

# Simulation von Festbettreaktoren zur technischen Verbrennung mit der Euler/Euler-Methode

Von der Fakultät Maschinenbau der Universität Stuttgart  
zur Erlangung der Würde eines Doktors  
der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)  
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von  
Frank Ulrich Rückert  
aus Mannheim

Hauptberichter: Prof. Dr.-Ing. K.R.G. Hein  
Mitberichter: Prof. Dr.-Ing. habil. E. Laurien

Tag der mündlichen Prüfung:  
01.12.2006

Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen  
der Universität Stuttgart

2005



# Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter des Instituts für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen (IVD) der Universität Stuttgart. Während dieser Zeit wurde sie von der Helmholtz Gemeinschaft (HGF) und der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) unterstützt.

Ganz besonders danke ich dem Leiter des IVD, Herrn Prof. Dr.-Ing. Klaus R.G. Hein für die Übernahme des Hauptberichtes, sein Engagement und die fachlichen Diskussionen haben diese Arbeit erst möglich gemacht. Dem Mitberichter Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Eckart Laurien vom Institut für Kernenergetik und Energiesysteme der Universität Stuttgart danke ich für sein Interesse und die guten Ratschläge. Ich möchte mich außerdem auch bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Helmut Seifert für die vielen guten Anregungen aus dem Bereich der Abfallverbrennung bedanken.

Mein herzlicher Dank gilt außerdem allen Kolleginnen und Kollegen des IVD für die angenehme Arbeitsatmosphäre. Vor allem Herr Prof. Dr.-Ing. PD Uwe Schnell hat mich, als Leiter der Abteilung Feuerungs- und Dampferzeugersimulation (FDS), stets unterstützt und bei der Anfertigung der Arbeit beraten. Hervorheben möchte ich auch die Herren Dr.-Ing. Benedetto Rasio und Dr.-Ing. Jochen Ströhle für ihre zahlreichen Ratschläge bei der Programmierung.

Die Diplomanden Stefan Bleckwehl, Heiko Dieter, Christoff Deeg, Simon Leiser und Jorge Santamaria-Carnicero haben einen Beitrag geleistet.

Herrn Dr.-Ing. Stefan Hamel vom Institut für Energietechnik der Universität Siegen danke ich für die freundliche Bereitstellung von Messwerten zum Abbrand von Koksen und Herrn Dr. Victor M. Gremyachkin vom Institut für Probleme der Mechanik (IPM) für die gute Zeit in Moskau.

Für die Möglichkeit zur Durchführung von Messkampagnen bzw. Überlassung vielfältiger Messwerte am Müllheizkraftwerk Ludwigshafen sowie den Testanlagen des Forschungszentrums Karlsruhe (FZK) möchte ich zum einen den Herren Klaus Diepenseifen und

Dr.rer.nat. Udo Pipenhagen von der LURGI Energie und Entsorgung GmbH sowie den Herrn Dipl.-Ing. Hans Leibold, Dr.-Ing. Adalbert Merz, Dipl.-Ing. Roland Walter und Dipl.-Ing. Hans Hunsinger vom Institut für technische Chemie Bereich thermische Abfallbehandlung (ITC-TAB) des FZK danken. Außerdem gilt mein Dank Herrn Dr.-Ing. Lambert Krebs vom Institut für Kern- und Energietechnik (IKET) für die Unterstützung.

Frau Susan Chun danke ich für die Durchsicht des englischsprachigen *abstracts* und Frau Dipl.-Ing. Etta Weiser für das Korrekturlesen der einleitenden Kapitel. Mein Bruder Dipl.-Ing. Wolfgang Rückert und meine Frau Dipl.-Ing. Maja Rückert haben ebenfalls große Teile der Arbeit korrigiert.

Nicht zuletzt möchte ich meiner Familie, meinen Freunden und meiner lieben Ehefrau Maja dafür danken, dass sie mich stets unterstützt haben und große Geduld während der vielen Abende bewiesen, die ich mit Programmieren und der Fertigstellung dieser Arbeit verbrachte.

Stuttgart, im Juni 2005

Frank U. Rückert

# Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis	VIII
Abstract	XII
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Motivation . . . . .	1
1.2 Zielsetzung . . . . .	5
1.3 Gliederung . . . . .	7
<b>2 Literaturübersicht</b>	<b>8</b>
2.1 Simulation von Rostfeuerungsanlagen . . . . .	8
2.2 Problematik der Partikelbeschreibung . . . . .	13
2.3 Design der Feuerraumgeometrie . . . . .	17
<b>3 Modellbildung</b>	<b>19</b>
3.1 Beschreibung von Partikel- und Gasphase . . . . .	19
3.1.1 Erhaltung der Masse . . . . .	20
3.1.2 Erhaltung des Impulses . . . . .	21
3.1.3 Partikelphase als granulares Medium . . . . .	25
3.1.4 Erhaltung der Enthalpie . . . . .	36
3.2 Beschreibung des Einzelpartikels . . . . .	43
3.2.1 Erhaltung der Masse . . . . .	44
3.2.2 Erhaltung des Impulses . . . . .	46
3.2.3 Erhaltung der Enthalpie . . . . .	47

3.3	Heterogene chemische Reaktionsmechanismen . . . . .	49
3.3.1	Trocknung . . . . .	50
3.3.2	Pyrolyse . . . . .	51
3.3.3	Vergasung . . . . .	54
3.3.4	Koksausbrand . . . . .	55
3.4	Turbulenz und chemische Reaktion . . . . .	61
3.4.1	Turbulenzmodell in der Gasphase . . . . .	61
3.4.2	Homogene Chemie und Turbulenz . . . . .	63
3.5	Homogene chemische Reaktionsmechanismen . . . . .	64
3.5.1	Detaillierte und reduzierte Reaktionsmechanismen . . . . .	64
3.5.2	Globale Reaktionsmechanismen . . . . .	66
3.5.3	Linearisierung chemischer Reaktionsgleichungen . . . . .	70
<b>4</b>	<b>Brennstoffcharakterisierung</b>	<b>71</b>
4.1	Untersuchung des Abbrandverhaltens . . . . .	71
4.1.1	Versuchsanlage . . . . .	72
4.1.2	Messtechnik . . . . .	73
4.1.3	Brennstoff . . . . .	73
4.2	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	74
4.2.1	Temperaturverlauf . . . . .	76
4.2.2	Massenabnahme . . . . .	77
4.2.3	Trocknung . . . . .	77
4.2.4	Pyrolyse und Koksabbrand . . . . .	78
4.2.5	Zündgeschwindigkeit . . . . .	80
<b>5</b>	<b>Implementierung</b>	<b>83</b>
5.1	Programmstruktur . . . . .	83
5.2	Randbedingungen . . . . .	86
5.2.1	Gasphase . . . . .	87
5.2.2	Partikelphase . . . . .	89
5.2.3	Gebietszerlegung . . . . .	92

5.3	Testfall - Reaktive Mehrphasenströmung . . . . .	93
<b>6</b>	<b>Technische Anwendung</b>	<b>97</b>
6.1	TAMARA - Anlage im halbtechnischen Maßstab . . . . .	98
6.1.1	Anlagenbeschreibung . . . . .	98
6.1.2	Messtechnik . . . . .	101
6.1.3	Brennstoff . . . . .	101
6.1.4	Numerische Simulation . . . . .	102
6.1.5	Ergebnisse . . . . .	106
6.2	MHKW Ludwigshafen - Anlage im technischen Maßstab . . . . .	117
6.2.1	Anlagenbeschreibung . . . . .	117
6.2.2	Brennstoff . . . . .	121
6.2.3	Messtechnik . . . . .	122
6.2.4	Numerische Simulation . . . . .	122
6.2.5	Ergebnisse . . . . .	125
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>131</b>
<b>A</b>	<b>Modellkonstanten</b>	<b>135</b>
<b>B</b>	<b>Versuchsparameter</b>	<b>137</b>
<b>C</b>	<b>Stoffdaten</b>	<b>139</b>
<b>D</b>	<b>Vergleichszahlen</b>	<b>141</b>
<b>E</b>	<b>Jacobi-Transformation</b>	<b>143</b>
<b>F</b>	<b>Stofftransport von Feststoffen</b>	<b>146</b>
F.1	Anlagenbeschreibung . . . . .	146
F.2	Einfluss der Roststabgeschwindigkeit . . . . .	148
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>150</b>

# Symbolverzeichnis

Größe	Bedeutung	Einheit
$A$	Fläche	$\text{m}^2$
$A$	Stoßfaktor chemischer Reaktionspartner	$\text{s}^{-1}$
$\tilde{a}$	spezifische Oberfläche	$\text{m}^2 \text{kg}^{-1}$
$C$	Turbulenz-Konstanten (siehe Anhang A)	-
$C_D$	Widerstandsbeiwert	-
$c_{p,i}$	spezifische Wärme der Spezies $i$ bei konstantem Druck	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
$c_{p,H_2O}$	spezifische Wärme von Wasser ( $4,187 \cdot 10^3$ )	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
$D_{q,i}$	spezifische Diffusionskonstante der Spezies $i$ in Phase $q$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
$D$	Diffusionsterm der turbulenten kinetischen Energie	$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-3}$
$d_{hyd}$	hydraulischer Durchmesser	$\text{m}$
$\bar{\bar{D}}_q$	Schergeschwindigkeitstensor der Phase $q$	$\text{s}^{-1}$
$d_P$	Partikeldurchmesser	$\text{m}$
$E$	Aktivierungsenergie	$\text{kJ kmol}^{-1}$
$E$	kinetische Energie der Partikelphase	$\text{kJ m}^2 \text{s}^{-2}$
$e$	Stoßzahl	-
$F$	Kraft	$\text{N}$
$f$	Mechanismus-Parameter für Koksabbrand	-
$g$	Gravitationskonstante (9,81)	$\text{m s}^{-2}$
$g_o$	Kontaktwert der radialen Verteilungsfunktion	-
$g_t$	Turbulenzgrad	-
$GV$	Glühverlust	-
$H$	Enthalpie	$\text{J}$
$H_o$	oberer Heizwert (Brennwert)	$\text{J kg}^{-1}$
$H_u$	unterer Heizwert	$\text{J kg}^{-1}$
$h_i$	spezifische Enthalpie der Spezies $i$	$\text{J kg}^{-1}$
$\bar{\bar{I}}$	Einheitstensor	-
$I$	Strahlungsintensität	$\text{W m}^{-2}$



Größe	Bedeutung	Einheit
$J$	Jacobi-Matrix	-
$k$	turbulente kinetische Energie	$\text{m}^2 \text{s}^{-2}$
$k$	Reaktionsrate	$\text{s}^{-1}$
$k_{ads/des}$	Geschwindigkeitskonstante (Adsorption/Desorption)	$\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$
$k_D$	Geschwindigkeitskonstante (Diffusion)	$\text{s}^{-1}$
$k_a$	Absorptionskoeffizient (Strahlung)	$\text{m}^{-1}$
$k_s$	Streukoeffizient (Strahlung)	$\text{m}^{-1}$
$k_\Theta$	Diffusionskoeffizient (granulare Temperatur)	-
$k^+$	dimensionslose Wandrauhigkeit	-
$L_P$	freie Weglänge der Partikel	m
$Le$	Lewis-Zahl	-
$\dot{m}_{pq}$	Massenstrom zwischen den Phasen $p$ und $q$	-
$M_i$	Molmasse der Spezies $i$	$\text{kg}_i \text{ kmol}_{\text{ges}}^{-1}$
$m$	Anzahl Kohlenstoffatome (Kohlenwasserstoffmolekül)	-
$n$	Reaktionsordnung	-
$n$	Anzahl Sauerstoffatome (Kohlenwasserstoffmolekül)	-
$Nu$	Nusselt-Zahl	-
$n$	Einheitsflächennormale	m
$P$	Produktion turbulenter kinetischer Energie	$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-3}$
$Pe$	Peclet-Zahl	-
$Pr$	Prandtl-Zahl	-
$p_q$	Druck der Phase $q$	$\text{N m}^{-2}$
$\dot{Q}_{pq}$	Wärmeaustausch zwischen den Phase $p$ und $q$	$\text{J m}^{-2} \text{s}^{-1}$
$q$	Wärmestromdichte	$\text{W m}^{-2}$
$\mathbb{R}$	allgemeine Gaskonstante (8341,0)	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
$R$	Rate der chemischen Reaktion	$\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$
$Re$	Reynolds-Zahl	-
$r$	Ortsvektor	m
$S$	Quellterm	*
$s$	dimensionsloser Partikelabstand	-
$Sc$	Schmidt-Zahl	-
$S_i$	massenbezogene, interne Oberfläche der Partikel	$\text{m}^2 \text{g}^{-1}$
$S_e$	externe Oberfläche der Partikel	$\text{m}^2$
$Sh$	Sherwood-Zahl	-
$T_q$	Temperatur der Phase $q$	K
$t$	Zeit	s

Größe	Bedeutung	Einheit
$U$	Umfang	m
$\vec{u}_q, \vec{v}_q, \vec{w}_q$	Geschwindigkeit Phase $q$	$\text{m s}^{-1}$
$V$	Volumen	$\text{m}^3$
$X_{s/a}$	Wichtungsfaktor (Strahlung)	-
$X_{q,i}$	Molanteil von Spezies $i$ und Phase $q$	$\text{kmol}_i \text{ kmol}_{\text{ges}}^{-1}$
$x_i$	Ortskoordinate	m
$x, y, z$	globale, kartesische Koordinaten	m
$y^+$	dimensionsloser Wandabstand	-
$Y_{q,i}$	Massenanteil von Spezies $i$ und Phase $q$	$\text{kg}_i \text{ kg}_{\text{ges}}^{-1}$

### Griechische Symbole

Größe	Bedeutung	Einheit
$\alpha$	Wärmeübergangszahl	$\text{W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$
$\beta$	Widerstandsfunktion	$\text{kg s}^{-1}$
$\beta_j^i$	Adjunkte der Jacobi-Matrix	-
$\gamma^*$	Massenanteil ( <i>fine-structures</i> )	-
$\gamma_{PG}$	Wärmeübergangskoeffizient Partikel/Gas	$\text{J m}^{-3} \text{ K}^{-1} \text{ s}^{-1}$
$\gamma_{\Theta}$	Dissipation granularer Energie	$\text{J m}^{-3} \text{ s}^{-1}$
$\delta_{ij}$	Kronecker-Symbol	-
$\epsilon_q$	Volumenfraktion der Phase $q$	-
$\tilde{\epsilon}$	Porosität des Partikels	-
$\varepsilon$	Dissipation turbulenter kinetischer Energie	$\text{m}^{-2} \text{ s}^{-3}$
$\varepsilon$	Emissionsgrad	-
$\zeta, \eta, \xi$	kurvilineare Koordinaten	m
$\Theta_P$	granulare Temperatur der Partikelphase	$\text{m}^2 \text{ s}^{-2}$
$\lambda_q$	Wärmeleitfähigkeit der Phase $q$	$\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$
$\lambda$	Luftzahl	-
$\lambda_H$	Horizontallastverhältnis	-
$\lambda_P$	Kompressionsviskosität der Partikelphase	Pa s
$\mu$	Viskosität	Pa s
$\mu_R$	Reibungsbeiwert	-
$\nu_{i,j}$	stöchiometrischer Koeffizient der Reaktion $j$	$\text{kg}_i \text{ kg}_{\text{ges}}^{-1}$
$\pi$	Ludolphsche Zahl, Kreiszahl (3,14159...)	-

Größe	Bedeutung	Einheit
$\rho_q$	physikalische Dichte der Phase $q$	$\text{kg m}^{-3}$
$\hat{\rho}_q$	effektive Dichte der Phase $q$	$\text{kg m}^{-3}$
$\sigma_r$	Stefan-Boltzmann Konstante ( $5,67 \cdot 10^{-8}$ )	$\text{W m}^{-2} \text{K}^{-4}$
$\sigma_{GS}$	Dicke der Grenzschicht	m
$\sigma$	Spannung der Partikelphase	$\text{N m}^{-2}$
$\Phi$	Phasenfunktion ( <i>scattering-phase function</i> )	-
$\phi$	allgemeine Variable der Bewegungsgleichungen	*
$\tau$	Verweilzeit	s
$\tau_{q,wall}$	Wandschubspannung der Phase $q$	$\text{N m}^{-2}$
$\Upsilon$	Stabilisierungsfaktor	-
$\phi$	allgemeine Variable	-
$\phi$	Thiele-Modul	-
$\phi_R$	Reibungswinkel	-
$\Omega$	Raumwinkel	°
$\omega^*$	Produktionsrate der chemischen Reaktion	$\text{kmol m}^{-3} \text{s}^{-1}$

### Hochgestellte Zeichen

Zeichen	Bedeutung
-	Mittelwert
$\sim$	<i>Favre</i> gemittelter Wert
*	auf <i>fine-structure</i> bezogener Wert
+	dimensionsloser Wert
$\hat{\phantom{x}}$	effektiver Wert (Multiplikation mit Volumenfraktion)
$\vec{\phantom{x}}$	vektorieller Wert
'	Schwankungswert

# Abstract

The incineration of household-waste, secondary fuel, or biomass represents, in comparison to other renewable energy sources, a cheap and technically feasible short-term option to substitute fossil fuel and to reduce the emission of carbon dioxide. Additionally the German government has set the goal to increase the thermal use of household-wastes in order to reduce the high volume needed for landfills. These landfills were used because of historical reasons and they pose great risk to the landscape. The European Union plans to increase the share of biomass fuel from 3 % in 1995 up to 8 % in 2010. Because of this, modern grate-firing systems, both in retrofit or new plants, are expected to expand significantly even in Germany in the upcoming years and to contribute to the aforementioned goal.

For the reduction of emissions, numerous examinations have been made to optimise the process. The realization of experimental optimisations is time-consuming and involves high financial costs. However, the utilization of changing wastes, has consequences on combustion behaviour inside the boiler, emissions, ash-quality, residual matter, and utilization of by-products. Numerical methods allow testing of many techniques with varying combustion parameters in a much shorter time period and at lower costs. Since simulation should provide solutions of acceptable accuracy within a short period, the algorithmic part and the model description of the physical processes attracts the attention of developers of 3D-furnace models. To model such a complex process like a grate-firing system, single physical and chemical processes and their combination have to be understood. The author shows consolidated experience in this subject. He spent much time examining these problems at numerous plants around Germany and has had discussions with special experts.

A modern grate-firing system for incineration of solid fuel is a combined process of the solid-fuel bed travelling slowly down the grate and a reacting gas-phase passing through this layer. The grate has moving bars to manipulate the momentum of such a bed. So this is a combination of velocity sources from the bars and gravity driven flow. While the solid phase is moving straight through the firing-room, also called reactor, primary air is blown from underneath the grate through the solids phase region in counter current

flow. The radiation from the walls of the reactor and the burning gas phase dries the fuel in the first phase of the combustion process. After this, gasification, pyrolysis, and finally the combustion of the bounded carbon take place. From all these heterogeneous processes, gas phase species like vaporized water, carbon monoxide, carbon dioxide, and several hydrocarbons escape and mix into the gas phase above the grate. While being transported by the primary air, the increase in gas volume and decrease in density caused by rise in temperature adds gas-phase velocity. The volatile species are transported up the firing-room and combust completely. If combustion driven phase change is not present, one can neglect the effect of the dispersed phase on the carrying flow.

The work is divided into several sections, but focuses on the main problems that have to be solved during mathematical modelling, mainly the problem of the moving behaviour of the solid-fuel bed and its heterogeneous combustion behaviour. It has to be said that problems with such firing in large-scale utility boilers have not been solved previously. The combustion in the gas phase and the influence of the turbulence are only briefly discussed here since they are further described in other publication by the author.

After a description of the physical problems mentioned above and the description of the motivation for this work, a review of current literature about the simulation of grate firing-systems is presented. Here a multiphase model was directly implemented into a program. AIOLOS is a powerful engineering-tool. Some of its new features are introduced. The program is a 3-dimensional *computational-fluid-dynamics* (CFD) code, that was developed at the Institute for Process Engineering and Power Plant Technology (IVD), Stuttgart University (Germany). It is the platform for further modelling work. The different attempts to implement a particle model into such a code means the first step necessary for the description of grate-firing. The possibility of a new model that combines the movement of the particle phase in addition to the movement of the gas phase is described. The different classes used to model such a particle phase are discussed. The multiphase-model is introduced, where reactive flow of the gas-phase even as the momentum of the particles and their heterogeneous reaction take place. The model is based on mathematical, physical, and chemical basics and is described in detail.

Although engineering applications often involve multiphase flows, there are two main approaches for computing this two-phase problem. The carrying or continuous fluid-phase is mostly treated by an Eulerian approach, while the dispersed phase may be handled by either an Eulerian or a Lagrangian method. Each method describes the particles in differing mathematical coordinate systems. If the Eulerian system is used, the mathematical description is based on a fixed coordinate system, while the Lagrangian describes a moving system relative to every single particle. The Lagrangian approach is used when the mass loading of the dispersed phase is not very large. There the solids phase is represented

by a finite number of particles whose motion is computed in Lagrangian manner. While implementing this into CFD, every particle has a computed history. The memory that has to be reserved for this depends on the particle number. The particle phase contributes to the momentum, energy and mass of the gas-phase in each control volume. This means, that the number of particles is one of the limiting steps for the calculation. When the mass loading of the dispersed phase is substantial, the influence of the particles on the fluid motion has to be taken into account. Interactions like collision between particles and shear stresses between particles and walls need to be modelled. For these exchanges, empirical correlations based on measurements are often used, but the uncertainties may be rather large. So for large mass loading and when phase change, caused by combustion, takes place, the Eulerian approach is applied to both phases. This Eulerian approach is also called the two-fluid model or Eulerian/Eulerian approach. Both phases are treated as continua with separate velocity and temperature fields. They interact via exchange terms analogous to those used in the Eulerian/Lagrangian approach. The mass balance defines how much of a control-volume is occupied by each phase. An ambitious part of the modelling was the description of the relationship between the pressure inside the solids phase and the gravity because of the numerical instability of this relationship. The principles of the Eulerian/Eulerian approach are described in detail in this work.

For the heterogeneous reaction of the particulate phase taking place parallel to the movement, the aforementioned single combustion processes like drying, pyrolysis, gasification and char-burnout has to be described mathematically. This is based mainly on Arrhenius equations. These heterogeneous processes give a sink to the oxygen concentration of the primary-air but offer several new gas-phase species. In addition to these mass transport problems, the different kind of heat transfer at the particle is described. Even homogeneous, chemical reaction is described further in papers by the author. It is important to give a short overview of this work. The homogeneous reactions in the gas-phase are described by chemical kinetics, which gives the time component to the reaction mechanism. The interaction between the turbulence and the chemistry is described by the eddy-dissipation-concept (EDC). Global and reduced kinetic mechanisms that can represent the important features of an original detailed mechanisms, e.g. for combustion of the hydrocarbons or carbon monoxide greatly increase the possibility of the kinetic modelling of practical combustion problems and offer potential improvement of modelling accuracy in comparison to using global mechanisms. The present work applies a comparison of such kinetics in conjunction with the CHEMKIN-library<sup>1</sup>. A global kinetics for hydrocarbon fuels in waste-fired furnaces is presented. A full version of the well known GRI 3.0-mechanism with 53 species and 325 reactions is used for validation. The global mechanism is implemented into the 3D combustion simulation CFD-program AIOLOS.

---

<sup>1</sup>CHEMKIN was developed at the SANDIA National labs, (USA)

Simulations of the burning process of hydrocarbons in a waste-fired reactor are carried out.

Simulation results are compared with experimental data. The reaction models for the homogeneous and heterogeneous phase will take advantage of experimental data gained by advanced analysis methods. It is shown that the global, homogeneous mechanism gives quite satisfactory results in a wide range of equivalence ratio, and the computing times of the present mechanism decrease. The model is verified by pilot- scale experimental data. Therefore a so called hot-pot, that is localized at the Research Centre Karlsruhe (FZK), (Germany), was used. With this test facility called KLEAA, it is possible to test the combustion behaviour mentioned above in a small, non- moving control-volume. Biomass as well as different kinds of waste is used as fuel. Parameters that have to be examined are the amount of primary-air and fuel-moisture. The investigations show that the combustion behaviour of the solid fuel can be described by relevant properties and parameters. With the results of these tests it is possible, to validate the heterogeneous combustion model. Theoretical background by detailed experimental work, the influence of several particle properties, like physical density, particle diameter and the density per control-volume are examined. All the results of these examinations should be extrapolated to a full-scale process with AIOLOS. In order to use the numerical simulation, to validate it against measurement, and to scale-up the results, the significant difference of detailed measurements at laboratory-scaled test facilities and at full-scale boilers is described.

The numerical aspects for the implementation of the model are given. Because the numerical solver in the AIOLOS code is described in detail elsewhere, this work describes the important, special features and boundary condition. Two new types of boundary conditions for the code are introduced. The first deals with the movement of the particles on the grate. It must be described by a boundary cell that gives a momentum source to the particles, but is porous for the counter flow of the gas phase, while being impenetrable for the solids phase. The second new boundary condition is a special outlet for the particles. Before, it was only possible for the AIOLOS code to handle one single outlet for the gas phase, but because of the separation of the dispersed and the homogeneous phase in grate-firing systems this new feature has been implemented. Enhancements of the grid generation process are often disregarded despite the fact that this part contributes significantly to the total turnaround time of the furnace optimisation process. Using different grid types allows the engineer to speed-up the modelling process while retaining accuracy. The description of the numeric closes with an overview of modern Supercomputer facilities, which were able to manage the high amount of numerical calculations needed for full-scale boilers. The author had the great opportunity to use the machines NEC-SX4 and SX5 of the High-Performance- Computing-Centre Stuttgart (HLRS), (Germany). These Supercomputers, with vector- parallel architecture need a special kind of programming

scheme, so-called vectorisation of the code. It allows to speed-up the calculation process while retaining the accuracy. Additional parallelisation of the code gives the opportunity to use several processors (CPU) in parallel, which also shortens the computing times. Some examples of this kind of philosophy are explained by exemplary source-code for the physical models explained before.

The work closes with a description of the technical application as well as the validation of the numerical results. The purpose of CFD is presented with the pilot- scaled waste incinerator TAMARA of the FZK and the full-scale furnace MHKW Ludwigshafen (Germany), which is a grate-firing system used for incineration in the Rhine-river region. All discretisations of the plants are made with curvilinear, Cartesian grids for the main part of the furnace. These body-fitted grids allow an accurate description of complex geometrical details. For both plants, design-studies of the firing-room are made to optimise the process. Most of these optimisations fit empirical investigations made before. The new geometries of the ovens are leading to an optimised combustion behaviour. Numerical results have been validated against measured data to prove prediction capabilities and reliability. The plants are documented by detailed measurements and the investigations with CFD are explained. Additionally in a discussion of the results, the examined firing-room-concepts are checked for their benefits. Nowadays the optimisation of additional nozzles, that blow secondary air or re-circulated flue-gas into the combustion chamber, offers a great opportunity to add new oxygen or more turbulence at special positions. Additionally, so-called noses for the flow of the gas or steps under the solid bed optimise the movement of the phase or increase the reactivity. A big goal is also the optimisation of residence times or its distribution inside the reactor to minimize emissions.

By using modern CFD methods and applying them to waste incineration, this work aims to give scientific background to the hands of developers of technical applications of such complex processes, as well as to managers, who have to plan the every-day- changes of the fuel mix for an individual rig.



# Kapitel 1

## Einleitung

Die Rostfeuerung ist zur Zeit der gebräuchlichste Gas-Feststoff Reaktor zur Verbrennung von Restmüll aus Haushalten, hausmüllähnlichen Gewerbeabfällen und Biomassen. In zunehmendem Maße werden bei ihrer Entwicklung und Auslegung rechnergestützte Methoden aus dem Bereich der *computational fluid dynamics* (CFD) genutzt. Die Entwicklung und Anwendung von CFD zur Optimierung von Rostfeuerungsanlagen ist Thema der vorliegenden Arbeit.

### 1.1 Motivation

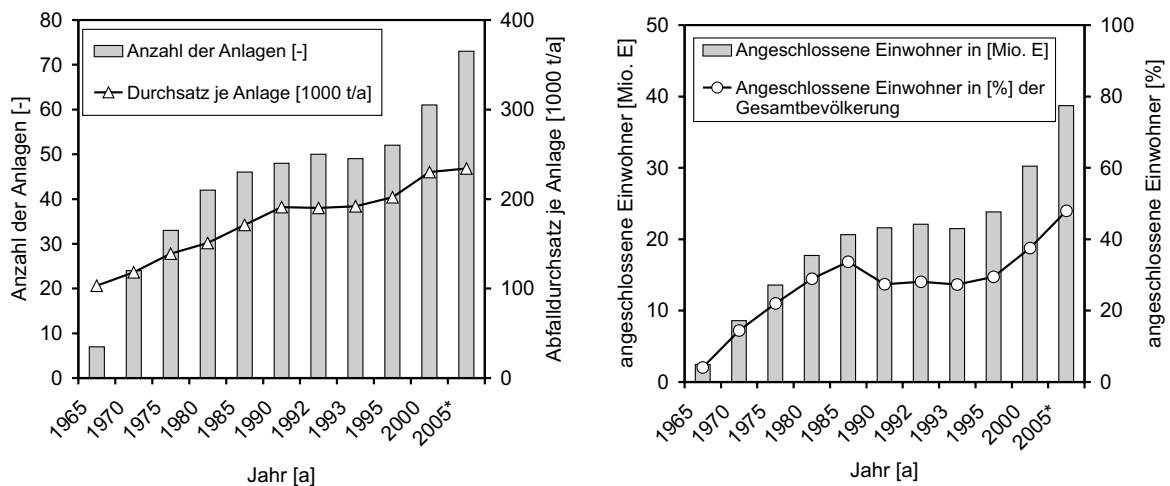
Trotz hoher Recyclingraten fallen erhebliche Mengen Abfall an, die der stofflichen Verwertung nicht wieder zugeführt werden können. In der Bundesrepublik Deutschland wird dieser Abfall zu einem überwiegenden Teil in Rostfeuerungsanlagen entsorgt. Aufgrund des hohen Biomasseanteils werden durch diese Energieumwandlungsform allein in Westeuropa Einsparungen fossiler Brennstoffe im Bereich von 100 t SKE/a realisiert und damit die Kohlendioxidemissionen ( $\text{CO}_2$ ) gesenkt [199].

Die thermischen Verfahren der Abfallentsorgung stehen in Konkurrenz zu Deponierung und biologischen Verfahren. Die Deponierung von Abfall ist historisch bedingt und hat den Nachteil, dass große Flächen durch den Abfall kontaminiert werden. Der Gesetzgeber hat deshalb mit der TA-Siedlungsabfall novelliert, dass ab 2005 nur noch Abfälle deponiert werden dürfen, die je nach Deponieklasse einen Restkohlenstoffgehalt (Mindestglühverlust  $GV < 5 \text{ Mass.-%}$ ) nicht überschreiten und folglich vorher thermisch behandelt werden müssen [207]. Dies führt zu einer Reduzierung des zu deponierenden Volumens. Da die biologischen Verfahren diesen Restkohlenstoffgehalt in den meisten Fällen nicht erreichen, können sie demnach nur noch als Vorstufe der thermischen Verfahren genutzt werden.

In Abbildung 1.1 ist dargestellt, dass in der Bundesrepublik Deutschland seit 1965 die

Anzahl der Müllverbrennungsanlagen (MVA) bedingt durch den zunehmenden Gesamtdurchsatz an Abfall stetig zugenommen hat.

Einer ITAS-Studie zufolge betrug im Jahr 1997 die erzeugte Abfallmenge 56,3 Mio. t. Davon wurden jedoch nur 9,8 Mio. t in den damals 53 MVA entsorgt [18]. 2002 wurden bereits 59 Anlagen mit einer jährlichen Kapazität von etwa 14 Mio. t zur thermischen Behandlung der Restsiedlungsabfälle genutzt, davon waren zwei Anlagen in der Inbetriebnahmephase. Bei Einhaltung der TA-Siedlungsabfall kann davon ausgegangen werden, dass die Kapazität bis zum Jahr 2005 und darüber hinaus weiter erheblich zu steigern ist. Gemäß Abbildung 1.1 wurde neben dem absoluten Durchsatz auch der Durchsatz pro Anlage gesteigert [212]. Dies konnte unter anderem durch eine Verlängerung der Instandhaltungsintervalle (ca. 2.000 bis 2.500 Betriebsstunden) und einer Verbesserung der Auslastung erreicht werden. Weiter ist ersichtlich, dass sich seit 1965 der Trend fortgesetzt hat, immer mehr Einwohner an MVA anzuschließen. Bis Ende 2005 sind weitere 14 MVA geplant bzw. schon im fortgeschrittenen Planungsstadium. Die Gesamtkapazität wird damit auf ca. 17,6 Mio. t a<sup>-1</sup> erhöht werden.

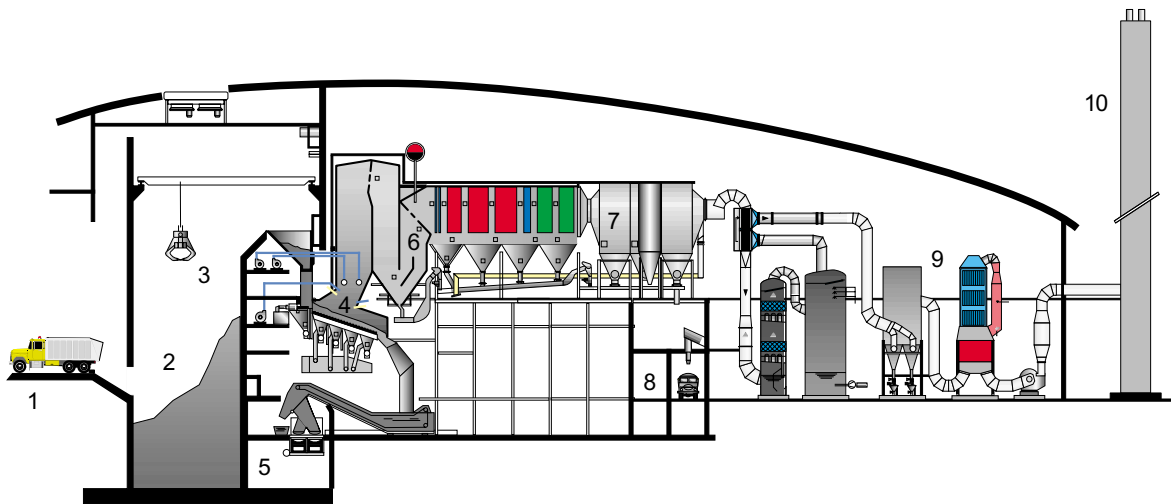


**Abbildung 1.1:** Anzahl und Abfalldurchsatz von Müllverbrennungsanlagen (MVA) der Bundesrepublik Deutschland und Anzahl der an die Anlagen angeschlossenen Einwohner \*(Werte für 2005 sind abgeschätzt) [212]

Durch ihren Einsatz bei der CO<sub>2</sub>-neutralen energetischen Nutzung von Biomasse und der Entsorgung von Altholz gewinnen die Rostfeuerungs-systeme zusätzlich an Bedeutung. Außerdem ist eine schnelle Umstellung auf große Mengen an unkonventionellen Brennstoffen (Tiermehl, Tierfutter, Kadaver, Klärschlamm etc.) möglich.

