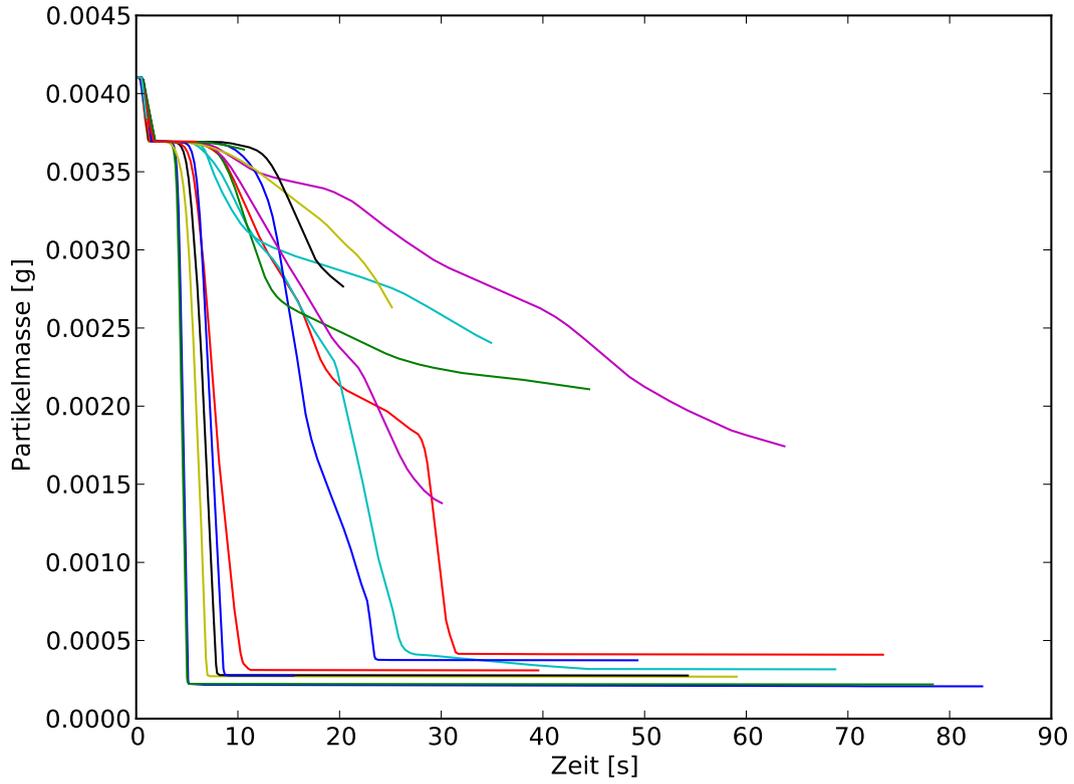


Abbildung 5.91: Zeitlicher Verlauf der Partikelmasse (jedes 50ste Holzpartikel)

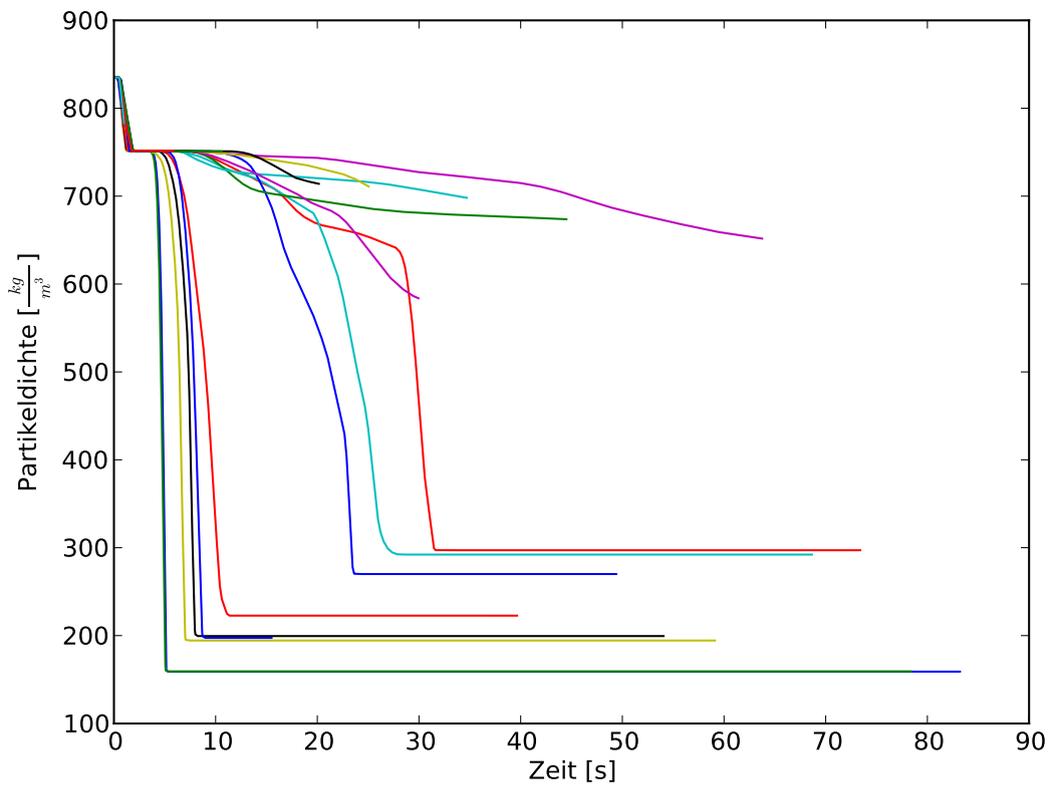
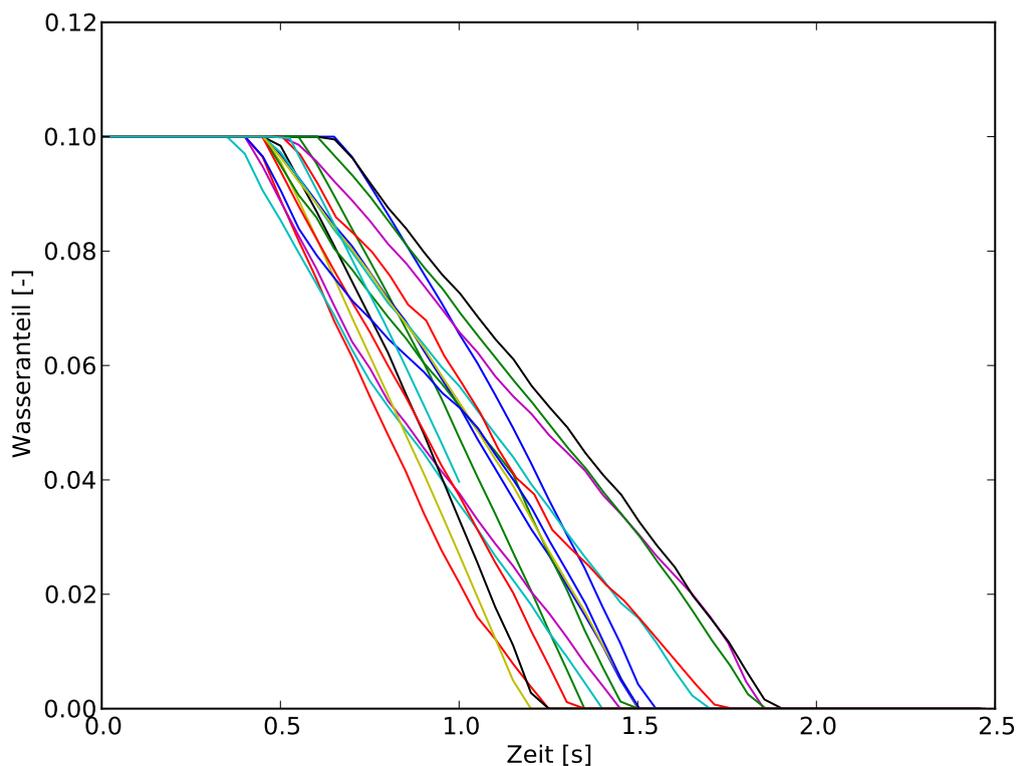


Abbildung 5.92: Zeitlicher Verlauf der Partikeldichte (jedes 50ste Holzpartikel)

Reaktion modelliert wurde und daher der Aufheizung entgegengewirkt hat, was nach Vollendung der primären Pyrolyse nicht mehr passiert.

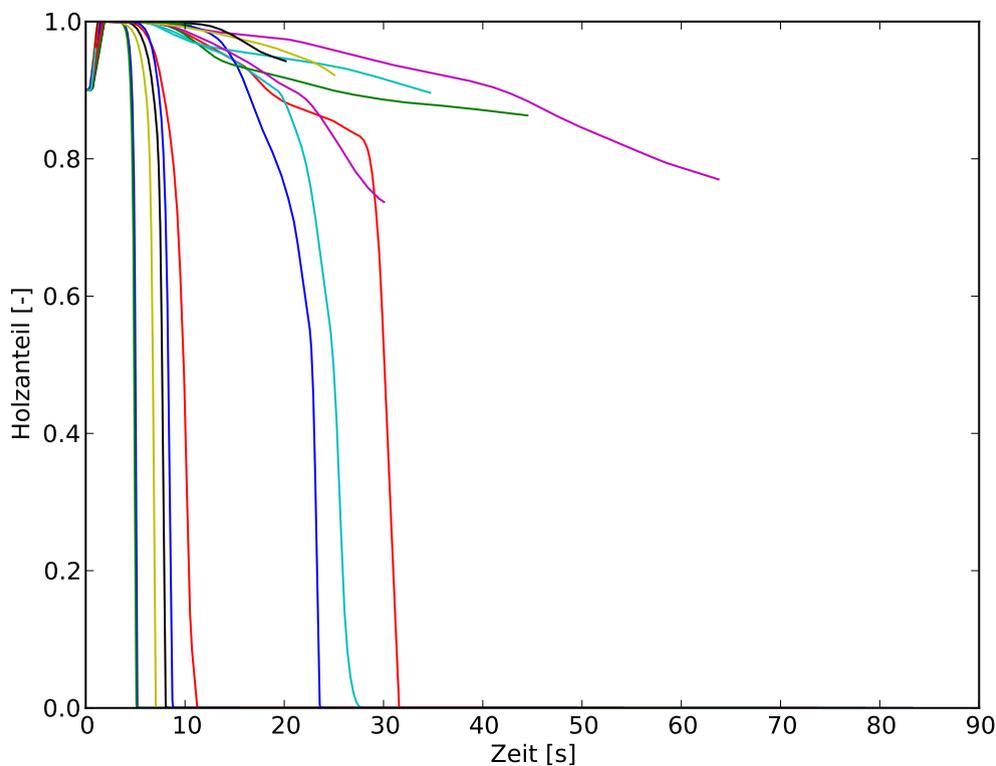
Abbildung 5.90 zeigt, dass es grob eingeteilt zwei Typen von Partikeln gibt: Partikel die schnell aufheizen und schnell pyrolysieren und deren Massenabbau (siehe Abbildung 5.91) daher sehr schnell von statten geht. Bei der zweiten Klasse von Partikeln laufen die Vorgänge langsamer ab und es kommt zu einer deutlich ausgeprägten Schulter im Temperaturverlauf der Partikel bei etwa 700 K (siehe Abbildung 5.90). Diese Schulter hängt unmittelbar mit der Endothermie der primären Pyrolyse zusammen. Die verwendete Kinetik der primären Pyrolyse zeigt eine recht starke Abhängigkeit der Holzkohleausbeute von der Aufheizrate und man kann daher in Abbildung 5.92 Dichteunterschiede von ca.  $100 \text{ kg/m}^3$  (nach Beendigung der Pyrolyse) sehen, was natürlich direkt auf die Fluidisierung der Partikel zurückwirkt.



**Abbildung 5.93:** Zeitlicher Verlauf des Partikelwasseranteils (jedes 50ste Holzpartikel)

Die Gründe dafür, dass man die einzelnen Partikel nur schwer in eine vereinfachte, historienfeste Partikelklasse einteilen kann, sollen anhand der Abbildungen 5.96 bis 5.102 erläutert werden. Es werden drei beliebige Partikel hinsichtlich ihrer zeitlichen

Temperatur-, Masse, Holzanteils-, Holzkohlenanteils- und Dichteentwicklung untersucht und dies wird anhand der Position der Partikel im Reaktor diskutiert. Die Partikel werden sukzessive alle am selben Ort in den Reaktor gegeben und fallen zunächst alle auf den Boden des Reaktors (linke Seite). Aufgrund der einseitigen Holzzugabe ist dies der Punkt am Boden des Reaktors, wo relativ niedrige Temperaturen vorherrschen (solange das frische Holz sich hier sammeln kann). Die Partikel wandern alle auf den rechten Rand des Reaktors zu (siehe Abbildung 5.101). Partikel 1 heizt sich ähnlich wie Partikel 2 auf - jedoch zeitlich versetzt (Abbildung 5.96). Die Partikeltemperatur von Partikel 3 bleibt über den betrachteten Zeitraum relativ klein auf einem Plateau von ca. 700 K bis 750 K. Dies erklärt sich über die noch nicht abgeschlossene primäre Pyrolyse und der damit verbundenen endothermen Reaktion innerhalb des Partikels (siehe Abbildung 5.100).