Ein Schnitt durch eine MVA<sup>1</sup> ist in Abbildung 1.2 dargestellt. Er zeigt die wesentlichen Komponenten von Rostfeuerung, Dampferzeuger und Abgasreinigung. Auf dem Rost wird

<sup>1</sup>Müllverbrennungsanlage Nürnberg nach VON ROLL INOVA GMBH, Betriebsbeginn 2001

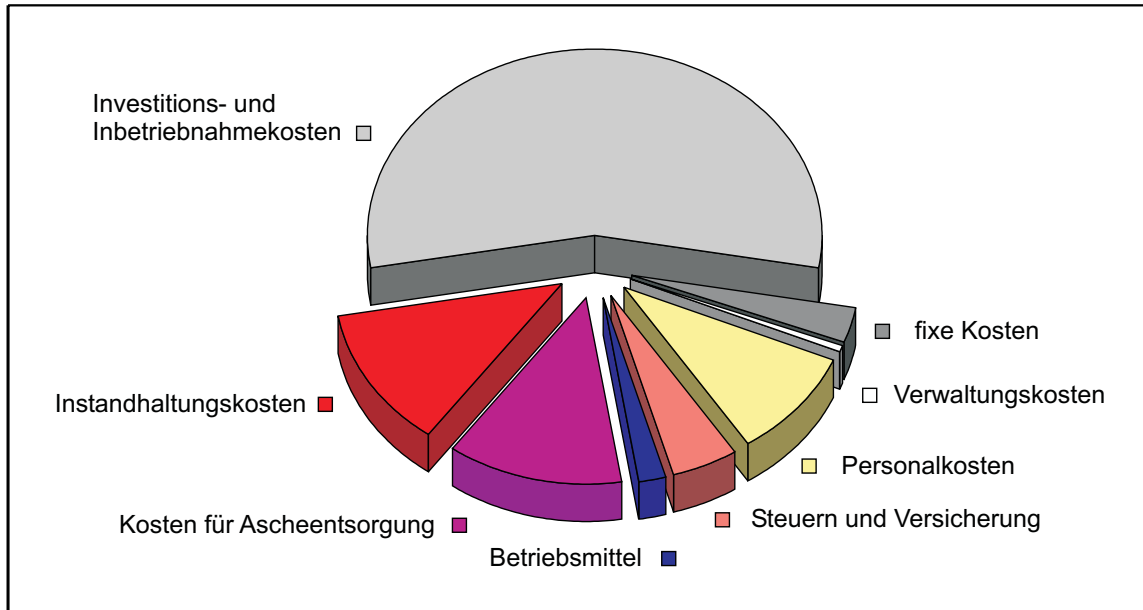


**Abbildung 1.2:** Schnitt durch eine moderne Müllverbrennungsanlage (MVA) mit Zugabe des Brennstoffs (1), Müllbunker (2), Greifer (3), Rostfeuerung (4), Schlackeaustrag (5), Dampferzeuger (6), Elektrofilter (7), Flugascheverladung (8), Abgasreinigung (9) und Schornstein (10)

der Brennstoff durch Verbrennungsreaktionen in Schlacke und Rauchgas umgesetzt. Das Brennstoffbett ist dabei eine von der Primärluft im Kreuzstrom durchströmte, reagierende Festbettaufschüttung, welche durch Strahlungsenergie aus dem Feuerraum gezündet wird. Die Dampfproduktion in den Wärmeübertragern dient der Erzeugung von Nutzwärme und elektrischer Energie (siehe auch Abbildung 2.1). Alle deutschen Anlagen verfügen über eine solche Energienutzung (Strom, Fernwärme). In 15 Anlagen werden die Restsiedlungsabfälle bereits gemeinsam mit kommunalen Klärschlämmen behandelt.

Die Qualität von Reststoffen und Rauchgasemissionen wird dabei ebenfalls durch gesetzliche Vorgaben wie 17. BImSchV und TAsi geregelt [20]. In vielen Fällen lässt sich die anfallende Schlacke beispielsweise im Straßenbau weiterverwenden. Um Emissionsgrenzwerte einzuhalten, werden Abgasreinigungssysteme eingesetzt. Die Rauchgasreinigung (*end-of-pipe*) ist eine sekundäre Maßnahme. Wie in Abbildung 1.2 ersichtlich, nehmen solche Systeme einen großen Teil der Anlage ein. Sie machen damit einen erheblichen Kostenanteil aus und dienen als Nachbesserung von Problemen, die ihre Ursache bereits im vorderen Teil der Anlage - dem Feuerraum - haben. Eine direkte Verbesserung dort wird als primärseitige Maßnahme bezeichnet und ist am effektivsten, wenn sie bereits in der Planungsphase bei der Gestaltung des Feuerraumes berücksichtigt wird. Die Berechnung des Feststofftransports auf dem Rost, sowie der Strömungsverhältnisse von Gasphase und Strahlungstransport sind dabei wichtige Hilfsmittel. Derzeitige Forschungs- und Entwicklungsarbeiten beschäftigen sich damit, den Verbrennungsprozess zu stabilisieren, Stillstandszeiten zu reduzieren und die Bildung von Schadstoffen sowie Verschlackungen an den Wänden zu vermindern.

Betrachtet man die gesamten Kosten einer MVA (siehe Abbildung 1.3) wird deutlich, dass der überwiegende Teil von etwa 50 bis 60 % im Bereich der Investitions- und Inbetriebnahmekosten liegt [148, 222]. Deshalb sind für den Hersteller gerade bei der Planung Voraussagen über das Verhalten der Anlage von großer Bedeutung. Vor allem die unterschiedliche thermische Kapazität des Feuerraums, die Redundanz von Bauteilen, das Luft-zu-Brennstoff-Verhältnis und die Rauchgasreinigung bieten hier große Einsparpotenziale [220]. Durch primärseitige Maßnahmen kann sowohl die Abgasreinigung bei Einhaltung der Grenzwerte vereinfacht als auch Fix- und Betriebskosten reduziert werden.



**Abbildung 1.3:** Gesamtkosten einer großtechnischen Müllverbrennungsanlage (MVA) [222]

Auslastung und Verfügbarkeit sind weitere wichtige Voraussetzungen für einen wirtschaftlichen Betrieb. Treten in der Brennkammer oder den Strahlungszügen verstärkt Verschmutzungen, Verschlackungen, Korrosions- oder Erosionserscheinungen auf, sind gerade in der Inbetriebnahmephase hohe Ausfallzeiten die Folge. Die laufenden Kosten für einen Stillstand liegen bei ca. 50.000 €/Tag, hinzu kommen Reinigungs- und Reparaturkosten. Die technische Entwicklung des Feuerraums beruht heute in vielen Fällen noch auf empirischen Erkenntnissen, die an bestehenden Anlagen gewonnen werden. Standard CFD Berechnungen, die auf Einphasenmodellen basieren, sind nicht anwendbar, da die Gasfreisetzung im Bett nicht bekannt ist. Bei großen Partikeln und schnellen, stark exothermen Reaktionen treten hohe Gradienten zwischen den Phasen auf.

Um solche Vorgänge basierend auf physikalisch-chemischen Grundlagen beschreiben zu können, wird ein allgemeingültiges Modell für den Feuerraum benötigt. Es muss die Bewegungsvorgänge im Festbett wiedergeben können und soll direkt in ein CFD-Programm implementiert sein, um den Strahlungstransport hinreichend genau zu berücksichtigen.

Der Brennstoff soll im laufenden Betrieb oder im Vorfeld der Planung mit einfachen Methoden getestet werden können, so dass über CFD direkt Rückschlüsse auf Betriebsweise bzw. Gestaltung des Feuerraums geliefert werden können.

Im Rahmen der Problemstellung wird darauf aufmerksam gemacht, dass eine Übertragung von Erkenntnissen an Versuchsanlagen auf großtechnische Anlagen Probleme mit sich bringt. Auch wenn sich ein technischer Prozeß im kleinen Maßstab gut beherrschen lässt, muss dies in einem größeren Maßstab nicht unbedingt möglich sein. Dafür gibt es im Wesentlichen zwei Gründe. Zum einen nimmt bei der Zunahme der räumlichen Dimension einer Anlage bzw. des Reaktionsraums das Verhältnis von Volumen zu Oberfläche zu. Physikalische bzw. chemische Effekte wirken sich in unterschiedlichen räumlichen und zeitlichen Dimensionen mit verschiedener Gewichtung aus. Auf der anderen Seite nimmt mit zunehmender Anlagengröße die Überschaubarkeit ab, da sowohl Anzahl als auch Genauigkeit der Messwerte geringer sind. Die Randbedingungen sind bei Laboranlagen ebenfalls besser bekannt. Ihre Schwankungen können bei Großanlagen während der Versuche meist nur mit geringerer Genauigkeit festgehalten werden. Der Einsatz von Simulation sollte deshalb immer in Kombination mit Messungen an Großanlagen stattfinden.

## 1.2 Zielsetzung

Das Ziel der Gestaltung eines Feuerraums ist die optimale Anpassung an den Brennstoff, bzw. das gesamte Brennstoffband bei Minimierung der Kosten. Aus der Problemstellung geht hervor, dass hierbei sowohl die fixen als auch variablen Kosten zu berücksichtigen sind.

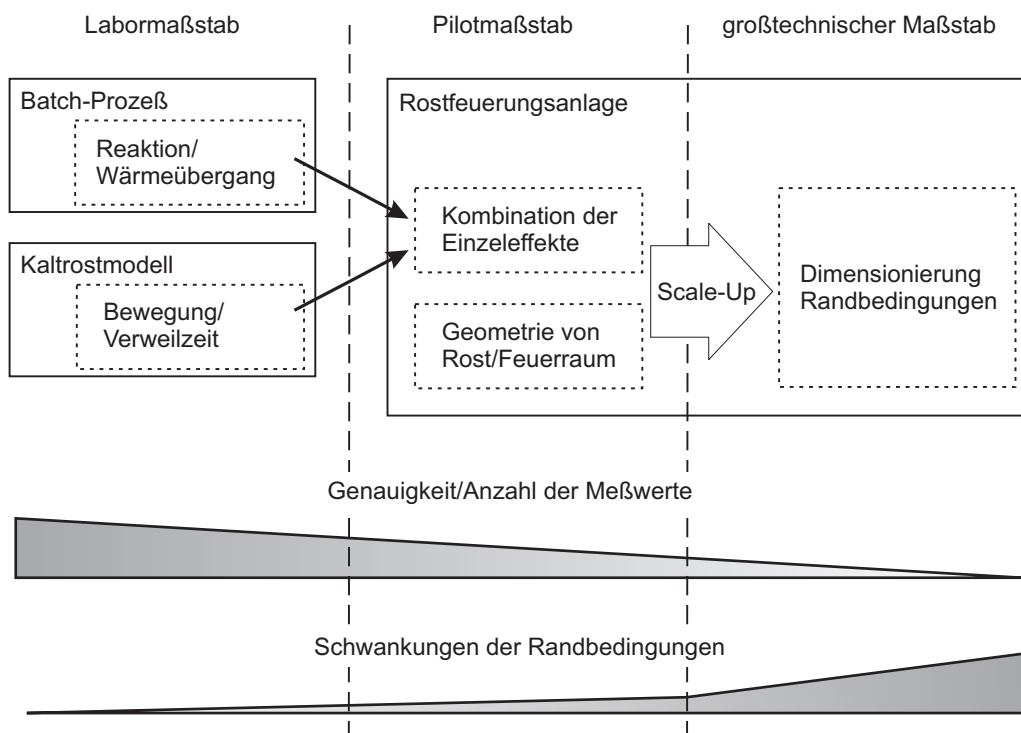
Zielsetzung dieser Arbeit ist die Bereitstellung eines Modells, das die Massenströme, ihre chemische Zusammensetzung sowie den Wärmeaustausch vorhersagen kann. Es soll auf kinetischen Daten aus der Literatur bzw. von Laboranlagen aufbauen. Das Temperatur- und Konzentrationsfeld der Partikel soll untersucht werden können, wobei Trocknung, Pyrolyse und Koksabbrand explizit berücksichtigt werden. Es werden die theoretischen Grundlagen zur mathematischen Beschreibung der Partikel durch eine eigene Euler-Phase dargestellt. Es werden Erweiterungen an der Theorie der granularen Medien vorgenommen (siehe Abschnitt 2.1). Die Implementierung der Modelle in AIOLOS<sup>2</sup> wird erläutert und es wird dargestellt, inwieweit durch Messungen eine Validierung des Modells möglich ist.

Weiter wird ein Konzept erarbeitet, mit dem die Entwicklung von Rostfeuerungen nach dem *bottom-up* Prinzip durchgeführt werden kann. Ein solcher Designprozess ist in Abbildung 1.4 dargestellt. Er berücksichtigt Anlagen in drei verschiedenen Dimensionen, im

---

<sup>2</sup>AIOLOS; CFD Programm zur dreidimensionalen Feuerraumsimulation; entwickelt am Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen (IVD), Universität Stuttgart

Labormaßstab, im halbtechnischen bzw. Pilotmaßstab und im großtechnischen Maßstab. Der Brennstoff wird zunächst im Labormaßstab untersucht. Hierbei sind vor allem rheologische Eigenschaften, die heterogene Reaktion und der Wärmeübergang von Bedeutung. Zur Untersuchung der Bewegung auf dem Rost werden Messungen an einem Kaltrostmodell verwendet (siehe Anhang F). Die chemische Reaktion wird in einem instationären Versuch (*batch*) untersucht. Die Rostfeuerungsanlage im Pilotmaßstab bietet eine Kombination aus chemischer Reaktion und Bewegung der Partikel. An ihr werden Parametervariationen durchgeführt. Für Anlagen im großtechnischen Maßstab wird ein *scale-up* konzipiert, da bei der Dimensionierung die Größenverhältnisse nicht einfach übertragen werden können, sondern angepasst werden müssen.



**Abbildung 1.4:** Entwicklung des Anlagenkonzeptes und Verfügbarkeit von Messwerten

Sowohl Messungen an der Pilotanlage TAMARA des Forschungszentrums Karlsruhe (FZK), als auch an einer Großanlage (MHKW Ludwigshafen) werden zur Validierung verwendet. Der experimentelle Aufwand an den Großanlagen ist erheblich, so dass die Untersuchungen auf wenige charakteristische Messpunkte beschränkt sind und durch Mitschriebe der Messwerte ergänzt werden. Im Hinblick auf die Übertragbarkeit hin zu Großanlagen wurde der Feuerraum von TAMARA als Mittelstromfeuerung neu gestaltet, wobei Simulationsrechnungen mit AIOLOS zur Verteilung der Sekundärluft eine wesentliche Grundlage zur endgültigen Festlegung der Feuerraumgeometrie sowie von Primär- und Sekundärluftverteilung bieten.

## 1.3 Gliederung

Im folgenden Kapitel 2 wird der Kenntnisstand der Simulation von Rostfeuerungsanlagen anhand einer Literaturübersicht dargelegt. Die einzelnen Ansätze werden diskutiert. Zusätzlich wird eine Einteilung der Partikelmodelle vorgenommen.

Kapitel 3 beschäftigt sich ausführlich mit der Modellbildung, und stellt das neue Mehrphasenmodell vor.

Die im Kapitel 3 beschriebenen theoretischen Grundlagen werden im Kapitel 4 anhand von experimentellen Untersuchungen bewertet. Detaillierte Untersuchungen des Verbrennungsverhaltens in einem nicht bewegten, instationären Festbett in Abhängigkeit von Parametern wie Primär- und Sekundärluft sowie der Brennstofffeuchte sind dargestellt.

Im Kapitel 5 wird auf die numerischen Aspekte bei der Implementierung des Mehrphasenmodells in das 3D-Feuerraumsimulationsprogramm AIOLOS eingegangen. Da die numerischen Lösungsmethoden von AIOLOS bereits hinreichend dokumentiert sind [165, 184], beschränkt sich das Kapitel im Wesentlichen auf die Darstellung von Besonderheiten bei den Randbedingungen. Zwei neue Randbedingungen werden vorgestellt. Zusätzlich wird auf die Implementierung für Vektor-Parallel-Rechner eingegangen.

Die technische Anwendung des Modells wird in Kapitel 6 anhand der Pilotanlage TAMARA und der großtechnischen Anlage MHKW Ludwigshafen verdeutlicht. Für beide Anlagen werden Designstudien der Feuerraumgeometrie erläutert. Die Modifizierung der Feuerraumgeometrien zur Optimierung des Verbrennungsvorganges wird dargestellt.

Abschließend werden in Kapitel 7 die gewonnenen Ergebnisse zusammengefasst und die untersuchten Feuerungskonzepte hinsichtlich ihrer Eignung verglichen. Die Arbeit schließt mit einem Ausblick auf die weiteren Möglichkeiten zum Einsatz des Simulationsprogramms.

# Kapitel 2

## Literaturübersicht

Die Literaturübersicht soll eine Zusammenfassung über die bisher in der Literatur vorgestellten Modelle und Simulationsprogramme für Rostfeuerungsanlagen geben. Hierbei wird auf die Problematik der Beschreibung der Partikelphase auf dem Rost hingewiesen und es erfolgt ein Verweis auf die klassische Vorgehensweise bei der Gestaltung des Feuerraums. Weiterführende Literaturstellen werden zur besseren Übersichtlichkeit direkt innerhalb der nachfolgenden Kapitel angegeben.

### 2.1 Simulation von Rostfeuerungsanlagen

Betrachtet man die bisherige Entwicklung der Rostfeuerung, so werden drei unterschiedliche Richtungen deutlich, die sich nach dem umzusetzenden Brennstoff richten. Zunächst wurde die Rostfeuerung für die Energieerzeugung mit Kohle genutzt. Als Mitte des letzten Jahrhunderts bei der thermischen Stromerzeugung von Rostfeuerung auf Staubfeuerung umgestellt wurde, verlagerten sich die Forschungsschwerpunkte auf diesen Feuerungstyp. Im Bereich Rostfeuerung beschäftigte sich die Forschung danach zu einem großen Teil mit der Beseitigung von Abfall.

Heute bildet sich ein neuer Schwerpunkt bei der energetischen Nutzung von Biomasse heraus. Im Bereich der Holzverbrennung werden sogenannte *Wurfbeschickungen* immer beliebter, die eine Kombination aus Staub- und Rostfeuerung darstellen. Eine Sonderform der Rostfeuerung ist der *Drehrohrofen*, bei welchem die Partikel durch eine rotierende Walze wandern. Er wird vor allem im Bereich der Verbrennung von Sondermüll und bei der Zementherstellung eingesetzt.

Der grundsätzliche Transport von Partikel- und Gasphase in einer Rostfeuerungsanlage mit Mittelstromfeuerung ist in Abbildung 2.1 dargestellt<sup>1</sup>. Der Brennstoff wandert vom

---

<sup>1</sup>nach VON ROLL INOVA GMBH

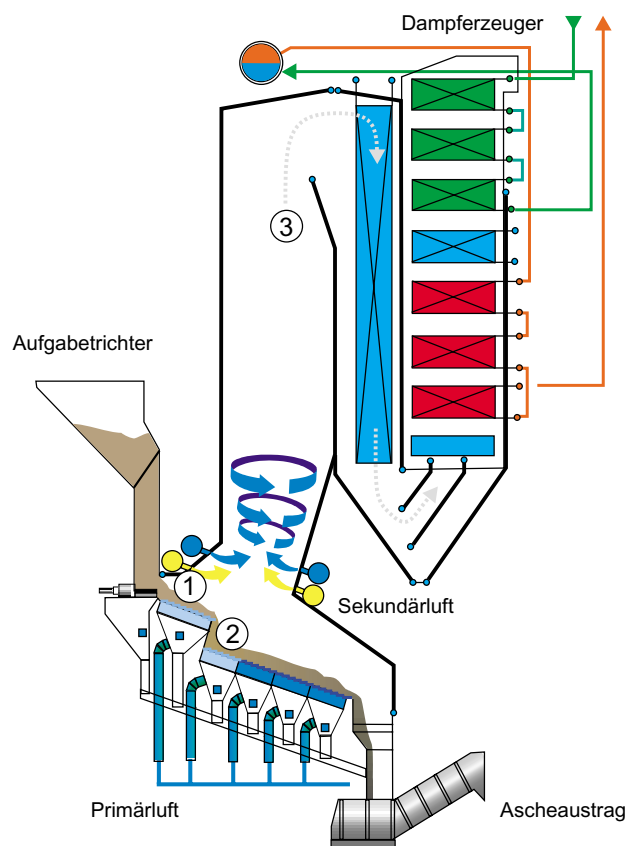


Aufgabetrichter auf das Rost (1), wobei er im Kreuzstrom von der Primärluft durchströmt wird. Durch Stufen auf dem Rost (2) können gezielt Partikel bewegt (*geschürt*) werden, was zu einer zusätzlichen Vermischung des Feststoffs führt. Dabei werden heiße Zündnester von der Oberfläche in das Brennstoffbett eingetragen. Die abreagierten Partikel wandern auf dem Rost weiter zum Ascheaustrag.

Die Verteilung der Sekundärluft durch Düsen im Feuerraum, bzw. deren Drall, ist beim Verbrennungsprozess von entscheidender Bedeutung, da sie die Verbrennung von gasförmigen Kohlenwasserstoffen und Ruß beeinflusst. Die Vorgänge im Feuerraum stehen, durch die freigesetzte Strahlung, wiederum in Wechselwirkung mit dem Transport der Partikel auf dem Rost.

Mit der Simulation der Feuerungsanlage beschäftigen sich aus den in Abschnitt 1.1 genannten Gründen zahlreiche Autoren. Die ersten theoretischen Arbeiten zu Rostfeuerungsanlagen wurden bereits sehr früh angefertigt. Für Kohle wird das Verbrennungsverhalten auf Wanderrosten bereits in den Jahren nach 1930 in mehreren Arbeiten untersucht [7, 114, 126, 170, 206, 218]. Von GUMZ wird 1958 eine Zusammenfassung dieser Arbeiten gemacht [75]. Jedoch erst 1970 werden experimentelle Untersuchungen in Verbindung mit mathematischen Modellen für die Verbrennung von Abfallstoffen auf Rostsystemen von ROGERS veröffentlicht [168, 169]. Die numerische Berechnung des Strömungsfeldes der Gasphase wird zuerst von verschiedenen Autoren sowohl isotherm [72, 161] als auch unter Berücksichtigung eines daran gekoppelten Temperaturfelds durchgeführt [133, 149].

Seit ca. 1990 findet man zunehmend Veröffentlichungen unterschiedlicher Gruppen zum Einsatz von CFD [12, 71, 146, 158]. Programme, welche eigentlich für die Müllverbrennung entwickelt wurden, werden heute in den unterschiedlichsten Fachgebieten genutzt. Mit



**Abbildung 2.1:** Fluid- und Feststofftransport in einer Mittelstromfeuerung mit Dampferzeuger

FLUENT<sup>2</sup> wurde von SWITTHENBANK, bereits sehr früh die Berechnung der Gasphasenströmung einer MVA durchgeführt [133]. Zur Modellierung schätzt NASSERZADEH dabei den Kohlenstoffeintrag aus dem Brennstoffbett in die Gasphase durch eine vorgegebene Verteilung des Brennstoffumsatzes und der Primärluftzufuhr entlang des Rosts ab [133]. Ein Nachfolger dieses Modells ist das Programm FLIC<sup>3</sup>. Die Geschwindigkeit, mit welcher sich die Verbrennungsfront innerhalb eines Betts aus Holz ausbreitet, wird von SAASTAMOINEN ET AL. modelliert. Sie beschreiben die Temperatur über eine Energieerhaltungsgleichung [178].

Von BEHRENDT wird ein Model erstellt, mit dem die Partikelphase der Pilotanlage TAMARA als kontinuierliches Medium beschrieben werden kann, wobei die Gleichungen mit empirischen Messwerten angepasst werden [16].

AHMED ET AL. entwickeln für Abfall ein dynamisches eindimensionales Modell, basierend auf empirischen Daten für chemische Reaktionskinetik, Energie- und Massentransport. Sie führen Studien bezüglich der Lage der Verbrennungszonen sowie der Verteilung der thermischen Last durch. Der Brennstoff Abfall wird durch eine Mischung aus Papier, Plastik und inertem Material nachgebildet [2].

Bei dem Modell von ADAMS wird die Feststoffschüttung in Schichten eingeteilt, in denen Trocknung, Vergasung und Pyrolyse über ein Gleichgewichtsmodell berechnet wird. Erhaltungsgleichungen beschreiben die Verteilung von Masse und Energie [1].

RAUPENSTRAUCH beschreibt das Bett über einzelne Partikel aus den Modellbrennstoffen Holz und Kohle. Auf Grundlage einer umfangreichen Parameterstudie erstellt er ein *shrinking-core* Modell für runde Partikel. In seinem Modell werden Trocknungseffekte, heterogene chemische Reaktionskinetiken, Diffusionseffekte sowie der Wärme- und Massentransport berücksichtigt. Pyrolyseeffekte werden jedoch vernachlässigt [158]. Das Programm wird in späteren Arbeiten für allgemeine Untersuchungen des Einflusses der Brennstofffeuchte auf die heterogene Wassergasreaktion [159] sowie der Selbsterwärmung gasdurchströmter Schüttungen verwendet [160]. HARTNER untersucht damit wie sich das Lückenvolumen und die Größe der Partikel auf die Abbrandgeschwindigkeit auswirken. Der Transport des Gases durch das poröse Bett wird dabei über eine eindimensionale transiente Erhaltungsgleichung berücksichtigt [80]. Eine ähnliche Vorgehensweise wählen auch RUMMER[176] und GORT[71].

SHIN und CHOI verwenden ebenfalls ein eindimensionales Modell zur Beschreibung des Verbrennungsvorgangs von Holz in einem Laborofen. Sie beschreiben die Reaktionen anhand makrokinetischer Daten [189]. ZHOU ET AL.[227] verwenden den Ansatz des porösen

---

<sup>2</sup>FLUENT; CFD Programm; Fluent Inc. - CFD Flow Modeling Software and Services

<sup>3</sup>FLIC (*A Fluid Dynamic Incinerator Code*); entwickelt am Sheffield University Waste Incineration Centre (SUWIC); Department of Chemical and Process Engineering; Sheffield University

Mediums für eine Mischung aus Abfall. Diesen Modellansatz verfolgt auch die Gruppe um MATKOWSKY ET AL. [4, 190]. Von LOHF wird ein chemisch-physikalisches Modell für die Umsetzung von Abfall im Batch-Prozess erstellt. Dort sind auch detaillierte Messungen vorhanden [118].

BECKMANN und SCHOLZ approximieren die Verbrennung von Abfall auf dem Wanderrost durch eine Kaskade aus ideal durchmischten Rührkesselreaktoren. Sie setzen Braunkohle und ein Gemisch aus Holz und Kunststoff als Modellbrennstoffe ein. Dies geschieht über einen *Gesamtreaktionskoeffizienten*, der in einem Batchreaktor experimentell für jeden Stoff bestimmt wird. In diesen Gesamtreaktionskoeffizienten gehen die chemische Reaktion, die Transportwiderstände und die Änderung der Reaktionsoberfläche ein. Für Restabfälle wird kein Gesamtreaktionskoeffizient angegeben. Der thermodynamische und chemische Zustand in jedem dieser Reaktoren wird über eine globale Massen- und Energiebilanz vorausgesagt. Dazu wird für jeden Reaktor eine empirische Korrelation von Messwerten durchgeführt. Die Gruppe um WARNECKE und DAVIDOVIC bietet auf dieser Grundlage ein Programmpaket für den gesamten Feuerraum von Müllverbrennungsanlagen an [11, 12, 13, 14].

Von STAPF ET AL. wird ein numerisches Tool entwickelt, mit welchem, basierend auf der Modellvorstellung einer Rührkesselkaskade, die Berechnung der Bewegung des Feststoffes in einem Drehrohrofen möglich ist. Dabei kann der Parameter der Brennstoffmenge variiert werden und die Freisetzung von Kohlenmonoxid (CO) ist auf Grundlage von empirischen Beobachtungen einzustellen. Auch hier werden die Prozesse Aufheizung, Trocknung, Pyrolyse und Vergasung berücksichtigt. Die Ergebnisse werden als Randbedingungen für die Gasphasenberechnung mit dem CFD-Programm FLUENT verwendet und anhand von Messwerten validiert [195]. Ein ähnliches Modell wird von RUPPERT für den Drehrohrofen vorgelegt [177].

FORD ET AL. beschreiben den Prozess der Verbrennung von Kohle auf einem Rost, wobei sie die heterogene chemische Reaktionskinetik als vollkommen diffusionskontrolliert voraussetzen. Eine Bewegung des Feststoffs wird nicht berücksichtigt [61].

FATEHI und KAVIANTY bestimmen die Geschwindigkeit mit der die Verbrennungsfront durch ein Brennbett aus Holz wandert, als Funktion des Primärluftstroms [53].

WAKAO und KATO präsentieren zwei Modelle zur Beschreibung des Wärmetransports in dicht gepackten Partikelschichten. Bei dem ersten Modell wird die Schüttung als kontinuierliche Phase angenommen, in der Wärmeleitung stattfindet. Bei dem zweiten Modellansatz wird ein Fluid in Kombination mit Partikel, die von einem radialen Temperaturfeld umgeben sind, beschrieben. Der Wärmetransport zwischen den Partikeln wird über eine Laplacegleichung beschrieben [214]. Diesen Modellen ist jedoch gemeinsam, dass sie den Effekt, dass sich an unterschiedlichen Stellen des Betts verschiedene Partikel befinden,

vernachlässigen. Hierzu wird von TSOTSAS eine Lösung vorgestellt [211].

Versuche von SCHUHMACHER und MERZ[186], sowie von RICHERS und SCHRÖDER am FZK sind die Grundlage theoretischer Überlegungen von KREBS und PETERS zur mathematischen Beschreibung des Kohlenstoffumsatzes diskreter Partikel, einer *discrete particle method* (DPM). Von PETERS wird mit TOSCA<sup>4</sup> ein objektorientiertes Modell vorgelegt, bei welchem viele Nachteile vorangegangener Modellierungen durch die detaillierte Auflösung diskreter Partikel umgangen werden sollen. Die Bewegung von Partikeln unterschiedlicher Größen, Formen und Materialien sowie die chemischen Reaktionen im Bett werden exakt beschrieben. Die Partikel stellen einen Quellterm für Energie- und Massenströme der Gasphase dar [146, 147, 149]. Der Einsatz von TOSCA wurde von HUNSINGER an der Anlage TAMARA gezeigt [66, 87]. Der Nachteil sind sehr hohe Rechenzeiten bedingt durch die objektorientierte Programmstruktur. TOSCA wird von BRUCH für Holzpartikel weiterentwickelt [31]. Der Ansatz wird auch von BRYDEN und RAGLAND verfolgt, um die Verbrennung von einzelnen Holzstämmen auf dem Rost zu beschreiben [32]. Pyrolyse und Trocknung der Stämme wird dabei über empirische Raten bestimmt. Ein ähnliches Modell wird außerdem von WURZENBERGER für Biomasse entwickelt. Hierzu beschreibt er Partikel über ein eindimensionales, transientes Modell in sphärischen Koordinaten, das mit einem eindimensionalen Modell für die Bewegung im Brennstoffbett gekoppelt ist [224]. Ein analoges Vorgehen wird von SANTAMARIA ET AL. gewählt [180]. SKREIBERG erweitert die Simulationsmethode der Beschreibung einer globalen Massen- und Energiebilanz zur Verbrennung von Holz auf dem Rost [191]. Ein ähnliches Modell nutzen auch KESSEL und BREM um das dynamische Verhalten von Abfall auf dem Rost zu beschreiben [99]. GOH ET AL. unterteilen das Bett in vier verschiedene Schichten, welche über eine integrale Bilanz beschrieben werden. Die Abbildung der verschiedenen Vorgänge erfolgt sehr detailliert [69]. Zur Auslegung von Anlagen zur Holzverbrennung entwerfen KUO ET AL. einen eindimensionalen Ansatz in Verbindung mit einer globalen Energiebilanz, um Umsatzrate, thermische Belastung des Rostes und Zusammensetzung der Gasphase zu berechnen. Auch diese Methode benötigt jedoch experimentelle Werte um angepasst zu werden [107, 108].

KRÜLL beschreibt das Festbett als kontinuierliches, poröses Medium. Das Bett wird in zwei Schichten eingeteilt. Hierfür werden Massen- und Energiebilanz gelöst. Das Modell verzichtet weitgehend auf empirische Betrachtungen. Ein großer Fortschritt hierbei ist, dass es direkt mit LORA<sup>5</sup> gekoppelt ist und numerische Lösungen bei sehr schnellen

---

<sup>4</sup>TOSCA (*Tools of Object-Oriented Software for Continuum Mechanics Application*); entwickelt am Institut für Kern- und Energietechnik (IKET), Forschungszentrum Karlsruhe (FZK)

<sup>5</sup>LORA (*LOcally Refined Algorithm*); CFD-Programm zur dreidimensionalen Feuerraumsimulation; entwickelt am Lehrstuhl für Energieanlagen und Energieprozesstechnik (LEAT), Ruhr-Universität Bochum

Antwortzeiten liefert. Die Kopplung zwischen Bettmodell und CFD erfolgt über eine Gebietszerlegungsmethode (siehe auch Abschnitt 5.2.3) [104, 105].

Eine solche Kopplung mit dem CFD-Programm FLUENT wird auch von KLASSEN und GÖRNER versucht, wobei sie das Bett ähnlich wie PETERS über einen objektorientierten Ansatz mit diskreten Partikeln beschreiben [96]. RICCIUS implementiert die Freisetzung repräsentativer Kohlenwasserstoffe direkt innerhalb der Gasphase eines CFD-Programmes [163]. Eine ähnliche Vorgehensweise wählt WOLF[223]. GHIRELLI geht sehr detailliert auf die Randbedingungen der Turbulenzgrößen und die Chemie-Turbulenz Interaktion ein. Er zeigt eine detaillierte Validierung seiner Rechnungen an einer Anlage im großtechnischen Maßstab [67]. Ähnliche Arbeiten stammen von THUNMAN[209] und KAER[95].

## 2.2 Problematik der Partikelbeschreibung

Allen in Abschnitt 2.1 genannten Modellen, bis auf die von PETERS und KRÜLL, ist gemeinsam, dass sie entweder ein einfaches Gesamtmodell oder einen Präprozessor für CFD darstellen. Der wichtige Einfluss des Strahlungstransports wird in den meisten Fällen stark vereinfacht.

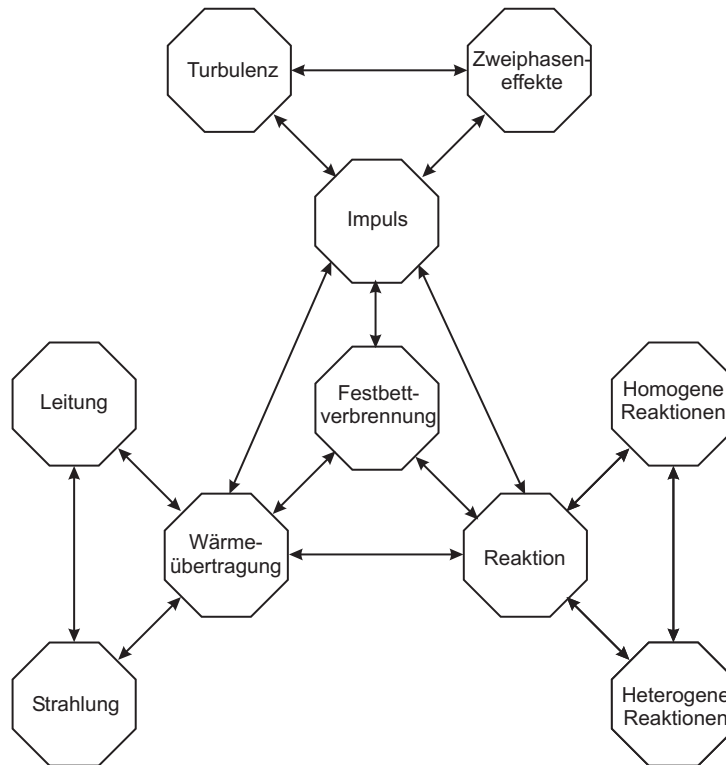
Im Rahmen dieser Arbeit ist das Modell zur Simulation von MVA direkt in das CFD-Programm AIOLOS implementiert worden. Der Detaillierungsgrad der Einzelmodelle für Partikel- und Gasphase soll dabei in etwa gleich sein. Die in Abbildung 2.2 dargestellte Einteilung zeigt die behandelten Themengebiete und Wechselwirkungen zwischen den Modellen. Abbildung 2.2 basiert auf einer Arbeit von SCHNELL[184] für Staubfeuerungen und ist hier auf die Feststoffverbrennung übertragen worden.

**Ausgangssituation für die Modellbildung** Ein guter Überblick über die bisher in AIOLOS verwendeten Modelle ist bei SCHNELL gegeben [183, 184, 185].

AIOLOS basiert auf einer konservativen Finite Volumen Formulierung mit nicht-versetzter Gitteranordnung. Die Diskretisierung kann auf kartesischen, zylindrischen oder allgemeinen, kurvilinearen Koordinaten (*body-fitted-coordinates*; BFC) erfolgen. Die Implementierung von BFC ist bei KNAUS[100] und PERIĆ[144] dargestellt.

Bei der Gasphasenströmung wird zur Druckkorrektur die *semi-implicite methode for pressure linked equations* (SIMPLE) oder *semi-implicite methode for pressure linked equations consistent* (SIMPLEC) Methode verwendet [48]. Um Druck und Geschwindigkeit auf dem nicht-versetzten Gitter zu berechnen, kann die Druckinterpolation nach RHIE ET AL.[162] oder nach DATE[43, 165] verwendet werden. Die Berechnung des konvektiven Flusses erfolgt mit dem UPWIND Schema. Möglich sind auch höhere Diskretisierungs-

schemata [135]. Die Turbulenz wird über das  $k, \varepsilon$ -Modell nach LAUNDER[110] beschrieben, es besteht jedoch auch die Möglichkeit, ein Reynolds-Stress Modell zu verwenden. Der Wärmetransport durch Strahlung wird durch die *discrete-ordinates-methode* nach FIVELAND[56] in einer Implementierung von STRÖHLE[197] berücksichtigt.



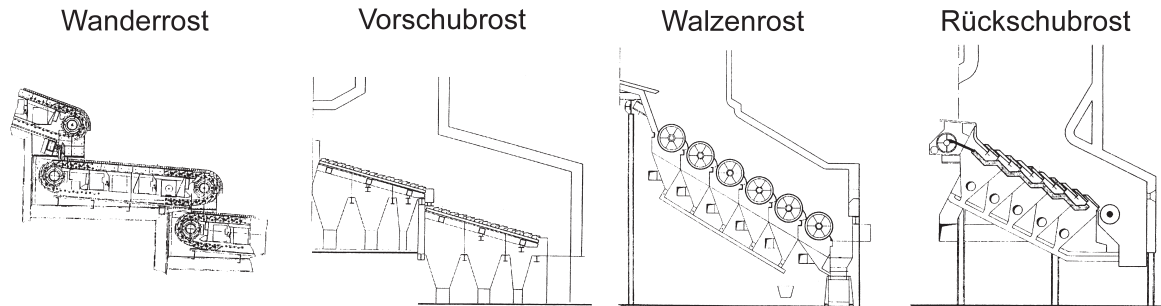
**Abbildung 2.2:** Wechselwirkungen der Festbettverbrennung nach SCHNELL[184]

Eine gute Darstellung der Implementierung der Interaktion zwischen Turbulenz und Chemie ist bei BRINK[30], MAGEL[122] und MUELLER[132] zu finden. Eine Übersicht über das Euler/Lagrange-Mehrphasenmodell in AIOLOS ist bei KNAUS und STRÖHLE enthalten [100, 196, 198]. Eine detaillierte Beschreibung der numerischen Lösungsverfahren bieten die Arbeiten von RISIO, SCHNEIDER und SCHNELL. Für das Euler/Euler-Mehrphasenmodell wird in den meisten Fällen die *successive-over-relaxation* (SOR) Methode eingesetzt. Komplexere Lösungsverfahren sind jedoch ebenfalls verfügbar [165, 182, 184].

**Anforderungen an das Partikelmodell** Wie aus Abschnitt 2.1 hervorgeht, besteht das Hauptproblem bei der Modellierung in der Beschreibung der Bewegung der Partikelphase. Die einzelnen Hersteller verwenden gezielt unterschiedliche Rosttypen, um sich den Impulseintrag vom Rost auf die Partikel zu nutze zu machen bzw. um das Rost vor Wärmestrahlung zu schützen. Die *Strömung* der Partikelphase spielt folglich in der Praxis eine entscheidende Rolle bei der Optimierung des Systems.

Die vier gebräuchlichsten Rosttypen sind Wander-, Vorschub-, Walzen- und Rückschubrost.

Sie sind in Abbildung 2.3 dargestellt. Je nach Heizwert, Wasser- und Aschegehalt bzw. Vorbehandlungsgrad des Brennstoffs werden die verschiedenen Technologien eingesetzt, um das Bewegungsverhalten der Partikel an die Verhältnisse im Feuerraum anzupassen. Das charakteristische Abbrandverhalten des Brennstoffs ist übertragbar und kann mehr oder weniger wie ein Stoffwert behandelt werden (siehe Abschnitt 4.1). Mit Hilfe der Be-



**Abbildung 2.3:** Unterschiedliche Rosttypen für Rostfeuerungsanlagen nach BORGWART[26]

wegungsmechanismen des Rosts sowie der individuell angepassten Feuerraumgeometrie ist die Möglichkeit gegeben, den Prozess auf die unterschiedlichen Brennstoffe einzustellen. Während der Feststofftransport bei Wander- und Vorschubrost im Wesentlichen durch die horizontale Bewegung erfolgt, ist beim Rückschubrost eine Kombination aus Roststabbewegung und Schwerkraft wirksam. Neben dem Transport bewirken die Roststäbe eine Durchmischung der Partikel. Aufgrund dieser Durchmischung ergibt sich ein charakteristischer Verlauf des Feststoffumsatzes auf dem Rost (siehe auch Anhang F). Beim Walzenrost wird das Brenngut in den Zwickeln zwischen den Walzen umgewälzt und umgeschichtet. Das aus diesen Walzenzwickeln mitgeführte Gut wird in einer relativ dünnen Schicht über die Oberseite der Walze transportiert. Dies ermöglicht den Aufschluß durch die thermische Strahlung aus dem Feuerraum.

**Einteilung von Partikelmodellen** Die theoretisch möglichen Modelle zur Beschreibung der Partikelbewegung lassen sich nach ZHOU in die in Tabelle 2.1 zusammengefassten Gruppen einteilen [227]. Die einfachsten Ansätze lassen sich dabei der Gruppe der *single-particle-dynamics* Modelle (SPD) zuteilen. Dabei werden alle Eigenschaften des Strömungsfeldes direkt auf das Partikel übertragen, das Partikel hat keinen Einfluss auf die Gasphase. Bei der Gruppe der *single-fluid* oder *non-slip* Modelle (NS) befinden sich die Partikel in einem dynamischen und thermischen Gleichgewicht mit der Gasphase. Die Temperatur und Geschwindigkeit ist dabei an jeder Stelle des Berechnungsraums so groß wie die des Gases. Die Diffusion in Partikel- und Gasphase ist gleich. Bei der Gruppe der *pseudo-fluid* oder *small-slip* Modelle (SS) wird die Partikelphase als Kontinuum betrachtet. Gradienten zwischen den Geschwindigkeiten bestehen. Da diese aber nur aus der

Diffusion der Partikelphase resultieren, werden die Modelle als *small-slip* bezeichnet.

Schwieriger zu implementieren sind solche Modelle, bei denen eine vollständige Interaktion zwischen Masse, Impuls und Energie besteht. Das können entweder *particle-trajectory* Modelle (PT) sein. Zu ihnen gehören stochastische oder deterministische Methoden, wie etwa TOSCA. Simultane Gradienten können aber auch bei *pseudofluid/multifluid* Modellen (MF) berücksichtigt werden.

**Tabelle 2.1:** Einteilung der Mehrphasenmodelle zur Partikelbeschreibung nach ZHOU[227]

Modell	Ansatz	Bezugssystem	Transportgleichung	Einfluss auf Gas	Schlupf
SPD	diskret	Lagrange	nein	nein	ja
SS	Kontinuum	Euler	teilweise	nein	teilweise
NS	Kontinuum	Euler	ja	teilweise	nein
PT	diskret	Lagrange	ja	ja	ja
MF	Kontinuum	Euler	ja	ja	ja

In AIOLOS wurde bisher ein *non-slip* Euler-Einphasenmodell verwendet, bei welchem sich die Partikel schlupffrei mit der homogenen Phase bewegen [182]. Parallel dazu wurde ein *particle-trajectory* Euler/Lagrange-Mehrphasenmodell entwickelt [100, 198]. Die Grundlage der Beschreibung des Festbetts baut auf einem *multifluid*-Ansatz (MF) auf und wurde hauptsächlich von SAVAGE, JEFFREY und JENKINS sowie von LUN entwickelt [90, 119, 120]. Grundlegende Arbeiten, veröffentlicht von ENSKOG und GRAD[73]. GIDASPOW[68] und NIEUWLAND[134] liefern ausführliche Erklärungen und Weiterentwicklungen. Anders als alle in Abschnitt 2.1 beschriebenen Ansätze ermöglicht diese Theorie eine allgemeingültige Beschreibung von Partikeln einer Größenklasse als eigene Euler-Phase.

Eine Einführung in die Problematik der Partikelbewegung des Euler/Euler-Modells auf Basis der kinetischen Theorie granularer Medien liefern die Arbeiten von BOEMER[23] und QI[155]. Ausführlicher ist das Mehrphasenmodell bei GIDASPOW[68] sowie bei SYAMLAL[202, 204] beschrieben.

**Kinetische Theorie granularer Medien** Die kinetische Theorie granularer Medien stellt die Basis für die in Abschnitt 3.1.2 beschriebenen Erhaltungsgleichungen dar. Analog zu Gasmolekülen werden die makroskopischen Eigenschaften der Partikelphase durch statistische Formulierungen des Verhaltens einzelner Partikel beschrieben. Während die thermodynamische Temperatur ein Maß für die Fluktuationsbewegungen der Moleküle darstellt, erfasst die Granulartemperatur die kinetische Energie der Partikel. Dabei wird



zwischen zwei Transportmechanismen unterschieden. Zum einen dem Transport von Eigenschaften wie Masse, Impuls oder Fluktuationsenergie durch translatorische Bewegung. Dieser Anteil wird als Kinetikterm bezeichnet. Zum anderen liegt ein Transport aufgrund von Stößen zwischen Partikeln vor, der als Kollisionsterm bezeichnet wird. Man erhält allgemeingültige Gleichungen in der Form von Boltzmann-Gleichungen, aus denen durch Multiplikation mit den entsprechenden Eigenschaften und Integration über die Geschwindigkeit die Maxwell'schen Transportgleichungen aufgestellt werden können [23].

In den Impulserhaltungsgleichungen der Phasen sind mit der viskosen Kraft, der Gravitationskraft, der Widerstandskraft und der Druckkraft die wichtigsten auftretenden Kräfte erfasst und werden über die kinetische Theorie granularer Medien beschrieben. Die Energieerhaltungsgleichungen berücksichtigen die Wärmeleitung innerhalb einer Phase, den konvektiven Energieaustausch zwischen den Phasen und die viskose Dissipation, welche jedoch nur einen geringen Anteil der Gesamtenergiebilanz ausmacht.

Um bei hohen Volumenkonzentrationen der Partikel Kollisionen beschreiben zu können, wird die Größe des Partikeldruckes neu eingeführt. Ein Unterschied zu der kinetischen Gastheorie besteht darin, dass Stöße zwischen Partikeln nicht wie Stöße zwischen Molekülen als vollständig elastisch angesehen werden können, da andere Potentiale herrschen. Im makroskopischen Bereich führt der Einfluss von Reibungseffekten zwischen Partikel und Gas zu einer Dissipation der bilanzierten Eigenschaft. Eine solche Senke durch Reibung ist auf molekularer Ebene nicht vorhanden. Bei der Turbulenzmodellierung hat die Dissipation von Bewegungsenergie einen vergleichbaren Einfluss auf das Gas.

Zahlreiche sehr ausführliche Arbeiten zu dieser Theorie werden von der Gruppe um SYAMLAL gemacht [44, 137, 138, 139, 200, 201]. Dort wird unter anderem das Programm MFIX<sup>6</sup> entwickelt. Es basiert auf einem MF-Ansatz und wird zur Simulation von Wirbelschichten genutzt [202, 204].

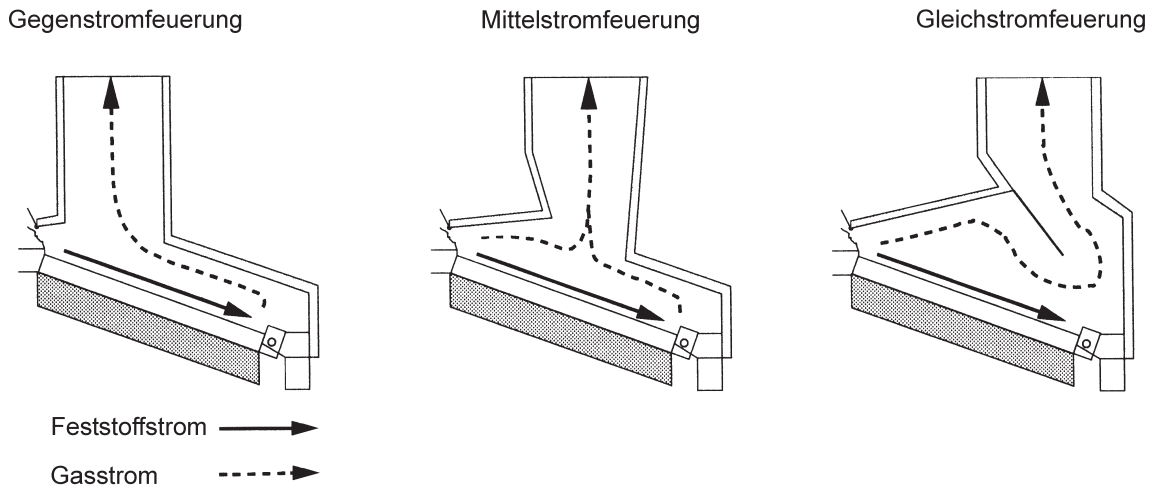
## 2.3 Design der Feuerraumgeometrie

Neben dem Rosttyp ist das Design der Feuerraumgeometrie von entscheidender Bedeutung für die optimale Umsetzung des Brennstoffs. Man unterscheidet zwischen den drei Feuerungsprinzipien *Gegen-*, *Mittel-* und *Gleichstromfeuerung*, in welche sich die Geometrien der Anlagen entsprechend der Strömungsrichtung von abbrennendem Feststoff und erzeugtem Rauchgas einteilen lassen. Die Konzepte sind in Abbildung 2.4 dargestellt.

Für feuchten, heizwertarmen Brennstoff ist die Gegenstromfeuerung ideal. Hier strömen

---

<sup>6</sup>MFIX (*Multiphase Flow with Interphase eXchanges*); CFD-Programm; entwickelt am National Energy Technology Laboratory (NETL); USA



**Abbildung 2.4:** Einteilung der Feuerraumgeometrie entsprechend der Strömungsführung [104]

die heißen Rauchgase vom Ende des Rostes in entgegengesetzter Richtung zum Transport des Feststoffs und unterstützen somit dessen Trocknung und Zündung. Die Folge ist ein intensiver Wärmeaustausch durch Strahlung und Konvektion im vorderen Bereich der Feuerung. Die bei diesem Konzept entstehenden Rauchgasstrahlen werden durch Wirbelzonen im oberen Teil des Feuerraums aufgelöst.

In neuen Anlagen wird bevorzugt das Konzept der Mittelstromfeuerung angewendet (siehe auch Abbildung 2.1). Es ist kostengünstig und bietet strömungstechnische Vorteile, auf die in Kapitel 6 eingegangen wird. Die Mittelstromfeuerung findet bei Brennstoffen im oberen Heizwertbereich Anwendung, da sie im Vergleich zur Gegenstromfeuerung einen verlängerten Ausbrennweg aufweist.

Bei Brennstoffen mit unterschiedlichem Heizwert empfiehlt sich eine Gleichstromfeuerung, bei der Rauchgas und Feststoff in die gleiche Richtung strömen. Dabei werden Ent- und Vergasungsprodukte aus dem Niedertemperaturbereich durch die Hauptverbrennungszone geführt. Die Durchströmung des Hochtemperaturbereichs bewirkt eine Nachverbrennung und Abreaktion der Rauchgasbestandteile sowie maximalen Kohlenstoffumsatz.

# Kapitel 3

## Modellbildung

Bei dem Euler/Euler-Mehrphasenmodell werden für jede Phase die Erhaltungsgleichungen gelöst. Es gehört damit zu der Gruppe der *multifluid*-Modelle (MF) mit einer homogenen Phase, in diesem Fall dem Gas und einer dispersen Phase, den Partikeln. Grundlage für die Beschreibung von einzelnen Partikeln über Erhaltungsgleichungen ist die in Abschnitt 2.2 dargestellte kinetische Theorie granularer Medien.

### 3.1 Beschreibung von Partikel- und Gasphase

Alle Phasen werden als Kontinuum dargestellt. Der Anteil der jeweiligen Kontinua wird durch die Volumenfraktion  $\epsilon_q$  bestimmt. Sie repräsentiert den Raum bzw. Anteil des Gesamtvolumens  $V$ , welcher von der Phase  $q$  eingenommen wird.

$$V_q = \int_V \epsilon_q dV \quad \text{mit} \quad \sum_{q=1}^n \epsilon_q = 1 \quad (3.1)$$

Die Phase  $q$  kann Gas ( $q = G$ ) oder Partikelphase ( $q = P$ ) sein, welche sich jeweils aus verschiedenen Komponenten zusammensetzen können. Bleibt  $V$  konstant, ergibt sich die Summe der Volumenfraktionen  $\epsilon_q$  aller Phasen zu 1.

Es wird zwischen physikalischer Dichte  $\rho$  und effektiver Dichte  $\hat{\rho}$  unterschieden. Dabei setzt sich die physikalische Dichte  $\rho$  aus den Massenanteilen  $Y_i$  der Komponenten  $i$  einer Phase  $q$  und deren physikalischen Dichten  $\rho_{q,i}$  zusammen.

$$\hat{\rho}_q = \epsilon_q \rho_q \quad \text{mit} \quad \rho_q = \sum_{i=1}^{ns} Y_{q,i} \cdot \rho_{q,i} \quad (3.2)$$

In der Gasphase verhält sich die physikalische Dichte  $\rho_G$  entsprechend dem idealen Gasgesetz. Besteht eine Feststoffkomponente aus porösem Material, so ergibt sich die physikalische Dichte  $\rho_{q,i}$  über die Porosität  $\tilde{\epsilon}_i$  und die physikalische Dichte  $\rho'_i$  des Materials  $i$

in nicht poröser Form.

$$\rho_{q,i} = (1 - \tilde{\epsilon}_i)\rho'_{q,i} \quad \text{mit} \quad \tilde{\epsilon}_i = \frac{V_{\text{Poren}}}{V_{\text{Partikel}}} \quad (3.3)$$

Bei nicht porösen Materialien gilt immer  $\rho_{q,i} = \rho'_{q,i}$ . Wenn die Phase  $q$  ein Gas ist, gilt ebenfalls  $q = G \rightarrow \tilde{\epsilon}_i = 0$ . In den Poren von porösem Material enthaltenes Gas wird, bis zur Freisetzung, mit der Feststoffphase mitbewegt. Es befindet sich im Inneren der Partikel eingeschlossen und wird deshalb der Volumenfraktion der Partikelphase  $\epsilon_P$  zugerechnet.

Für die theoretisch dichteste Packung aus gleichgroßen, runden Partikeln ergibt sich aus geometrischen Gründen die maximale Volumenfraktion  $\epsilon_{P,max} = 0,74$ . Für nicht monodisperse Schüttungen sind Werte von bis zu  $\epsilon_{P,max} = 0,60$  realistisch.

### 3.1.1 Erhaltung der Masse

Die Volumenfraktion  $\epsilon_q$  einer Phase  $q$  ergibt sich aus den Massenerhaltungsgleichungen der Phasen  $p$  und  $q$ . Durch die Beziehung (3.1) ergibt sich eine globale Massenerhaltungsgleichung über alle Phasen.

$$\nabla \cdot \sum_{q=1}^n (\hat{\rho}_q \vec{u}_q) = 0 \quad (3.4)$$

Dabei ist  $\vec{u}_q$  die Geschwindigkeit der Phase  $q$ . Die stationäre Massenerhaltungsgleichung (3.5) für jede Phase  $q$  berücksichtigt zusätzlich Quellen und Senken zwischen den Phasen.

$$\nabla \cdot (\hat{\rho}_q \vec{u}_q) = S_{qp} \quad (3.5)$$

Bei  $\epsilon_G = 1$  und  $\epsilon_P = 0$  entspricht Gleichung (3.5) der Massenerhaltungsgleichung einphasiger Gasphasensysteme. Der Quellterm  $S_{qp}$  ergibt sich aus dem Massenaustausch oder Massentransfer  $\dot{m}_{pq}$  zwischen zwei Phasen  $p$  und  $q$ . Bei einphasigen Systemen ist  $S_{qp}$  immer 0.

$$S_{qp} = \sum_{p=1}^n \dot{m}_{pq} \quad (3.6)$$

Bei Verbrennungs- und Verdampfungsprozessen erfolgt  $\dot{m}_{pq}$  in der Regel von der dispersen zur homogenen Phase und resultiert aus chemischen Reaktionen und physikalischen Vorgängen wie Trocknung oder Pyrolyse von Kohlenwasserstoffen. Dabei unterliegt der Massenaustausch der Massenerhaltung  $\dot{m}_{pq} = -\dot{m}_{qp}$ , außerdem gilt  $\dot{m}_{pp} = 0$ .

Bei der Verbrennung sind Adsorptionsprozesse der Grund für Massentransfer von der homogenen zur dispersen Phase. Kondensations- und Resublimationsprozesse können vernachlässigt werden. Sauerstoffmoleküle werden dabei am Feststoffpartikel adsorbiert, und greifen an den aktiven Zentren der C-Atome an. Bei Vergasungsprozessen werden auch andere Bestandteile, wie z.B.  $\text{H}_2\text{O}$  aus dem Rauchgas angelagert.

Die Massenkonzentration  $Y_{q,i}$  einer Komponente oder Spezies  $i$  ist durch die Beziehung (3.7) definiert,  $ns$  ist die Gesamtanzahl aller Spezies.

$$Y_{q,i} = \frac{m_{q,i}}{\sum_{k=1}^{ns} m_{q,k}} \quad (3.7)$$

Damit bezieht sich  $Y_{q,i}$  nicht auf das gesamte Berechnungsgebiet, sondern auf die Gesamtmasse der einzelnen Phase  $q$ .

$$\sum_{k=1}^{ns} Y_{q,i} = 1 \quad (3.8)$$

Aus dieser Betrachtungsweise kann ein Satz von Erhaltungsgleichungen für die Spezies  $i$  einer Phase  $q$  abgeleitet werden.

$$\nabla \cdot (\hat{\rho}_q \vec{u}_q Y_{q,i}) = \nabla \cdot (\hat{\rho}_q D_{q,i} \nabla Y_{q,i}) + S_{Y_{q,i}} \quad (3.9)$$

Der Quellterm  $S_{Y_{q,i}}$  ergibt sich aus der Reaktionsrate  $R_j$  der Reaktionen  $j$  und dem stöchiometrischen Koeffizienten  $\nu_{i,j}$  für alle Reaktionen  $nr$  an denen die Spezies  $i$  beteiligt ist.

$$S_{Y_{q,i}} = \sum_{j=1}^{nr} \nu_{i,j} \cdot R_j \quad (3.10)$$

Über Gleichung (3.9) werden die Gasphasenspezies Stickstoff ( $N_2$ ), Sauerstoff ( $O_2$ ), Kohlendioxid ( $CO_2$ ), Kohlenmonoxid ( $CO$ ), Wasserstoff ( $H_2$ ), Wasser ( $H_2O$ ) und Methan ( $CH_4$ ) bilanziert. Die Partikelphase besteht aus den *lumping*<sup>1</sup> Komponenten feuchter Brennstoff ( $fB$ ), trockener Brennstoff ( $tB$ ), Koks ( $C$ ) und Asche ( $A$ ).

Innerhalb der Gasphase wird von einer Lewis-Zahl  $Le = 1$  ausgegangen. Deshalb werden für Gasphasenspezies binäre Diffusionskoeffizienten  $D_{G,i}$  verwendet. Der Diffusionsstrom des Gases wird durch die Schmidt-Zahl  $Sc$  charakterisiert, welche die innere Reibung ins Verhältnis zum Diffusionsstrom setzt. In  $Sc$  geht die Gasviskosität  $\mu_G$  mit ein. Bei dem Transport der Feststoffkomponenten wird der diffusive Anteil vernachlässigt.

Alle verwendeten Vergleichszahlen werden in Anhang D zusammengefasst und erklärt.

### 3.1.2 Erhaltung des Impulses

Nach TANKA[205] können Interaktionen bei sphärischen Partikeln nur vernachlässigt werden, wenn  $\epsilon_P < 0,1$  % ist. Deshalb wird hier einen MF-Ansatz gewählt. Er ermöglicht große Gradienten zwischen Partikel- und Gasphase. Wechselwirkungseffekte, wie Kräfte und Spannungsverläufe bedingt durch Kollisionen, Reibungs- und Fluktuationsbewegungen, können damit berücksichtigt werden.

---

<sup>1</sup>engl.: lumping = zusammengefasst

Für Gas- und Partikelphase wird ein Satz an stationären Impulserhaltungsgleichungen (3.11) aufgestellt.

$$\nabla \cdot (\hat{\rho}_q \vec{u}_q \vec{u}_q) = \nabla \cdot \bar{\sigma}_q - \nabla p_q + \vec{S}_{q,W} + \vec{S}_{q,A} + \vec{S}_{q,R} \quad (3.11)$$

**Literaturübersicht** Impulserhaltungsgleichungen in ähnlicher Form werden auch von DING und GIDASPOW[46] verwendet. Weitere Entwicklungen in diesem Bereich finden bei BALZER[9] sowie SIMONIN und SYAMLAL[204] für unterschiedliche Applikationen statt. Von BOEMER[23] wird der technische Einsatz an einer blasenbildenden und von QI[155] an einer zirkulierenden Wirbelschicht gezeigt.

Wenn die Wechselwirkungsterme  $\vec{S}$  zwischen den Phasen fehlen, entspricht Gleichung (3.11) der Navier-Stokes Gleichung. Die Spannungen innerhalb der Phase werden durch den Druck  $p_q$  und den Spannungstensor  $\bar{\sigma}_q$  beschrieben.

$$\bar{\sigma}_q = 2 \epsilon_q \mu_q \bar{D}_q + \epsilon_q \left[ \lambda_q - \frac{2}{3} \mu_q \right] \cdot \text{tr}(\bar{D}_q) \bar{I} \quad (3.12)$$

In Gleichung (3.12) ist  $\bar{I}$  der Einheitstensor und  $\text{tr}(\bar{D}_q)$  die Spur des Schergeschwindigkeitstensors.

$$\text{tr}(\bar{D}_q) = \frac{\partial \vec{u}_q}{\partial x} + \frac{\partial \vec{v}_q}{\partial y} + \frac{\partial \vec{w}_q}{\partial z} \quad (3.13)$$

Der Schergeschwindigkeitstensor  $\bar{D}_q$  ist in ausformulierter Form in Gleichung (3.14) dargestellt.

$$\bar{D}_q = \frac{1}{2} [\nabla \vec{u}_q + (\nabla \vec{u}_q)^T] = \begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{u}_q}{\partial x} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \vec{u}_q}{\partial y} + \frac{\partial \vec{v}_q}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \vec{u}_q}{\partial z} + \frac{\partial \vec{w}_q}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \vec{v}_q}{\partial x} + \frac{\partial \vec{u}_q}{\partial y} \right) & \frac{\partial \vec{v}_q}{\partial y} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \vec{v}_q}{\partial z} + \frac{\partial \vec{w}_q}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \vec{w}_q}{\partial x} + \frac{\partial \vec{u}_q}{\partial z} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \vec{w}_q}{\partial y} + \frac{\partial \vec{v}_q}{\partial z} \right) & \frac{\partial \vec{w}_q}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

Ist die Phase  $q$  ein Gas, so erfolgt die Modellierung des Tensors  $\bar{\sigma}_q$  über ein Turbulenzmodell (siehe Abschnitt 3.4.1). Bei der Gasphasenmodellierung wird der Tensor in der Regel nicht durch das Symbol  $\bar{\sigma}$  sondern mit  $\bar{\tau}$  abgekürzt.

Die Modellierung der Viskosität  $\mu_G$  von, z.B. Luft bzw. Rauchgas, wird bei SCHNEIDER[182] erläutert. Da die Viskosität des Gases um drei bis vier Größenordnungen unter der für die Partikelphase liegt, wird ihr Einfluss auf Spannungen der dispersen Phase hier vernachlässigt.

Bei geringen Volumenfraktionen und  $\frac{\rho_G}{\rho_P} \leq 10^{-3}$  können nach CROWE[41] alle an den Partikeln angreifenden Kräfte außer der Widerstandskraft  $\vec{F}_{P,W}$ , der Auftriebskraft  $\vec{F}_{P,A}$  und der durch Massentransport verursachten Kraft  $\vec{F}_{P,R}$  vernachlässigt werden. Bei hohen Anteilen  $\epsilon_P$  kommen Wechselwirkungen zwischen den Partikeln hinzu. Die Partikelbewegung wird dann in der Regel durch Normal-, Schub- und Druckspannungen bestimmt. Für die

Modellgrößen Partikeldruck  $p_P$ , Scherviskosität  $\mu_P$  und Kompressionsviskosität  $\lambda_P$  sind dann physikalische Modelle notwendig (siehe auch Abschnitt 3.1.3).

Der Quellterm  $\vec{S}_{q,W}$  wird durch die Widerstandskraft  $\vec{F}_{q,W}$  verursacht. Zusätzlich wirken der durch die Auftriebskraft  $\vec{F}_{q,A}$  bestimmte Term  $\vec{S}_{q,A}$  und die durch Massentransport bedingte Kraft  $\vec{F}_{q,R}$  ( $\vec{S}_{q,R}$ ).

Die Widerstandskraft  $\vec{F}_{q,W}$  ist die Kraft, die einer Phase  $q$  der Geschwindigkeit  $\vec{u}_q$  beim Eindringen in eine Phase  $p$  der Geschwindigkeit  $\vec{u}_p$  entgegengesetzt wird. Sie ist von der Widerstandsfunktion  $\beta$  abhängig und beschreibt den Quellterm  $\vec{S}_{q,W}$ .

$$\vec{S}_{q,W} = \frac{\vec{F}_{q,W}}{V} \quad \text{mit} \quad \vec{F}_{q,W} = \beta (\vec{u}_q - \vec{u}_p) \quad (3.15)$$

Der Widerstand einer dispersen Phase wird auch als *Druckverlust* der homogenen Phase bezeichnet. Dabei muss die Widerstandsfunktion  $\beta$  modelliert werden (siehe Abschnitt 3.1.2.1). Für die zwischen den Phasen wirkenden Kräfte gilt immer  $F_{pq} = -F_{qp}$ , sowie  $F_{qq} = 0$ .

Die Auftriebskraft  $\vec{F}_{q,A}$  beschreibt die, in Abhängigkeit des Dichteunterschieds, durch die Erdbeschleunigung  $\vec{g}$  hervorgerufene Kraft.

$$\vec{S}_{q,A} = \frac{\vec{F}_{q,A}}{V} \quad \text{mit} \quad \vec{F}_{q,A} = m_q \vec{g} \quad (3.16)$$

Der Massentransfer  $\dot{m}_{pq}$  verursacht die zusätzliche Kraft  $\vec{F}_{q,R}$ . Wenn  $\dot{m}_{pq} > 0$  erfüllt ist, wird Masse von der Phase  $p$  zu der Phase  $q$  transportiert, dies führt zu einer Impulsquelle  $\vec{S}_{q,R}$ .

$$\vec{S}_{q,R} = \frac{\vec{F}_{q,R}}{V} \quad \text{mit} \quad \vec{F}_{q,R} = \frac{6 \cdot V^{1/3}}{\tau_q} S_{qp} \quad (3.17)$$

Die Verweilzeit  $\tau_q$  ist definiert durch den Ausdruck (3.18).

$$\tau_q = \frac{\hat{\rho}_q \cdot V}{\dot{m}_q + S_{qp}} \quad (3.18)$$

In der Regel kann die Kraft  $\vec{F}_{P,R} = 0$  (bei  $q = P$ ) gesetzt werden, da sie sehr gering ist. Die Kraft  $\vec{F}_{G,R}$  (bei  $q = G$ ) muss aber in jedem Fall berücksichtigt werden, da am Partikel freigesetzte Komponenten, wie z.B. Wasser beim Verdampfen, zu einer großen Volumenzunahme der Gasphase führen und dadurch eine Impulsquelle verursachen. Auf die Freisetzung wird in Abschnitt 3.2 näher eingegangen.