**Abbildung 5.94:** Zeitlicher Verlauf des Partikelholzanteils (jedes 50ste Holzpartikel)

Sowohl die finale Temperaturerhöhung von Partikel 1 als auch von Partikel 2 treten zeitgleich mit dem Abheben der Partikel vom Reaktorboden auf. Die niedrige Temperatur direkt am Reaktorboden ist ein Effekt, der durch die Vernachlässigung der Wärmeleitung bzw. Wärmestrahlung innerhalb der Partikel bzw. zwischen Re-

aktorwand und Partikel auftritt. Sehr dicht am Reaktorboden liegt die räumlich interpolierte Außentemperatur eines Partikels sehr nahe an der Lufteinlasstemperatur, da der Reaktorboden nicht als Festkörper modelliert wird und damit auch keine eigene über der Lufteingangstemperatur liegende Temperatur hat. Eine erhöhte Reaktorwandtemperatur würde über Mechanismen wie Wärmeleitung und Strahlung das Holz schneller pyrolysieren. Zusätzlich korreliert das Abheben von Partikel 1 und 2 in Abbildung 5.101 auch gut mit dem Unterschreiten der ursprünglich angesetzten Holzkohledichte von  $450 \text{ kg/m}^3$  (siehe Abbildung 5.98).

Der Massenabbau der Partikel 2 und 3 in Abbildung 5.97 sieht sehr ähnlich aus und erfolgt deutlich langsamer als im Fall des Partikels 1 und führt daher auch zu größeren scheinbaren Partikeldichten als für Partikel 1, wie man Abbildung 5.98 entnehmen kann. Der mit dem Massenabbau der Partikel verbundene Aufbau der Holzkohle innerhalb der Partikel in Abbildung 5.99 sieht für alle drei Partikel mit zunehmender Partikelzahl langsamer werdend aus. Während in Partikel 1 die Holzkohle sehr schnell entsteht, entsteht sie in Partikel 2 und 3 über einen deutlich längeren Zeitraum und damit mit einer höheren Ausbeute an Holzkohle. Das sehr leichte Partikel 1 bewegt sich entsprechend seiner Dichte in Abbildung 5.102 zur Bettoberfläche. Partikel 2 folgt Partikel 1 zeitlich versetzt zur Bettoberfläche, da auch die scheinbare Dichte von Partikel 2 kleiner als die angesetzte Dichte der Partikel 2 umgebenden Holzkohlepartikel ist.

Ein wesentlicher Aspekt dieser Ergebnisse ist, dass das gemittelte Abbrandverhalten der Holzpartikel nur schwer mit Hilfe einer einzigen Partikelhistorie beschrieben werden kann, wenn man nicht wesentliche Unterschiede im Partikelverhalten vernachlässigen will. Für diesen Zweck ist es zumindest notwendig, mehrere repräsentative Holzpartikel zu betrachten, um mit diesen das gemittelte Abbrandverhalten wiederzugeben. Das Beschreiben von Vorgängen an einzelnen Partikeln mit Hilfe repräsentativer Partikel ist in einigen Bereichen der Simulation von Mehrphasenströmungen gängig und führt häufig zu einem erheblich gesteigerten Anwendungsbereich derartiger Simulationen, da der Rechenaufwand meist sehr stark sinkt und somit Anlagen im industriellen Maßstab simulierbar werden.

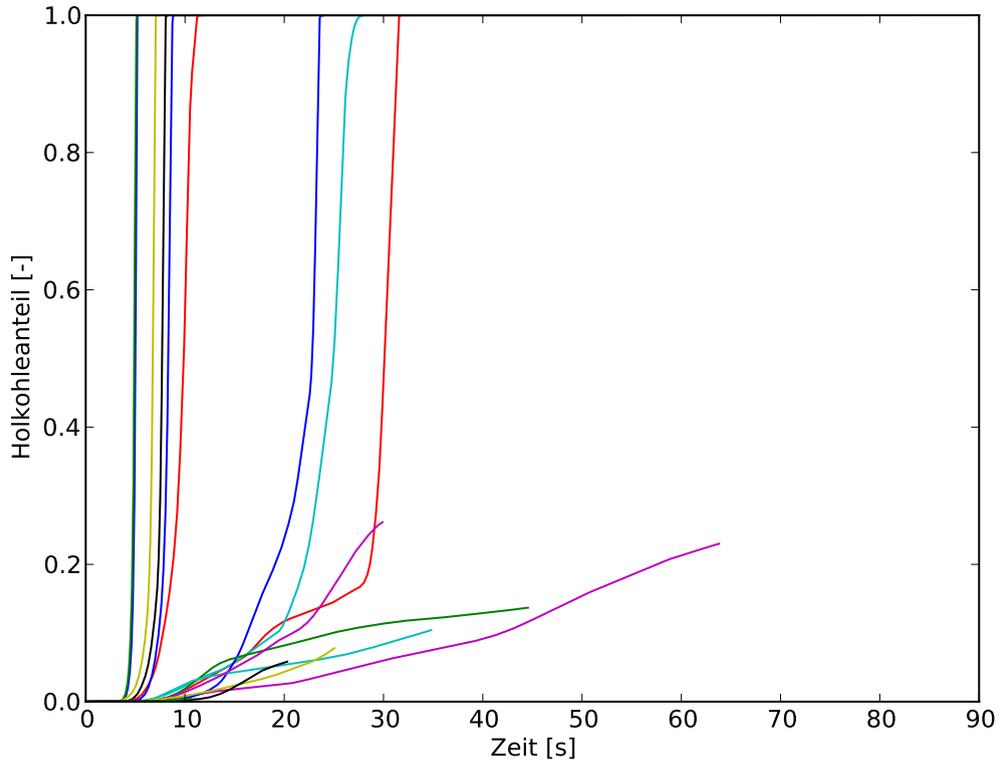


Abbildung 5.95: Zeitlicher Verlauf des Partikelholzkohleanteils (jedes 50ste Holzpartikel)

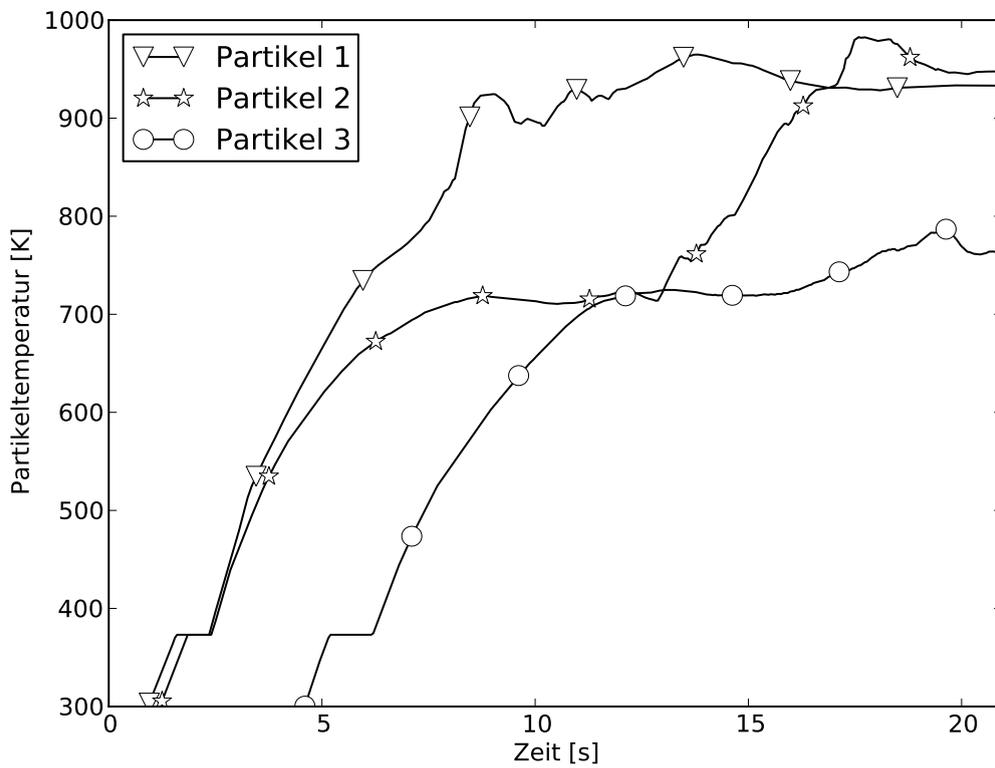


Abbildung 5.96: Zeitlicher Verlauf der Partikeltemperatur dreier ausgewählter Holzpartikel

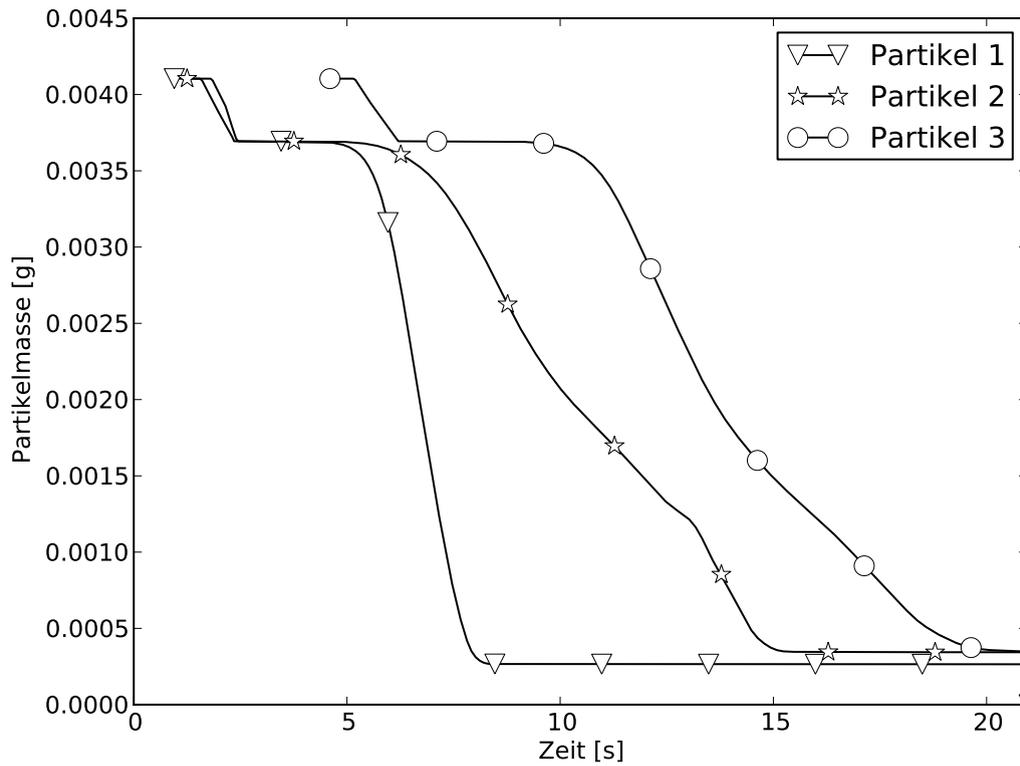


Abbildung 5.97: Zeitlicher Verlauf der Partikelmasse dreier ausgewählter Holzpartikel

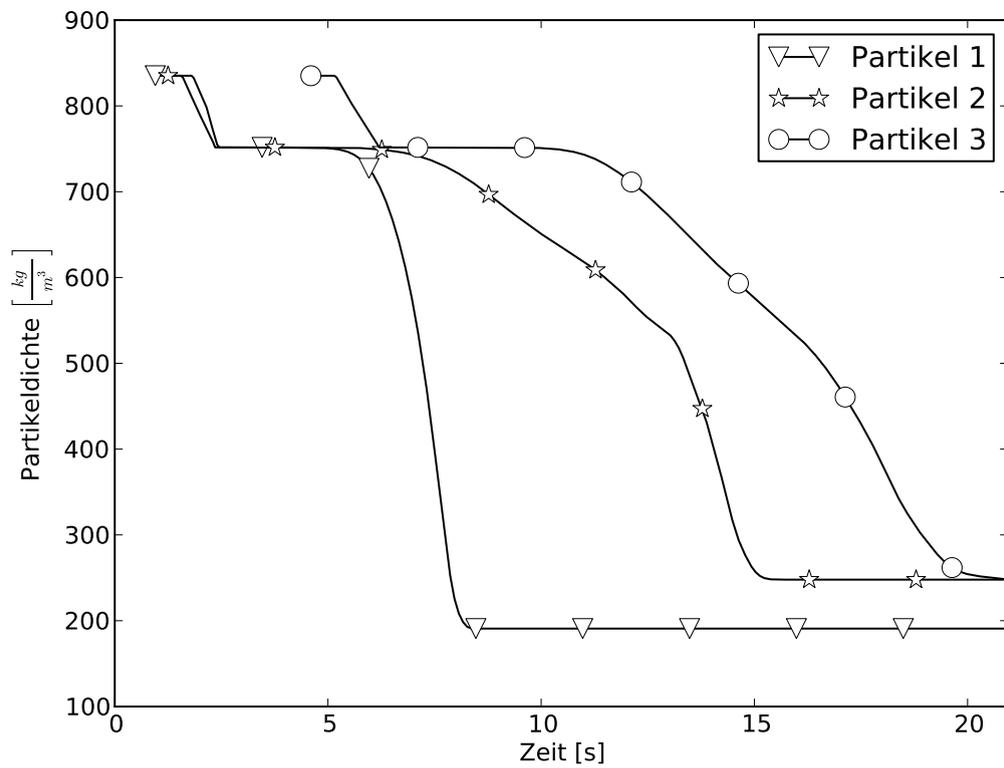


Abbildung 5.98: Zeitlicher Verlauf der Partikeldichte dreier ausgewählter Holzpartikel

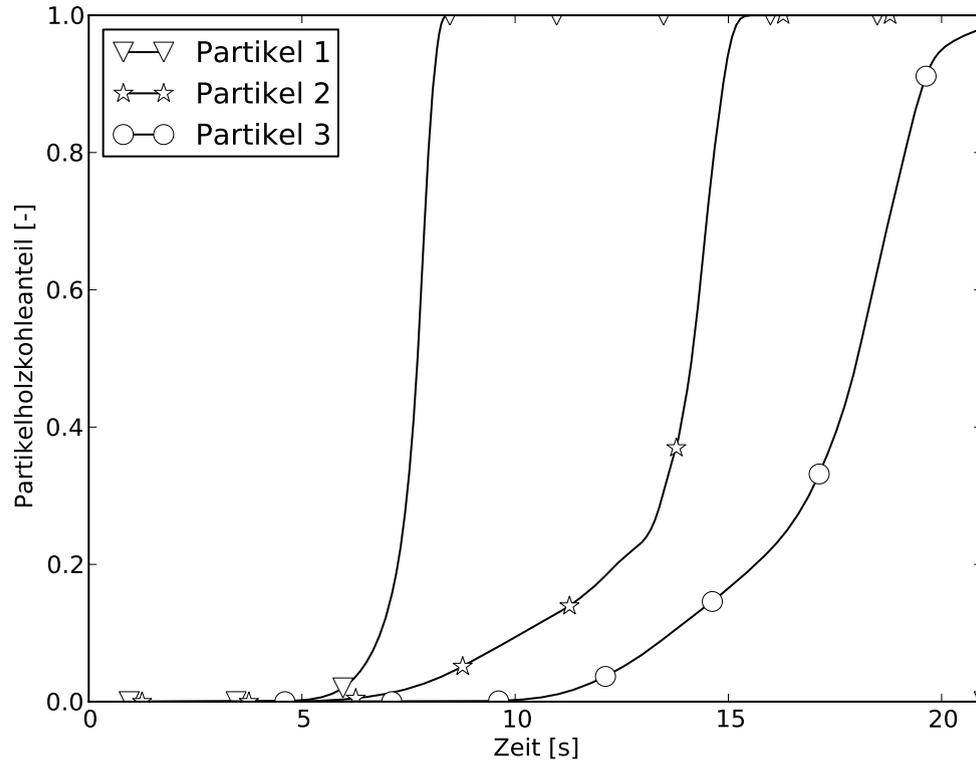


Abbildung 5.99: Zeitlicher Verlauf des Partikelholzkohleanteils dreier ausgewählter Holzpartikel

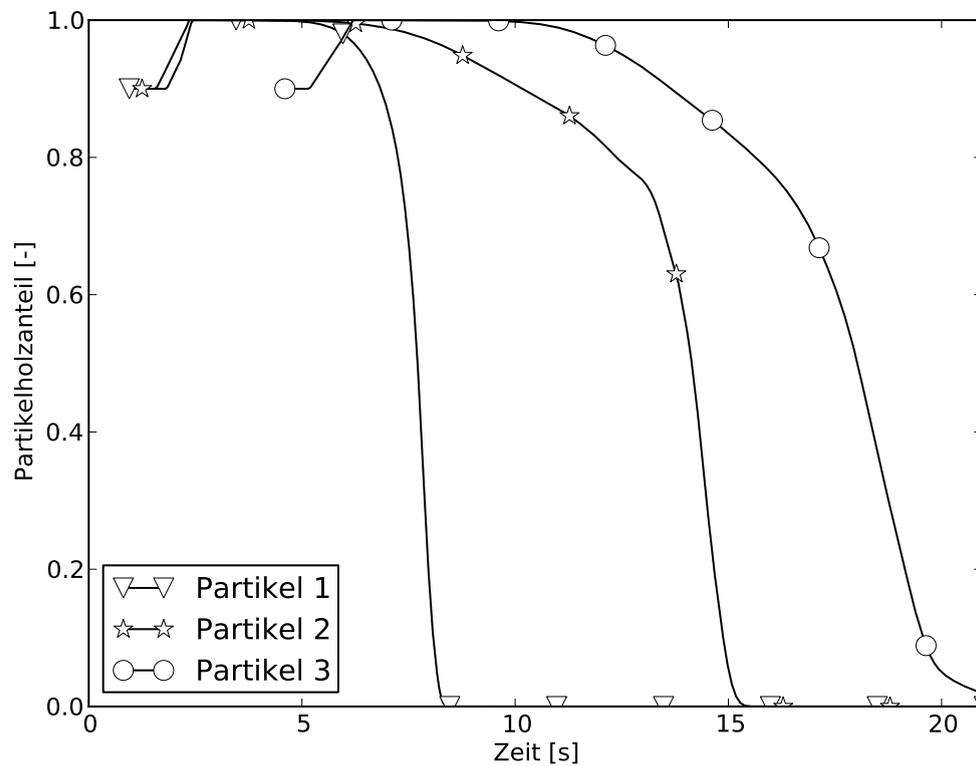


Abbildung 5.100: Zeitlicher Verlauf des Partikelholzanteils dreier ausgewählter Holzpartikel

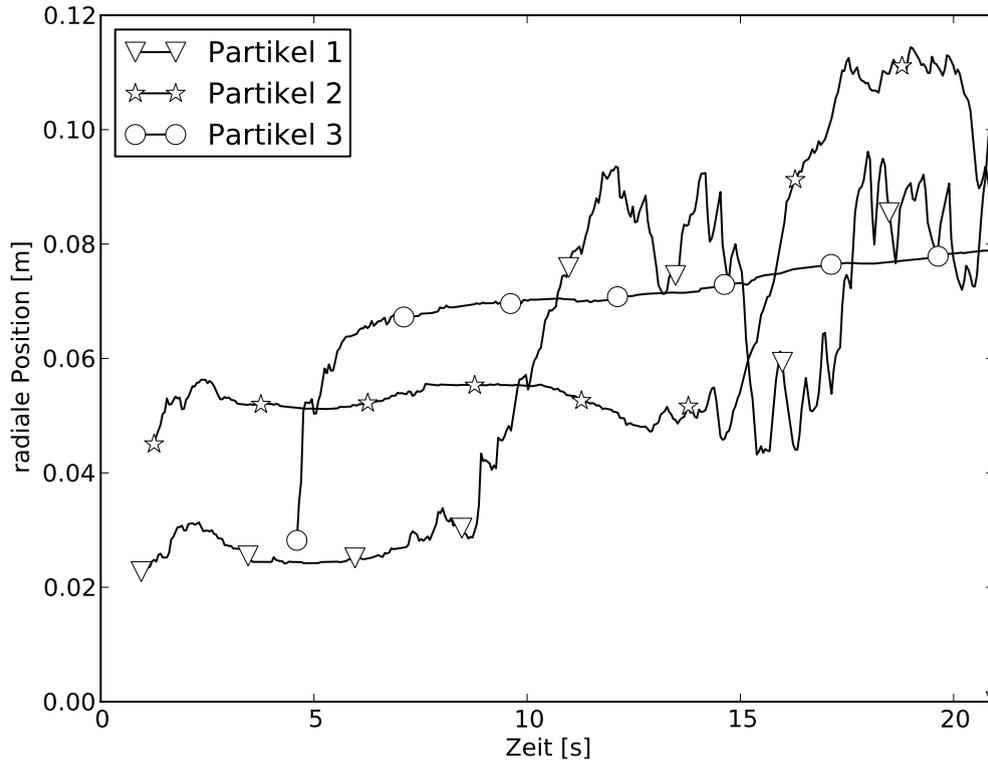


Abbildung 5.101: Zeitlicher Verlauf der radialen Position dreier ausgewählter Holzpartikel

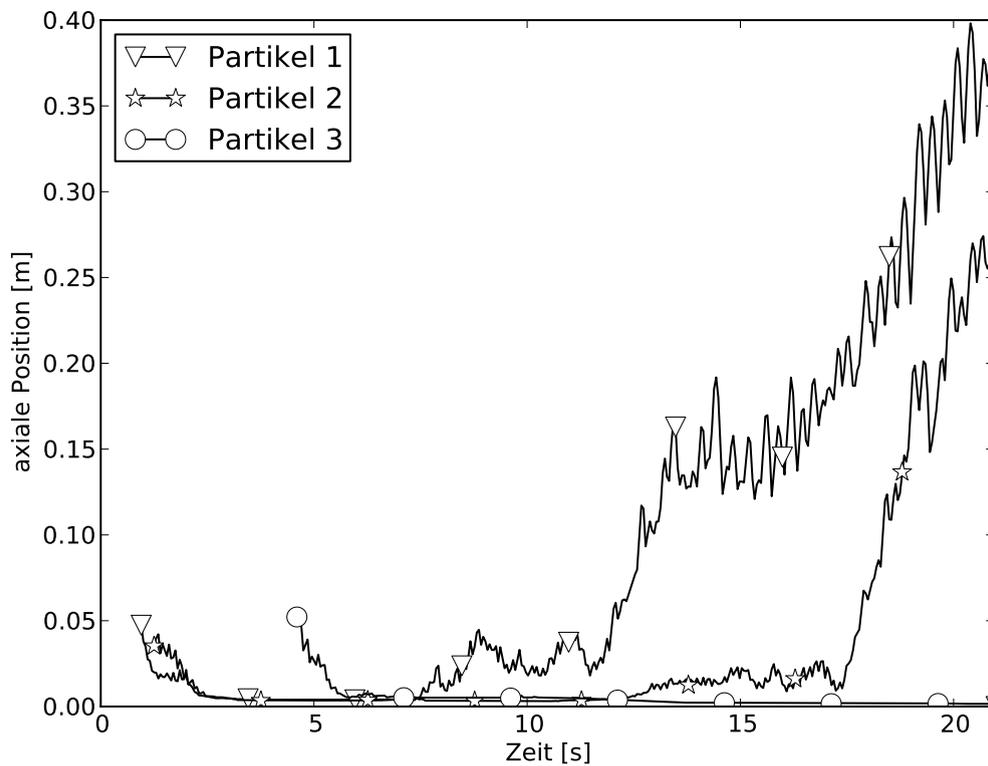
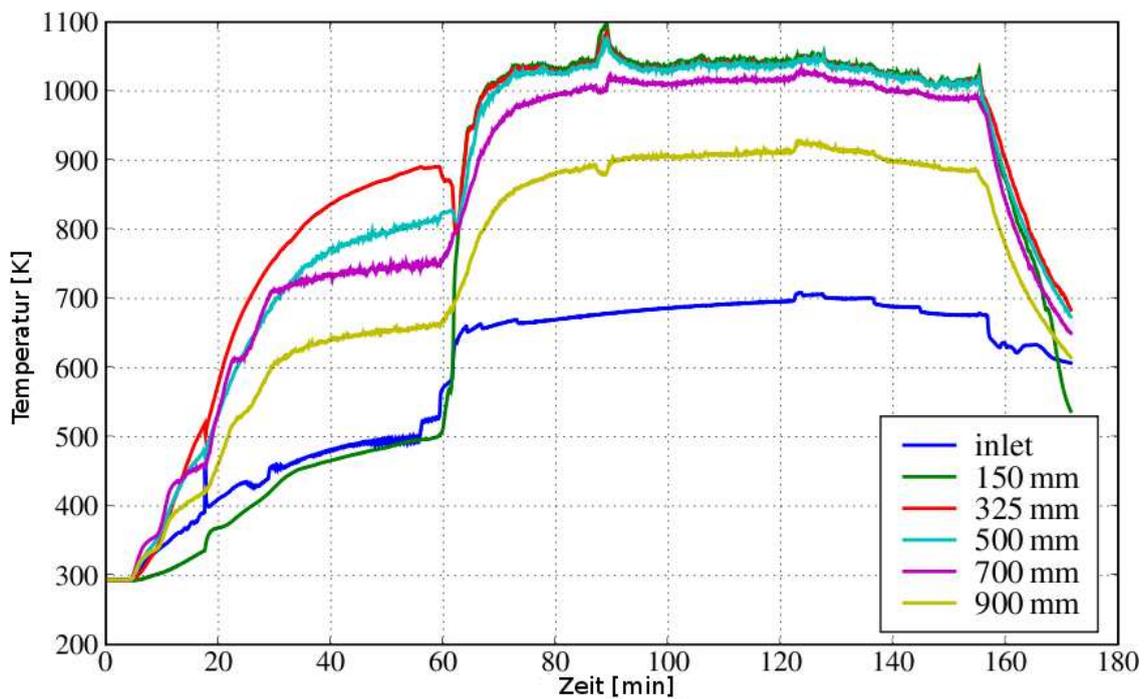