### 3.1.2.1 Widerstandsfunktion

Die Widerstandsfunktion  $\beta$  dient zur Beschreibung der Widerstandskraft  $\vec{F}_{q,W}$ . Innerhalb des Partikelbetts können die Gradienten zwischen den Geschwindigkeiten hohe Werte

annehmen, was zu einem großen Druckverlust des Gases bzw. zu einem Anheben der Partikel führt.

Es gibt unterschiedliche Ansätze für Widerstandsfunktionen. Einige werden bei BOEMER[23] diskutiert. Fast immer wird ein Widerstandsbeiwert  $C_D$  zur Berechnung von  $\beta$  benötigt und die Querschnittsfläche der Partikel  $A'_P$  geht mit ein.

$$\beta = \frac{1}{2} C_D \rho_G A'_P |\vec{u}_P - \vec{u}_G| = \frac{3}{4} C_D \epsilon_P \rho_G \frac{1}{d_P} V |\vec{u}_P - \vec{u}_G| \quad (3.19)$$

In Abhängigkeit der Reynolds-Zahl des Partikels  $Re_P$  wird  $C_D$  für vier unterschiedliche Regime bestimmt, die über umfangreiche Messungen ermittelt wurden, und in der Literatur weitgehend akzeptiert sind [21].

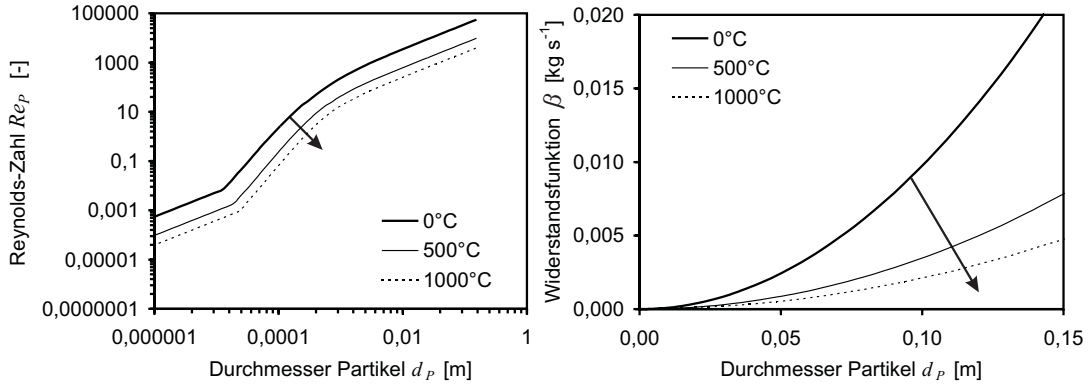
$$C_D = \frac{24}{Re_P} \left[ 1 + 0,1315 \cdot Re_P^{(0,82 - 0,05 \cdot \log(Re_P))} \right] \quad \text{bei} \quad Re_P < 20 \quad (3.20)$$

$$C_D = \frac{24}{Re_P} \left[ 1 + 0,1935 \cdot Re_P^{0,6305} \right] \quad \text{bei} \quad 20 \leq Re_P < 260 \quad (3.21)$$

$$C_D = \frac{24}{Re_P} \left[ 1 + 0,1500 \cdot Re_P^{0,6870} \right] \quad \text{bei} \quad 260 \leq Re_P < 1000 \quad (3.22)$$

$$C_D = 0,44 \quad \text{bei} \quad Re_P \geq 1000 \quad (3.23)$$

$Re_P$  wird vom Durchmesser der Partikel  $d_P$ , der dynamischen Viskosität des Gases  $\mu_G$  und dessen Dichte  $\rho_G$  sowie dem Geschwindigkeitsunterschied zwischen den Phasen beeinflusst (siehe auch Anhang D). Die Berechnung des Partikeldurchmessers  $d_P$  wird in Abschnitt 3.2.1 beschrieben.



**Abbildung 3.1:** Reynolds-Zahl (*links*) und Widerstandszahl (*rechts*) über dem Partikeldurchmesser bei verschiedenen Rauchgastemperaturen

In Abbildung 3.1 sind Reynolds-Zahl  $Re_P$  und Widerstandsfunktion  $\beta$ , bei verschiedenen Rauchgastemperaturen  $T_G$ , über dem Partikeldurchmesser aufgetragen. Auf der linken Seite der Abbildung ist zu sehen, dass die Reynolds-Zahl  $Re_P$  mit Anstieg des Partikeldurchmessers von den verschiedenen Regimen (3.20 - 3.23) beeinflusst wird.



Selbst bei Staubfeuerungen liegen die typischen Reynolds-Zahlen der Partikel mit  $Re_P \simeq 100$  leicht oberhalb des *Stokes'schen Bereiches*, so dass selbst dort die Geschwindigkeiten der Partikel von denen der Gasphase abweichen können [198]. Mit Anstieg der Gastemperatur  $T_G$  sinken sowohl  $Re_P$  als auch  $\beta$  ab, da  $\mu_G$  mit der Temperatur stark zunimmt und  $\rho_G$  absinkt.

### 3.1.3 Partikelphase als granulares Medium


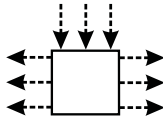
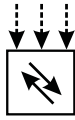
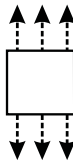



Zur Modellierung der Partikelphase als granulares Medium werden fünf neue Hilfsgrößen eingeführt, die radiale Verteilungsfunktion  $g_o$ , der Reibungswinkel  $\phi_R$ , der Stoßfaktor  $e$ , die granulare Temperatur  $\Theta_P$  und der Partikeldruck  $p_P$ . Die Größen werden in den Abschnitten 3.1.3.1 bis 3.1.3.5 beschrieben.

Mit dem vorliegenden Modell wird nur eine einzige Größenklasse von Partikeln beschrieben. Diese sind identisch in Durchmesser, Dichte, Elastizitätsmodul und Reibungseigenschaften [90]. Weiter wird angenommen, dass die Partikel rund, glatt und nahezu elastisch sind. Die Verteilung der Partikel im Kontrollvolumen ist homogen und Kollisionen sind ausschließlich binär und isotrop. Es liegt weiter eine Isotropie von Fluktuationbewegungen vor. Erweiterungen in Bezug auf Formfaktoren sind möglich und werden berücksichtigt. Rotation von Partikeln wird nicht berücksichtigt, diese könnte aber in zukünftige Arbeiten eingebunden werden. Die Bedeutung von Rotationen auf das Abbrandverhalten wird bei ANNAMALAI[6] beschrieben.

Die Eigenschaften und das Verhalten eines granularen Mediums wirken sich auf dessen innere Kräfte aus. Die resultierenden Spannungen verhalten sich dabei anders als bei Flüssigkeiten, Gasen oder Festkörpern. In Abbildung 3.2 sind die möglichen Spannungsarten innerhalb der verschiedenen Medien gegenübergestellt.

Da granulare Medien nicht isotrop sind, wirken die Normalspannungen  $\sigma_{P,N}$  im Gegensatz zu den Normalspannungen  $\sigma_{G,N}$  im Gas nicht in jede Richtung gleich. Dies führt dazu, dass sich Partikel bei kleinen Widerstandskräften  $\vec{F}_{P,W}$  nicht gleichmäßig im Raum verteilen. Zusätzlich treten im Gegensatz zum Gas Schubspannungen  $\sigma_{P,S}$  auf, die zu einer Dissipation der aufgebrachten Kraft führen. Eine ähnliche Wirkung hat bei Fluiden die Turbulenz. Aufgrund der Richtungsunabhängigkeit des Gasdruckes  $p_G$  sind Horizontal- und Vertikalspannungen in Gasen natürlich gleich groß.

Das granulare Medium kann sowohl in fluidisierter Form als auch als Festkörper vorliegen. Dabei sind theoretische Verhältnisse von Horizontal- zu Vertikalspannungen zwischen 0 und 1 möglich. Ein idealer Festkörper, der sich nicht verformen kann, hat immer ein Horizontallastverhältnis von 0. Als Horizontallastverhältnis wird das Verhältnis von Horizontal- zu Vertikalkraft bezeichnet. Wobei die Vertikalkraft immer in Richtung der

	Normalspannung	Schubspannung	Zugspannung	Druckspannung
 <b>Festkörper</b>	 bei plastischer / elastischer Deformation	 ja	 ja	 ja
 <b>Granulares Medium</b>	ja $\sigma_{\text{Horizontal}} < \sigma_{\text{Vertikal}}$	ja	bei kohäsiven Partikeln	ja
 <b>Flüssigkeit / Gas</b>	ja $\sigma_{\text{Horizontal}} = \sigma_{\text{Vertikal}}$	nein	nein	ja

**Abbildung 3.2:** Vergleich von Spannungsarten verschiedener Medien im ruhenden Zustand nach SCHWISTER[187]

aufgebrachten Kraft wirkt.

Bei der vorliegenden Modellierung muss die Partikelphase sowohl die Möglichkeit haben, relative stabile Positionen einzunehmen als auch an gewissen Stellen in den Bereich des Fließens überzugehen. Zur Modellbildung werden in den folgenden Abschnitten 3.1.3.1-3.1.3.9 Größen vorgestellt, die eine Beschreibung der Partikelphase als granulares Medium ermöglichen.

### 3.1.3.1 Radiale Verteilungsfunktion

Bei PT Methoden erfordert es einen hohen Rechenaufwand, Kollisionen zwischen diskreten Partikeln zu berechnen (siehe Abschnitt 3.1.3). Für jedes einzelne Partikel muss der Abstand zu allen anderen Partikeln bestimmt werden. Technische Anwendungen solcher Modelle sind deshalb bis heute nur schwer umsetzbar.

Um die räumliche Ausdehnung der Partikel zu berücksichtigen, wird hier der Kontaktwert der radialen Verteilungsfunktion im Gleichgewicht  $g_o$  verwendet. Er wird auch als radiale Verteilungsfunktion oder Kontaktwahrscheinlichkeit bezeichnet [36].

**Literaturübersicht** Es existieren sehr unterschiedliche Ansätze für  $g_o$ , unter anderem von CARNAHAN und STARLING[35], LUN[119], SAVAGE[90], DING und GIDASPOW[46] sowie von BALZER und SIMONIN[9]. Eine experimentelle Bestimmung von  $g_o$  ist nur sehr

schwer möglich. Von ALDER und WAINWRIGHT[3] stammen gemessene Kollisionsraten, auf deren Basis  $g_o$  beurteilt werden kann.

Die radiale Verteilungsfunktion  $g_o$  nimmt mit zunehmender Volumenfraktion  $\epsilon_P$  stets zu. Der dimensionslose Partikelabstand  $s$  stellt das statistische Mittel des Abstandes zweier Partikel voneinander dar [68].

$$g_o = \frac{s + d_P}{s} \quad (3.24)$$

Im Fall von kleinen Werten von  $\epsilon_P$  strebt  $s \rightarrow \infty$  und damit  $g_o \rightarrow 1$ , während für hohe Partikelanteile  $s \rightarrow 0$  geht und damit  $g_o \rightarrow \infty$  gilt. Die von CARNAHAN und STARLING vorgeschlagene Formel lautet [35]:

$$g_o = \frac{1}{\epsilon_G} + \frac{3 \epsilon_P}{2 \epsilon_G^2} + \frac{1 \epsilon_P^2}{2 \epsilon_G^3} \quad (3.25)$$

Ein vergleichbarer Ansatz für eine einzige Partikelklasse stammt von BALZER und SIMONIN[9]. Sie normieren die Volumenfraktion in Gleichung (3.25) mit der maximalen Volumenfraktion  $\epsilon_{P,max}$ .

$$g_o = \frac{1}{1 - \frac{\epsilon_P}{\epsilon_{P,max}}} + \frac{3}{2} \frac{\frac{\epsilon_P}{\epsilon_{P,max}}}{\left[1 - \frac{\epsilon_P}{\epsilon_{P,max}}\right]^2} + \frac{1}{2} \frac{\left[\frac{\epsilon_P}{\epsilon_{P,max}}\right]^2}{\left[1 - \frac{\epsilon_P}{\epsilon_{P,max}}\right]^3} \quad (3.26)$$

Von LUN und SAVAGE[119] wird der alternative Ansatz (3.27) vorgeschlagen.

$$g_o = \left[1 - \frac{\epsilon_P}{\epsilon_{P,max}}\right]^{-2,5 \epsilon_{P,max}} \quad (3.27)$$

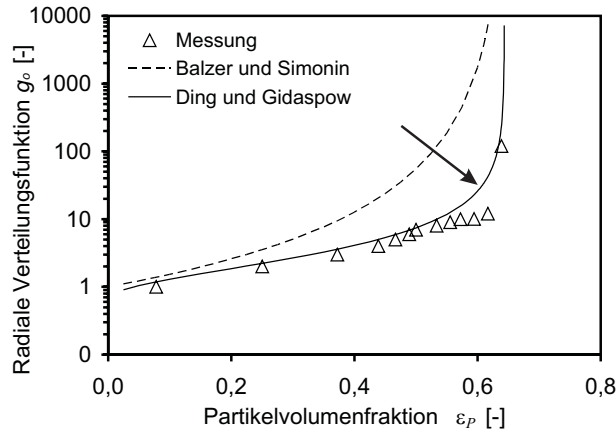
Er wird von DING ET AL.[46] auf Grundlage der Arbeit von OGAWA[141] zu dem Ausdruck (3.28) weiterentwickelt. Sie führen dabei den Faktor  $\frac{3}{5}$  ein, mit dem  $g_o$  im Bereich niedriger Volumenfraktionen gegen  $g_o \rightarrow \frac{3}{5}$  strebt.

$$g_o = \frac{3}{5} \cdot \left[1 - \left(\frac{\epsilon_P}{\epsilon_{P,max}}\right)^{\frac{1}{3}}\right]^{-1} \quad (3.28)$$

In Abbildung 3.3 werden die von ALDER und WAINWRIGHT[3] ermittelten Kollisionsraten mit den Gleichungen (3.26) und (3.28) verglichen.

Wird für  $g_o$  ein Modell verwendet, das im Fall dichter Schüttungen gegen  $\infty$  geht, so strebt auch der Druck zwischen den Partikeln gegen  $\infty$  (siehe Abschnitt 3.1.3.5). Deshalb ist  $g_o$  bei Überschreitung der maximalen Volumenfraktion  $\epsilon_{P,max}$  mathematisch nicht mehr definiert.

ALDER ET AL. konnten bei ihren Messungen eine maximale Volumenfraktion von  $\epsilon_{P,max} = 0,6436$  erreichen. Dabei wird für eine Gruppe von 500 Glaskugeln ( $d_P = 0,5 \text{ mm}$ ) jeweils die Kollisionsrate bestimmt und die entsprechende radiale Verteilungsfunktion berechnet.



**Abbildung 3.3:** Vergleich radiale Verteilungsfunktion  $g_o$  mit Messwerten von ALDER ET AL.[3]

Es zeigt sich, dass der Ansatz (3.26) von BALZER im Vergleich zu den gemessenen Werten zu hoch liegt. Der Ansatz (3.28) von DING stimmt am besten mit den Messwerten überein und wird im Weiteren verwendet.

### 3.1.3.2 Reibungswinkel

Der Reibungswinkel  $\phi_R$  eines granularen Mediums entspricht der Neigung einer Oberfläche, auf der eine Partikelschüttung unter Schwerkrafteinfluss mit gleichbleibender Geschwindigkeit abrutscht. Mit dem Reibungswinkel steigt auch der mögliche Schüttwinkel eines granularen Mediums an. Bei der Modellierung wird an verschiedener Stelle auch der Reibungsbeiwert  $\mu_R$  verwendet, der durch die Beziehung (3.29) gegeben ist.

$$\mu_R = \tan(\phi_R) \quad (3.29)$$

Als Reibungswinkel für lockere Schüttungen mit niedrigen Volumenfraktionen können nach JOHNSON[91] Werte von  $\phi_R = 25 - 30^\circ$  verwendet werden.

### 3.1.3.3 Stoßfaktor

Der Stoßfaktor  $e$  beschreibt den Verlust an kinetischer Energie bei einer Kollision. Für vollkommen elastisches Material ist  $e = 1$ , bei vollständiger Dissipation der kinetischen Energie wird  $e = 0$ . Durch verschiedene Stoßzahlen  $e$  können Geschwindigkeitsfluktuationen unterschiedlich stark gedämpft werden [23].

Obwohl  $e$  theoretisch auch von der Stoßgeschwindigkeit und der Geometrie der Partikel beeinflusst werden kann, wird er hier als Materialkonstante verstanden. Das Symbol  $\eta$  steht für die Abkürzung  $\eta = \frac{1}{2}(1 + e)$ . Für den inhomogenen Brennstoff *Abfall* wird ein Stoßfaktor von  $e = 0,80$  angenommen.

### 3.1.3.4 Granulare Temperatur

Da der Druck der Partikel  $p_P$  eine Zustandsgröße und keine Erhaltungsgröße ist, wird eine zusätzliche Größe benötigt, über welche die Kräfte innerhalb der Partikel bilanziert werden kann. Gemäß der Theorie der granularen Medien geschieht dies über die granulare Temperatur der Partikel  $\Theta_P$ .

In der klassischen Mechanik ist die kinetische Energie  $E$  proportional zum Quadrat der Geschwindigkeit eines Festkörpers. Die Beschreibung des Impulses erfolgt dabei ausschließlich über die Bilanz (3.11). In dem hier entwickelten Modell wird diese Vorstellung erweitert. Es wird postuliert, dass auch kleinste Schwingungen bis hin zu Spannungen zwischen und innerhalb von Partikeln der kinetischen Energie  $E$  hinzugerechnet werden können. Mit der mittleren Geschwindigkeit der Partikel  $\bar{u}_P$  ergibt sich die virtuelle Geschwindigkeit  $u_{\circ,P}$ , die um einen Schwingungs- bzw. Spannungsanteil  $u'_P$  erweitert ist.

$$u_{\circ,P}(t) = \bar{u}_P + u'_P(t) \quad (3.30)$$

Die Modellvorstellung ist vergleichbar mit der Turbulenzmodellierung bei Gasen. Während die Impulserhaltungsgleichung (3.11) den Anteil  $\bar{u}_P$  erfasst, beschreibt  $\Theta_P$ , ähnlich der turbulenten kinetischen Energie  $k$ , den Anteil von  $u'_P$ .

$$E = \frac{1}{2} m_P \overline{(u'_P)^2} = \frac{3}{2} m_P \cdot \Theta_P \quad (3.31)$$

Analog zur thermodynamischen Temperatur eines Fluids, welche die Fluktuationsenergie der Moleküle darstellt, ist die granulare Temperatur damit ein Maß für die Fluktuationbewegungen der Partikel. Eine granulare Temperatur von  $\Theta_P = 0$  führt zu sehr geringen Spannungen innerhalb der Partikelphase und ist im Einflussgebiet von Schwerkraft fast nicht anzutreffen. Zwischen der thermodynamischen Temperatur der Partikel  $T_P$  und der Granulartemperatur  $\Theta_P$  besteht kein direkter physikalischer Zusammenhang.

**Literaturübersicht** Das Modell der granularen Temperatur wird unter anderem von GIDASPOW ET AL.[46], BALZER ET AL.[9], SYAMLAL[204], BOEMER[23] und QI[155] verwendet. Von MIH[129] stammen grundsätzliche Überlegungen zu der Wechselwirkung zwischen Turbulenz und Partikelphase.

Die allgemeingültige, stationäre Formulierung der granularen Temperatur basiert auf der vollständigen Bilanz der spezifischen, kinetischen Fluktuationsenergie. Damit besteht eine Analogie zur Gleichung der turbulenten kinetischen Energie (3.107) beim  $k, \varepsilon$ -Turbulenzmodell (siehe auch Abschnitt 3.4.1).

$$\frac{3}{2} [\nabla \cdot (\hat{\rho}_P \bar{u}_P \Theta_P)] = (-p_P \cdot \bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\tau}}_P) : \nabla \bar{\mathbf{u}}_P - \nabla \cdot \bar{\mathbf{q}}_{\Theta_P} - \gamma_{\Theta_P} + \phi_{P,G} \quad (3.32)$$

Durch den Partikeldruck  $p_P$  und den Spannungstensor  $\bar{\bar{\tau}}_P$  im Feststoff besteht eine Quelle von Bewegungsenergie. Die Produktion von Fluktuationsenergie durch lokale Beschleunigung bzw. Schwerkraft wird durch den Term  $(-p_P \cdot \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}}_P) : \nabla \vec{u}_P$  erfasst [23]. Die Größe  $\phi_{P,G}$  steht für den Energieaustausch zwischen Partikel und Gas.  $\gamma_{\Theta_P}$  ist die Rate der Dissipation von kinetischer Energie auf Grund von Kollisionen.

$$\gamma_{\Theta_P} = 3 \cdot (1 - e^2) \epsilon_P^2 \rho_P g_o \Theta_P \left[ \frac{4}{d_P} \sqrt{\frac{\Theta_P}{\pi}} - \nabla \cdot \vec{u}_P \right] \quad (3.33)$$

Bei granularen Medien handelt es sich im Prinzip um eine *Suspension* aus Feststoff und Gas. Der Anteil  $\vec{q}_{\Theta_P} = -k_{\Theta_P} \nabla \cdot \Theta_P$  beschreibt die Diffusion von  $\Theta_P$ . Der darin enthaltene Diffusionskoeffizient  $k_{\Theta_P}$  kann in einen Anteil für dichte<sup>2</sup> und verdünnte<sup>3</sup> Suspensionen aufgeteilt werden.

$$k_{\Theta_P} = k_{\Theta_P,dense} + k_{\Theta_P,rare} \quad (3.34)$$

Bei GIDASPOW[47] werden Terme für dünne und dichte, bei SYAMLAL[204] lediglich für dichte Suspensionen angegeben. SYAMLAL gibt für den Diffusionskoeffizient  $k_{\Theta_P,dense}$  Gleichung (3.35) an.

$$k_{\Theta_P,dense} = \frac{15 d_P \rho_P \epsilon_P \sqrt{\pi \Theta_P}}{4 (41 - 33\eta)} \left[ 1 + \frac{12}{5} \eta^2 (4\eta - 3) \epsilon_P g_o + \frac{16}{15\pi} (41 - 33\eta) \eta \epsilon_P g_o \right] \quad (3.35)$$

Eine solche Formulierung des Diffusionskoeffizienten, auf Basis der Stoßzahl  $e$ , steigt nach BOEMER[23] mit der Granulartemperatur und dem Partikelvolumenanteil  $\epsilon_P$  an. GIDASPOW vereinfacht den Term.

$$k_{\Theta_P,dense} = 4 \rho_P \epsilon_P^2 d_P \eta g_o \sqrt{\frac{\Theta_P}{\pi}} \quad (3.36)$$

Da die Gleichung (3.37) für den dünnen Bereich Kollisionseinflüsse enthält, strebt diese Formulierung von GIDASPOW[47] im Bereich hoher Volumenfraktion  $\epsilon_P$  gegen  $\infty$ .

$$k_{\Theta_P,rare} = \frac{25}{128} \frac{\rho_P d_P \sqrt{\pi \Theta_P}}{g_o \eta} \left[ 1 + \frac{12}{5} \epsilon_P g_o \eta \right]^2 \quad (3.37)$$

Bei kleinen Partikeln kann die Turbulenz in der Gasphase den Term  $k_{\Theta_P,rare}$  erhöhen, bei hohen Volumenfraktionen  $\epsilon_P$  wird die Turbulenz gedämpft [129]. Nach GIDASPOW entspricht der Austausch von kinetischer Energie zum Gas, bei stochastischen Fluktuationen der Partikelgeschwindigkeit und hohen Volumenfraktionen, dem Term  $-3 \beta \Theta_P$ . Dieser kann zusätzlich in Gleichung (3.36) eingefügt werden. BALZER[9] berücksichtigt diese Wechselwirkungen bei geringen Partikelvolumenfraktionen ebenfalls über die Widerstandsfunktion  $\beta$  und leitet daraus Gleichung (3.38) her.

$$k_{\Theta_P,rare} = \frac{5 \epsilon_P^2 \rho_P^2 \Theta_P}{9 \beta} \left[ 1 + \frac{10 \epsilon_P^2 \rho_P \eta (49 - 33e)}{9 \beta d_P} \sqrt{\frac{\Theta_P}{\pi}} \right]^{-1} \quad (3.38)$$

---

<sup>2</sup>engl.: dense = dicht

<sup>3</sup>engl.: rare = dünn - bei Luft, Gasen

Der Aufbau der Gleichung (3.32) entspricht dem der übrigen Erhaltungsgleichungen und kann deshalb mit den gleichen linearen Lösungsverfahren verarbeitet werden. Es besteht aber auch die Möglichkeit, Gleichung (3.32) analytisch aufzulösen [23, 203]. Dabei wird die Vereinfachung getroffen, dass unabhängig vom jeweiligen Volumenanteil alle Partikel am selben Ort zur selben Zeit die gleiche absolute Fluktuationsenergie besitzen. Durch eine Linearisierung des Quellterms nach PATANKAR[143] kann die Erhaltungsgleichung dann analytisch in einen algebraischen Ansatz überführt werden.

### 3.1.3.5 Partikeldruck

Ursache des Druckes  $p_P$  innerhalb der Partikelphase sind Spannungen aufgrund von Schwerkraft sowie Stöße zwischen den Partikeln. Damit stellt  $p_P$  ein Maß für das Bestreben der Partikel dar, sich im Raum auszubreiten. Wenn in ein mit Partikeln gefülltes Gebiet weitere Partikel einströmen, erfahren diese eine Gegenkraft. Der Partikeldruck verhindert, dass  $\epsilon_P$  unphysikalisch hohe Werte von  $\epsilon_P \geq \epsilon_{P,max}$  annimmt.

In ruhendem Zustand berühren sich die Partikel einer Schüttung und müssen ihr Eigengewicht tragen. Messungen von CAMPBELL[34] zeigen, dass mit ansteigender Höhe eines Festbetts der Partikeldruck abnimmt und mit zunehmender Geschwindigkeit das Gas immer mehr Partikel trägt. Der statische Druckverlust des Gases nimmt zu, der Partikeldruck der Schüttung ab.

Der Partikeldruck wird in einen Kollisions- und einen Kinetikterm unterteilt.

$$p_P = p_{P,col} + p_{P,kin} \quad (3.39)$$

Der Kollisionsterm  $p_{P,col}$  steht für die direkten Kollisionen zwischen den Partikeln.

$$p_{P,col} = 4 \rho_P g_o \epsilon_P^2 \Theta_P \eta \quad (3.40)$$

Durch die radiale Verteilungsfunktion  $g_o$  wird berücksichtigt, inwieweit sich Partikel eines Partikelpaares berühren. Der Partikeldruck nimmt mit dem Volumenanteil  $\epsilon_P$  aufgrund der steigenden Kollisionswahrscheinlichkeit zu, da jeweils ein Partikelpaar an einem Stoß beteiligt ist sogar quadratisch.

Analog zum Gasdruck  $p_G$  beim idealen Gasgesetz, beschreibt der Kinetikterm  $p_{P,kin}$  die translatorische Bewegung der Partikel.

$$p_{P,kin} = \rho_P g_o \epsilon_P \Theta_P \quad (3.41)$$

Nach BOEMER[23] hat der Durchmesser der Partikel  $d_P$  keinen Einfluss auf den Druck. Das Modell führt deshalb zu einer linearen Abhängigkeit des Partikeldrucks von der Partikeldichte und gilt, neben einigen empirischen Ansätzen, als die einzige allgemeingültige Beschreibung [23, 120].

### 3.1.3.6 Normalspannung

In Festkörpern bewirkt eine Druckkraft nur dann eine Normalspannung  $\sigma_{P,N}$ , wenn diese elastisch sind. Bei als starr anzunehmenden Körpern (z.B. Keramik) kann  $\sigma_{P,N}$  vernachlässigt werden.

Da bei Flüssigkeiten und Gasen der Fluiddruck immer in alle Raumrichtungen gleich wirkt, sind die Normalspannungen dort genauso hoch wie die hydrostatischen Druckspannungen (siehe auch Abbildung 3.2).

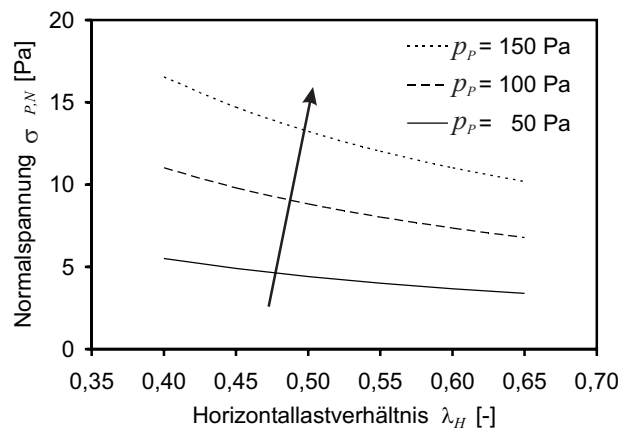
Bei granularen Medien sind die Normalspannungen infolge innerer Reibung immer kleiner als Druckspannungen in Richtung einer auf das Medium wirkenden Kraft. Die Normalspannung führt zu einer Verteilung der Partikelphase senkrecht zu der aufgebracht Kraft bzw. zu einer Spannungszunahme in diese Richtung.

Entsprechend DIN<sup>4</sup> richtet sich die Größe von  $\sigma_{P,N}$  nach dem charakteristischen Horizontallastverhältnis  $\lambda_H$  senkrecht zu der auf die Partikelphase aufgebracht Kraft.

$$\sigma_{P,N} = \frac{p_P}{2 \cdot \lambda_H \cdot \mu_R \cdot (\Delta x_j + \Delta x_k)} \cdot \frac{A}{dx_i} \quad (3.42)$$

Die Normalspannung ist damit von dem herrschenden Partikeldruck  $p_P$  und dem Reibungsbeiwert  $\mu_R$  nach Gleichung (3.29) abhängig. Dabei wird der Reibungswinkel  $\phi_R = 80^\circ$  verwendet, da die Abfallpartikel in der Regel bei geringen Steigungen erst durch einen zusätzlichen Impuls mit dem Abrutschen beginnen.

In Abbildung 3.4 ist die Normalspannung  $\sigma_{P,N}$  über dem, entsprechend DIN, gültigen Bereich des Horizontallastverhältnis von  $0,40 < \lambda_H < 0,65$  dargestellt. Die Normalspannung ist für drei verschiedene Partikeldrücke  $p_P$  dargestellt. Diese liegen in einem Bereich, der für technische Anwendungen relevant ist (siehe auch Abschnitt 6.1).



**Abbildung 3.4:** Normalspannung bei verschiedenen Partikeldrücken

<sup>4</sup>DIN 1055, Teil 6; Deutsches Institut für Normung, (1987)



Bei kleinen Werten von  $\lambda_H$  und mit zunehmendem Partikeldruck  $p_P$  nimmt die Normalspannung immer weiter zu. Aufgrund der Beschaffenheit der Brennstoffpartikel wird der kleinste zulässige Wert für  $\lambda_H$  gewählt ( $\lambda_H = 0,4$ ).

### 3.1.3.7 Schubspannung

In Fluiden entstehen Schubspannungen erst, wenn diese strömen [187]. Innerhalb der Partikelphase wirken Tangentialkräfte, die im Spannungstensor (3.12) zusammengefasst sind. Die Schubspannung  $\sigma_{P,S}$  kann dabei in Abhängigkeit von der Viskosität der Partikelphase  $\mu_P$  beschrieben werden.

$$\mu_P = \mu_{P,col} + \mu_{P,kin} + \mu_{P,fric} \quad (3.43)$$

Die Scherviskosität setzt sich, wie der Partikeldruck, aus einem Kollisions-  $\mu_{P,col}$  und einem Kinetikterm  $\mu_{P,kin}$  zusammen. Zusätzlich kommt der reibungsbedingte Term  $\mu_{P,fric}$  hinzu<sup>5</sup>. Eine konstante Scherviskosität  $\mu_P$  kann nicht angenommen werden, da sich eine Partikelphase nur in wenigen Spezialfällen wie ein newtonsches Fluid verhält. Reibungseffekte können in Form von Stößen und Fluktuationsbewegungen einen großen Einfluss auf die Scherspannungen ausüben. Bei höherer Beladung nimmt deshalb die Scherviskosität zu. Ihre Beschreibung kann eine Unterscheidung in *Scherviskosität* (Scherkraft) und *Kompressionsviskosität* (Kompressionskraft) beinhalten.

Kräfte, die in Schubspannungen umgesetzt werden, gehen im vorliegenden Modell für die Umsetzung in kinetische Energie verloren. Dies ist streng genommen nicht richtig, da sie lediglich in eine andere Energieform umgewandelt werden. Die Vereinfachung entspricht aber dem Detaillierungsgrad der übrigen Modelle, und kann deshalb bei der globalen Betrachtung des Bewegungsvorganges herangezogen werden (siehe auch Abschnitt 2.2).

**Literaturübersicht** Während die Formulierung des Partikeldruckes  $p_P$  in der Literatur weitgehend gleich ist, werden nach SCHWISTER[187] zur Beschreibung der Schubspannung unterschiedliche Ansätze aus der Schüttgutmechanik abgeleitet. Nach PRASAD[153] liegen die Viskositäten bei hohen Partikelanteilen in einem Bereich von  $\mu_P = 0,3 - 83,0$  Pa·s. Die Formulierung von GIDASPOW[47] beinhaltet die radiale Verteilungsfunktion  $g_o$  und damit den Einfluss der Kollisionen. Diese Form führt aber bei kleinen Volumenfraktionen  $\epsilon_P$  zu einer ansteigenden Scherviskosität, was unrealistisch erscheint. Bei  $\epsilon_P \rightarrow 0$  wird die Formulierung von GIDASPOW gleich dem Ausdruck von CHAPMAN[36] für dichte Gase. Von SYAMLAL[204] gibt es ein Modell, bei welchem der Kinetikterm aus numerischen Gründen vernachlässigt wird.