Abbildung 5.102: Zeitlicher Verlauf der axialen Position dreier ausgewählter Holzpartikel

### 5.2.12 Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten bzw. anderen numerischen Modellen

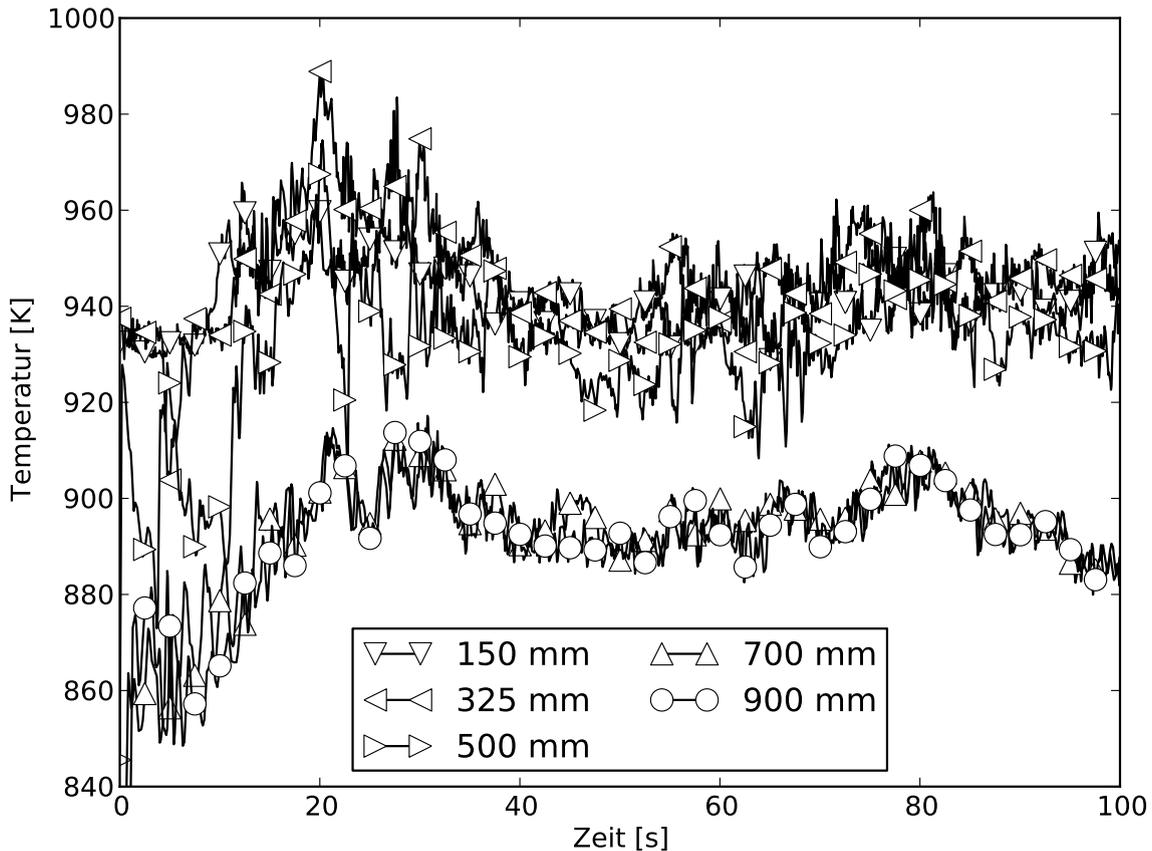


*Abbildung 5.103: Zeitlicher Verlauf der Reaktortemperatur für verschiedene Höhen (experimentelle Daten)*

Die unzureichende Validierung von Simulationsdaten mit Hilfe experimenteller Daten war schon in Kapitel 2.2 ein wesentlicher Punkt, an dem laut Gomez-Barea u. Leckner (2009) weitere Forschungsarbeiten anknüpfen sollten. Da diese Arbeit den Schwerpunkt klar auf den numerischen Arbeiten und der Modellierung hat und damit andere in Gomez-Barea u. Leckner (2009) erwähnte Probleme erfasst, bleibt der experimentelle Bereich in dieser Arbeit außen vor. Da die messtechnischen und anlagentechnischen Probleme relativ früh während der Arbeit an dieser Dissertation auftraten, wurden andere numerische Methoden verwendet, um hier entsprechende Vergleiche bzgl. der durchgeführten Parametervariationen anstellen zu können.

Ein wesentlicher Aspekt lag dabei auf den sogenannten Euler-Euler-Methoden. In den beiden Diplomarbeiten Hoffmann (2010) und Merchan (2010) wurde ein Euler-Euler-Modell mit Hilfe des OpenSource Simulationstools MFIX erstellt, das die Holzvergasung in Wirbelschichten modelliert. Auf Basis dieser Arbeiten entstand die Parameterstudie Gerber u. a. (2010). Die Ergebnisse der hier vorliegenden Arbeit

sollen im Folgenden mit denen von Gerber u. a. (2010) und experimentellen Daten verglichen werden und die Unterschiede analysiert werden. Als maßgeblicher Fall zum Vergleich mit den Szenarien gilt hier der Fall 2 aus Tabelle 5.3.

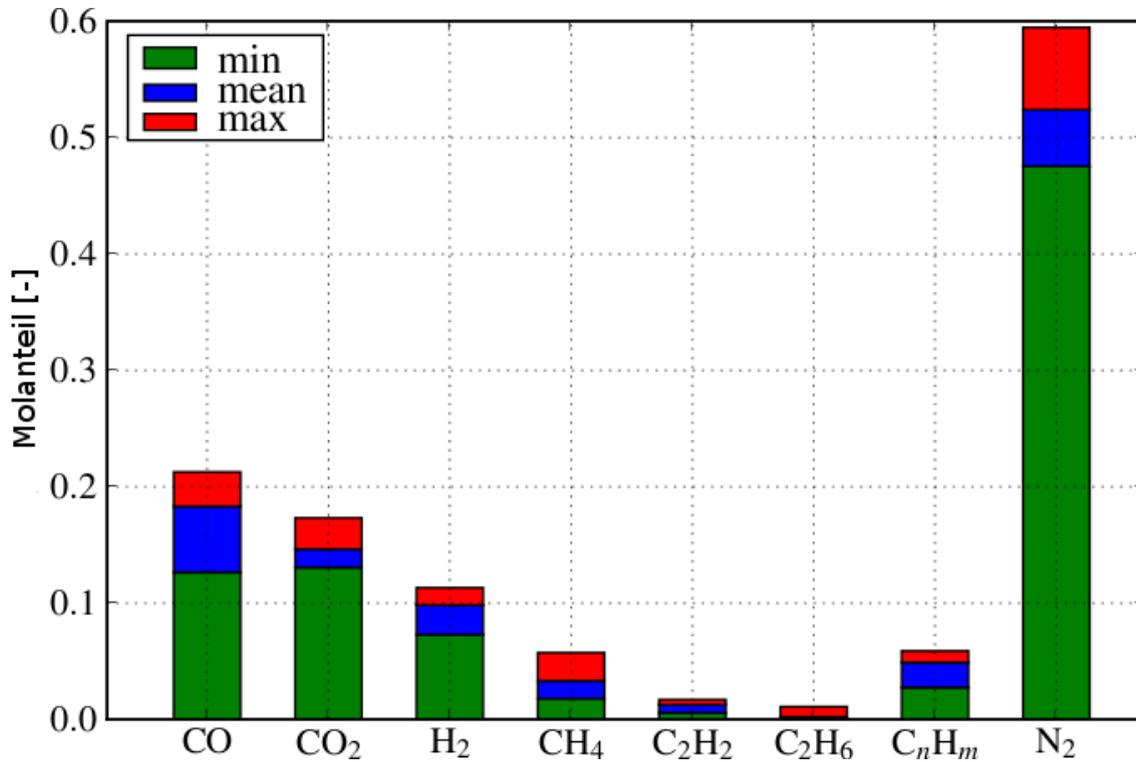


**Abbildung 5.104:** Zeitlicher Verlauf der Reaktortemperatur für verschiedene Höhen des Standardfalles)

Abbildung 5.103 zeigt typische Temperaturverläufe auf verschiedenen Höhen innerhalb der Reaktors. Die Daten zeigen die Startphase des Betriebs inkl. Aufheizen und deuten auf ein stationäres Temperaturprofil zwischen Minute 100 und Minute 120 hin. Nach Minute 120 wurden andere Tests an der Anlage durchgeführt. Es zeigt sich erstens, dass, abgesehen von der in Abbildung 5.103 gezeigten Einlasstemperatur, die Temperatur umso niedriger ist, je höher sie im Reaktor gemessen wird und das die Temperaturen bei 150 mm, 325 mm, 500 mm sehr dicht beieinander liegen. Die Temperaturen bei 700 mm sind etwas niedriger (ca. 20 K) als die drei zuvor genannten und die Temperatur bei 900 mm ist nochmal um ca. 100 K niedriger.

Abbildung 5.104 zeigt die Gastemperaturdaten der Simulation für den Standardfall auf den selben Höhen wie in Abbildung 5.103. In der Simulation sieht das Geschehen

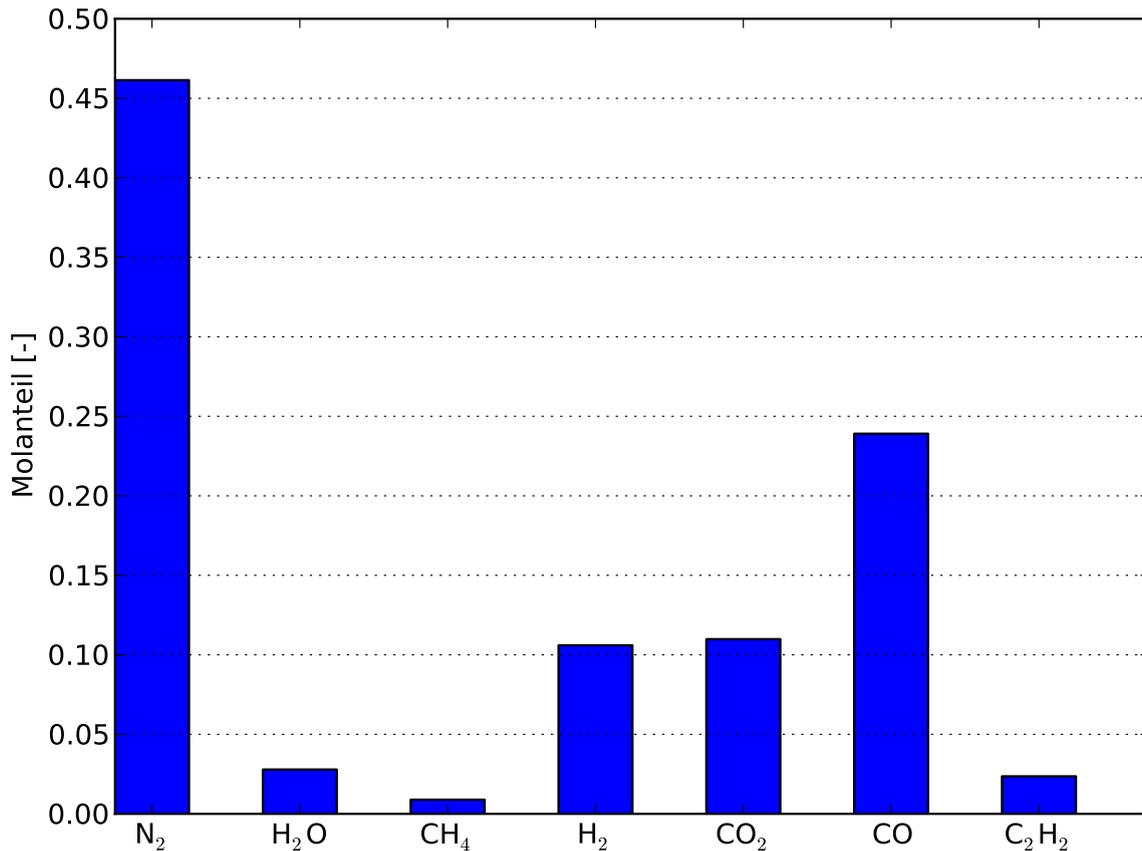
ähnlich zu den hier gezeigten experimentellen Daten aus. Die Temperaturen der ersten drei Höhenstufen liegen alle dicht beieinander, allerdings ca. 90 K niedriger als im Experiment. Die Temperaturen für die Höhenstufen 700 mm und 900 mm liegen in der Simulation ebenfalls dicht beieinander, was sie im Experiment nicht taten. Die Absolutwerte der Temperaturen bei 900 mm zeigen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation.



**Abbildung 5.105:** Aus 19 verschiedenen Messungen gemittelte Gaszusammensetzung des Reaktors (experimentelle Daten)

Die Unterschiede in den Absolutwerten der Gastemperatur auf einer Reaktorhöhe von 700 mm sind nachvollziehbar, da in den Arbeiten von Merchan (2010) und Gerber u. a. (2010) ähnliche Unterschiede in verschiedenen Fällen auftraten. Merchan (2010) zeigt, dass sich die Temperatur im oberen Reaktorbereich stark mit der Zahl der berücksichtigten Partikeldurchmesserklassen im betrachteten Euler-Euler-Modell ändert. Partikel mit kleineren Durchmessern fluidisieren besser und führen damit zu einer Ausdehnung des Wirbelbettes (sichtbar an der gesteigerten Bett Höhe). Eine größere Betthöhe, bei konstanter Wandtemperatur, führt zu anderen Wärmeübergangsverhältnissen an der Innenseite des Reaktors. Der Wärmeübergang

wechselt von einphasig zu zweiphasig und wird damit intensiver. Da die Temperaturrandbedingungen für die Wände mit relativ großen Unsicherheiten behaftet sind, ergibt sich ein weiterer Einfluss.



*Abbildung 5.106: Gaszusammensetzung des Standardfalles ohne Teer (Simulationsdaten)*

Die Messung von einphasigen Temperaturdaten innerhalb eines zweiphasigen Reaktors ist unter Umständen nicht einfach. Werden Thermoelemente innerhalb einer dichten zweiphasigen Gas-Feststoff-Strömung einfach im Reaktor platziert, kann man nicht davon ausgehen, dass diese die Gasphasentemperatur messen können. Vielmehr wird es zu zeitlich begrenzten bzw. andauernden Feststoffkontakten kommen und damit wird die am Thermoelement gemessene Temperatur einen zwischen Gas- und Feststofftemperatur liegenden Wert haben. Des Weiteren sollten die Temperaturen eines Thermoelementes auch durch die Strahlung innerhalb des Wirbelbettes beeinflusst werden, da das Thermoelement als Feststoff deutlich mehr Strahlung pro Fläche aufnimmt, als eine dünne Gasschicht. Insofern gibt es einige Gründe, die Gastemperaturwerte aus Abbildung 5.103 differenzierter zu betrachten.

Vergleicht man die Ergebnisse der experimentell gemessenen Molenfraktionen aus Abbildung 5.105 mit denen des Falles 2 aus Abbildung 5.106 so treten einige Unterschiede auf. Zum einen ist der Anteil an Wasser im Produktgas bei den experimentellen Werten unbekannt, d.h., dass im Folgenden wasserfreie Molenanteile mit nicht wasserfreien Stoffmengenanteilen verglichen werden. Allerdings ist auch der Produktgasanteil an Stickstoff an der Anlage nicht messbar, was implizit bedeutet, dass die Stickstoffdaten in Abbildung 5.105 durch Summenbildung der anderen direkt gemessenen Stoffmengenanteile erfolgt. Der Stickstoffanteil in Abbildung 5.105 ist also vielmehr als Summe aus Stickstoff- und Wasseranteilen (und ggf. anderen nicht gemessenen Komponenten) zu deuten, da der Wasseranteil ebenfalls nicht messbar ist im Reaktor.

Der summierte Wert der Anteile aus Wasser und Stickstoff in Abbildung 5.106 (Simulationsdaten) liegt im unteren Mittelfeld der Stickstoffdaten aus Abbildung 5.105 (experimentelle Daten). Die Ähnlichkeit der Stickstoffwerte kann als Beleg für die Ähnlichkeit der Produktgasmenge gedeutet werden, da sich Stickstoff weitestgehend inert verhält. Die Werte der Hauptvergasungsprodukte Kohlenmonoxid und Wasserstoff in der Simulation sind höher als die der experimentellen Daten in Abbildung 5.105. Kohlenmonoxid hat ca. 2 % höhere Molenanteile als die Maximalwerte aus Abbildung 5.105 und Wasserstoff hat Werte, die am oberen Ende der Maximalwerte aus Abbildung 5.105 liegen. Die Simulationsdaten für Kohlendioxid liegen im oberen Bereich der Minimalwerte der experimentellen Daten für Kohlendioxid. Da die Wasseranteile nicht experimentell bestimmt wurden, bleibt hier die Vermutung, dass die erhöhten Werte an Kohlenmonoxid und Wasserstoff sowie die verringerten Werte an Kohlendioxid auf zu schnelle Ratenausdrücke der heterogenen Vergasungsreaktionen zurückzuführen sind.

Starke Unterschiede zwischen Simulationsdaten und experimentellen Daten zeigen sich bezüglich der Kohlenwasserstoffanteile im Produktgas. Da Methan in dieser Arbeit nicht durch das Cracken der Teere gebildet werden kann und Ethin diese Rolle übernommen hat, sind die Simulationsdaten nur in Bezug auf Massenanteile aussagekräftig, da diese durch die zugrundeliegenden Modelle gegeben sind. Um Stoffmengenanteile aus Massenanteilen zu berechnen, muss die gesamte Mischung

bekannt sein. Insofern beeinflusst die Wahl der beteiligten Stoffe auch die Stoffmengenanteile über die unterschiedlichen Molmassen der Komponenten.

Insgesamt sind die Stoffmengenanteile der Kohlenwasserstoffe in der Simulation ca. Faktor vier zu klein zu sein. Gründe dafür können an vielen Stellen zu suchen sein. Zum einen gibt es die Möglichkeit, dass die Anteile an Kohlenwasserstoffen als Produkte der primären Pyrolyse bzw. des Teer crackens innerhalb der Simulation zu niedrig sind. Des Weiteren besteht die Möglichkeit, dass die vernachlässigte heterogene Methanbildung mit Hilfe von Wasserstoff eigentlich zu berücksichtigen wäre. Da Asche hier als bekannter und relativ guter Katalysator wirkt, wäre der Unterschied zumindest partiell erklärbar, da die Betrachtung der heterogenen Methanbildung in der Simulation zudem auch den Wasserstoffanteil senken würde. Letztendlich bleibt die Möglichkeit, dass vermehrt Methan bzw. Kohlenwasserstoffe am Reaktoreinlass mit Sauerstoff verbrannt wurden und so nicht am Reaktorausgang austreten. Allerdings kam es bei ähnlichen Rechnungen mit Euler-Euler-Modellen zu tendenziell sehr kleinen Reaktionsumsätzen der Oxidation der Gasphasenbrennstoffe, was gegen den zuletzt genannten Punkt spricht. Die genauen Gründe für die Differenzen im Kohlenwasserstoffgehalt zwischen Simulation und Experiment bleiben daher in dieser Arbeit offen.

Um die Ergebnisse der Parametervariationen auch ohne Experimente einordnen zu können, sollen sie hier, trotz aller Modellunterschiede, mit der Arbeit von Gerber u. a. (2010) qualitativ verglichen werden. In der Arbeit von Gerber u. a. (2010) wird die Variation der thermischen Randbedingungen (als Dirichletrandbedingung) um  $\pm 50$  K gegenüber dem in Gerber u. a. (2010) angenommenen Referenzfall untersucht. Die entsprechende Variation der Randbedingungen ist in dieser Arbeit im Kapitel 5.2.6 dokumentiert. Dabei stellte sich heraus, dass es einen klaren Trend bzgl. der Vergasungsleistung des Reaktors in Abhängigkeit von der Wandtemperatur gibt. Mit höherer Wandtemperatur nehmen in Gerber u. a. (2010) die Anteile der Vergasungsprodukte (Kohlenmonoxid und Wasserstoff) zu und die der Vergasungsmittel (Wasser und Kohlendioxid) ab. Dieser Trend ist für Wasser bzw. Wasserstoff deutlich schwächer ausgeprägt. Zudem erkennt man in Gerber u. a. (2010) eine Abnahme des Gehalts an reaktiven Teer und eine Zunahme des Gehalts an inerten Teer mit

steigender Wandtemperatur. Dies hängt zum einen mit den höheren Aufheizraten des Holzes während der primären Pyrolyse und zum anderen mit dem erhöhten Teerumsatz bei höheren Reaktortemperaturen zusammen. Die veränderten Wandtemperaturen in Gerber u. a. (2010) führen zudem zu veränderten Temperaturen im Auslass des Reaktors. Eine Erhöhung der Wandtemperatur um 50 K führt zu einer Temperaturerhöhung von 33 K im Reaktorauslass, wohingegen eine Senkung der Wandtemperatur um 50 K zu einer Senkung der Temperaturen im Auslass von 36 K führt.

Vergleicht man die Ergebnisse dieser Änderung der Wandtemperaturen aus Gerber u. a. (2010) mit denen dieser Arbeit zeigen sich starke Ähnlichkeiten. Auch in dieser Arbeit führt das Erhöhen der Wandtemperaturen (hier allerdings um jeweils 100 K) zu gesteigerten Anteilen der Vergasungsprodukte (Wasserstoff und Kohlenmonoxid) und zu verringerten Anteilen der Vergasungsmittel (Wasser und Kohlendioxid). Wiederum zeigt sich, dass dieser Effekt für die Vergasung des Wassers weniger stark ausgeprägt ist als für die Vergasung mit Kohlendioxid. Allerdings führt die Änderung der Wandtemperatur nur für Kohlenmonoxid zu einem klaren Trend (siehe Abbildung 5.54), da die anderen an der heterogenen Vergasung beteiligten Komponenten teilweise nur auf eine der beiden in dieser Arbeit vorgenommenen Änderungen der Wandtemperatur reagieren (siehe Abbildung 5.54). Ähnlichkeiten zwischen den beiden Arbeiten gibt es aber auch bzgl. der Anteile des reaktiven Teers. Je höher die Wandtemperatur desto niedriger sind die Anteile des reaktiven Teers im Auslass des Reaktors. In Hinsicht auf den als inert angenommenen Teer ergibt sich kein klares Bild (siehe Abbildung 5.54). Die Auslasstemperaturen des Reaktors in dieser Arbeit ändern sich bei einer Erhöhung der Wandtemperatur um jeweils 100 K von 888 K im Referenzfall auf 944 K und 985 K (siehe Tabelle 5.4). Der Trend entspricht also dem der Arbeit von Gerber u. a. (2010).

Ein weiterer Fall aus der Arbeit von Gerber u. a. (2010), der sich mit den Ergebnissen dieser Arbeit vergleichen lässt, ist die Variation des zugeführten Holzmassenstromes des Reaktors (in dieser Arbeit die Fälle 2, 6, 7 und 8 in Kapitel 5.2.3). Dabei wird hier nicht auf den Fall 8 dieser Arbeit eingegangen, da in diesem Fall die Ergebnisse einen stark instationären Charakter haben und sich daher nicht für einen Vergleich

eigenen. In der Arbeit von Gerber u. a. (2010) entstehen bei einer Vergrößerung der Holzzufuhr um  $\frac{2}{7}$  gegenüber dem Referenzfall insgesamt mehr Produkte (geringerer Anteil an Stickstoff im Auslass des Reaktors) und höhere Anteile der Komponenten  $\text{H}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  und des Teers. Lediglich der Anteil des Kohlendioxids verringert sich leicht. Die Auslasstemperatur bei einer Vergrößerung der Holzzufuhr erhöht sich um 6 K. Bei einer Verringerung der Holzzufuhr um  $\frac{2}{7}$  ändern sich die Ergebnisse dahingehend, dass weniger Produktgase entstehen und die Komponenten  $\text{H}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  und der Teer in verringerten Anteilen im Auslass vorliegen. Der Anteil des Kohlendioxids ändert sich wiederum kaum, ist aber größer als im Referenzfall. Die Auslasstemperatur sinkt verglichen mit dem Referenzfall um 12 K. Die Temperatur und der Anteil des Kohlendioxids im Auslass sind also in dem untersuchten Bereich relativ unabhängig vom zugeführten Holzmassenstrom im Rahmen des hier vorgestellten Modelles.