---

<sup>5</sup> *engl.*: friction = Reibung

Der Kollisionsterm kann nach GIDASPOW[68] durch Gleichung (3.44) modelliert werden.

$$\mu_{P,col} = \frac{8}{5} \epsilon_P \rho_P d_P g_o \eta \left[ \frac{\Theta_P}{\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.44)$$

Der Term beinhaltet, dass bei zunehmender Volumenfraktion, Dichte, Stoßzahl, granularer Temperatur und ansteigendem Partikeldurchmesser eine Zunahme von  $\mu_{P,col}$  stattfindet. Für den kinetischen Anteil  $\mu_{P,kin}$  wird von SYAMLAL[204] Term (3.45) vorgeschlagen.

$$\mu_{P,kin} = \frac{\epsilon_P d_P \rho_P \sqrt{\pi \Theta_P}}{6 \cdot (3 - e)} \left[ 1 + \frac{4}{5} \eta (3e - 1) \epsilon_P g_o \right] \quad (3.45)$$

Eine Vereinfachung der Gleichung 3.45 stellt der Term von GIDASPOW[47] dar.

$$\mu_{P,kin} = \frac{5}{96} \frac{\rho_P d_P \sqrt{\pi \Theta_P}}{\epsilon_P \eta} \left[ 1 + \frac{8}{5} g_o \epsilon_P \eta \right]^2 \quad (3.46)$$

Der reibungsbedingte Ausdruck  $\mu_{P,fric}$  kann aus dem Spannungstensor  $\bar{\bar{\tau}}_{P,fric}$  hergeleitet werden. JACKSON[88] beschreibt den Spannungstensor  $\bar{\bar{\tau}}_{P,fric}$  für den Zustand der dichten Partikelphase  $\epsilon_P$  am Lockerungspunkt. Die Schüttung geht dann in einen fließenden Zustand über. Eine ähnliche Formulierung verwendet HUI[86].

$$\bar{\bar{\tau}}_{P,fric} = \begin{bmatrix} -\sigma_{P,S} \cdot (1 + \sin \phi_R \cos 2\gamma) & \sigma_{P,S} \cdot (\sin \phi_R \sin 2\gamma) \\ \sigma_{P,S} \cdot (\sin \phi_R \sin 2\gamma) & -\sigma_{P,S} \cdot (1 - \sin \phi_R \cos 2\gamma) \end{bmatrix} \quad (3.47)$$

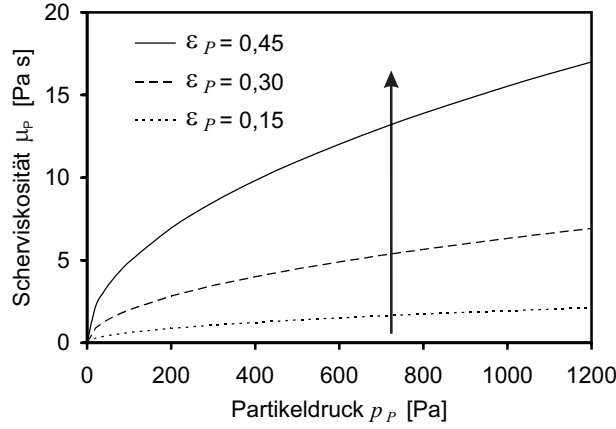
Die Berechnung des Winkels  $\gamma$  zwischen der maximalen Hauptachse und der Achse in die entsprechende Richtung ( $x, y$  oder  $z$ ) wird ausführlich bei BOEMER[23] erläutert. Dort ist auch die Herleitung der Gleichung (3.48) aus (3.47) beschrieben. Die Überführung des Tensors  $\bar{\bar{\tau}}_{P,fric}$  in die Form  $\nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_P - \nabla p_P \equiv \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_{P,fric}$  führt dabei zu der Beziehung für reibungsbedingte Schubspannungen  $\sigma_{P,S}$  [204]. Diese wird bei der Modellbildung eingesetzt.

$$\sigma_{P,S} = 2 \cdot \frac{\mu_{P,fric}}{\sin \phi_R} \sqrt{I_{2D}} \quad (3.48)$$

Die in Gleichung (3.48) enthaltene zweite Invariante des Deviators des Schergeschwindigkeitstensors  $I_{2D}$  kann in allgemeiner, dreidimensionaler Form dargestellt werden.

$$I_{2D} = \frac{1}{6} \left[ \left( \frac{\partial u_P}{\partial x} - \frac{\partial v_P}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial v_P}{\partial y} - \frac{\partial w_P}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial w_P}{\partial z} - \frac{\partial u_P}{\partial x} \right)^2 \right] \\ + \frac{1}{4} \left[ \left( \frac{\partial u_P}{\partial y} + \frac{\partial v_P}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial v_P}{\partial z} + \frac{\partial w_P}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial w_P}{\partial x} + \frac{\partial u_P}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (3.49)$$

In Abbildung 3.5 ist die Abhängigkeit der Scherviskosität vom Partikeldruck dargestellt. Mit zunehmendem Druck und zunehmender Volumenfraktion nimmt die Scherviskosität zu. Auch der Partikeldruck  $p_P$  wird zu einem Großteil von der Volumenfraktion beeinflusst, da bei konstanter Dichte  $\rho_P$  der Partikeldruck mit Zunahme der Partikelanzahl ansteigt.



**Abbildung 3.5:** Scherviskosität bei verschiedenen Partikelvolumenfraktionen

Bei kleinen Volumenfraktionen kann die Turbulenz der Gasphase einen dämpfenden Einfluss haben. Bei geringer Partikelbeladung erhöht diese  $\mu_P$  deutlich, während dichte Partikelbeladungen die Gasturbulenz dämpfen [129]. Die Scherbewegungen sind dann langsamer und die Kontaktzeiten zwischen den Partikeln länger. Nach BALZER[9] kann dieser Effekt ebenfalls modelliert werden.

Eine Modellierung des Widerstandes der Partikelphase gegen Kompression wird in dem vorliegenden Ansatz nicht berücksichtigt. Dies könnte über die Kompressionsviskosität  $\lambda_P$  geschehen.

$$\lambda_P = \frac{8}{3} \epsilon_P^2 \rho_P d_P g_o \eta \sqrt{\frac{\Theta_P}{\pi}} \quad (3.50)$$

Gleichung (3.50) ist die, aus der kinetischen Theorie granularer Medien hergeleitete, Form für die Kompressionsviskosität nach LUN[120].

### 3.1.3.8 Zugspannung

Zugkräfte können nur von Festkörpern aufgenommen werden. Sie führen dort zu entsprechenden Zugspannungen  $\sigma_{P,Z}$ . Nur fest zusammenhaftende, so genannte kohäsive Partikel, können unter bestimmten Umständen Zugspannungen aufnehmen [187], da sie sich dann wie Festkörper verhalten. Eine frei fließende Partikelphase kann keine Zugspannungen aufnehmen. Aus diesem Grund werden die Zugspannungen hier vernachlässigt ( $\sigma_{P,Z} = 0$ ).

### 3.1.3.9 Druckspannung

Durch die Schließung der Kräftebilanz ergibt sich die Druckspannung der Partikelphase  $\sigma_{P,D}$  aus einer einfachen Bilanzierung des Partikeldrucks  $p_P$  und den Spannungen innerhalb der Partikelphase.

$$\sigma_{P,D} = p_P - (\sigma_{P,N} + \sigma_{P,S} + \sigma_{P,Z}) \quad (3.51)$$

Diese Bilanzierung gilt bei einem MF-Ansatz jedoch nur im monodispersen Fall. Sollen mehrere Klassen mit verschiedenen Partikeldurchmessern  $d_P$  berücksichtigt werden, muss die Druckspannung  $\sigma_{P,D}$  ebenfalls modelliert werden. Negative Werte von  $\sigma_{P,S}$  sind nicht definiert, bei  $\sigma_{P,S} \rightarrow \infty$  ergibt sich  $\sigma_{P,D} = 0$ .

### 3.1.4 Erhaltung der Enthalpie

Um die Erhaltung der Energie zu beschreiben, muss für jede Phase  $q$  eine separate Enthalpieerhaltungsgleichung gelöst werden.

$$\nabla \cdot (\hat{\rho}_q \vec{u}_q h_q) = \bar{\tau}_q : \nabla \vec{u}_q - \nabla \cdot \vec{q}_q + S_q + \sum_{p=1}^n (\dot{Q}_{pq} + \dot{m}_{pq} h_{pq}) \quad (3.52)$$

Dabei steht  $h_q$  für die spezifische Enthalpie,  $\vec{q}_q$  ist der Wärmefluss und  $S_q$  enthält die Quellterme der Enthalpie.  $\dot{Q}_{pq}$  ist der Wärmeaustausch zwischen der  $p$ -ten und der  $q$ -ten Phase und  $h_{pq}$  beschreibt den Enthalpieaustausch zwischen den Phasen bedingt durch Massenaustausch. Die lokalen Bilanzbedingungen  $\dot{Q}_{pq} = -\dot{Q}_{qp}$  und  $\dot{Q}_{qq} = 0$  müssen dabei erfüllt sein.

#### 3.1.4.1 Wärmeleitung

**Literaturübersicht** Eine umfangreiche Darstellung der Thematik erfolgt bei BIRD, STEWART und LIGHTFOOT[21]. Enthalpieerhaltungsgleichung (3.52) wird von den meisten Autoren verwendet. Für die Wärmeleitfähigkeit gibt es unterschiedliche Ansätze, ZEHNER und SCHLÜNDER beschreiben sie anhand einer Schüttung über eine Einheitszelle, dabei wird das Kontaktverhalten der Partikel betrachtet [181, 225]. Bei dem Kontinuumsmodell von TSOTSAS wird von einer quasikontinuierlichen Phase ausgegangen, er beschreibt aber auch heterogene Modelle bei denen zwischen Fluid und Feststoff unterschieden wird [211]. Eine sehr detaillierte Darstellung der Thematik ist in WAKAO enthalten [214]. Neuere Ansätze von HUNT verwenden die kinetische Theorie granularer Medien, um effektive Wärmeleitfähigkeiten der Partikelphase zu berechnen. Nach KUIPERS kann das Fourier'sche Gesetz angewendet werden [106]. Sehr detaillierte Messungen von Wärmekapazität und Strahlungseigenschaften verschiedener Schlacken hat LINKA in seiner Arbeit durchgeführt [115].

Bei dem hier vorgestellten Modell wird jede Phase als eine Mischung ihrer Komponenten bzw. Spezies  $i$  ( $i = 1, m$ ) beschrieben. Ihre Enthalpie  $h_q$  ergibt sich durch Aufsummieren der einzelnen Enthalpien  $h_{q,i}$ .

$$h_q = \sum_{i=1}^m m_{q,i} h_{q,i} \quad \text{mit} \quad dh_{q,i} = c_{p,i} dT_q. \quad (3.53)$$

$c_{p,i}$  ist die spezifische Wärmekapazität der Spezies bzw. Feststoffkomponente  $i$  bei konstantem Druck. Die spezifischen Werte für  $c_{p,i}$  der einzelnen Spezies sind in tabellierter Form, zum Beispiel den IUPAC-Tabellen, abgelegt [98]. Die thermischen Randbedingungen der Gasphase bei mehreren Phasen sind die gleichen wie bei Einphasenströmung (siehe auch Kapitel 5.2) [100]. Die Wärmeleitung wird durch das Fourier'sche Gesetz beschrieben.

$$\vec{q}_q = -\epsilon_q \lambda_q \nabla T_q \quad (3.54)$$

Der Ausdruck  $\bar{\bar{\tau}}_q : \nabla \vec{u}_q$  steht für die doppelte Verjüngung der Tensoren  $\bar{\bar{\tau}}_q$  und  $\nabla \vec{u}_q$ . Diese ist für zwei Tensoren  $T$  und  $T'$  gemäß  $\bar{\bar{T}} : \bar{\bar{T}}' = \sum_i \sum_j T_{ij} T'_{ji} = S$  definiert und ergibt einen Skalar  $S$ . Entsprechend der *particle-source-in-cell* Methode liefern alle Partikel einen Beitrag zum Quellterm [40]. Die Quelle resultiert aus dem Massentransport vom Partikel zur Gasphase und dem Wärmetransport bedingt durch erzwungene Konvektion und Strahlung. In Abschnitt 3.2 wird deshalb die Bilanzierung eines Einzelpartikels dargestellt. Bei dem Energieaustausch zwischen den Phasen wird angenommen, dass es sich um eine Funktion in Abhängigkeit von der Temperaturdifferenz handelt, wobei  $\dot{Q}_{pq} = \dot{Q}_{qp}$  gilt.

$$\dot{Q}_{PG} = \gamma_{PG}(T_G - T_P) \quad (3.55)$$

Der Wärmedurchgangskoeffizient  $\gamma_{PG}$  zwischen den Phasen beschreibt den Wärmedurchgang ohne Berücksichtigung von Massentransfer zwischen den Phasen.

$$\gamma_{PG} = 6 \cdot \frac{\lambda_{G,0} \epsilon_P Nu_P}{d_P^2} \quad (3.56)$$

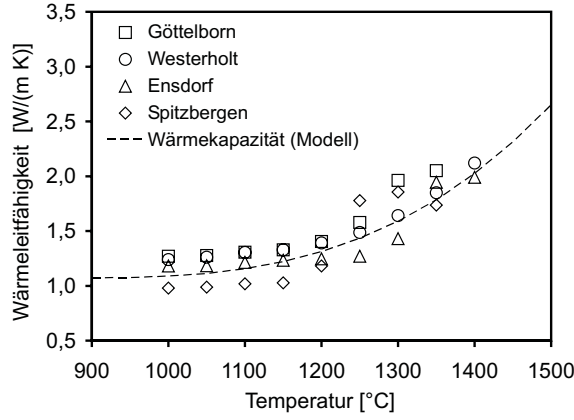
Die Nusselt-Zahl  $Nu_P$  basiert auf dem Durchmesser der Partikel  $d_P$  und der relativen Geschwindigkeit  $|\vec{u}_P - \vec{u}_G|$ . Sie kann über unterschiedliche Korrelationen bestimmt werden (siehe Anhang D). Die Wärmeleitfähigkeit des Gases in den Zwischenräumen  $\lambda_{G,0}$  wird ebenfalls berücksichtigt. Der Ansatz geht auf eine Formulierung von BIRD, STEWART und LIGHTFOOT[21] zurück.

$$\lambda_{G,0} = 6,05 \cdot 10^{-5} \cdot \sqrt{\frac{T_G}{300}} \quad (3.57)$$

Zur Berücksichtigung des Massentransfers kann eine Korrektur des Durchgangskoeffizienten auf Grundlage der Filmtheorie nach BIRD ET AL.[21] erfolgen. Die korrigierte Form wird mit  $\gamma_{PG}^\circ$  bezeichnet und basiert auf  $\gamma_{PG}$ .

$$\gamma_{PG}^\circ = S_{PG} \cdot \frac{c_{p,G}}{e^{[S_{PG} \cdot (c_{p,G} / \gamma_{PG})]} - 1} \quad (3.58)$$

Die Korrektur  $\gamma_{PG}^\circ$  wird bei der vorliegenden Modellierung jedoch nicht verwendet, da der Enthalpietransfer bedingt durch Massentransfer direkt im Rahmen der Modellierung des Einzelpartikels Berücksichtigung findet. Dies wird in Abschnitt 3.2.3 ausführlich dargestellt.



**Abbildung 3.6:** Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_{P,0}$  nach Gleichung (3.62) und Messung [115]

Bei vielen reaktionskinetischen Modellen wird die Annahme getroffen, dass das Partikel im Gasraum frei schwebt. Diese Situation wird mit  $Nu_P = 2$  beschrieben und trifft zu, wenn kein Geschwindigkeitsgradient zwischen Gas und Partikeln besteht und diese sich nicht gegenseitig berühren. Im Fall dichter Packungen ist für  $Nu_P$  die Korrelation von GUNN geeignet, in welche die Volumenfraktion  $\epsilon_G$  mit eingeht [76] (siehe Anhang D). Der Wärmetransport zwischen den Partikeln der granularen Phase basiert auf einem Ansatz, der analog zu dem Fourier'schen Gesetz der Wärmeleitung formuliert wird.

$$\dot{Q}_{PP} = -\epsilon_P \lambda_P \nabla \cdot T_P \quad (3.59)$$

Nach dem Modellansatz von ZEHNER[225] setzt sich die effektive Wärmeleitfähigkeit additiv aus den Anteilen von Hohlraum der Schüttung und Partikeln zusammen. Zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_P$  ergibt sich dadurch eine Berechnungsformel, die auf geometrischen Überlegungen beruht und die Kontaktfläche der Partikel sowie Formfaktoren berücksichtigt.

$$\lambda_P = \lambda_{G,0} \frac{\sqrt{1 - \epsilon_G}}{(1 - \epsilon_G)} \left[ \omega A + (1 + \omega) \frac{2}{(1 - B/A)} \left[ \frac{(A - 1) B}{(1 - B/A)^2 A} \ln \left( \frac{A}{B} \right) - \frac{(B - 1)}{(1 - B/A)} - \frac{1}{2} \right] \right] \quad (3.60)$$

Das Verhältnis der Kontaktflächen zwischen Partikeln und Gas wird auf  $\omega = 7,26 \cdot 10^{-3}$  gesetzt [204]. In der Gleichung (3.60) werden der Parameter  $A$  und der Formfaktor  $C = 1,25$  für kugelförmige Partikel eingesetzt.  $C$  gilt für Materialien wie, z.B.: Keramik, Stahl oder Kupfer und wird in Gleichung (3.61) eingesetzt.

$$A = \frac{\lambda_{P,0}}{\lambda_{G,0}} \quad \text{und} \quad B = C \cdot \left[ \frac{1 - \epsilon_G}{\epsilon_G} \right]^{\frac{10}{9}} \quad (3.61)$$

Bei der Leitung  $\lambda_P$  innerhalb der Schüttung wird die Wärmeleitfähigkeit von Gas  $\lambda_{G,0}$  entsprechend (3.57) und  $\lambda_{P,0}$  eines einzelnen Partikels berücksichtigt.

$$\lambda_{P,0} = 5,8 \cdot 10^{-9} \cdot T_P^3 - 1,0 \cdot 10^{-5} \cdot T_P^2 + 5,7 \cdot 10^{-3} \cdot T_P \quad (3.62)$$

Die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_{P,0}$  wird auf Grundlage von Messungen für die Laboraschen verschiedener Kohlen ermittelt. In Abbildung 3.6 ist der Vergleich von  $\lambda_{P,0}$  nach Gleichung (3.62) mit den gemessenen Wärmeleitfähigkeiten dargestellt.

Die Messungen wurden von LINKA[115] durchgeführt. Die Wärmeleitfähigkeit des Materials der Partikel  $\lambda_{P,0}$  ist ein Stoffwert, der im nicht-porösen Zustand allein von der Temperatur der Asche des Brennstoffes abhängig ist. Das Modell strebt im niedrigeren Temperaturbereich gegen 0.

### 3.1.4.2 Strahlung

Da sich Strahlung mit Lichtgeschwindigkeit ausbreitet, tritt sie nicht nur mit der unmittelbaren Umgebung, sondern mit dem gesamten Feuerraum in Wechselwirkung. Die Wärmeübertragung durch elektromagnetische Wellen macht deshalb den überwiegenden Anteil des Energietransports im Feuerraum aus. Bei Staubfeuerungen kann dies bis zu 90 % betragen.

**Literaturübersicht** Ein guter Überblick über Strahlungsmodelle für CFD ist bei HOWELL[85], MALALASEKERA[125] und VISKANTA[213] enthalten. In Abhängigkeit davon, wie das Problem des Strahlungstransportes bei den einzelnen Modellen gelöst wird, lassen sich diese in die drei Gruppen der Zonen-Modelle, der differentiellen Verfahren und der Strahlverfolgungsmodelle (*ray-tracing*) einteilen. Beispiele für Strahlverfolgungsmodelle sind das *discrete-transfer* Verfahren oder die *Monte-Carlo-Methode* [117, 130]. Zu den differentiellen Verfahren gehören die *Flussmethode*, das *Finite-Volumen-Verfahren*, die *Momenten-Methode* oder die *discrete-ordinates-methode* [39, 45, 55, 142]. Alle Zonen-Modelle sowie die Monte-Carlo Methode gelten als exakt. Die Zuverlässigkeit der einfacheren Modelle hängt von dem jeweiligen Einsatzgebiet ab.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird zur Berechnung der Strahlungsintensitäten die Discrete-Ordinates Methode (DOM) verwendet. Sie gilt für Feuerräume als hinreichend genau und bietet den Vorteil, dass die nötige Differentialgleichung analog zu den anderen Erhaltungsgleichungen mit den gleichen numerischen Lösern bearbeitet werden kann [101, 182]. SAKAMI und CHEONG erweiterten die DOM auf komplexe zweidimensionale Geometrien [38, 179]. Ein vereinfachter Ansatz von LIU[116] ermöglicht den Einsatz in AIOLOS. Eine ausführliche Darstellung der Implementierung in AIOLOS ist bei STRÖHLE enthalten [196].

Bei Rostfeuerungen führt die Strahlung im Bett zu den physikalischen Prozessen der Trocknung und Pyrolyse des Brennstoffs und ermöglicht die Zündung der Feststoffphase. Modelle, die nur das Feststoffbett auf dem Rost und nicht den Gasraum darüber

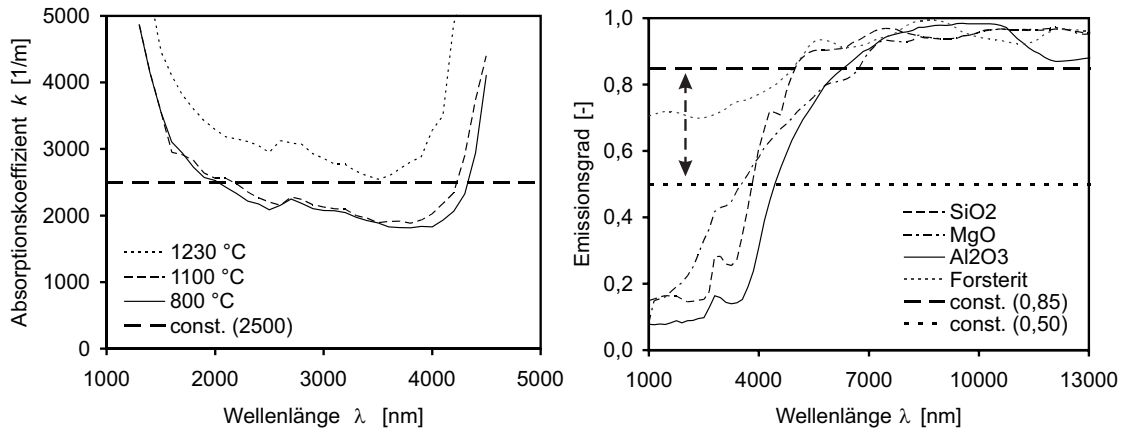
beschreiben, sind aus diesem Grund unrealistisch. Die Erhaltungsgleichung der Strahlungsintensität  $I(\vec{r}, \vec{s})$  ist in (3.63) dargestellt.

$$\vec{s} \cdot \nabla I(\vec{r}, \vec{s}) = k_a(\vec{r}) I_b(\vec{r}) - [k_a(\vec{r}) + k_s(\vec{r})] I(\vec{r}, \vec{s}) + \frac{k_s(\vec{r})}{4\pi} \int_{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s}', \vec{s}) d\Omega \quad (3.63)$$

Hierbei ist  $\vec{r}$  die Ortskoordinate,  $\vec{s}$  der Richtungsvektor und  $d\Omega$  der berechnete Raumwinkelausschnitt. Der Ursprung der Strahlung, die auf die Partikel trifft, sind die Wände und Heizflächen der Brennkammer und höherkettige Kohlenwasserstoffe in der Gasphase des Feuerraums. Gas- und Partikelphase beeinflussen sowohl den Absorptionskoeffizienten  $k_a$  als auch den Streukoeffizienten  $k_s$ , wobei sich die Koeffizienten aus den Einzelkoeffizienten der Phasen approximieren lassen.

$$k_a(\vec{r}) = k_{a,G}(\vec{r}) + k_{a,P}(\vec{r}) \quad \text{und} \quad k_s(\vec{r}) = k_{s,G}(\vec{r}) + k_{s,P}(\vec{r}) \quad (3.64)$$

Die Koeffizienten sind zwar abhängig von der Zusammensetzung der Phasen, werden aber in der Regel als wellenlängenunabhängig angesehen (*weighted sum of grey gases*). Die Modellvorstellung der Gasphase geht somit von einem grauen Gas aus [196]. Als Absorptionskoeffizient der Partikelphase wird häufig ein konstanter Wert von  $k_{a,P} = 2500 \text{ m}^{-1}$  verwendet. Er wird hier mit der Partikeldichte  $\hat{\rho}_P$  gewichtet.



**Abbildung 3.7:** spektraler Absorptionskoeffizient von Glasschmelze (*linke Seite*); Emissionsgrad von Aschekomponenten (*rechte Seite*) nach LINKA[115] im Vergleich mit Konstanten

Auf der linken Seite von Abbildung 3.7 ist der spektrale Absorptionskoeffizient einer Glasschmelze<sup>6</sup> nach Messungen von LINKA dargestellt [115]. Die Messungen zeigen eine gute Übereinstimmung mit dem verwendeten Modellwert im relevanten Temperatur- und Wellenlängenbereich.

<sup>6</sup> Glasschmelze mit der Zusammensetzung  $67 \% \text{ SiO}_2 + 16 \% \text{ Na}_2\text{O} + 9 \% (\text{FeO} + \text{Fe}_2\text{O}_3)$ ; exemplarisch für Rostasche



Der Emissionsgrad der Partikel  $\varepsilon_{P,rad}$  ist auf der rechten Seite von Abbildung 3.7 für verschiedene Aschekomponenten dargestellt<sup>7</sup>. Im Modell variiert  $\varepsilon_{P,rad}$  zwischen Werten von 0,50 bis 0,85 in Abhängigkeit der Zusammensetzung der Feststoffphase (*weighted sum of particle phase*). Nach Absinken der Konzentration des trockenen Brennstoffs  $Y_{tB} < 0,01$  innerhalb der Feststoffphase wird  $\varepsilon_{P,rad} = 0,85$  verwendet, darüber sind die Werte kleiner. Dadurch soll eine Schwärzung von Restkoks und Asche simuliert werden. Die Partikel nehmen dadurch mehr Strahlungsenergie auf.

Die Strahlungstransportgleichung (3.63) wird bei der DOM für  $m$  verschiedene Richtungen formuliert. Dabei wird die richtungsabhängige Strahlungsintensität  $I(\vec{r}, \vec{s}^m)$  für die jeweilige Richtung berechnet.

$$\vec{s}^m \cdot \nabla I(\vec{r}, \vec{s}^m) = k_a(\vec{r})I_b(\vec{r}) - [k_a(\vec{r}) + k_s(\vec{r})]I(\vec{r}, \vec{s}^m) + \frac{k_s(\vec{r})}{4\pi} \sum_{m'} I(\vec{r}, \vec{s}^{m'}) \Phi(\vec{s}^{m'}, \vec{s}^m) w^{m'} \quad (3.65)$$

Zuverlässigkeit und Effektivität des Modells hängen von dessen Diskretisierung ab [196]. Der Strahlungswinkel wird in  $n$  Richtungen aufgeteilt. Jede Richtung  $\vec{s}^m$  wird in den Ordinaten  $\mu^m$ ,  $\xi^m$  und  $\eta^m$  ausgedrückt und ist mit einer Wichtung  $w^m$  versehen. Sie ist von dem durch sie repräsentierten Sektor  $d\Omega$  des Raumwinkels abhängig. Ordinate und Wichtung werden durch eine Quadratur numerisch berechnet, wobei die  $S_4$ -Approximation mit 24 Richtungen verwendet wird [57, 89, 97]. In dem vorliegenden Modell wird vereinfacht, dass die Wellenlängen im Wesentlichen von den Gaseigenschaften unabhängig sein sollen. Bei der Gasphase werden nur die dreiatomigen Komponenten  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$  berücksichtigt, da sie die Strahlung besonders stark absorbieren. Aus dem Strahlungsmodell ergibt sich die, in Abschnitt 3.2 berücksichtigte, Wärmequelle für die Partikel.

Für die Schüttung aus kugelförmigen, monodispersen Partikeln mit Durchmesser  $d_P$  und einer physikalischen Dichte  $\rho_P$  ergibt sich die Absorption aus ihrer Zusammensetzung und spezifischen Oberfläche  $\tilde{a}_s$ . Der Absorptionskoeffizient  $k_{a,P}$  und der Streukoeffizient  $k_{s,P}$  der Feststoffphase lassen sich nach ZINSER[228] durch die Gleichungen (3.66) beschreiben.

$$k_{a,P} = X_a \frac{\tilde{a}_s}{4} \quad \text{und} \quad k_{s,P} = X_s \frac{\tilde{a}_s}{4} \quad (3.66)$$

Der Faktor  $\frac{1}{4}$  steht dabei für das Verhältnis der Schattenfläche eines Partikels zu seiner Oberfläche.  $X_a$  beschreibt den Wichtungsfaktor der Absorption an dieser Schattenfläche der Partikel und hängt vom Streuwinkel  $a$  sowie dem komplexen Brechungsindex der Partikel ab. Der Streukoeffizient  $X_s$  wird analog berechnet. Von HEMSATH werden Näherungsbeziehungen für Wirkungsfaktoren abgeleitet. Für Wirkungsfaktoren bei einem Streuwinkel von  $a > 30^\circ$  gibt er  $X_a = 0,85$  und  $X_s = 0,15$  an [82]. Eine Fehlerabschätzung zeigt, dass auch im Bereich eines Streuwinkels von  $1^\circ > a > 30^\circ$  gute Ergebnisse erzielt

---

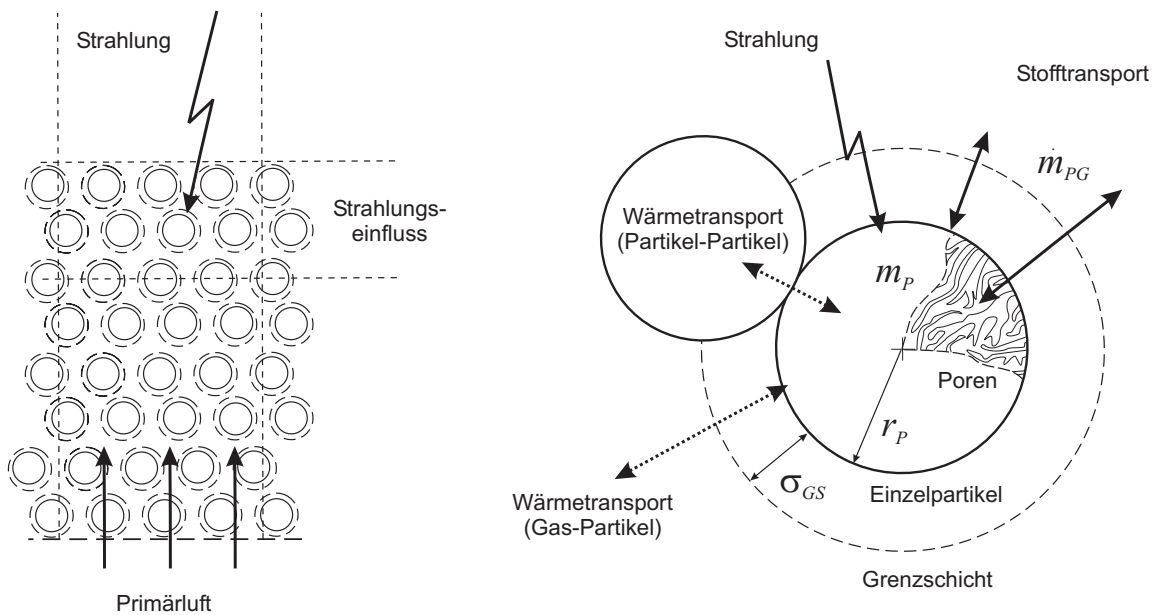
<sup>7</sup> engl.: radiation = Strahlung

werden [82]. Eine unregelmäßige Form der Partikel führt in der Regel zu der Vergrößerung der spezifischen Schattenfläche. Bei beliebiger Orientierung der Partikel ist ihre Beschreibung als ideale Kugeln jedoch nach HOTTEL[83] durchaus zulässig.

## 3.2 Beschreibung des Einzelpartikels

Der Verbrennungsvorgang im Festbett beginnt mit der Verbrennung einzelner Partikel und setzt sich in der Gasphase fort. Er verursacht dabei den Massentransfer  $\dot{m}_{PG}$  zwischen den Phasen. Das heterogene Reaktionsmodell basiert auf Bilanzierung am Einzelpartikel. Dabei wird die chemische Reaktion durch den, in Abbildung 3.8 dargestellten, Stoff- und Wärmehaushalt bestimmt.

Neben dem Wärmetransport zwischen den einzelnen Partikeln sowie zwischen Gas und Partikel ist vor allem der Wärmetransport durch Strahlung wichtig. Am Partikel selbst entsteht eine Quelle bzw. Senke der Wärme, bedingt durch Reaktions- und Verdampfungsenthalpie.



**Abbildung 3.8:** Schematische Darstellung von Schüttung und Einzelpartikelmodell

Sowohl an der äußeren als auch inneren Oberfläche der Partikel finden chemische Reaktionen statt. Dabei wird der Stofftransport von der Diffusion in den Poren sowie durch eine Grenzschicht um das Partikel beeinflusst.

Die wichtigsten Kenndaten zur Charakterisierung fester Brennstoffe sind, neben dem Heizwert  $H_u$ , der Gehalt an brennbaren Substanzen. Der Aufbau fester Brennstoffe wie Abfall, Holz, Braun- und Steinkohle ist äußerst komplex. Zur Beschreibung sind vereinfachende Grundkomponenten notwendig, die entsprechend ihrer relevanten Funktion eingeteilt werden. Eine geeignete Charakterisierung erhält man, wenn der Brennstoff in Feuchtigkeit, flüchtige Bestandteile, fixen Kohlenstoff und Inertmaterial eingeteilt wird <sup>8</sup>.

<sup>8</sup>Das Verfahren zur Bestimmung dieser Bestandteile wird als Immediatanalyse (Kurzanalyse) bezeichnet und ist in DIN 51718 bis DIN 51720 beschrieben.

Um den Verbrennungsvorgang für bestimmte Korngrößen, die mittlere Schüttdichte sowie die Wärmeleitfähigkeit der Schüttung zu beschreiben, wird der komplexe Gesamtprozess der Verbrennung in Teilprozesse zerlegt und deren Zusammenwirken untersucht. So ist jeder Verbrennungsschritt getrennt beschreibbar.

Wie bereits in Abschnitt 3.1.1 dargestellt, besteht ein Partikel im vorliegenden Modell aus den *lumping* Komponenten feuchter Brennstoff ( $fB$ ), trockener Brennstoff ( $tB$ ), Koks ( $K$ ) und Asche ( $A$ ). Der Verbrennungsprozess wird in vier Hauptschritte unterteilt, Trocknung, primäre Pyrolyse und Vergasung sowie Ausbrand des aus dem Brennstoff entstandenen Restkoks. Die Trocknung, primäre Pyrolyse und Vergasung sind physikalische Vorgänge, bei denen es zu einer Volumenzunahme und damit zu einer Impulsquelle für das Gas in der näheren Umgebung kommt.