Die Ergebnisse dieser Arbeit sind in einigen Punkten ähnlich den Ergebnissen von Gerber u. a. (2010), unterscheiden sich jedoch teilweise qualitativ. Bei einer Erhöhung der Holzzufuhr entstehen auch in dem hier dokumentierten Verfahren mehr Produktgase und höhere Anteile der Kohlenwasserstoffe (inklusive der Teere) sowie des Wasserstoffs und des Wassers (siehe Abbildung 5.30). Jedoch sinkt der Anteil des Kohlenmonoxids und zusätzlich steigt der Anteil des Kohlendioxids im Produktgas bei stärkerer Zufuhr des Holzes. Damit einhergehend sinkt die Temperatur im Auslass mit steigender Holzzufuhr, was eine mögliche Erklärung für die kleineren Anteile des Vergasungsproduktes Kohlenmonoxid ist. Die Trends für die Temperatur und die Anteile an Kohlendioxid sowie Kohlenmonoxid im Auslass sind also gegenteilig zu denen aus der Arbeit von Gerber u. a. (2010).

Zur Erklärung der gegenteiligen Trends kann auf viele Unterschiede in den Modellen dieser Arbeit und der Arbeit von Gerber u. a. (2010) verwiesen werden, jedoch deutet die Diskussion in Kapitel 5.2.3 schon an, dass die Wärmeleitung innerhalb der Festphase von entscheidender Bedeutung sein könnte. In der Arbeit von Gerber u. a. (2010) wird die Wärmeleitung innerhalb der Festphasen berücksichtigt und somit sind auch die thermischen Randbedingungen der Festphasen nicht an die Randbedingungen der Gasphase gebunden. Geht man davon aus, dass das dem Reaktor

zugeführte Holz aufgrund seiner Dichte und der Partikelgröße größtenteils am Boden des Reaktors liegt und dort pyrolysiert, was sowohl in dieser als auch der Arbeit von Gerber u. a. (2010) der Fall ist, ist es zumindest plausibel, dass bei höheren Temperaturen des Reaktorbodens (in dieser Arbeit ist dies die Lufteinlasstemperatur, in der Arbeit von Gerber u. a. (2010) eine über der Lufteinlasstemperatur liegende, als fester Wert gesetzte Wandtemperatur der festen Phasen) sowohl die Pyrolyse als auch die Vergasung in Bodennähe anders abläuft, da dort die Temperatur der Partikel eben nicht nur durch die Gaseinlasstemperatur, sondern auch durch die Wandtemperatur des Reaktorbodens bestimmt wird.

Des Weiteren sind die Änderungen der Holzzufuhr in dieser Arbeit deutlich größer als in der Arbeit von Gerber u. a. (2010), was unter Umständen dazu führen kann, dass die Ergebnisse nicht direkt vergleichbar sind, da eine Extrapolation der Ergebnisse hier eine lineare Abhängigkeit der untersuchten Größen von der Holzzufuhr impliziert. Die weiteren in Gerber u. a. (2010) gezeigten Parametervariationen unterscheiden sich von denen, die in dieser Arbeit untersucht wurden und können daher nicht verglichen werden.

## Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein Euler-Lagrange-Verfahren auf Basis eines Diskreten Elemente Ansatzes erstellt. Die Partikelbewegung wird auf Basis empirischer Beziehungen für die Widerstandskraft und mit Hilfe der Beziehungen für die Gravitationskraft und den Auftrieb berechnet. Der Partikelabbrand wird mit Hilfe eines nulldimensionalen Partikelmodells modelliert. Es wurden Modelle für die Aufheizung, die Trocknung, die Pyrolyse und die Vergasung berücksichtigt. Das entstandene Simulationstool betrachtet das Vorgehen innerhalb des Wirbelschichtreaktors vereinfacht als zweidimensional.

Der Einzelpartikelcharakter der partikulären Phase wird zum Beispiel durch den partikelspezifischen und veränderlichen Umsatzgrad der Holzkohle berücksichtigt. Mit Hilfe dieser Modelle kann die Vergasung auf Basis des vereinfachten Partikelsystems wiedergegeben werden. Das Partikelsystem ist dahingehend vereinfacht, dass zu Beginn der Simulation je ca. 6000 1 mm und 1.5 mm große Partikel der Holzkohle als Bettmasse angenommen wurden. Da es sich bei einer Euler-Lagrange-Methode um eine partikelbasierte Methode handelt, wurden diverse Ergebnisse bzgl. der festen Phasen dokumentiert und auch der zeitliche Verlauf des Partikelabbrandes einzelner Partikel untersucht.

Die Gasphase wurde mit Hilfe eines Grobstrukturansatzes zur Beschreibung der turbulenten Schwankungen und unter Berücksichtigung eines einfachen Systems an globalen Reaktionsgleichungen modelliert. Das entstandene Simulationstool ist parallelisiert worden und erfolgreich zur Berechnung der in dieser Arbeit gezeigten Ergeb-

nisse verwendet worden. Bei der Parallelisierung wurden auch die Partikel-Partikel-Kollisionen und die Berechnung der partikulären Volumenanteile berücksichtigt.

Die Ergebnisse zeigen in vielen Punkten sowohl qualitativ als auch quantitativ Übereinstimmungen zu den experimentellen Daten bzw. zu anderen numerischen Ergebnissen. Die Nutzung des in dieser Arbeit entstandenen Simulationstools zur Vorausberechnung des Reaktorgeschehens ist an weitere mit Experimenten abgestimmten Tests gebunden, die dabei insbesondere Messgrößen innerhalb des Partikelbettes in Betracht ziehen sollten.

## 6.1 Ausblick

Einige Vereinfachungen innerhalb des Modells haben sich als besonders kritisch herausgestellt und sollten in weiteren Arbeiten an dem Thema berücksichtigt werden. Dazu zählt zum einen die Zweidimensionalität des Rechengebietes. In der Arbeit von Xie u. a. (2008a,b) wird auf die Unterschiede zwischen zwei- und dreidimensionalen Rechnungen eingegangen und es zeigen sich nicht zu vernachlässigende Unterschiede. In reaktiven Modellen kommt jedoch noch ein weiterer Unterschied zum Tragen. Ein einfaches Beispiel ist das Verhältnis aus Holz- und Holzkohlemasse im Reaktor. Da Holzkohlepartikel als Produkt der primären Pyrolyse von Holzpartikeln immer kleiner sind als die ursprünglichen Holzpartikel, wird in einer zweidimensionalen reaktiven Euler-Lagrange-Simulation (mit einer Ausdehnung von einer Gebietszelle in der dritten Raumdimension) immer zu wenig Holzkohle berücksichtigt. Der dem Reaktor zugeführte Holzmassenstrom ist anhand des in den Reaktor eintretenden Luftmassenstromes festgelegt (über die Luftzahl). Die Berechnung dreidimensionaler Modelle setzt aber entweder deutlich höhere Rechenzeiten oder aber andere Parallelisierungskonzepte voraus.

Zum anderen wurden die Wärmeleitung innerhalb der partikulären Phase und die Wärmestrahlung nicht berücksichtigt. In wie fern die Gastemperatur durch die Strahlung der durchströmten Packung der Partikel beeinflusst wird, ist unklar und sollte in weiteren Untersuchungen erfasst werden. Die Wärmeleitung zwischen den Partikeln hatte sich schon während der Arbeit an der Publikation Gerber u. a. (2010) als be-

deutend herausgestellt und sollte daher ebenfalls in weiteren Arbeiten berücksichtigt werden. Die Arbeit von Zhou u. a. (2004a,b) kommt zwar zu dem Resultat, dass die Wärmeleitung vernachlässigbar wäre und kaum Einfluss hat, jedoch stammt diese Erkenntnis aus sehr kurzen Simulationszeiten und kann daher nicht zur Beurteilung des stationären Geschehens herangezogen werden. Der Prozess der Wärmeleitung zwischen den Partikeln mag während der Aufheizphase klein sein (siehe Zhou u. a. (2004a,b)), jedoch kann auch dieser kleine Anteil im stationären Betrieb maßgeblich das letztendlich erreichte Temperaturniveau beeinflussen und damit nicht vernachlässigbar sein.

Insbesondere für den unteren Reaktorbereich, in dem die Partikel direkt auf der Bodenplatte des Reaktors liegen, ist eine Rückwirkung des reaktiven Geschehens über der Bodenplatte auf die Temperatur der Bodenplatte durch Wärmeleitung und Wärmestrahlung durchaus relevant. Die Differenz der Temperatur der einströmenden Luft und der Temperatur der Bodenplatte wird, je nachdem wie die Bodenplatte ausgeführt ist, unterschiedlich ausfallen. Ganz entscheidenden Einfluss werden hier die Porosität, die durchströmte Länge innerhalb der Bodenplatte und die Gasgeschwindigkeit haben, da der Wärmeübergang zwischen einströmender Luft und der Bodenplatte maßgeblich durch diese Faktoren beeinflusst wird. Eine instationäre, in Abhängigkeit des Partikelabbrandes in Reaktorbodennähe modellierte thermische Randbedingung der Gas- als auch der Festphase sollte in weiteren Arbeiten in Betracht gezogen werden.

Wärmeleitung bzw. Wärmestrahlung innerhalb der Partikelphase haben vermutlich auch für die frischen Holzpartikel eine große Bedeutung, da nicht davon auszugehen ist, dass die Aufheizrate des Holzes nicht von der heißeren Umgebung beeinflusst wird. Der Wärmehalt des Holzkohlebettes, das das Partikel umgibt, ist volumenspezifisch deutlich größer als der des Gases im Wirbelbett. Des Weiteren sind Dirichletrandbedingungen für die thermische Modellierung der Reaktorwände nur eingeschränkt nutzbar, da der effektive Wärmestrom stark vom zweiphasigen Charakter der Strömung abhängt. In diesem Zusammenhang sollte auch die veränderte Partikeldynamik in Wandnähe berücksichtigt werden.

Ein weiterer nicht zu vernachlässigender Punkt ist die Wechselwirkung verschiedener Vergasungsmittel auf die Holzkohlepartikel. Gerade bei hohen Temperaturen (wie sie im unteren Bereich des Reaktors vorliegen) und damit einhergehenden hohen Raten der Vergasungsreaktionen ist sowohl die Konkurrenz der Vergasungsmittel um Oberflächenplätze als auch die Limitierung der Gesamtumsatzraten der Vergasungsmittel bzw. Vergasungsprodukte durch diffusive Effekte von Bedeutung. Entsprechende Ansätze sollten daher implementiert werden.

Um letztendlich ein Simulationstool zu erhalten, das einen breiten Anwendungsbereich hat, muss man im Abgleich mit Experimenten viele Versuche unternehmen, die gezielt einzelne Effekte untersuchen. Zum einen sollten daher die Raten sämtlicher homogener chemischer Reaktionen gezielt untersucht werden, da auch katalytische Wandeffekte in der Literatur dokumentiert sind. Zum anderen sollten die Raten der heterogenen Reaktionen durch Experimente validiert werden. Diese Effekte sollten allerdings ohne Holzzufuhr untersucht werden, um aussagekräftige Ergebnisse zu erhalten. Die Messung der Produktgase sollte Stickstoff berücksichtigen (als direkten Messwert und nicht via Summenbildung der anderen Produktgase), um die Menge des entstehenden Produktgases besser beurteilen zu können. Das gleiche gilt für das Wasser.

Des Weiteren ist die Messung von Feststofftemperaturen durch evtl. Ziehen von Partikelproben aus dem Reaktor ein gutes Mittel, um die Temperatur der Partikel und damit auch die Gültigkeit der Modelle innerhalb der Simulationen zu beurteilen. Die Bett Höhe wiederum kann als Indikator für die Fluidisierung der Partikel und damit für die Gültigkeit der fluiddynamischen Annahmen herangezogen werden.



# Literaturverzeichnis

- [Aarsen u. a. 1985] AARSEN, E. G. van den ; BEENACKERS, A. A. C. M. ; SWAAIJ, W. P. M.: Wood pyrolysis and carbon dioxide char gasification kinetics in a fluidized bed. In: OVEREND, R. P. (Hrsg.) ; MILNE, T. A. (Hrsg.) ; MULGE, L. K. (Hrsg.): *Fundamentals of thermochemical biomass conversion*. London : Elsevier, 1985, S. 691–715
- [Anderson u. Jackson 1967] ANDERSON, T. B. ; JACKSON, R.: A fluid mechanical description of fluidized beds - equations of motion. In: *Ind. Chem. Fundamen.* 6 (1967), S. 527–539
- [Anderson u. Jackson 1969] ANDERSON, T. B. ; JACKSON, R.: A fluid mechanical description of fluidized beds - Comparison of theory and experiment. In: *Ind. Chem. Fundamen.* 8 (1969), S. 137–144
- [Asmar u. a. 2003] ASMAR, B. N. ; LANGSTON, P. A. ; MATCHETT, A. J. ; WALTERS, J. K.: Energy monitoring in distinct element models of particle system. In: *Advanced Powder Technology* 14 (2003), S. 43–69
- [Bader u. Deuffhard 1983] BADER, G. ; DEUFLHARD, P.: A semi-implicit mid-point rule for stiff systems of ordinary differential equations. In: *Numerische Mathematik* 41 (1983), S. 373–398
- [Baehr u. Stephan 2002] BAEHR, H. D. ; STEPHAN, K.: *Wärme- und Stoffübertragung*. 3. Springer, 2002
- [Bauer 1999] BAUER, Irene: *Numerische Verfahren zur Lösung von Anfangswertaufgaben und zur Generierung von ersten und zweiten Ableitungen mit Anwendungen*

- bei Optimierungsaufgaben in Chemie und Verfahrenstechnik*, Universität Heidelberg, Diss., 1999
- [Biba u. a. 1978] BIBA, V. ; MACAK, J. ; KLOSE, E. ; MALECHA, J.: Mathematical Model for the Gasification of Coal under Pressure. In: *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* 17 (1978), S. 92–98
- [Boyalakuntla 2003] BOYALAKUNTLA, D. S.: *Simulation of Granular and Gas-Solid Flows Using Discrete Element Method*, Carnegie Institute of Technology, Diss., 2003
- [Brauer 1971] BRAUER, H.: *Grundlagen der Einphasen- und Mehrphasenströmungen*. Aarau : Verlag Sauerländer, 1971
- [Cash u. Karp 1990] CASH, J. R. ; KARP, A. H.: A variable order Runge-Kutta method for initial value problems with rapidly varying right-hand sides. In: *ACM transactions on mathematical software* 16 (1990), S. 201–222
- [Chan u. a. 1985] CHAN, W. R. ; KELBON, M. ; KRIEGER, B. B.: Modelling and experimental verification of physical and chemical processes during pyrolysis of large biomass particle. In: *Fuel* 64 (1985), S. 1505–1513
- [Crowe 1981] CROWE, C. T.: On the relative importance of particle-particle collisions in gas-particle flows. In: *Proceedings of the Conference on Gas Borne Particles*, 1981, S. 135–137. – Paper C78/81
- [Crowe 2006] CROWE, C. T.: *Multiphase Flow Handbook*. Boca Raton USA : CRC Press Inc, 2006
- [Crowe u. a. 1977] CROWE, C. T. ; SHARMA, M. P. ; STOCK, D. E.: The Particle-Source-In Cell (PSI-CELL) Model for Gas-Droplet Flows. In: *Journal of Fluid Engineering* 99 (1977), S. 325–332
- [Crowe u. a. 1998] CROWE, C. T. ; SOMMERFELD, M. ; TSUJI, Y.: *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. Boca Raton USA : CRC Press Inc, 1998
- [Cundall u. Strack 1979] CUNDALL, P. A. ; STRACK, O. D. L.: A discrete numerical model for granular assemblies. In: *Geotechnique* 29 (1979), Nr. 1, S. 47–65

- [Dandy u. Dwyer 1990] DANDY, D. S. ; DWYER, H. A.: A sphere in shear flow at finite Reynolds number: Effect of shaer on lift, drag, and heat transfer. In: *Journal of Fluid Mechanics* 216 (1990), S. 381–410
- [Darmana u. a. 2006] DARMANA, D. ; DEEN, N. G. ; KUIPERS, J. A. M.: Parallelization of an Euler-Lagrange model using mixed domain decomposition and a mirror domain technique: Application to dispersed gas-liquid two-phase flow. In: *Journal of Computational Physics* 220 (2006), S. 216–248
- [Deen u. a. 2007] DEEN, N. G. ; SINT ANNALAND VAN, M. ; DER, M. A. v. ; KUIPERS, J. A. M.: Review of discrete particle modelling of fluidized beds. In: *Chemical Engineering Science* 62 (2007), S. 28–44
- [Dennis u. a. 1980] DENNIS, S.C.R. ; SINGH, S.N. ; INGHAM, D.B.: The steady flow due to a rotating sphere at low and moderate Reynolds numbers. In: *Journal of Fluid Mechanics* 101 (1980), S. 257–279
- [Diaz 2006] DIAZ, C. J. G.: *Understanding biomass pyrolysis kinetics: Improved modeling based on comprehensive thermokinetic analysis*, Universitat Politecnica de Catalunya, Diss., 2006
- [DiBlasi 1999] DIBLASI, C.: Reactivities of some biomass chars in air. In: *Carbon* 37 (1999), S. 1227–1238
- [DiBlasi 2008] DIBLASI, C.: Modeling chemical and physical processes of wood and biomass pyrolysis. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 34 (2008), S. 47–90
- [DiBlasi 2009] DIBLASI, C.: Combustion and gasification rates of lignocellulosic chars. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 35 (2009), S. 121–140
- [DiBlasi u. Branca 2001] DIBLASI, C. ; BRANCA, C.: Kinetics from primary product formation from wood pyrolysis. In: *Ind. Eng. Chem. Res.* 40 (2001), S. 5547–5556
- [Dryer u. Glassman 1973] DRYER, F. L. ; GLASSMAN, I.: High-Tmeperature Oxidation of CO and CH<sub>4</sub>. In: *Fourteenth Symposium on Comustion* Bd. 14, 1973, S. 987–1003

- [Ergun 1952] ERGUN, S.: Fluid flow through packed columns. In: *Chemical Engineering Progress* 48 (1952), S. 89–94
- [Fan u. Fox 2009] FAN, R. ; FOX, R. O.: Segregation in polydispers fluidized beds: Validation of a multi-fluid model. In: *Chemical Engineering Science* 63 (2009), S. 272–285
- [Felice 1994] FELICE, R. D.: The voidage function for fluid-particle interaction systems. In: *Int. Journ. of Multiphase Flow* 20 (1994), S. 153–??
- [Fraige u. Langston 2004] FRAIGE, F. Y. ; LANGSTON, P. A.: Integration schemes and damping algorithms in distinct element models. In: *Advanced Powder Technology* 15 (2004), S. 227–245
- [Frank 2002] FRANK, T.: *Parallel Algorithmen für die numerische Simulation dreidimensionaler, disperser Mehrphasenströmungen und deren Anwendung in der Verfahrenstechnik*. 2002
- [Gerber 2006a] GERBER, S.: *Implementierung eines Euler-Lagrange-Verfahrens zur Modellierung einer inerten Fluid-Feststoff-Strömung*, Technische Universität Berlin, Diplomarbeit, 2006
- [Gerber 2006b] GERBER, S.: *Implementierung und Test einer Vier-Wege-Kopplung zur Berechnung dichter inerter Partikelströmungen*, Technische Universität Berlin, Diplomarbeit, 2006
- [Gerber u. a. 2010] GERBER, S. ; BEHRENDT, F. ; OEVERMANN, M.: An Eulerian modeling approach of wood gasification in a bubbling fluidized bed reactor using char as bed material. In: *Fuel* 83 (2010), S. 2903–2917
- [Gidaspow 1994] GIDASPOW, D.: *Multiphase Flow and Fluidization*. Academic Press, 1994
- [Gomez-Barea u. Leckner 2009] GOMEZ-BAREA, A. ; LECKNER, B.: Gasification of biomass in fluidised bed: Review of modelling. In: *Proceedings of the 20th International Conference on Fluidised Bed Combustion* Bd. 20, 2009, S. 13–26

- [Gomez-Barea u. Leckner 2010] GOMEZ-BAREA, A. ; LECKNER, B.: Modeling of biomass gasification in fluidized bed. In: *Progress in energy and combustion science* 36 (2010), S. 444–509
- [Grønli 1996] GRØNLI, M. G.: *A theoretical and experimental study of the thermal degradation of biomass*, NTNU, Trondheim, Diss., 1996
- [Hagge u. Bryden 2002] HAGGE, M. J. ; BRYDEN, K. M.: Modeling the impact of shrinkage on the pyrolysis of dry biomass. In: *Chemical Engineering Science* 57 (2002), S. 2811–2823
- [Hairer u. Wanner 1996] HAIRER, E. ; WANNER, G.: *Solving ordinary differential equations II: stiff and differential-algebraic problems*. Springer, 1996
- [Hamel 2001] HAMEL, S.: *Mathematische Modellierung und experimentelle Untersuchung der Vergasung verschiedener fester Brennstoffe in atmosphärischen und druckaufgeladenen stationären Wirbelschichten*, Universität Siegen, Diss., 2001
- [Happel 1958] HAPPEL, John: Viscous flow in multiparticle systems: Slow motion of fluids relative to beds of spherical particle. In: *AIChE Journal* 4 (1958), S. 197–201
- [Hawley u. a. 1983] HAWLEY, M. C. ; BOYD, M. ; ANDERSON, C. ; DEVERA, A.: Gasification of wood char and effects of intraparticle transport. In: *Fuel* 62 (1983), S. 213–216
- [Hiller u. Reimert 2010] HILLER, H. ; REIMERT, R.: Gas Production. In: ULLMANN, F. ET AL. (Hrsg.): *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim, 2010 ( 7th ed.)
- [Hjelmfeld u. Mockros 1966] HJELMFELD, Jr. A. T. ; MOCKROS, L. F.: Motion of discrete particles in a turbulent fluid. In: *Applied Scientific Research* 16 (1966), S. 149–161
- [van der Hoef u. a. 2008] HOEF, M. A. d. ; SINT ANNALAND VAN, M. ; DEEN, N. G. ; KUIPERS, J. A. M.: Numerical Simulation of Dense Gas-Solid Fluidized Beds: A Multiscale Modeling Strategy. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 40 (2008), S. 47–70

- [Hoffmann 2010] HOFFMANN, M.: *Numerische Euler-Euler Simulation der Holzvergasung im Wirbelschichtreaktor*, Technische Universität Berlin, Diplomarbeit, 2010
- [Homepage von E. Hairer ] *Fortran and Matlab Codes*. <http://www.unige.ch/~hairer/software.html>,
- [Hoomans u. a. 1996] HOOMANS, B. P. B. ; KUIPERS, J. A. M. ; BRIELS, W. J. ; SWAAIJ, W. P. M.: Discrete particle simulation of bubble and slug in a two-dimensional gas-fluidised bed: a hard-sphere approach. In: *Chemical Engineering Science* 51 (1996), S. 99–118
- [Kaps u. Rentrop 1979] KAPS, P. ; RENTROP, P.: Generalized Runge-Kutta Methods of Order Four with Stepsize Control for Stiff Ordinary Differential Equations. In: *Numerische Mathematik* 33 (1979), S. 55–68
- [Klein 1999] KLEIN, R ; D. VEYNANTE, L. V. (Hrsg.): *Numerics in Combustion*. Brussels, Belgium, January 6-9 1999
- [Klein u. a. 2001] KLEIN, R. ; BOTTA, N. ; HOFMANN, L. ; MEISTER, A. ; MUNZ, C. .. ; ROLLER, S. ; SONAR, T.: Asymptotic Adaptive Methods for Multiscale Problems in Fluid Mechanics. In: *Journal of Engineering Mathematics* 39 (2001), S. 261–343
- [Klose u. Wölki 2005] KLOSE, W. ; WÖLKI, M.: On the intrinsic reaction rate of biomass char gasification with carbon dioxide and steam. In: *Fuel* 84 (2005), S. 885–892
- [Kraume 2004] KRAUME, M.: *Transportvorgänge in der Verfahrenstechnik*. First. Springer, 2004
- [Kruggel-Emden u. a. 2008] KRUGGEL-EMDEN, H. ; STURM, M. ; WIRTZ, S. ; SCHEERER, V.: Selection of an appropriate time integration scheme for the discrete element method (DEM). In: *Computers and Chemical Engineering* 32 (2008), S. 2263–2279
- [Kuo, K. K. 1986] KUO, K. K.: *Principles of Combustion*. New York : John Wiley & Sons, 1986