Die Trocknung von Wasser ( $H_2O$ ) am feuchten Brennstoff ( $fB$ ) kann auf ein physikalisches Modell zurückgeführt werden. Vergasung findet statt, wenn bei niedrigen Sauerstoffkonzentrationen beispielsweise Wasserstoff ( $H_2$ ) am Partikel adsorbiert wird. Vergasungsprozesse werden hier jedoch nicht berücksichtigt. Die primäre Pyrolyse ist eine Verdampfung von Kohlenwasserstoffen und anderen Gasen am trockenen Brennstoff ( $tB$ ). Sie ist mit physikalischen Grundlagen nur schwer nachzuvollziehen, gilt deshalb als charakteristisch für den Brennstoff und wird über empirische Modelle beschrieben. Als sekundäre Pyrolyse wird die Freisetzung von niederkettigen aus höherkettigen Kohlenwasserstoffen und Teeren bezeichnet.

**Literaturübersicht** Eine gute Zusammenfassung der Vorgehensweise bei der Entwicklung von heterogenen chemischen Reaktionsmechanismen ist bei ATKINS[8], BEARNS[10] oder FRANK-KAMENETSKII[64] enthalten. Die Grundlage der Bilanzierung am Einzelpartikel wird durch MAXELL, STEFAN und BOLTZMANN[25] nach experimentellen Vorarbeiten von GRAHAM um 1830 und FICK 1855 aufgestellt. CHAPMAN und ENSKOG stellen erstmals eine approximative Lösung dieser Gleichungen vor, wobei ab einer bestimmten Approximationsstufe die Navier-Stokes-Gleichung und die Euler-Gleichung auftreten [25].

### 3.2.1 Erhaltung der Masse

Wie bereits beschrieben, wird die Gesamtmasse eines Einzelpartikels  $m_P$  entsprechend der für den Verbrennungsprozess relevanten Funktionen eingeteilt. Sie ergibt sich als Summe aus Masse an feuchtem Brennstoff  $m_{fB}$ , trockener Masse des Brennstoffes  $m_{tB}$ , Masse des Kokes  $m_K$  sowie Masse der Asche  $m_A$ .

$$m_P = m_{fB} + m_{tB} + m_K + m_A \quad (3.67)$$

Durch den Massentransport  $\dot{m}_{PG}$  kann an der äußeren Oberfläche der Partikel Material abgetragen werden. Dieser Idealfall wird als *shrinking core model* (SCM) bezeichnet, die Dichte  $\rho_P$  bleibt dabei konstant. Auf der anderen Seite kann im Inneren der Poren Material abgetragen werden, was als *constant-diameter burning* (CDB) bezeichnet wird (siehe auch Abbildung 3.8).

Diese Effekte können nach ESSENHIGH[50, 52] über den Zusammenhang (3.68) beschrieben werden. Eine Fragmentierung der Partikel wird dabei nicht berücksichtigt.

$$\frac{\rho_P}{\rho_{P,0}} = \left[ \frac{d_P}{d_{P,0}} \right]^\alpha \quad \text{mit} \quad \begin{array}{l} \text{SCM : } \alpha = 0 \\ \text{CDB : } \alpha \rightarrow \infty \end{array} \quad (3.68)$$

In der Regel ändert sich der Durchmesser  $d_P$  während der primären Pyrolyse nur geringfügig. Erst die Massenabnahme, bedingt durch Koksabbrand, führt zu einer Verringerung von  $d_P$ . Mit (3.7) ergibt sich aus Gleichung (3.68) die Beziehung (3.69).

$$d_P = d_{P,0} \cdot Y_K^{n_B} \quad (3.69)$$

Der Formfaktor  $n_B$  steht dabei mit dem Parameter  $\alpha$  in Zusammenhang. Für die Schrumpfung der Abfallpartikel wird er auf  $n_B = \frac{2}{3}$  gesetzt. Auch bei der inneren Oberfläche  $S_i$  wird der Ursprungsdurchmesser  $d_{P,0}$  und die Ursprungsdichte  $\rho_{P,0}$  berücksichtigt. Sie besitzt damit die Einheit  $[m^2 \text{ kg}^{-1}]$ .

$$S_i = \frac{6}{\rho_{P,0} d_{P,0}} \cdot (1 - Y_K)^{(n_B+1)} \quad (3.70)$$

Die äußere externe Oberfläche ergibt sich aus einer einfachen geometrischen Beziehung.

$$S_e = \frac{6}{d_P} \quad (3.71)$$

Es ist zu beachten, dass im feuchten Brennstoff ( $fB$ ) die Komponenten trockener Brennstoff ( $tB$ ) und Koks ( $K$ ) enthalten sind. Zu Beginn der Verbrennung gilt damit  $m_{tB} = 0$  sowie  $m_K = 0$ . Während der Trocknung wird  $m_{fB}$  zu  $m_{tB}$  und Wasser. Durch die primäre Pyrolyse wird  $m_{tB}$  zu  $m_K$  und den Pyrolysegasen.

Der Quellterm  $S_{Y_{q,i}}$  einer Spezies  $i$  entsprechend Gleichung (3.10) ergibt sich durch eine Ableitung von Gleichung (3.67) nach der Zeit.

$$\frac{dm_P}{dt} = \frac{dm_{fB}}{dt} + \frac{dm_{tB}}{dt} + \frac{dm_K}{dt} + \frac{dm_A}{dt} \quad (3.72)$$

Die Massenänderung des feuchten Brennstoffs  $m_{fB}$  wird durch die Rate der Trocknung<sup>9</sup>  $R_{dry}$  und deren stöchiometrischen Koeffizienten  $\nu_{dry} = -1$  bestimmt.

$$\frac{dm_{fB}}{dt} = - R_{dry} \quad (3.73)$$

---

<sup>9</sup> engl.: drying = Trocknung

Die Masse des trockenen Brennstoffs  $m_{tB}$  wird durch die Raten der primären Pyrolyse  $R_P$  verringert. Die Trocknungsrate  $R_{dry}$  stellt mit dem Anteil der Partikelfeuchte  $F$  eine Quelle für trockenen Brennstoff dar.

$$\frac{dm_{tB}}{dt} = (1 - F) \cdot R_{dry} - R_P \quad (3.74)$$

Koks wird durch die Rate der Pyrolyse  $R_P$  erzeugt und durch die Koksabbrandreaktionen verbraucht.

$$\frac{dm_K}{dt} = (1 - Fl) \cdot R_P - R_K \quad (3.75)$$

Hierbei steht  $Fl$  für den Anteil der flüchtigen Gasphasenkomponenten welche durch die primäre Pyrolyse gebildet werden. Zu diesen flüchtigen Bestandteilen gehören bei der vorliegenden Modellierung die Spezies CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> und H<sub>2</sub>.

Der in Gleichung (3.6) benötigte Massentransfer zwischen den Phasen  $\dot{m}_{PG}$  ergibt sich daraus.

$$\dot{m}_{PG} = \frac{dm_{PG}}{dt} = F \cdot R_{dry} + Fl \cdot R_P + R_K \quad (3.76)$$

Die Masse an Asche  $m_A$  bleibt konstant. Die Massenänderung der Asche ist somit 0.

$$\frac{dm_A}{dt} = 0 \quad (3.77)$$

Bei der Beschreibung der Bewegung der Partikel über die Impulsbilanz (3.11) kann der Anteil der Asche auch als so genannte *shadow-fraction* verwendet werden. Eine solche Verwendung des Ascheanteils als passiver Skalar wird beispielsweise von ZINSER[228] angewendet.

### 3.2.2 Erhaltung des Impulses

Die chemische Reaktion am Partikel sowie dessen Massenabnahme hat zwar indirekt, über die Verringerung der physikalischen Dichte  $\rho_P$ , einen Einfluss auf das Bewegungsverhalten, die Impulsbilanz des Einzelpartikels wird aber nicht beeinflusst. Dies wäre, z.B. bei einer Explosion der Fall, bei der die chemische Reaktion zu einer großen Impulsquelle am Partikel führt.

Der freiwerdende Anteil an Wasser  $F$  und flüchtigen Kohlenwasserstoffen  $Fl$  verursacht eine Impulsquelle innerhalb der Gasphase. Diese wird über Gleichung (3.17) berücksichtigt. Durch die Reaktion am Koks wird das Strömungsfeld nur wenig beeinflusst, da vor der Desorption der Produkte CO und CO<sub>2</sub> die Adsorption des O<sub>2</sub> stattfindet. Die mit dieser Reaktion einhergehende Volumenänderung kann in Bezug auf eine daraus resultierende Impulsquelle vernachlässigt werden.

### 3.2.3 Erhaltung der Enthalpie

Die Enthalpie des Einzelpartikel wird durch den Heizwert des Brennstoffs und die Enthalpie der Verbrennungsluft (Primär-, Sekundär- und Plattenluft) bestimmt. Weiter sind Strahlungs- und Leitungsverluste bedingt durch die Randbedingungen des Berechnungsgebietes entscheidend. Das treibende Gefälle ist dabei die Temperaturdifferenz zwischen Partikel und umgebendem Fluid bzw. die imitierte Strahlungsenergie.

Es wird angenommen, dass im gesamten Einzelpartikel sowie in den Poren eine konstante Temperatur  $T_P$  herrscht. Die Temperatur der umgebenden Grenzschicht  $T_{GS}$ , die in Abbildung 3.8 das Partikel umgibt, entspricht der mittleren Temperatur zwischen freiströmender Gasphase und Partikel.

$$T_{GS} = \frac{1}{2}(T_P + T_G) \quad (3.78)$$

Die Temperatur der Partikel  $T_P$  ergibt sich aus der Erhaltung der Enthalpie am Einzelpartikel. Basierend auf der Massenbilanz (3.67) wird eine Enthalpiebilanz aufgestellt. Die Gesamtenthalpie  $H_P$  des Partikels setzt sich dabei aus den spezifischen Enthalpien  $h_i$  der Einzelkomponenten  $i$  zusammen.

$$H_P = h_{fB} \cdot m_{fB} + h_{tB} \cdot m_{tB} + h_K \cdot m_K + h_A \cdot m_A = m_P \cdot h_P \quad (3.79)$$

Analog zu der Massenbilanz (3.67) wird die Enthalpieerhaltungsgleichung nach der Zeit abgeleitet.

$$\frac{dH_P}{dt} = h_{fB} \cdot \frac{dm_{fB}}{dt} + h_{tB} \cdot \frac{dm_{tB}}{dt} + h_K \cdot \frac{dm_K}{dt} + h_A \cdot \frac{dm_A}{dt} = m_P c_{p,P} \frac{dT_P}{dt} \quad (3.80)$$

Über die spezifische Wärmekapazität des Partikels  $c_{p,P}$  kann aus der Enthalpieänderung die Partikeltemperatur  $T_P$  ermittelt werden. Die Änderung der spezifischen Enthalpie des Partikels  $h_P$  ergibt sich aus der Bilanzierung des Wärmetransportes zwischen dem Partikel und seiner Umgebung sowie den einzelnen Wärmequellen und -senken.

$$\frac{dh_P}{dt} = \frac{\dot{Q}_{rad} + \dot{Q}_{PP} + \dot{Q}_{PG} + \dot{Q}_{RK} + \dot{Q}_{dry} + \dot{Q}_{mass}}{m_P} \quad (3.81)$$

Die Strahlungswärme stellt mit Abstand den Hauptanteil der in das Partikel eingetragenen Wärme dar. Der Wärmetransport durch Strahlung  $\dot{Q}_{rad}$  ergibt sich aus der Differenz zwischen eingestrahelter Strahlungsmenge und der Strahlung die vom Partikel emittiert wird.

$$\dot{Q}_{rad} = S_\phi \cdot \varepsilon_{P,rad} \cdot I^* - S_e \cdot \varepsilon_{P,rad} \cdot \sigma_{rad} \cdot T_P^4 = m_P \cdot \frac{3 \cdot \varepsilon_{P,rad}}{\bar{\rho}_P \cdot d_P} \cdot \left[ \frac{1}{4} \cdot I^* - \sigma_{rad} \cdot T_P^4 \right] \quad (3.82)$$

Die Intensität der einfallenden Strahlung  $I^*$  wird dabei über die *discrete-ordinates-methode* (DOM) berechnet (siehe Abschnitt 3.1.4.2).  $S_\phi$  ist die frei der Strahlungsquelle zugewandte

Seite,  $\sigma_{rad}$  die Boltzmannkonstante und  $\varepsilon_{rad}$  die Emissivität der Partikel. Der Energietransfer zwischen den Phasen  $\dot{Q}_{PG}$  und zwischen den Partikeln des Festbettes  $\dot{Q}_{PP}$  ist bereits in Abschnitt 3.1.4.2 in den Gleichung (3.55) und (3.59) beschrieben.

Die bei der Verdampfung der Feuchtigkeit benötigte Wärmemenge  $\dot{Q}_{dry}$  ergibt sich aus der Menge des verdampften Wassers<sup>10</sup>  $m_{vap}$  sowie der Bindungsenthalpie  $\Delta h_B$  und der Verdampfungsenthalpie  $\Delta h_V$  (siehe auch Abschnitt 3.3.1).

$$\dot{Q}_{dry} = -(\Delta h_V + \Delta h_B) \cdot \frac{dm_{vap}}{dt} \quad (3.83)$$

Alternative zu der Korrektur des Wärmedurchgangskoeffizienten  $\gamma_{PG}^\circ$ , die in Abschnitt 3.1.4 eingeführt wird, beschreibt Gleichung (3.84) den Wärmetransport bedingt durch Massentransfer korrekt.

$$\dot{Q}_{mass} = S_{PG} \cdot h_P \quad (3.84)$$

Die durch chemische Reaktion (RK) bereitgestellte Wärmemenge ergibt sich zu einem Großteil aus der Reaktionswärme bei dem Abbrand des Kokes  $\Delta H_{K,RK}$  und wird über die Reaktionsrate der Koksabbrandreaktion  $R_K$  berechnet.

$$\dot{Q}_{RK} = R_K \cdot \frac{\Delta H_{K,RK}}{m_K} \quad (3.85)$$

Auf die Berechnung der Reaktionsrate  $R_K$  wird in den nachfolgenden Abschnitten genauer eingegangen.

$$\Delta H_{K,RK} = \frac{2fm_{CO}h_{CO} + (1-f)M_{CO_2}h_{CO_2} - M_{O_2}h_{O_2} - (1+f)M_C h_C}{1+f} \quad (3.86)$$

Der Parameter  $f$ , der auch als Mechanismus-Faktor bezeichnet wird, ist weiter unten in Abschnitt 3.3.4 erklärt.

---

<sup>10</sup> engl.: vaporization = Verdampfung



### 3.3 Heterogene chemische Reaktionsmechanismen

Die Mechanismen der heterogenen chemischen Reaktion werden beim Verbrennungsprozess in hoher Masse von der Temperatur in Partikel  $T_P$  und Grenzschicht  $T_{GS}$  sowie der Verfügbarkeit von Sauerstoffmolekülen an den reaktiven Zentren beeinflusst. Die Reaktionskinetik behandelt dabei nicht nur chemische, sondern auch physikalische Vorgänge wie Diffusion, Verdampfung, Trocknung und die Freisetzung von Gasen aus dem, durch die Einzelpartikel gebildeten, Brennstoffbett. In Abbildung 3.9 sind die resultierenden Phasen der Verbrennung auf dem Rost schematisch dargestellt.

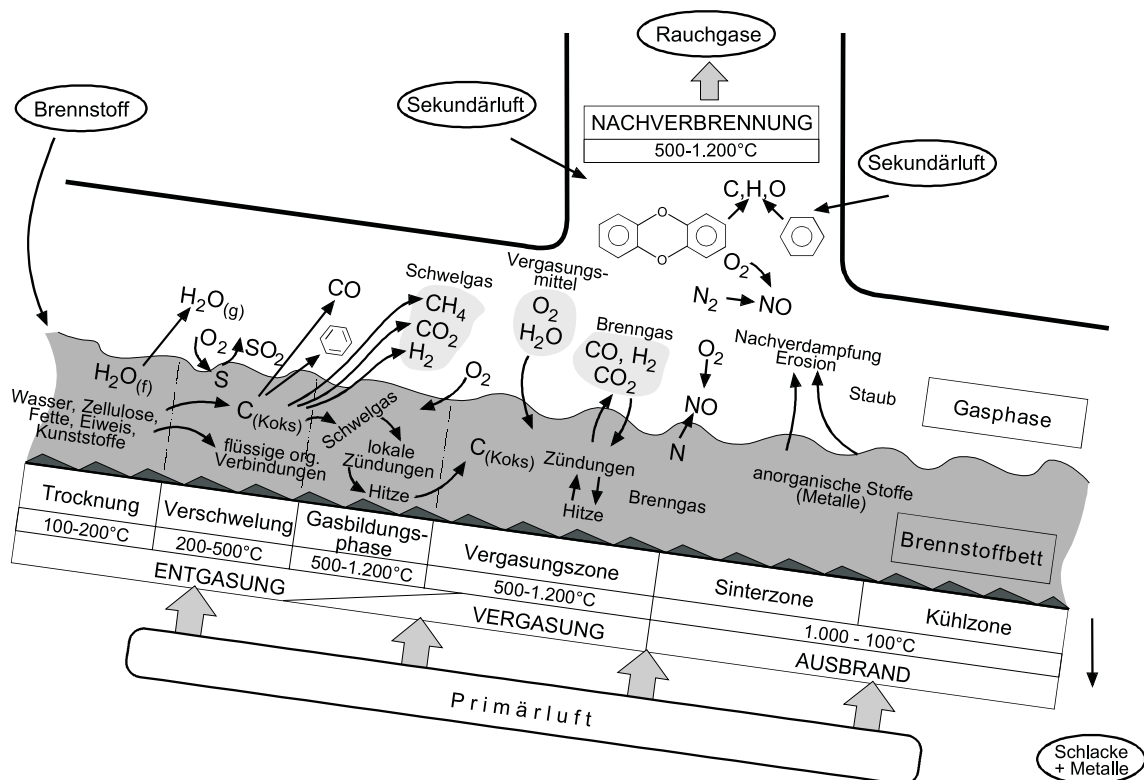


Abbildung 3.9: Phasen der Verbrennung auf dem Rost nach MORF und RECHBERGER[131]

Wie bereits ausführlich im Abschnitt 2.1 dargelegt, gibt es, im Gegensatz zu dem Bewegungsmodell der Partikelphase, bereits eine Vielzahl von Veröffentlichungen zu den heterogenen Reaktionen am Einzelpartikel. Grund hierfür ist auf der einen Seite die individuelle Charakterisierung eines bestimmten Brennstoffes. Auf der anderen Seite ist aber auch die Möglichkeit verlockend, durch ein geschicktes *fitting* der Reaktionskinetiken arbeitsintensive Modellierungsarbeit bei den Bewegungsgleichungen und Diffusionsprozessen zu umgehen.

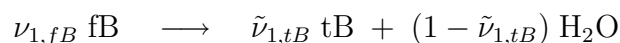
**Literaturübersicht** Auf Grundlage der Theorien JÜTTNERS[94] zu Diffusions- und Reaktionsproblemen hat DAMKÖHLER[42] erstmals umfangreiche und systematische Unter-

suchungen zu Reaktions- und Diffusionsproblemen am Einzelpartikel bzw. im Brennstoffbett durchgeführt. Seine Arbeiten liefern tiefe Einblicke in Transportprozesse innerhalb einzelner Partikel und ganzer Schüttungen. DAMKÖHLER hat auch die ersten pseudohomogenen Reaktormodelle aufgestellt. THIELE[208] und ZELDOWITSCH[226] haben Diffusion und Reaktion in porösen Substanzen untersucht. Von WICKE ET AL.[171, 219] sind Experimente zu dieser Problematik durchgeführt worden. Darin werden die Auswirkungen der Diffusion auf die Reaktionsordnung und die gemessene scheinbare Aktivierungsenergie untersucht.

Bei der Verbrennung erfolgt zunächst die Aufheizung und Trocknung. Daran schließt sich die Zersetzung von organischer Substanz in flüchtige Bestandteile und fixen Kohlenstoff (Pyrolyse) an. Weiter findet die so genannte homogene Verbrennung der flüchtigen Zersetzungsprodukte in der Gasphase sowie die heterogene Verbrennung des kohlenstoffhaltigen Rückstands durch eine Oberflächenreaktion mit dem Oxidationsmittel  $O_2$  statt (siehe auch Abschnitt 3.4).

### 3.3.1 Trocknung

Als Trocknung wird allgemein die Freisetzung von Wasser aus den Partikeln bezeichnet. Von SCHUHMACHER und RICHERS[186] werden Ergebnisse über den Einfluss der Brennstofffeuchte veröffentlicht. In Bezug auf die Wärmebilanz lässt sich feststellen, dass die Trocknung zu einer Enthalpiesenke am Partikel führt. Da diese bei porösen Stoffen selbst im Labormaßstab sehr schwer zu beschreiben ist und stark von der Homogenität und der Kapillarstruktur der Partikel abhängt, wird hier ein vereinfachtes Modell verwendet.



Die Masse des feuchten Brennstoffs  $m_{fB}$  setzt sich dabei aus dem trockenen Brennstoff  $m_{tB}$  und der Masse an gebundenem Wasser  $m_{H_2O}$  zusammen.

$$m_{fB} = m_{tB} + m_{H_2O} \quad (3.87)$$

Der Trocknungsprozess gliedert sich in einen Verdunstungs- und einen Verdampfungsvorgang. Es wird aber davon ausgegangen, dass Verdunstung bei den herrschenden Bedingungen vernachlässigt werden kann. Das Modell beschränkt sich somit auf die Verdampfung. Weiter wird davon ausgegangen, dass bei den vorliegenden Temperaturen keine Kondensationsprozesse stattfinden. Unter Umständen können aber Adsorptionsprozesse von  $H_2O$  durch Vergasungsreaktionen vorliegen. Diese werden im Rahmen der Arbeit nicht berücksichtigt.

Die Verdampfungsenthalpie vermindert entsprechend Gleichung (3.83) die Gesamtenthalpie des Partikels. In der Impulserhaltungsgleichung führt der freiwerdende Wasserdampf durch die Vergrößerung des Gasvolumens zu einem Quellterm.

Der Verdampfungsprozess im Festbett kann nach KRÜLL[104] durch ein so genanntes *stilles Sieden* approximiert werden. Der Dampfmassenstrom ergibt sich aus dem Potential an Brennstoffenthalpie und der Siedetemperatur der zu verdampfenden Flüssigkeit, in diesem Fall Wasser. Dabei verdampft genau so viel Flüssigkeit, wie überschüssige Wärme im Einzelpartikel zur Überwindung von Verdampfungs- und Bindungsenthalpie zur Verfügung steht.

$$\frac{dm_{vap}}{dt} = - \frac{\dot{H}_P(T_P) - \dot{H}_P(T_{sat})}{\Delta h_V + \Delta h_B} \quad (3.88)$$

Gleichung (3.88) gilt immer dann, wenn die Temperatur der Flüssigkeit am Partikel  $T_P$  gleich oder größer der Siedetemperatur  $T_{sat}$  ist<sup>11</sup>. Weiter wird vorausgesetzt, dass die am Partikel gebundene Flüssigkeit die gleiche Temperatur wie das gesamte Partikel hat. Wenn die Temperatur der an das Partikel gebundenen Feuchte kleiner als  $T_{sat}$  ist, gilt  $\frac{dm_{vap}}{dt} = 0$ .

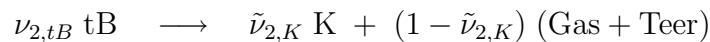
Die Rate der Trocknung  $R_{dry}$  ergibt sich aus der Verdampfungsrate.

$$R_{dry} = F^{-1} \cdot \frac{dm_{vap}}{dt} \quad (3.89)$$

Die Bindungsenthalpie  $\Delta h_B$  resultiert normalerweise aus der Sorptionsisotherme und ist damit von der Kapillarität des Brennstoffs abhängig. Von GÖRRES[70] wird für Biomasse ein Wert von  $\Delta h_B = 400 \text{ kJ kg}^{-1}$  angegeben. Dieser wird hier verwendet. Die Verdampfungsenthalpie von Wasser beträgt bei Normaldruck  $\Delta h_V = 2257 \text{ kJ kg}^{-1}$ . Bis  $120 \text{ }^\circ\text{C}$  kann es zusätzlich zu einer physikalischen Abspaltung von  $\text{H}_2\text{O}$  an organischen Materialien kommen. Dieser Effekt wird jedoch im Rahmen der Pyrolyse behandelt.

### 3.3.2 Pyrolyse

Die Pyrolyse oder Entgasung stellt einen Zersetzungsprozess organischer Substanzen dar. Bei Partikeltemperaturen  $T_P > 300 \text{ }^\circ\text{C}$  werden Teile der Partikelmatrix in flüchtige Gase, Kokse und Teere überführt. Nach SOLOMON[193] kann die Pyrolyse in zwei Schritte unterteilt werden. Während eines primären Pyrolyseschrittes werden aus dem Brennstoff leichtflüchtige Kohlenwasserstoffe (z.B.: Methan, Propan, etc.) sowie höherkettige Kohlenwasserstoffe (Teere) abgespalten, der Koks verbleibt am Partikel. In einem sekundären Pyrolyseschritt reagiert die Gasphase weiter.




---

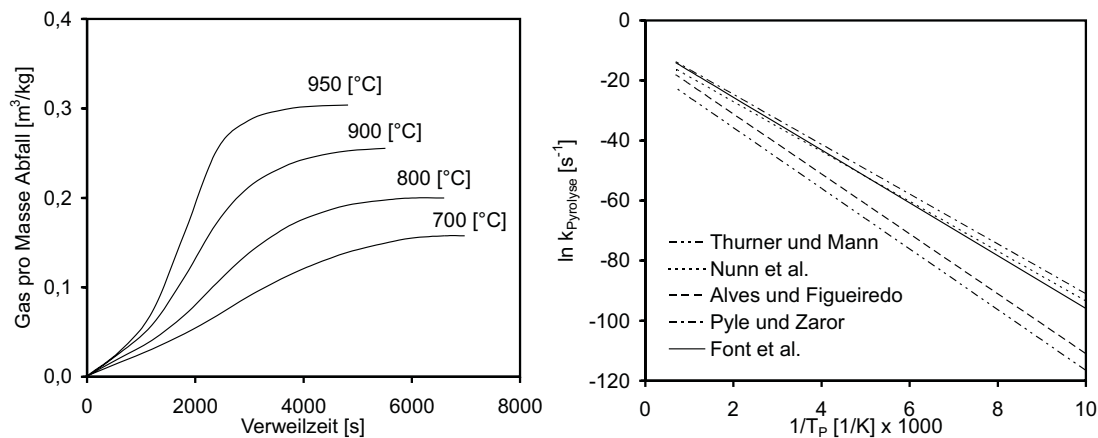
<sup>11</sup> *engl.*: saturation = Sättigung

Vereinfacht kann die primäre Pyrolyse über *lumping* Komponenten dargestellt werden. Bei der primären Pyrolyse werden Flüchtige ( $Fl$ ) innerhalb der Poren bzw. an der äußeren Oberfläche freigesetzt. Durch die in Abbildung 3.8 dargestellte Grenzschicht der Dicke  $\sigma_{GS}$  werden diese dann in die umgebende Gasphase transportiert. Dort werden sie zu niederkettigen Kohlenwasserstoffen zerlegt. Die homogene Verbrennung der flüchtigen Zersetzungsprodukte in der Gasphase erfolgt im Feuerraum. Neben den Pyrolysegasen fällt der Pyrolysekoks als fester Rückstand an, dessen Verbrennung im Abschnitt 3.3.4 behandelt wird.

Die Masse des trockenen Brennstoffs  $m_{tB}$  setzt sich aus der Masse an Koks  $m_K$  und der Masse an flüchtigen Bestandteilen  $m_{Fl}$  zusammen.

$$m_{tB} = m_K + m_{Fl} \quad (3.90)$$

Es wird beobachtet, dass die Dauer der Pyrolyse einen Einfluss auf Ausbeute und Zusammensetzung der Produkte hat. Auf der linken Seite von Abbildung 3.10 ist die freigesetzte Gasmenge  $m_{Fl}$  bei unterschiedlichen Pyrolysetemperaturen dargestellt. Diese Ergebnisse von FEDERLE[54] bestätigen, dass die Gasmenge mit zunehmender Partikeltemperatur ansteigt. Die Dauer der Pyrolyse nimmt dabei ab.



**Abbildung 3.10:** Gasausbeute in Abhängigkeit von Temperatur und Verweilzeit nach FEDERLE[54] (*linke Seite*); Vergleich verschiedener Pyrolysekinetiken (*rechte Seite*)

Grund für den überproportionalen Anstieg der Gasmenge bei einer Pyrolysetemperatur von ca. 950 °C sind die einsetzende Wassergasreaktion der Partikelfeuchte mit dem verbleibenden Kohlenstoff sowie Crackung höherer Kohlenwasserstoffe ( $C_nH_m$ ) in den Poren und in der Grenzschicht.

Der Vorgang der primären Pyrolyse ist mit physikalischen Grundlagen nur über sehr komplizierte Modelle zu beschreiben. Deshalb wird der gesamte Vorgang von Diffusion und Reaktion in den Poren über einen empirischen Arrhenius-Ansatz der Form (3.91)

zusammengefasst.

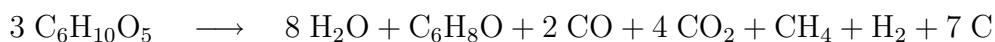
$$R_P = A \cdot \exp\left(-\frac{E}{R \cdot T_P}\right) Y_{tB} \quad (3.91)$$

Der Stoßfaktor  $A$  sowie die Aktivierungsenergie  $E$  sind Reaktionskonstanten.  $A$  ist ein Maß für die Kollisionen zwischen den reagierenden Molekülen. Die Aktivierungsenergie  $E$  gibt an, wie viel thermische Energie notwendig ist, damit die chemische Reaktion zwischen den Edukten eingeleitet werden kann.

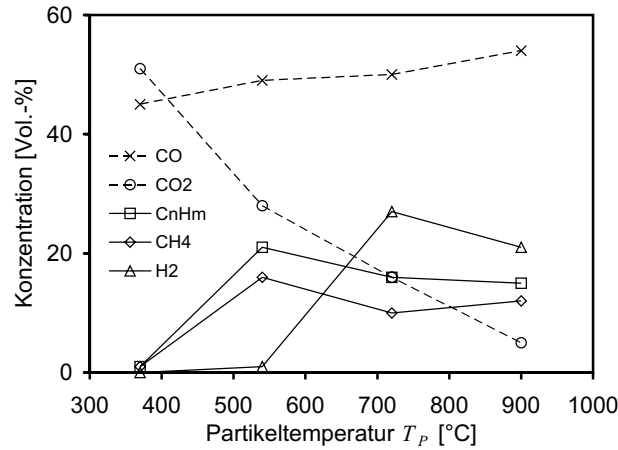
**Literaturübersicht** Unter anderem werden von THURNER[210], NUNN[136], ALVES[5], PYLE[154] und FONT[60] Reaktionskonstanten für die Pyrolyse von Hausmüll veröffentlicht. Die Konstanten dieser Autoren sind im Anhang A in Tabelle A.5 zusammengefasst.

Die Reaktionsraten besitzen jeweils eine unterschiedliche Dynamik. Dies zeigt sich, wenn die Raten  $R_P$ , die sich aus Gleichung (3.91) ergeben, in einem Arrheniusdiagramm aufgetragen werden. Aus Abbildung 3.10 geht hervor, dass die Kinetik von PYLE und ZAROR[154] zu der schnellsten Pyrolyserate führt. Die Kinetik von THURNER und MANN[210] ist die langsamste. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Kinetik von FONT[60] verwendet. Sie gehört zu den langsameren Pyrolysekinetiken, wird von vielen Autoren zitiert und hat im Rahmen der experimentellen Untersuchung zu einer guten Übereinstimmung mit Messwerten geführt.

Aus Abbildung 3.11 geht hervor, dass nicht nur die Gesamtmenge der Pyrolysegase sondern auch deren Zusammensetzung von der Temperatur abhängig ist. Nach KRÜLL[104] kann die primäre Pyrolyse durch eine Reaktion erster Ordnung beschrieben werden, wobei hier die Zersetzung von Zellulose ( $C_6H_{10}O_5$ ) beispielhaft über eine Globalreaktion beschrieben wird [173].



Aufgrund der Zusammensetzung und Porenstruktur des Abfalls ergibt sich eine charakteristische Speziesverteilung der Brenngase in der näheren Umgebung pyrolysierender Partikel. Bei BILITEWSKI[19] sind die Konzentrationen im Produktgas von Zellulosepartikeln in Abhängigkeit von  $T_P$  angegeben. Während der Anteil an CO bei Temperaturzunahme annähernd konstant bleibt, verringert sich das  $CO_2$  stetig [19]. Die im Pyrolysegas enthaltenen Spezies  $CH_4$  und  $C_nH_m$  erreichen ein Maximum bei etwa 550 °C und nehmen bei höheren Temperaturen unter Abspaltung von  $H_2$  wieder ab. Um den stöchiometrischen Koeffizienten  $\nu_i$  der primären Pyrolyse zu ermitteln, ist eine Charakterisierung des Brennstoffes notwendig, auf die in Kapitel 4 genauer eingegangen wird. Obwohl es sich auch bei der primären Pyrolyse streng genommen um einen Verdampfungsprozess handelt, wird eine damit verbundene physikalisch bedingte Enthalpieänderung hier nicht berücksichtigt.



**Abbildung 3.11:** Brenngas bei der Pyrolyse von Zellulose über der Partikeltemperatur[19]

Durch den Transport der Pyrolyseprodukte kommt es dennoch zu einem Enthalpietransport zwischen Partikel und Gas.

Da sich während der Pyrolyse die Masse des Partikels ändert, ist die Freisetzung der flüchtigen Komponenten ebenfalls mit der Umwandlung von Energie  $\Delta H_{P,RK}$  verbunden.

$$\Delta H_{P,RK} = (1 - \tilde{\nu}_{1,K}) \cdot h_{Fl} + \tilde{\nu}_{1,K} \cdot h_K - h_{tB} \quad (3.92)$$

Die Enthalpieänderung entspricht der Enthalpie der am Brennstoff freigesetzten Masse, die dadurch am Partikel nicht mehr zur Verfügung steht.

$$\frac{dH_P}{dt} = h_{Fl} \cdot \frac{dm_{Fl}}{dt} = [\Delta H_{P,RK} + \tilde{\nu}_{2,K} \cdot h_K - h_{tB}] \cdot R_P \quad (3.93)$$

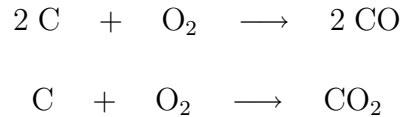
Bedingt durch den Massentransport von Flüchtigen  $\dot{m}_{Fl}$  wird Brennstoff, der noch nicht vollständig abreagiert ist, in die Gasphase überführt. Die darin enthaltene Reaktionsenthalpie steht dem Partikel dann nicht mehr zur Verfügung, wodurch sich die Gesamtenthalpie des Einzelpartikels verringert.