- [Lathouwers 1999] LATHOUWERS, D.: *Modelling and simulation of turbulent bubbly flows*, Delft University of Technology, Diss., 1999
- [Lathouwers u. Bellan 2000] LATHOUWERS, D. ; BELLAN, J.: Modeling and simulation of bubbling fluidized beds containing particle mixtures. In: *Proc. Combustion Institute* 28 (2000), S. 2297–2304
- [Lathouwers u. Bellan 2001a] LATHOUWERS, D. ; BELLAN, J.: Modeling of dense gas-solid reactive mixture applied to biomass pyrolysis in a fluidized bed. In: *International Journal of Multiphase Flow* 27 (2001), S. 2155–2187
- [Lathouwers u. Bellan 2001b] LATHOUWERS, D. ; BELLAN, J.: Yield optimization and scaling of fluidized beds for tar production from biomass. In: *Energy & Fuels* 15 (2001), S. 1247–1262
- [Li u. Kuipers 2003] LI, Jie ; KUIPERS, J.A.M.: Gas-particle interactions in dense gas-fluidized beds. In: *Chemical Engineering Science* 58 (2003), S. 711–718
- [Lu 2006] LU, H.: *Experimental and modeling investigations of biomass particle combustion*, Brigham Young University, Diss., 2006
- [Marchisio u. Fox 2007] MARCHISIO, D. L. ; FOX, R. O.: *Multiphase reacting flows: modelling and simulation*. First. Springer, 2007
- [Martin 1980] MARTIN, H.: *Wärme- und Stoffübertragung in der Wirbelschicht*. Aarau : Chem.-Ing.-Tech, 1980. – 199–209 S.
- [Mei 1992] MEI, R.: An approximate expression for the shear lift force on a spherical particle at finite Reynolds numbers. In: *International Journal of Multiphase Flow* (1992), Nr. 18, S. 145–147
- [Merchan 2010] MERCHAN, V. A.: *Modellierung der Holzvergasung mit einer gekoppelten Euler-Euler/Populationsbilanzen Methode*, Technische Universität Berlin, Diplomarbeit, 2010
- [Mermoud u. a. 2006] MERMOUD, F. ; SALVADOR, S. ; STEEN, L. Van d. ; GOLFIER, F.: Influence of the pyrolysis heating rate on the steam gasification rate of large wood char particles. In: *Fuel* 85 (2006), S. 1473–1482

- [MFIx 2007] *MFIx Readme Version 2007-4. MFIx-Dokumentation*. <http://www.mfix.org/documentation/Readme.pdf>, 2007
- [Mitani u. Williams 1980] MITANI, T. ; WILLIAMS, F. A.: Studies of cellular Flames in Hydrogen-Oxygen-Nitrogen Mixtures. In: *Combustion and Flame* 39 (1980), S. 169–190
- [Nordin 2001] NORDIN, N.: *Complex Chemistry Modeling of diesel spray combustion*, Chalmers University of Technology, Diss., 2001
- [Ocampo u. a. 2003] OCAMPO, A. ; ARENAS, E. ; CHEJNE, F. ; ESPINEL, J. ; LONDON, C. ; AGUIRRE, J. ; PEREZ, J. D.: An experimental study on gasification of Colombian coal in fluidised bed. In: *Fuel* 82 (2003), S. 161–164
- [Odar u. Hamilton 1964] ODAR, F. ; HAMILTON, W. S.: Forces on a sphere accelerating in a viscous fluid. In: *Journal FLuid Mechanics* 18 (1964), S. 302–314
- [OpenFoam User Guide 2008] OPENCFD LIMITED (Hrsg.): *OpenFoam - The Open Source CFD Toolkit - User Guide*. 1.5. : OpenCFD Limited, Juli 2008. [www.openFOAM.org/](http://www.openFOAM.org/)
- [Osterle u. Dinh 1998] OSTERLE, B. ; DINH, T. B.: Experiments on the lift of a spinning sphere in a range of intermediate Reynolds numbers. In: *Experiments in Fluids* 25 (1998), S. 16–22
- [Papadikis u. a. 2008] PAPADIKIS, K. ; BRIDGEWATER, A. V. ; GU, S.: CFD modeling of the fast pyrolysis of biomass in fluidised bed reactors, Part A: Eulerian computation of the momentum transport in bubbling fluidised beds. In: *Chemical Engineering Science* 63 (2008), S. 4218–4227
- [Papadikis u. a. 2009a] PAPADIKIS, K. ; BRIDGEWATER, A. V. ; GU, S.: CFD modeling of the fast pyrolysis of biomass in fluidised bed reactors, Part B: Heat, momentum and mass transport in bubbling fluidised beds. In: *Chemical Engineering Science* 64 (2009), S. 1036–1045
- [Papadikis u. a. 2009b] PAPADIKIS, K. ; GU, S. ; BRIDGEWATER, A. V.: CFD modelling of the fast pyrolysis of biomass in fluidized bed reactors: Modelling the

- impact of biomass shrinkage. In: *Chemical Engineering Journal* 149 (2009), S. 417–427
- [Papadikis u. a. 2009c] PAPADIKIS, K. ; GU, S. ; BRIDGEWATER, A. V. ; GERHAUSER, H.: Application of CFD to model fast pyrolysis of biomass. In: *Fuel Processing Technology* 90 (2009), S. 504–512
- [Peters 2003] PETERS, B.: *Thermal conversion of solid fuels*. First. WIT-Press, 2003
- [Ranz 1952] RANZ, W. E.: Friction and transfer coefficients for single particles and packed beds. In: *Chemical Engineering Progress* 48 (1952), S. 247–253
- [Rath u. Staudinger 2001] RATH, J. ; STAUDINGER, G.: Cracking reactions of tar from pyrolysis of spruce wood. In: *Fuel* 80 (2001), S. 1379–1389
- [Rath u. a. 2003] RATH, J. ; WOLFINGER, M. G. ; STEINER, G. ; KRAMMER, G. ; BARONTINI, F. ; COZZANI, V.: Heat of wood pyrolysis. In: *Fuel* 82 (2003), S. 81–91
- [Raznjevic 1976] RAZNJEVIC, K.: *Handbook of Thermodynamic Tables and Charts*. Hemisphere Publishing Corporation, McGraw-Hill Book Company, 1976
- [Richardson u. Zaki 1954] RICHARDSON, J. F. ; ZAKI, W. N.: Sedimentation and fluidization: Part I. In: *Trans. Inst. Chem. Eng.* 32 (1954), S. 35–53
- [Roberts u. Harris 2007] ROBERTS, D. G. ; HARRIS, D. J.: Char gasification in mixtures of CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O: Competition and inhibition. In: *Fuel* 86 (2007), S. 2672–2678
- [Rubinow u. Keller 1961] RUBINOW, S. I. ; KELLER, J. B.: The transverse force on spinning sphere moving in a viscous fluid. In: *Journal Fluid Mechanics* 11 (1961), S. 447–459
- [Sadd u. a. 1993] SADD, SM. H. ; TAI, Q. ; SHUKULA, A.: Contact law effects on wave propagation in particulate materials using distinct element modeling. In: *International Journal of Non-Linear Mechanics* 28 (1993), S. 251–265

- [Saffmann 1965] SAFFMANN, P. G.: The lift on a small sphere in a slow shear flow. In: *Journal Fluid Mechanics* 22 (1965), S. 385–400
- [Saffmann 1968] SAFFMANN, P. G.: The lift on a small sphere in a slow shear flow. In: *Journal Fluid Mechanics* 31 (1968), S. 624
- [Sawatzki 1970] SAWATZKI, O.: Strömungsfeld um eine rotierende Kugel. In: *Acta Mechanica* 9 (1970), S. 159–214
- [Schiller u. Naumann 1933] SCHILLER, L. ; NAUMANN, A.: Über die grundlegende Berechnung bei der Schwerkraftaufbereitung. In: *Verein Deutscher Ingenieure* 44 (1933), S. 318–320
- [Schwager u. Pöschel 2005] SCHWAGER, T. ; PÖSCHEL, T.: *Computational Granular Dynamics*. Dritte. Springer-Verlag, 2005
- [Seebauer 1999] SEEBAUER, V.: *Experimentelle Untersuchungen zur Pyrolyse von Kohle und Holz*, Graz University of Technology, Diss., 1999
- [Simsek u. a. 2009] SIMSEK, E. ; BROSCHE, B. ; WIRTZ, S. ; SCHERER, V. ; KRÜLL, F.: Numerical simulation of grate firing systems using a coupled CFD/discrete element method (DEM). In: *Powder Technology* 193 (2009), S. 266–273
- [Smagorinski 1963] SMAGORINSKI, J.: General circulation experiments with the primitive equations I. The basic experiment. In: *Monthly Weather Review* 91 (1963), S. 99–164
- [Sommerfeld 2000a] SOMMERFELD, M.: *Theoretical and Experimental Modelling of Particulate Flows*. 2000. – Overview and Fundamentals Part I and II, Lecture Series 2000-06
- [Sommerfeld 2000b] SOMMERFELD, M.: *Theoretical and Experimental Modelling of Particulate Flows. Overview and Fundamentals, Part I and II*. April 2000
- [de Souza-Santos 1989] SOUZA-SANTOS, M. L.: Comprehensive Modelling and Simulation of Fluidized- Bed Boilers and Gasifiers. In: *Fuel* 68 (1989), S. 1507–1521
- [Stokes 1851] STOKES, G. G.: On the effect of the internal frictions of fluids on the motion of pendulums. In: *Trans. Cambr. Phil. Soc.* 9 (1851), S. 8–106

- [Sundaram u. Collins 1996] SUNDARAM, S. ; COLLINS, L. R.: Numerical considerations in simulating a turbulent suspension of finite-volume particles. In: *Journal of Computational Physics* 124 (1996), S. 337–350
- [SUNDIALS Bibliothek ] *SUNDIALS (SUite of Nonlinear and Differential/ALgebraic equation Solvers)*. <https://computation.llnl.gov/casc/sundials/main.html>,
- [Syamlal u. a. 1994] SYAMLAL, M. ; ROGER, W. ; O'BRIEN, T. J.: *MFIX Documentation: Theory Guide, Technical Note*. <http://www.mfix.org/documentation/Theory.pdf>, 1994
- [Tsuji u. a. 1993] TSUJI, Y. ; KAWAGUCHI, T. ; TANAKA, T.: Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. In: *Powder Technology* 77 (1993), S. 79–87
- [Uhl 1999] UHL, R.: *Volumen eines Kugeleinschnittes*. [http://www.math.kit.edu/user/~Seminar\\_LV/](http://www.math.kit.edu/user/~Seminar_LV/), 1999
- [Wen u. Yu 1966] WEN, C. Y. ; YU, Y. H.: Mechanics of fluidization. In: *Chemical Engineering Progress* 62 (1966), S. 100–111
- [Wu u. a. 2009] WU, C. L. ; ZHAN, J. M. ; LI, Y. S. ; LAM, K. S. ; BERROUK, A. S.: Accurate void fraction calculation for three-dimensional discrete particle model on unstructured mesh. In: *Chemical Engineering Science* 64 (2009), S. 1260–1266
- [Xie u. a. 2008a] XIE, N. ; BATTAGLIA, F. ; PANNALA, S.: Effects of using two- vs. three-dimensional computational modeling of fluidized bed Part I, hydrodynamics. In: *Powder Technology* 182 (2008), S. 1–13
- [Xie u. a. 2008b] XIE, N. ; BATTAGLIA, F. ; PANNALA, S.: Effects of using two- vs. three-dimensional computational modeling of fluidized bed Part II, budget analysis. In: *Powder Technology* 182 (2008), S. 14–24
- [Yang 2006] YANG, F. L.: *Interaction law for a collision between two particles in a viscous liquid*, California Intitute of Technology, Diss., 2006

- [Yu u. a. 2007] YU, L. ; LU, J. ; ZHANG, X. ; ZHANG, S.: Numerical simulation of the bubbling fluidized bed coal gasification by the kinetic theory of granular flow (KTGF). In: *Fuel* 86 (2007), S. 722–734
- [Zhong u. a. 2006] ZHONG, Wenqi ; XIONG, Yuanquan ; YUAN, Zhulin ; ZHANG, Mingyao: DEM simulation of gas-solid flow behaviors in spout-fluid bed. In: *Chemical Engineering Science* 61 (2006), S. 1571–1584
- [Zhou u. a. 2004a] ZHOU, H. ; FLAMANT, G. ; GAUTHIER, D.: DEM-LES simulation of coal combustion in a bubbling fluidized bed Part I: gas-particle turbulent flow structure. In: *Chemical Engineering Science* 59 (2004), S. 4193–4203
- [Zhou u. a. 2004b] ZHOU, H. ; FLAMANT, G. ; GAUTHIER, D.: DEM-LES simulation of coal combustion in a bubbling fluidized bed Part II: coal combustion at the particle level. In: *Chemical Engineering Science* 59 (2004), S. 4205–4215
- [Zhou u. a. 2003] ZHOU, H. ; FLAMANT, G. ; GAUTHIER, D. ; FLITRIS, Y.: Simulation of coal combustion in a bubbling fluidized bed by distinct element method. In: *Chemical Engineering Research and Design* 81 (2003), S. 1144–1149