### 3.3.3 Vergasung

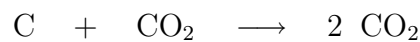
Die Vergasung darf nicht mit der Pyrolyse verwechselt werden. Sie umfasst die Umsetzung von kohlenstoffhaltigem Pyrolysekoks zu gasförmigem Brennstoff (siehe auch Abbildung 3.9 auf Seite 49). Dabei setzen sich das bereits gebildete CO<sub>2</sub> und der H<sub>2</sub>O-Dampf bei Sauerstoffmangel und entsprechend hoher Temperatur mit unverbranntem Kohlenstoff zu CO und H<sub>2</sub> um (*Boudouard-* und *Wassergasreaktion*). Vergasungsreaktionen werden im Rahmen der Arbeit nicht berücksichtigt. Da sie für die in Kapitel 6 behandelten Anwendungsfälle, Aufgrund der Strömungsverhältnisse, eine untergeordnete Rolle spielen.

### 3.3.4 Koksausbrand

Nach der Trocknung und primären Pyrolyse bestehen die Partikel nur noch aus Koks (K) und Asche (A). Jetzt werden Sauerstoffmoleküle aus der Gasphase am Partikel adsorbiert oder dringen über die Poren in das Innere ein. Dort können verschiedene chemische Reaktionen ausgelöst werden.



Bis heute konnte nicht geklärt werden, wovon es abhängt, welches Produkt bei der heterogenen Reaktion entsteht. Zum einen kann die durch Diffusion bedingte Verfügbarkeit der Sauerstoffmoleküle eine Rolle spielen. Es ist aber auch möglich, dass in Mikroporen ausschließlich die erste Reaktion stattfindet und das Kohlenmonoxid in den größeren Poren zu  $\text{CO}_2$  weiterreagiert. Daneben können aber auch andere Reaktionen, wie z.B. die Boudouard-Reaktion



eine Rolle spielen. Diese werden hier jedoch nicht berücksichtigt.

Die beiden erstgenannten Reaktionsgleichungen lassen sich zu einer Gleichung zusammenfassen. Dabei beschreibt der Mechanismus-Parameter  $f$  das Produktverhältnis von CO zu  $\text{CO}_2$ .



Zur Beschreibung der Koksabbrandkinetik sind von GREMYACHKIN[74] Untersuchungen am heterogenen porösen Kokspartikeln gemacht worden. Er führt dabei Simulationen für ein detailliert aufgelöstes Einzelpartikel durch und ermittelt so auf Basis physikalischer Grundlagen die Rate und den Mechanismus-Parameter  $f$ .

Die eigentliche chemische Reaktion zwischen  $\text{O}_2$  und C ist auch für Kokse aus unterschiedlichen Brennstoffen immer ähnlich. Wie die Pyrolyse, wird sie im Wesentlichen durch die poröse Struktur der Partikel bestimmt. Es ist zu berücksichtigen, dass die Porenstruktur der Kokse im Vergleich zum Ausgangspartikel bereits durch die hohen Temperaturen und den Aufschluss bei der Pyrolyse stark verändert wird. Die Struktur der Kokse kann sich durch ihre innere Oberfläche  $S_i$ , den Porendurchmesser  $d_{Pore}$  und die Porosität unterscheiden.

In vorangegangenen Arbeiten zur Implementierung von Verbrennungsmodellen für Kohle in AIOLOS wird die Rate der Koksumsetzung immer analog zur Pyrolyse über einen einzelnen Arrhenius-Ansatz beschrieben [62, 122, 182]. Dieses Vorgehen wird als *Freundlich-Kinetik* bezeichnet [65]. Bedingt durch die komplizierte Struktur der Restkokse bei der

Festbettverbrennung und die wesentlich größeren räumlichen Dimensionen der Brennstoffpartikel im Vergleich zur Staubverbrennung ist es notwendig, diese Kinetik zu erweitern. Von ROBERTS[167] wird bereits 1965 vorgeschlagen, die Freundlich-Kinetik für poröse Katalysatorpartikel durch eine *Adsorptions-Desorptions-Kinetik* von LANGMUIR[109] zu ersetzen.

Die Rate  $R_K$ , die sich aus der Adsorptions-Desorption-Kinetik ergibt, ist aus drei Termen zusammengesetzt, dem diffusionskontrollierten Teilschritt sowie den durch Adsorption und Desorption von Sauerstoffmolekülen limitierten Teilschritten. Die einzelnen Schritte verhalten sich wie in Reihe geschaltete Widerstände. Die Geschwindigkeit der Gesamtreaktion wird von dem langsamsten Teilschritt bestimmt.

$$R_K = \left[ \frac{1}{k_D \cdot Y_{O_2, \infty}} + \frac{1}{\phi \cdot k_{ads} \cdot p_{O_2, \infty}} + \frac{1}{\phi \cdot k_{des}} \right]^{-1} \quad (3.94)$$

Dieser Ansatz ist nicht empirisch, die Einzelmechanismen basieren auf theoretischen Grundlagen der physikalischen Chemie [167, 51]. Die chemische Reaktion von Sauerstoffradikalen ( $\cdot O$ ) an den aktiven Zentren der C-Atome werden direkt berücksichtigt.

**Diffusion** Der erste Term in Gleichung (3.94) steht für die Diffusion der Sauerstoffmoleküle durch die Grenzschicht zu dem Partikel.

$$k_D = D_{O_2, GS} \frac{Sh_P}{Sh_{P,0} \cdot d_P} \cdot \frac{M_C \cdot p_G}{\mathbb{R} \cdot T} \quad (3.95)$$

Dieser diffusionskontrollierte Teilschritt ist dementsprechend von der vorhandenen Konzentration an Sauerstoffmolekülen  $Y_{O_2, \infty}$  in der Umgebung des Partikels abhängig. Außerdem wird er von der Diffusionsgeschwindigkeit der  $O_2$ -Moleküle bestimmt. In Abbildung 3.8 ist die Grenzschicht um das Partikel dargestellt. Die Diffusionskonstante von Sauerstoff durch die Grenzschicht  $D_{O_2, GS}$  ergibt sich aus der Referenzdiffusionskonstante  $D_{O_2, ref}$  und ändert sich mit der Grenzschichttemperatur  $T_{GS}$ .  $M_C$  ist das Molekulargewicht von Kohlenstoff (C).

$$D_{O_2, GS} = D_{O_2, ref} \cdot p_{ref}^{-1} \cdot \left[ \frac{T_{GS}}{1600} \right]^{1,75} \quad \text{mit} \quad D_{O_2, ref} = 0,000349 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad (3.96)$$

Die Eigenschaften, einschließlich der Form, der Grenzschicht werden über die Sherwood-Zahl des Partikels  $Sh_P$  berücksichtigt.  $Sh_P$  ist eine Vergleichszahl und wird im Anhang D genauer dargestellt. Sie setzt den Stoffübergangstrom ins Verhältnis zum Diffusionsstrom.

Die Dicke der Grenzschicht  $\sigma_{GS}$  wird durch benachbarte Partikel innerhalb der Schüttung begrenzt. Wenn der Unterschied zwischen Gas- und Partikelgeschwindigkeit vernachlässigt werden kann, ist die Grenzschicht intakt und es ergibt sich ein Wert von  $Sh_P = 2$ . Bei



großen Gradienten ändert sich  $Sh_P$ . Dies beeinflusst den Koksabbrand. Die Standard-Sherwood-Zahl hat den Wert  $Sh_{P,0} = 1$ . Die Diffusion der Reaktionsprodukte CO und CO<sub>2</sub> durch die Grenzschicht, nach Ablauf der Reaktion, wird hier nicht berücksichtigt.

Es kann angenommen werden, dass auch durch die Rückdiffusion ein Einfluss auf die Geschwindigkeit der Gesamtreaktion ausgeübt wird. Da CO<sub>2</sub>-Moleküle im Vergleich zu Sauerstoffmolekülen groß sind, können sie unter Umständen den Transport des O<sub>2</sub> durch die Grenzschicht behindern. Der Effekt wird als *Stefan-Strom* bezeichnet. Er kann im Rahmen der Arbeit aber nicht berücksichtigt werden.

**Adsorption** Die Geschwindigkeitskonstante  $k_{ads}$  beschreibt die Adsorption von O<sub>2</sub>-Molekülen an den aktiven Zentren der C-Atome im Bereich der äußeren und inneren Oberfläche der Partikel. Dieser chemische Vorgang kann sehr genau vermessen werden und wird über einen Arrhenius-Ansatz beschrieben.

$$k_{ads} = k_{0,ads} \cdot \exp\left(-\frac{E_{ads}}{R \cdot T}\right) \quad (3.97)$$

Die Konstanten für  $k_{0,ads}$  und  $E_{ads}$  sind im Anhang A in Tabelle A.2 zusammengefasst und basieren auf Angaben von ESSENHIGH[51]. Bei der Adsorption muss der Partialdruck des Sauerstoffs  $p_{O_2,\infty}$  berücksichtigt werden, da eine Erhöhung des Druckes  $p_G$  durch die damit verbundene Partialdruckerhöhung zu einer schnelleren Adsorption von Molekülen an den Feststoffen führt. Dadurch ergeben sich für die Langmuir-Kinetik charakteristische Adsorptions-Isotherme.

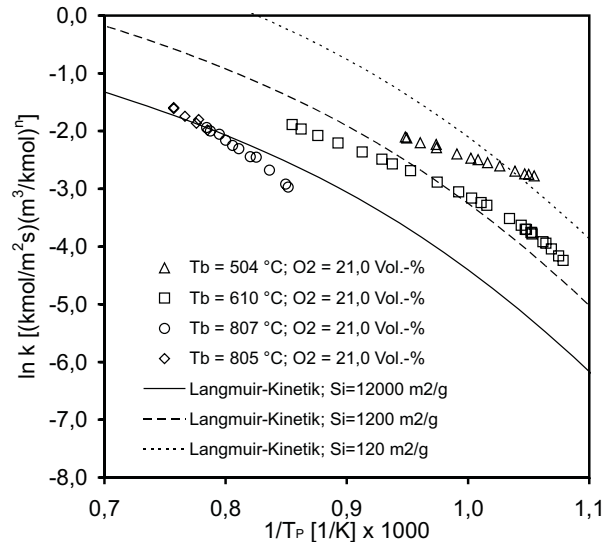
Die Struktur und Größe der Poren wird über den *Thiele-Modul*  $\phi$  berücksichtigt [208]. Er beschreibt die Reaktionsgeschwindigkeit ohne Diffusionshemmung in der Pore im Verhältnis zur aktuellen Diffusionsgeschwindigkeit in der Pore und damit das Verhältnis von Reaktionsgeschwindigkeit ohne Diffusionshemmung zu Diffusionsgeschwindigkeit.

$$\phi = d_P \sqrt{\frac{k_{chem} \cdot S_i \cdot p_{O_2,\infty}^{-0,5}}{D_{O_2} \cdot d_{Pore} \cdot p_G}} \quad (3.98)$$

In den Thiele-Modul gehen neben dem Sauerstoffpartialdruck und der Diffusionskonstante auch die mittlere, interne Oberfläche der Partikel  $S_i$  und die absolute chemische Reaktionskonstante  $k_{chem}$  ein. Diese bezieht sich ausschließlich auf die chemische Reaktion.

$$k_{chem} = \left[ \frac{1}{k_{ads}} + \frac{1}{k_{des}} \right]^{-1} \quad (3.99)$$

Die Gleichung (3.94) berücksichtigt damit den Vorgang, dass Sauerstoffmoleküle in sehr kleinen Poren durch Diffusionseffekte oder Kollisionen an der Reaktion mit der Porenwand gehindert werden.



**Abbildung 3.12:** Arrheniusdiagramm für Kunststoffkokse unter Variation der internen Oberfläche

**Desorption** Die Desorption der Reaktionsprodukte wird analog zu der Adsorption beschrieben. Dabei wird nicht unterschieden, ob CO oder CO<sub>2</sub> bei der heterogenen Reaktion gebildet wird. Die entsprechende Geschwindigkeitskonstante ist in Gleichung (3.100) angegeben.

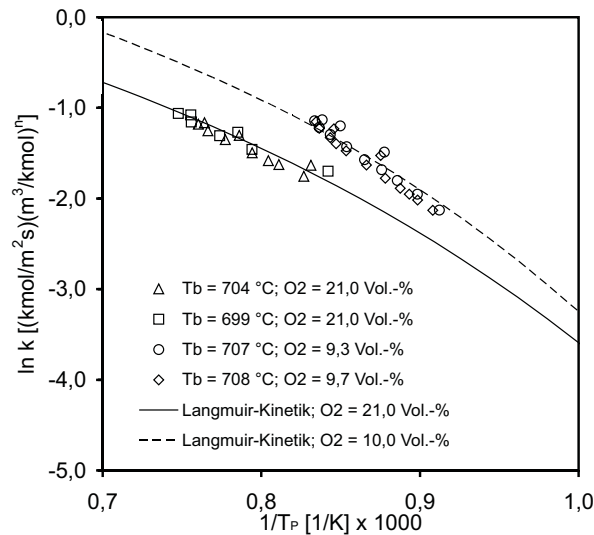
$$k_{des} = k_{0,des} \cdot \exp\left(-\frac{E_{des}}{R \cdot T}\right) \quad (3.100)$$

Die Konstanten  $k_{0,des}$  und  $E_{des}$  sind ebenfalls in Tabelle A.2 enthalten. Im Gegensatz zur Adsorption ist die Desorption nicht von den Partialdrücken innerhalb der umgebenden Gasphase abhängig. Es zeigt sich aber, dass die Angaben von ESSENHIGH[51] zu sehr langen Desorptionszeiten der Produktmoleküle an der Kohlenstoffmatrix führen. Die Desorption kann dadurch unter Umständen den geschwindigkeitsbestimmenden Teilschritt ausmachen.

**Einfluss der internen Oberfläche** Von HAMEL und KRUMM[77] werden zur Bestimmung der Kinetik der Vergasung und Verbrennung unterschiedlicher Abfälle, Biomassen und Kohlen umfangreiche und sehr genaue Messungen an Einzelpartikeln durchgeführt. Die geometrische Struktur des Kohlenstoffs wird davon beeinflusst, aus welchem Ausgangsmaterial er entsteht.

In Abbildung 3.12 sind Messwerte von HAMEL ET AL. in das Arrhenius-Diagramm der Restkokverbrennung von Kunststoffkoksen für unterschiedliche Temperaturen  $T_b$  der Partikelschüttung<sup>12</sup> eingetragen. Unter Variation der internen Oberfläche  $S_i$  kann Gleichung (3.94) mit den Messungen verglichen werden.

<sup>12</sup> engl.: bulk = Großteil



**Abbildung 3.13:** Arrheniusdiagramm für Holzkokse unter Variation des Sauerstoffpartialdruckes

Vor der Restkoksverbrennung schmelzen die verschiedenen Kunststoffe unter Einfluss der hohen Umgebungstemperaturen. Sie bilden durch die entweichenden Produktgase unterschiedliche Porenstrukturen aus. Da verschiedene Arten von Kunststoffen getestet wurden, kommt es in Abbildung 3.12 zu einer Separation der Messwerte. Eine Variation von  $S_i$  ( $120 - 12000 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ ) zeigt, dass die Langmuir-Kinetik in der Lage ist, diesen Effekt zu berücksichtigen. Die Reaktionsgeschwindigkeit wird mit zunehmender interner Oberfläche pro Masse Brennstoff immer höher.

**Einfluss des Sauerstoffpartialdrucks** Eine wichtige Einflussgröße bei der Modellierung ist der Sauerstoffpartialdruck  $p_{O_2, \infty}$ . Er bestimmt sowohl die Verfügbarkeit von  $O_2$ -Molekülen als auch die Adsorption. Die Abbildung 3.13 zeigt Raten der Restkoksverbrennung von Holzkoksen unter Variation des Sauerstoffpartialdrucks im Vergleich mit Ergebnissen der Langmuir-Kinetik. Die Messdaten stammen ebenfalls von HAMEL und KRUMM[77]. Die interne Oberfläche wird bei der Rechnung auf dem konstanten Wert von  $S_i = 1,2 \text{ m}^2 \text{ kg}^{-1}$  gehalten.

Hölzer sind im Vergleich zu Kunststoffmischungen relativ homogen. Dementsprechend streuen die Messwerte in Abbildung 3.13 weniger. Es zeigt sich hier aber die deutliche Sensitivität in Bezug auf den Sauerstoffpartialdruck. Je mehr Sauerstoffmoleküle vorhanden sind, desto mehr Stoßpartner werden für den Adsorptionsvorgang zur Verfügung gestellt. Die heterogene Reaktion läuft dann schneller ab. Der Effekt wird auch von dem Modell gut wiedergegeben. Die Kinetik stimmt hier sehr gut mit den Messungen von HAMEL überein.

Verbunden mit der heterogenen Abbrandreaktion ist die Freisetzung von Wärmeenergie.

Für den Koksausbrand wird die Enthalpiebilanz analog zur Pyrolyse formuliert. Während der Reaktion führen die Produktmoleküle zu einem Transport von Enthalpie vom Partikel zur Umgebung.

$$\frac{dH_K}{dt} = \dot{m}_{O_2} \cdot h_{O_2} + \dot{m}_{CO} \cdot h_{CO} + \dot{m}_{CO_2} \cdot h_{CO_2} \quad (3.101)$$

Unter der Annahme, dass kein Sauerstoff im Inneren der Poren akkumuliert wird, kann dieser über das stöchiometrische Verhältnis zwischen  $O_2$  zu Reaktionsprodukten und den Mechanismus-Faktor  $f$  ermittelt werden.

$$\frac{dH_K}{dt} = [M_{O_2} \cdot h_{O_2} - 2fM_{CO} \cdot h_{CO} - (1 - f)M_{CO_2} \cdot h_{CO_2}] \cdot \frac{R_K}{(1 + f)M_C} \quad (3.102)$$

$$\frac{dH_K}{dt} = - (\Delta H_{K,RK} + h_K) \cdot R_K \quad (3.103)$$

Der Enthalpiestrom der Produkte steht damit in Abhängigkeit zu der Reaktionsrate  $R_K$  des reagierenden Kohlenstoffs.

## 3.4 Turbulenz und chemische Reaktion

Durch die heterogenen Reaktionen am Partikel freigesetzt, reagieren die brennbaren Komponenten in der Gasphase weiter. Man spricht in diesem Fall von homogener Reaktion. Selbst wenn nur kurzkettinge Kohlenwasserstoffe Berücksichtigung finden, können die homogenen Reaktionen bei MVAs durch die große Anzahl der freiwerdenden Spezies sehr komplex werden. Deshalb stellen die Gasphasenspezies im Grunde ebenfalls *lumping* Komponenten dar.

Die Modellierung geht von der Modellvorstellung aus, dass der Ablauf der homogenen Reaktion durch die Verweilzeit der Edukte in den Turbulenzwirbeln bestimmt wird. Die turbulente kinetische Energie  $k$  ist dabei ein Maß für die Stärke der Wirbel in der Gasphase.

$$k = \frac{1}{2} \overline{(u'_G u'_G)} \quad (3.104)$$

Lokale Werte der Geschwindigkeiten  $u_G$  schwanken dabei mit der Fluktuation  $u'_G$  um ihren Mittelwert  $\bar{u}_G$ . Zur mathematischen Beschreibung der Turbulenz wird das  $k, \epsilon$ -Turbulenzmodell nach JONES und LAUNDER[92] verwendet.

### 3.4.1 Turbulenzmodell in der Gasphase

Bei Mehrphasenströmungen in Wirbelschichten wird grundsätzlich zwischen zwei verschiedenen Konzepten unterschieden, dem *dispersed-turbulence model* (DTM) und dem *secondary-turbulence model* (STM). Das DTM ist geeignet, wenn die Volumenfraktion  $\epsilon_P$  der Partikelphase am Gesamtvolumen gering ist. Wechselwirkungen zwischen Partikeln sind dann zu vernachlässigen, die Turbulenz in der Gasphase hat jedoch einen Einfluss auf die Bewegung der Partikel. Bei den hier verwendeten Partikelphasen mit hohen Volumenfraktionen  $\epsilon_P$  wird jedoch ein zusätzlicher Quellterm berücksichtigt. Die Beeinflussung der Partikel durch die Turbulenz wird mittels eines statistischen Verfahrens beschrieben, wobei  $u_G = \bar{u}_G + u'_G$  ist. Während die mittleren Geschwindigkeiten  $\bar{u}_G$  unmittelbar aus der Impulsbilanz (3.11) zu entnehmen sind, müssen die Schwankungswerte  $u'_G$  aus dem Turbulenzmodell ermittelt werden.

Beim  $k, \epsilon$ -Turbulenzmodell wird von einer isotropen, ungerichteten Turbulenz ausgegangen. Es hat sich gezeigt, dass damit bei der Verbrennung im großtechnischen Maßstab gute Ergebnisse erzielt werden können [102]. Dissipationsrate und turbulente kinetische Energie bestimmen den Einfluss der Turbulenz auf die homogene Reaktion,  $\Pi_k$  und  $\Pi_\epsilon$  stellen den Einfluss der Partikelphase auf die Turbulenz dar. Der Einfluss der Gasphasenturbulenz wirkt auf die Partikelphase direkt über Impulsquellen und indirekt durch eine Änderung der Partikelgrenzschicht und damit der heterogenen Reaktionen.

Von Qi[155] wird für  $\Pi_k$  der Ausdruck (3.105) angegeben. Er stellt die Änderung der Turbulenzenergie aufgrund der Anwesenheit von Partikeln dar.

$$\Pi_k = \beta(\overline{u'_G u'_P} - \overline{u'_G u'_G}) = \beta(k_{GS} - 2k) \quad \text{mit} \quad k_{GS} = \overline{u'_G u'_P} \quad (3.105)$$

$k_{GS}$  ist die Kovarianz von Partikel- und Gasphasengeschwindigkeit. Der Ausdruck (3.105) basiert auf der Herleitung aus der granularen Theorie und enthält die Widerstandsfunktion  $\beta$  (siehe Seite 24; Gleichung (3.19)). Die Kopplung mit der Dissipationsrate über Beziehung (3.106) ergibt sich aus Gleichung (3.105).

$$\Pi_\varepsilon = C_{\varepsilon,3} \frac{\varepsilon}{k} \Pi_k \quad (3.106)$$

Die Konstante  $C_{\varepsilon,3}$  ist im Anhang A enthalten. Unter Berücksichtigung des Terms  $\Pi_k$  ergibt sich die Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie  $k$  zu (3.107).

$$\nabla \cdot (\bar{\rho}_G \tilde{u}_G k) = \nabla \cdot \left[ \frac{\mu_{\text{eff}}}{Sc_t} \nabla k \right] + P - \bar{\rho}_G \varepsilon + \Pi_k \quad (3.107)$$

Der turbulente Widerstand wird modelliert,  $Sc_t = 0,67$  ist die turbulente Schmidt-Zahl. Um das Modell zu schließen, wird die Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie  $\varepsilon$  ebenfalls durch eine Erhaltungsgleichung beschrieben.

$$\nabla \cdot (\bar{\rho}_G \tilde{u}_G \varepsilon) = \nabla \cdot \left[ \frac{\mu_{\text{eff}}}{Sc_t} \nabla \varepsilon \right] + C_{\varepsilon,1} \frac{\varepsilon}{k} P - C_{\varepsilon,2} \bar{\rho}_G \frac{\varepsilon^2}{k} + \Pi_\varepsilon \quad (3.108)$$

Da *Favre*-gemittelte Werte verwendet werden, erfolgt die Mittelwertbildung durch eine Wichtung mit der Dichte. Die Produktionsrate  $P$  der turbulenten kinetischen Energie  $k$  ist durch Gleichung (3.109) definiert.

$$P = \rho_G u'_G u'_G \nabla \bar{u}_G - \frac{\mu_t}{\rho_G^2} \nabla \bar{\rho}_G \nabla \bar{p} \quad (3.109)$$

Die effektive Viskosität der Gasphase  $\mu_{\text{eff}}$  ergibt sich aus der Summe der molekularen Viskosität  $\mu_l$  und der turbulenten Viskosität  $\mu_t$ .

$$\mu_{\text{eff}} = \mu_l + \mu_t \quad \text{mit} \quad \mu_t = C_\mu \rho_G \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.110)$$

Die molekulare Viskosität  $\mu_l$  ist eine Stoffgröße. Die turbulente Viskosität  $\mu_t$  hängt von der turbulenten kinetischen Energie  $k$  ab. Die verwendeten Konstanten sind im Anhang A in Tabelle A.1 zusammengefaßt.

Alternativ zum  $k, \varepsilon$ -Modell kann in AIOLOS für die Gasphasenströmung ein Reynolds-spannungsmodell eingesetzt werden. Da bei diesem mehr Gleichung gelöst werden müssen als beim  $k, \varepsilon$ -Modell, erfordern sie jedoch einen höheren numerischen Aufwand [110, 111].

### 3.4.2 Homogene Chemie und Turbulenz

Um den Einfluss der Turbulenz auf die homogene chemische Reaktion zu beschreiben, wird das *eddy-dissipation-concept* (EDC) von MAGNUSSEN verwendet [49, 122, 123, 124]. Dabei wird das Volumen der Gasphase in zwei Zonen unterteilt, in einen Reaktionsraum, der sich im Inneren der Wirbel befindet (*fine-structures*) und ein umgebendes Fluid, in dem keine Reaktionen stattfinden (*surrounding-fluid*) [49, 124]. Der Bereich der *fine-structures* wird lokal wie ein vollständig durchmischter Rührkesselreaktor, ein *perfectly-stirred-reactor* (PSR), behandelt.

Transfer von Masse und Energie findet ausschließlich mit dem umgebenden Fluid statt. Die mittlere Verweilzeit  $\tau^*$  innerhalb eines Wirbels wird nach Gleichung (3.111) modelliert [123, 124]. Sie bestimmt, wieviele Zeit der chemischen Reaktion zur Verfügung steht. Alle Größen, die sich auf die *fine-structures* beziehen, sind mit Stern (\*) gekennzeichnet.

$$\tau^* = C_{\varepsilon,4} \cdot \sqrt{\frac{\nu_G}{\tilde{\varepsilon}}} \quad (3.111)$$

Die kinematische Viskosität des Gases  $\nu_G$  und die Dissipation der turbulenten kinetischen Energie  $\varepsilon$  dienen als Eingangsgrößen. Der Massenanteil  $\gamma^*$ , den die *fine-structures* im Volumen der Gasphase einnehmen, ist durch Gleichung (3.112) definiert. Dieser Anteil entspricht der Ausdehnung des PSR.

$$\gamma^* = \left[ C_{\varepsilon,5} \cdot \left( \frac{\nu_G \varepsilon}{k^2} \right)^{0,25} \right]^2 \quad (3.112)$$

Die Konstanten  $C_{\varepsilon,4}$  und  $C_{\varepsilon,5}$  sind im Anhang A in Tabelle A.1 angegeben. Die Reaktions- und Produktionsraten der einzelnen Gasphasenspezies  $i$  ergeben sich aus der bekannten Massenbilanz der PSR-Gleichung. Mit der Massenfraktion  $w_i$  und dem Molekulargewicht  $M_i$  nimmt sie beim EDC die Form (3.113) an.

$$M_i \cdot \omega_i^* = \Upsilon \cdot (w_i^* - \bar{w}_i) = \frac{\rho_G^*}{\tau^* \cdot (1 - \gamma^*)} \cdot (w_i^* - \bar{w}_i) \quad (3.113)$$

Dabei steht  $\omega_i^*$  für die mittlere chemische Produktionsrate in den *fine-structures*,  $w_i$  ist der Massenanteil der Spezies  $i$ , für die Massenkonzentration gilt  $Y_i = w_i/M_i$ . Weiter gilt die Abkürzung (3.114).

$$\Upsilon = \frac{\rho_G^*}{\tau^* (1 - \gamma^*)} \quad (3.114)$$

Es wird angenommen, dass alle Reaktionen, die mehr als ein Edukt enthalten, nur innerhalb der *fine-structures* stattfinden. Der Quellterm der Enthalpie der Gasphase wird aus den Produktionsraten  $\tilde{\omega}_i$  des gesamten Gasvolumens und den Bildungsenthalpien  $H_{B,i}$  der Spezies berechnet.

$$\Delta H = - \sum_{i=1}^N \tilde{\omega}_i \cdot H_{B,i} \quad \text{mit} \quad \tilde{\omega}_i = \gamma^* \frac{\bar{\rho}_G}{\rho_G^*} \tilde{\omega}_i \quad (3.115)$$

Die Bildungsenthalpien  $H_{B,i}$  der Gasphasenspezies  $i$  sind über Polynomansätze tabelliert und können, z.B. den IUPAC-Tabellen entnommen werden [98].

## 3.5 Homogene chemische Reaktionsmechanismen

Das Fortschreiten der homogenen Reaktionen in Abhängigkeit von der Temperatur  $T_G$  wird über Arrhenius-Ansätze beschrieben, mit denen die Reaktionskinetik und somit die Produktionsraten der Spezies bestimmt werden [122, 184].

$$\omega_i^* = \frac{dm_i^*}{dt} = -A T^b \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \prod_{j=1}^N \left[\frac{m_j^*}{M_j}\right]^p \quad (3.116)$$

Über Gleichung (3.116) werden die Raten in den fine-structures berechnet.  $A$  steht für den Frequenzfaktor der homogenen Reaktion,  $E$  ist die Aktivierungsenergie. Die Temperatur geht mit der Ordnung  $b$  ein.

Eine sehr genau Beschreibung homogener Gasphasenreaktionen erfolgt über *detaillierte Reaktionsmechanismen*. Diese enthalten teilweise über 100 Spezies und bis zu 1000 Reaktionen. Sie liefern Lösungen der einzelnen Reaktionen für verschiedene Druck- und Temperaturbereiche. Dreidimensionale CFD-Rechnungen mit solchen Mechanismen sind nur bedingt sinnvoll, da hohe Rechenzeiten notwendig werden [17]. Mit großem rechentechnischem Aufwand können solche Mechanismen, z.B.: zur Validierung globaler Mechanismen, verwendet werden.

### 3.5.1 Detaillierte und reduzierte Reaktionsmechanismen

Detaillierte Reaktionsmechanismen werden verwendet, um globale Mechanismen für die Anforderungen im Feuerraum von Anlagen im technischen Maßstab zu validieren. Im Rahmen dieser Arbeit wird der GRI-Mech 3.0 Mechanismus<sup>13</sup> nach BOWMAN ET AL. verwendet [28]. Er wurde speziell für die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen und die Beschreibung der Stickstoffoxidbildung optimiert.

**Literaturübersicht** Bekannte detaillierte Reaktionsmechanismen werden beispielsweise von BOWMAN[28], KONNOV[103] oder WARNATZ[217] aus einzelnen Reaktionsgleichungen zusammengestellt. Durch CHEN, PETERS und ROGG werden Methoden zur Reduktion von solchen Mechanismen weiterentwickelt [37]. Diese werden zur Beschreibung der

---

<sup>13</sup>Der GRI-Mech 3.0 enthält die aktuelle Kinetik (Stand 2000), die von der *University of California, Berkeley, Stanford University, der University of Texas in Austin (USA)* sowie von *SRI International* entwickelt wurde. Die Arbeiten erhalten finanzielle Unterstützung vom *Gas Research Institute (GRI)*, daher der Name.



Verbrennung von Kohlenwasserstoffen beispielsweise von SMOOKE[192] oder PETERS[150] eingesetzt. Der GRI-Mech 3.0 stellt eine Weiterentwicklung des GRI-Mech 2.1 dar, der von BRAUN-UNKHOFF und KOGER durch Vergleiche mit experimentellen Untersuchungen an einem Strömungsrohrreaktor getestet wurde [29, 78, 79, 188]. Er enthält Reaktionskonstanten sowie thermochemische Daten für 53 Spezies und besteht aus 325 elementaren chemischen Reaktionen. Die Randbedingungen liegen in einem Temperaturbereich von  $T = 1000$  K bis  $T = 2500$  K und einem Druckbereich von  $p = 1333$  Pa bis zu  $p = 10,1325$  bar, bei vorgemischten Systemen ist er für Luftzahlen von  $\lambda = 0,2$  bis  $\lambda = 10$  gültig [28].

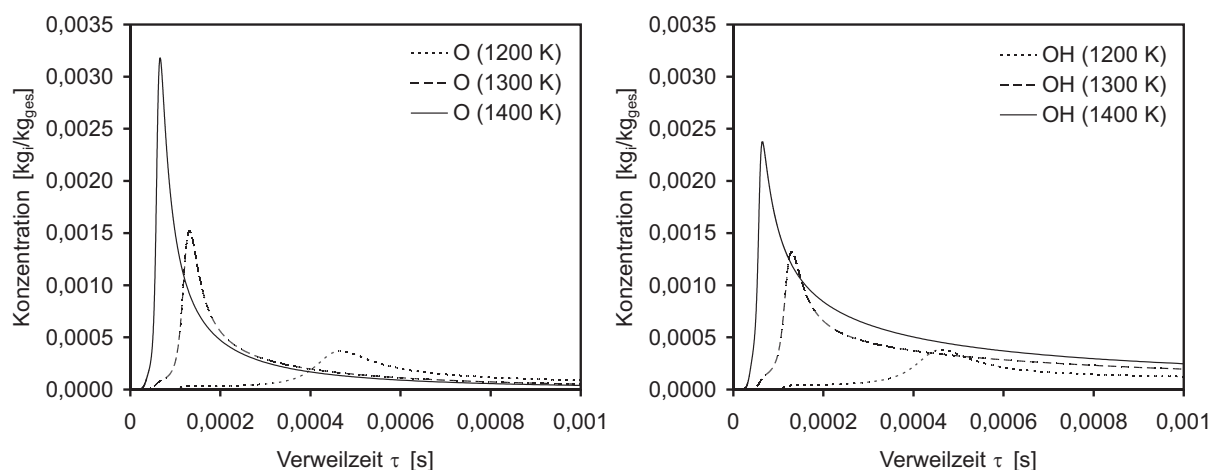
Die Reduktion solcher Mechanismen erfolgt nach vier Schritten. Zunächst wird dabei ein *Skelettmechanismus* ermittelt, der für bestimmte Randbedingungen wichtige Reaktionen und Spezies enthält. Danach werden *Quasi-Steady-State* Spezies (QSS) bestimmt. Dies sind Spezies  $i$  bei denen der relative Unterschied zwischen Produktionsrate  $\omega_i^+$  und Abbaurrate  $\omega_i^-$  kleiner als ein bestimmtes Kriterium ist [17, 37, 78, 216].

Auf Grundlage des Skelettmechanismus wird der globale Mechanismus ermittelt. Die Reaktionsraten des Systems können dann durch analytische Lösungen bestimmt werden. Die Auswertung wird mit dem Programm SENKIN auf Grundlage der CHEMKIN-Bibliothek durchgeführt [98, 121]. So können Zerfalls- und Bildungsvorgänge aller Mechanismen bei konstanter Temperatur über der Verweilzeit ermittelt werden. Die Rückreaktionsraten werden bei CHEMKIN auf Grundlage der Reaktionsraten und der thermodynamischen Daten berechnet.

Jede globale Reaktion beschreibt die Kombination einer Vielzahl von Reaktionen zwischen Radikalen und Hauptspezies. Die globale Oxidationsreaktion von  $\text{CH}_4$  besteht beispielsweise aus Reaktionen von atomarem Wasserstoff- ( $\cdot\text{H}$ ), Sauerstoff- ( $\cdot\text{O}$ ) und Hydroxidradikalen ( $\cdot\text{OH}$ ). In Abbildung 3.14 sind die Massenanteile  $Y_i$  in  $[\text{kg}_i/\text{kg}_{\text{ges}}]$  der Radikale  $\cdot\text{O}$  und  $\cdot\text{OH}$  bei verschiedenen Temperaturen ( $T_G = 1200$  K, 1300 K und 1400 K) unter Verwendung des GRI-Mech 3.0 dargestellt.

Das vorgegebene Gasgemisch besteht aus den Spezies  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$  und Luft. Die entsprechenden Konzentrationen sind auf Seite 69 angegeben. Es herrschen vorgemischte Verhältnisse mit einer Luftzahl von  $\lambda = 1,15$ . Die Radikalkonzentrationen sind hier zu Beginn auf den Wert  $Y_{\text{OH},\text{O},\text{H}} = 0 \text{ kg}_i/\text{kg}_{\text{ges}}$  gesetzt. Die Konzentrationen zeigen bei höheren Temperaturen einen deutlich stärkeren Anstieg. Alle Verbrennungsreaktionen laufen schneller ab.

Die Radikale werden während der Reaktion gebildet und fungieren als Transporter zwischen Edukten und Produkten. Globale Reaktionsmechanismen beinhalten keine Radikale und beschreiben die Vorgänge als ob immer maximale Radikalkonzentrationen vorlägen. Im realen Feuerraum ist dies fast immer der Fall, da durch Feuchtigkeit ( $\text{H}_2\text{O}$ ) im Rauch-



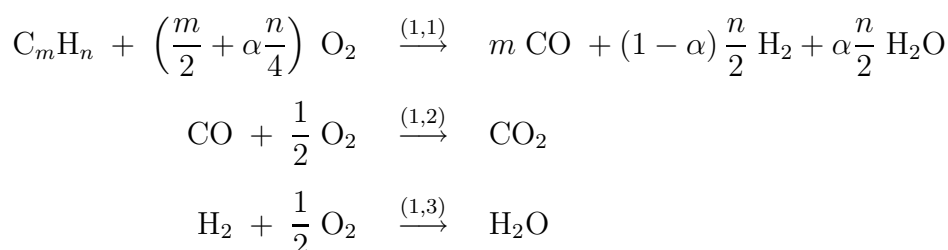
**Abbildung 3.14:** Massenanteile der Radikale  $\cdot\text{O}$  und  $\cdot\text{OH}$  bei Berechnung von Methan-Oxidation mit dem GRI-Mech 3.0

gas  $\cdot\text{OH}$ -Radikale gebildet werden und die Verbrennungsreaktion begünstigen.

Ein gegenteiliger Effekt entsteht durch Radikale der Halogene Fluor ( $\cdot\text{F}$ ), Chlor ( $\cdot\text{Cl}$ ), Brom ( $\cdot\text{Br}$ ) und Iod ( $\cdot\text{I}$ ). Sie haben einen löschenden Effekt, da sie  $\cdot\text{OH}$ -Radikale binden und somit die Reaktion der Kohlenwasserstoffe behindern. Wenn im Brennstoff viele Salze oder halogenhaltige Stoffe enthalten sind (z.B.: PVC, Elektronikschrott) kann es zur Unterdrückung der Verbrennungsreaktionen in der Gasphase kommen. Dieser Effekt wird im Rahmen der Arbeit jedoch nicht berücksichtigt.

### 3.5.2 Globale Reaktionsmechanismen

Der große Vorteil der globalen Reaktionsmechanismen liegt in der geringen Rechenzeit, die für ihre numerische Integration benötigt wird. Außerdem sind analytische oder halbanalytische Lösungen möglich. Die Spezies sind zusammengefasste (*lumping*) Komponenten [30, 63]. Die Folgereaktionen der Produkte aus den heterogenen Reaktionen können somit über ein System aus drei Reaktionsgleichungen beschrieben werden.

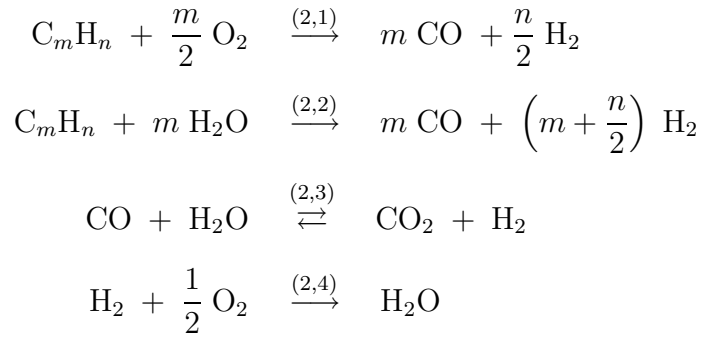


Der Mechanismus geht auf Arbeiten von HAUTMAN[81] zurück und ist ähnlich dem von BRINK[30] vorgestellten. Er wurde für PSR-Rechnungen mit dem EDC optimiert (siehe Abschnitt 3.4.2). Über die Indizes  $m$  und  $n$  kann er auf beliebige aliphatische Kohlenwasserstoffe eingestellt werden. Alle Reaktionen sind irreversibel. Die Reaktionskonstanten

sind im Anhang A in Tabelle A.3 aufgelistet.

Die Reaktionskinetik von HAUTMAN neigt zu einer Unterbewertung der CO Konzentration, wobei H<sub>2</sub>O überschätzt wird [172, 175]. Eine Verbesserung bei der Modellierung der Zwischenprodukte CO und H<sub>2</sub> unter Annahme des Wassergasgleichgewichts wird auf Grundlage des Vergleichs mit dem GRI-Mech 3.0 gemacht. Bei kleinen Luftzahlen werden durch eine Gleichgewichtsbetrachtung die Konzentrationen von H<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>O eingefroren, nur die Oxidation von CO ist dann aktiv [84]. Der Parameter  $\alpha$  wird unter dieser Annahme aus der Wassergaskonstante berechnet. Das Vorgehen ist ausführlich bei MAGEL[122] beschrieben.

Eine Verbesserung bietet auch der Mechanismus von JONES und LINDSTEDT[93]. Bei ihm werden die Reaktionen über einen 4-Schritt Mechanismus beschrieben. Er gilt auch bei hohen Luftzahlen  $\lambda$ , wenn wenig Radikale vorliegen, da der Abbau der Kohlenwasserstoffe über zwei Reaktionsgleichungen beschrieben wird. Die erste gilt bei großen  $\lambda$ -Werten, die zweite bei kleinen. Ein dritter Reaktionsschritt steht für die Wassergasreaktion und ein vierter für die Oxidation von H<sub>2</sub>.



Bei der Wassergasreaktion sind im Gleichgewicht die Vorwärts- und die Rückwärtsrate gleich und können über die Gleichgewichtskonstante  $K_3^{eq}$  bestimmt werden. Numerisch problematisch stellt sich dar, dass die Dissoziation von H<sub>2</sub>O unabhängig von der H<sub>2</sub>O-Konzentration ist. Für die Kinetik gilt:

$$k_{2,1} = A_{2,1} T^{b_{2,1}} \exp(E_{2,1}/RT) Y_{O_2}^{*0.25} Y_{CH_4}^{*0.50} \quad (3.117)$$

$$k_{2,2} = A_{2,2} T^{b_{2,2}} \exp(E_{2,2}/RT) \quad (3.118)$$

$$k_{2,3f} = A_{2,3f} T^{b_{2,3}} \exp(E_{2,3f}/RT) \quad (3.119)$$

$$k_{2,3r} = A_{2,3r} T^{b_{2,3}} \exp(E_{2,3r}/RT) K_3^{eq-1.0} \quad (3.120)$$

$$k_{2,4} = A_{2,4} T^{b_{2,4}} \exp(E_{2,4}/RT) \quad (3.121)$$

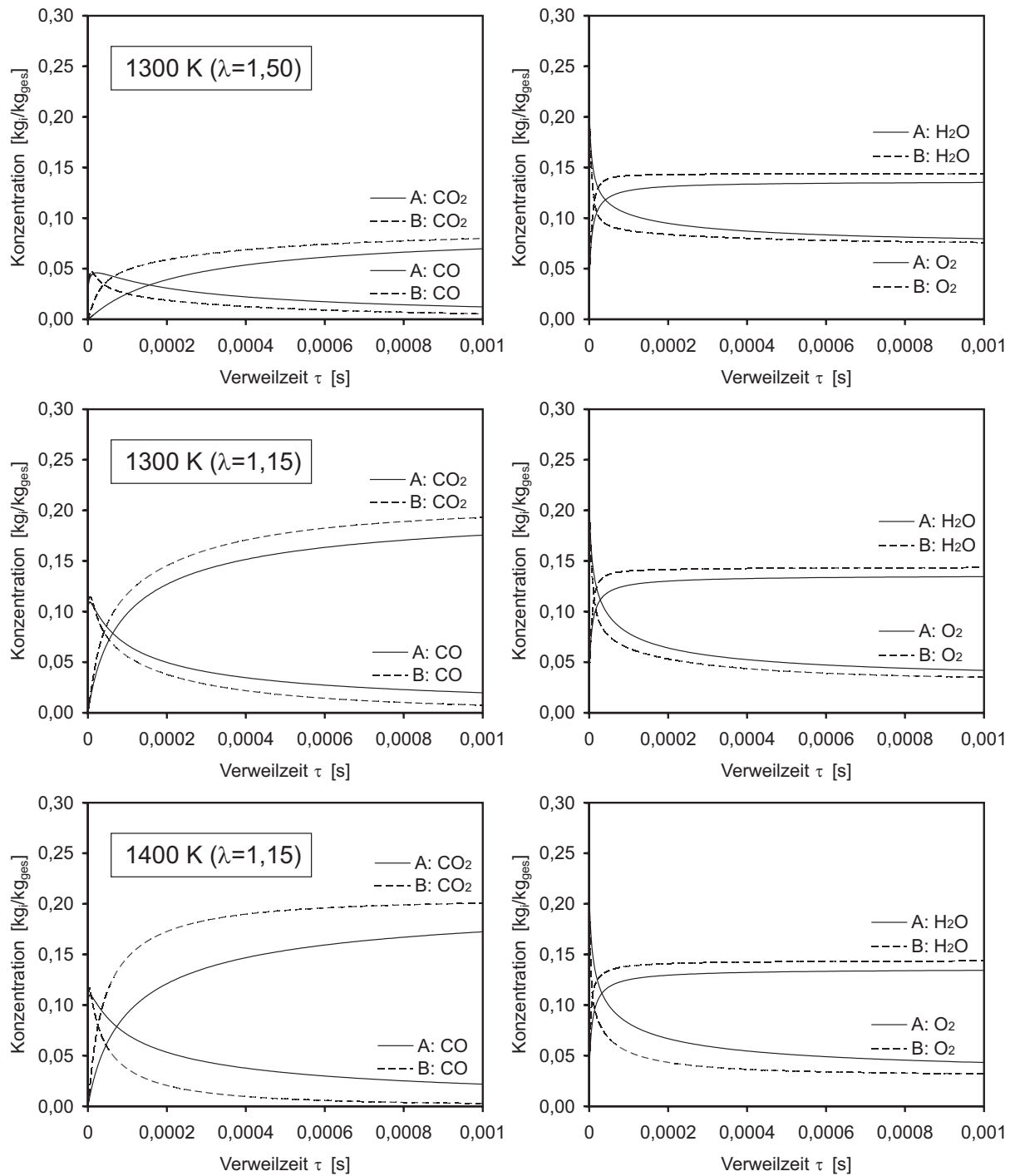
Die Rückreaktionsrate im Mechanismus von JONES und LINDSTEDT wird aus der Gleichgewichtskonstante  $K_3^{eq} = e^{(-1,89+2094/T_G^*)}$  berechnet, die sich aus der freien Gibbs'schen Enthalpie im Standardzustand auf Basis der IUPAC-Tabellen ergibt [98].

In Abbildung 3.15 sind die Ergebnisse des Vergleichs zwischen der globalen Reaktionskinetik nach HAUTMAN (A) und der detaillierten Reaktionskinetik GRI-Mech 3.0 (B) dargestellt. Es wird ein Temperatur- bzw. Verweilzeitbereich gewählt, wie er für die Wirbel in der Hauptverbrennungszone einer MVA typisch ist. Durch die Zugabe von  $\text{CH}_4$  und  $\text{H}_2$  werden unterschiedliche Luftzahlen  $\lambda$  eingestellt und die resultierenden Massenanteile  $Y_i$  an Kohlenmonoxid ( $\text{CO}$ ), Kohlendioxid ( $\text{CO}_2$ ), Wasser ( $\text{H}_2\text{O}$ ) und Sauerstoff ( $\text{O}_2$ ) miteinander verglichen.

Für den Vergleich werden die Radikalkonzentrationen bei den Berechnungen mit detailliertem Mechanismus auf die Maximalwerte gesetzt. Dadurch wird eine Verzögerung der Reaktionen vermieden. Weil die maximalen Konzentrationen der Radikale, relativ zu den Hauptspezies, niedrig sind, bleibt die Vergleichbarkeit mit den globalen Mechanismen bestehen.

Bei hohen Werten von  $\lambda = 1,5$  ist die Übereinstimmung besonders gut. Es zeigt sich aber, dass der detaillierte Mechanismus immer um ca. 0,1 ms schneller reagiert als die globale Kinetik. Da die typischen Verweilzeiten in der Hauptverbrennungszone einer MVA größer als  $\tau = 0,1 - 0,6$  s sind, kann der dadurch entstehende Fehler vernachlässigt werden.

Bei unterschiedlichen Autoren wird auf die Problematik einer Unterbewertung der CO-Konzentration durch globale Kinetiken hingewiesen [30, 122], dies kann anhand der durchgeführten Untersuchungen jedoch nicht bestätigt werden.



**Abbildung 3.15:** Vergleich der Massenkonzentrationen  $Y_i$  [kg<sub>i</sub>/kg<sub>ges</sub>] von Kohlenmonoxid (CO), Kohlendioxid (CO<sub>2</sub>), Wasser (H<sub>2</sub>O) und Sauerstoff (O<sub>2</sub>) bei globaler (A) und detaillierter Reaktionskinetik (B) (*oben*:  $T = 1300$  K,  $\lambda = 1,5$ ; *Mitte*:  $T = 1300$  K,  $\lambda = 1,15$ ; *unten*:  $T = 1400$  K,  $\lambda = 1,15$ )

### 3.5.3 Linearisierung chemischer Reaktionsgleichungen

Die Reaktionsmechanismen decken einen großen Bereich an Zeitskalen ab. Sie können in Gleichungssystemen resultieren, die als *stief* bezeichnet werden. Solche System sind nicht-linearer, was dazu führen kann, dass Lösungsmethoden wie etwa die SIMPLE Methode nicht konvergieren.

Zur Lösung dieses Problems wird eine Linearisierung der chemischen Gleichungssysteme durchgeführt (siehe auch Anhang E). Somit können für Strömung und Chemie gleiche numerische Löser verwendet werden.

Für Reaktionsmechanismen, die entsprechend Abschnitt 3.4.2 implementiert werden, wird der Quellterm der chemischen Reaktionsrate der Spezies  $i$  in einen positiven Anteil  $(\omega_i^*)^\oplus$  und einen negativen Anteil  $(\omega_i^*)^\ominus$  aufgeteilt. Dieses Vorgehen führt nach PATANKAR[143] zu einer Stabilisierung des Gleichungssystems.

$$\Upsilon \cdot (w_i^* - \bar{w}_i) = M_i \cdot \omega_i^* = M_i \cdot ((\omega_i^*)^\oplus + (\omega_i^*)^\ominus) \quad (3.122)$$

Die größeren chemischen Gleichungssysteme, welche nicht mehr analytisch linearisiert werden können, müssen separat mit einem Löser, wie ihn etwa CHEMKIN auf Basis von DASSL[98] bereitstellt, getestet und mit den globalen Kinetiken verglichen werden.

# Kapitel 4

## Brennstoffcharakterisierung

Bei der Brennstoffcharakterisierung wird das Abbrandverhalten der Partikel in der Schüttung ermittelt. Parameter wie Brennstofffeuchte, Inertgehalt, Partikelgröße sowie Primärluftmenge, -verteilung und -temperatur werden variiert. Wichtige Ergebnisse dieser Untersuchung sind Zünd- und Verbrennungsgeschwindigkeit sowie Gutbetttemperatur und Gaskonzentrationen im Bett.

### 4.1 Untersuchung des Abbrandverhaltens

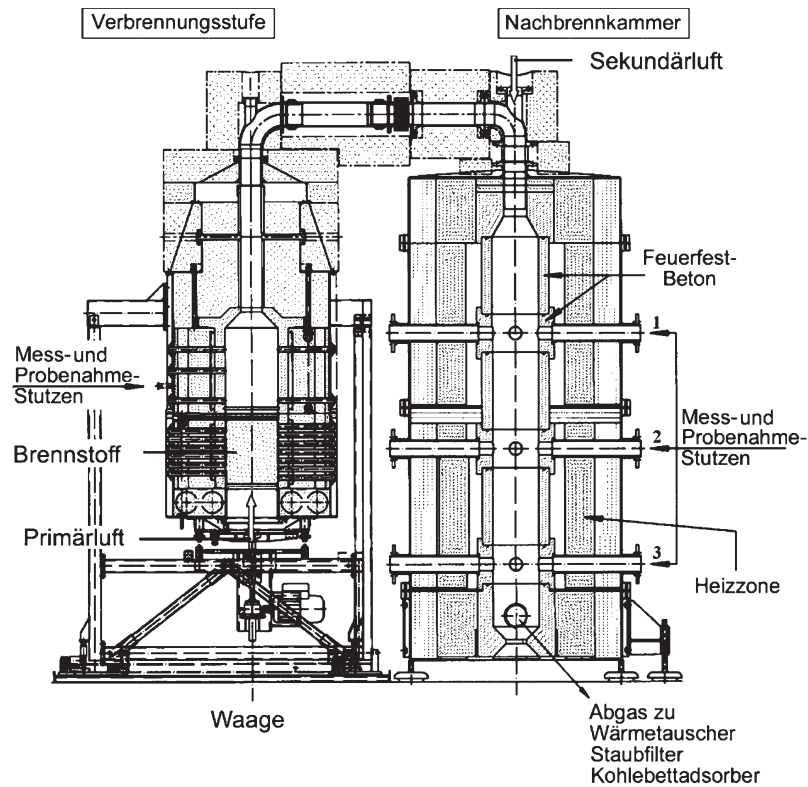
Zur Untersuchung des Abbrandverhaltens der Brennstoffe sind im Rahmen der Arbeit Experimente an der Versuchsanlage KLEAA des Instituts für Technische Chemie - Bereich Thermische Abfallbehandlung (ITC-TAB) (Forschungszentrum Karlsruhe GmbH) durchgeführt worden.

Die Anlage stellt einen *batch*-Prozess dar. Er ist nicht kontinuierlich. Zu Beginn wird eine Charge eingefüllt. Der Versuch dauert dann bis zu der vollständigen Umsetzung des Brennstoffs. Deshalb wird dieser Reaktortyp auch als *hot-pot* bezeichnet.

**Literaturübersicht** ROGERS[168] führt Untersuchungen mit geschredderten Abfällen und einem Holz/Inertstoffgemisch durch. Dabei ermittelt er die Temperatur- und Gaskonzentrationsverteilung im Müllbett. Außerdem errechnet er Zündgeschwindigkeiten und Abbrandraten. Grundlegende Arbeiten zur Modellierung dieses Reaktortyps werden auch von LOHF[118] vorgestellt. SCHUHMACHER ET AL.[186] stellen die hier verwendete Versuchsanlage KLEAA erstmals vor und nutzen als Modellbrennstoff ein Gemisch aus Holz und Inertstoff.

### 4.1.1 Versuchsanlage

KLEAA ist ein Akronym für *Karlsruher Laboranlage zur Ermittlung des Abbrandverhaltens von Abfall*. Die Verbrennungsluft wird von unten durch einen Rost in das Brennstoffbett eingeblasen. Während des Versuchs wird das Bett nicht bewegt. Idealerweise finden ausschließlich die Prozessschritte Trocknung, Pyrolyse, Vergasung und Koksausbrand zeitlich nacheinander statt [173]. In Abbildung 4.1 ist KLEAA im Schnitt dargestellt.



**Abbildung 4.1:** Karlsruher Laboranlage zur Ermittlung des Abbrandverhaltens [22, 173]

Die Anlage besteht aus einer ersten Brennkammer mit Festbett und beheiztem Feuerraum, sowie einer Nachbrennkammer. Eine Rauchgasreinigung ist nachgeschaltet. Die erste Brennkammer hat ein verschiebbar gelagertes Unterteil. Hier befindet sich die Brennstoffschüttung. Während der Versuche wird es luftdicht mit dem Oberteil verbunden. Das gesamte Gewicht der Brennkammer lastet dann auf drei parallel geschalteten Wägezellen. Dadurch kann der Massenverlust während der Verbrennungsexperimente gemessen werden.

Der Brennstoff wird bei Umgebungstemperatur eingefüllt. Der Feuerraum der ersten Brennkammer ist elektrisch auf eine maximale Wandtemperatur von ca. 1400 K beheizbar. Da die Wände im unteren Teil der Anlage nicht beheizt sind, wird der Brennstoff nur durch die emittierte Strahlung gezündet. Bei den für diese Arbeit durchgeführten



Versuchen wird die Feuerraumwand konstant auf 1170 K beheizt. Die Höhe des beheizten Feuerraums beträgt 400 mm. Ober- und Unterteil haben einen Innendurchmesser von 250 mm.

Die KLEAA wird im Unterwindbetrieb gefahren. Primärluft durchströmt von unten den auf einer Sintermetallplatte liegenden Brennstoff. Zur gezielten Erzeugung einer inhomogenen Durchströmung kann die Sintermetallplatte abgedeckt werden [22]. Auf eine Vorwärmung der Primärluft wird bei den dargestellten Versuchen verzichtet. Der Gasausbrand findet im Feuerraum oberhalb des Gutbetts und in der Nachbrennkammer statt.

### 4.1.2 Messtechnik

Im Rahmen der Diplomarbeit von BLECKWEHL ist ein zusätzlicher Messstrang zur Erfassung der Gaskonzentrationen direkt über dem Gutbett aufgebaut worden [22]. Dort werden Konzentrationen von  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  und  $C_{org.}$  erfasst. Die Daten der Konzentrations-, Temperatur- und Druckmessung werden jeweils in einem Zeitintervall von 5 s mit einer Datenerfassung protokolliert. Sauerstoff wird mit einem paramagnetischen Verfahren gemessen. Zur kontinuierlichen Erfassung der organischen Substanzen im Abgas wird der Flammen-Ionisations-Detektor (FID) verwendet. Dieses Messprinzip beruht auf der Ionisation von Kohlenwasserstoffmolekülen in einer Wasserstoffflamme und anschließender Absaugung freier Ladungsträger durch ein elektrisches Feld. Die übrigen Komponenten werden mittels eines Fourier-Transformierten-Infrarot Spektrometers (FTIR) gemessen.

Im Inneren des Brennstofftopfes befinden sich 13 CrNi-Ni Mantelthermoelemente, mit denen die Temperatur gemessen und somit der Verlauf der Verbrennungsfront untersucht werden kann. Für die Messstellen T1 bis T13 im Festbett (siehe Abbildung 4.3), im Feuerraum und zwischen Brennkammer und Nachbrennkammer werden Thermoelemente ohne keramisches Schutzrohr verwendet. Dies ermöglicht eine schnelle Temperaturmessung. Die Messung des Rauchgasvolumenstroms erfolgt mittels einer hinter der Nachbrennkammer installierten Venturidüse. Zur Kontrolle wird der Massendurchfluss der zugegebenen Primär- und Sekundärluft gemessen.

### 4.1.3 Brennstoff

Der Brennstoff Abfall wird durch Holz dargestellt. Dieses Vorgehen wird von unterschiedlichen Autoren angewandt [12, 71, 118, 168, 186]. Der Brennstoff wird in den auf der linken Seite von Abbildung 4.1 dargestellten Topf gegeben. Dabei ergibt sich eine maximale Festbetthöhe von 250 mm. Die Konzentrationsmessung erfolgt ca. 20 mm darüber. Die Partikel haben eine maximale Größe von  $60 \times 30 \times 15$  mm. Ausgangsmaterial für

diese Holzschnitzel sind die Nadelhölzer Tanne, Fichte und Kiefer. Die Größenverteilung kann zwischen den unterschiedlichen Anlieferungschargen variieren. Das Verhältnis von Fein- zu Grobanteil ist ebenfalls chargenabhängig [22].

Je nach Einstellung der gewünschten Brennstoffeigenschaften und Verbrennungsbedingungen wird eine Mischung unterschiedlicher Feuchte und verschiedener Mengen an Inertmaterial eingesetzt. Die Menge an trockenem Holz wird dabei konstant gehalten. Ausgangspunkt für die Gemischberechnungen ist der Heizwert des trockenen Holzes mit  $H_u = 19,2 \text{ MJ kg}^{-1}$ . Der Wassergehalt und das Inertmaterial Blähschiefer wird so variiert, dass die Brennstoffmischung einen Heizwert von  $H_u = 11 \text{ MJ kg}^{-1}$  hat.

Bei dem Blähschiefer handelt es sich um *ulopor* ( $\hat{\rho}_P = 540 \pm 25 \text{ kg m}^{-3}$ ;  $\rho_P \simeq 1,25 \text{ g cm}^{-3}$ ;  $\lambda_P = 0,16 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ). Er hat einen Schmelzpunkt von  $1380 \text{ }^\circ\text{C}$ . Die einzelnen Partikel besitzen eine innere Porosität von  $54,2 \text{ Vol.}\%$ , eine Haufwerkporosität von  $56,8 \text{ Vol.}\%$  und eine Gesamtporosität von  $80,2 \text{ Vol.}\%$  [22]. Auf Basis der durchgeführten Abbrandexperimente wird davon ausgegangen, dass der Blähschiefer sich vollständig inert verhält und nicht aufschmilzt.

## 4.2 Experimentelle Ergebnisse

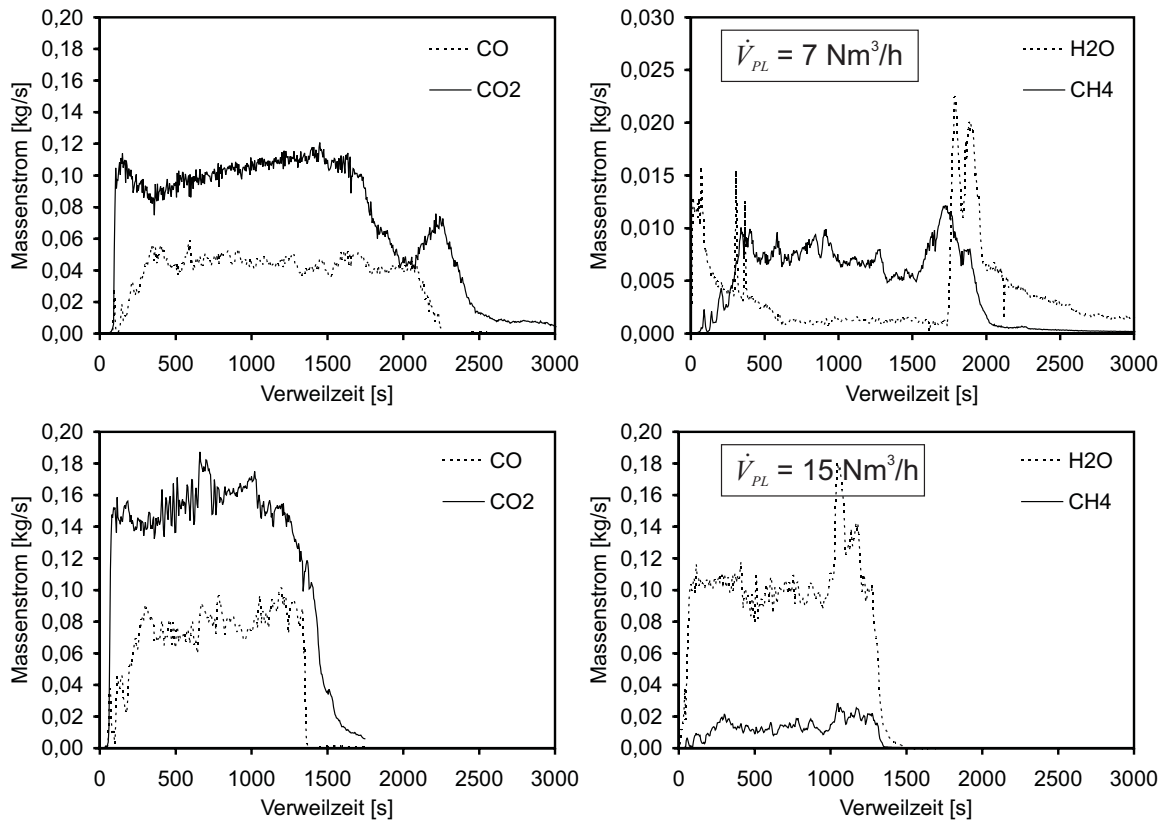
Zur Validierung des Modells sind ca. 40 verschiedene Messreihen durchgeführt worden. Die dabei variierten Randbedingungen sind Primärluftstrom  $\dot{V}_{PL}$  ( $T_{PL}=200 \text{ }^\circ\text{C}$ ) und Zusammensetzung des Brennstoffs. Zur Bestimmung der Massenabnahme wird die Waage eingesetzt. Zusätzlich wird die Massenbilanz über Konzentrationsmessungen geschlossen. Die versuchsstechnisch maximal mögliche Primärluftmenge liegt bei  $18 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$ .

Im Gegensatz zu einer Regulierung der Abfallmenge wirkt sich eine Änderung der Primärluft direkt auf den Verbrennungsprozess aus. Sie dient deshalb als eine Hauptstellgröße der Feuerleistungsregelung in Abfallverbrennungsanlagen.

Um den Einfluss unterschiedlicher Primärluftmengen auf den Verbrennungsvorgang zu untersuchen, werden ausgewählte Versuche abgebildet (Vers.-13:  $\dot{V}_{PL} = 7 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$ , Vers.-36:  $\dot{V}_{PL} = 10 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$ , Vers.-35:  $\dot{V}_{PL} = 15 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$  und Vers.-12:  $\dot{V}_{PL} = 18 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$ ).

Die in Abbildung 4.2 gezeigten Messungen sind direkt oberhalb des Brennstoffbettes aufgenommen worden. Gezeigt werden typische Produktspezies der heterogenen Verbrennung, wobei die Konzentrationsmessungen immer einen ähnlichen Verlauf zeigen. Im Anhang B in Tabelle B.1 werden alle Parameter der Messungen dargestellt, die hier beispielhaft herangezogen werden. Eine umfangreichere Darstellung mit weiteren Versuchen ist bei BLECKWEHL ET AL.[22, 173] enthalten.

Zu Beginn der Versuchsführung steigen die Konzentrationen von  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  und  $\text{CH}_4$



**Abbildung 4.2:** Spezies oberhalb des Festbetts (*oben:* Vers.-13; *unten:* Vers.-35) [173]

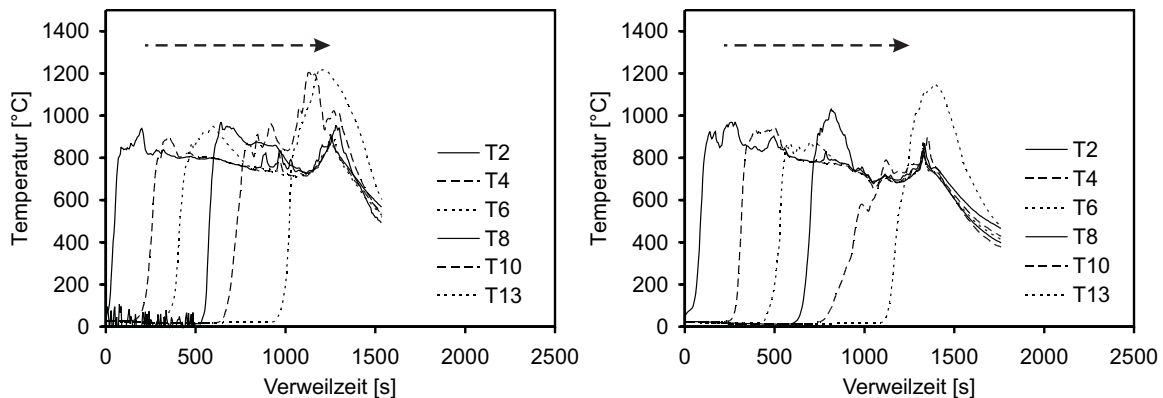
auf nahezu konstante Werte an. Gegen Ende, wenn der Brennstoff umgesetzt ist, fallen diese wieder ab. Bei manchen Messungen wird vorher noch einmal ein kurzes Maximum beobachtet, da der letzte Rest Brennstoff im Topf schneller umgesetzt wird. Weil bei hohen Primärluftströmen auch die Oxidationsreaktionen schnell sind, nimmt dann die Konzentration des Produktes Wassers ebenfalls stark zu.

Nach ca. 50 % der Versuchszeit steigen sowohl die Werte an CH<sub>4</sub> und CO als auch H<sub>2</sub>O sichtlich an. Die CO<sub>2</sub>-Konzentrationen steigen zunächst auch an, nehmen aber aufgrund des Sauerstoffmangels nach 60 % der Versuchszeit ab. Grund hierfür ist, dass während der Versuche die O<sub>2</sub>-Konzentration vollständig auf Null absinkt. Am Ende steigt sie wieder auf den Gehalt in der Primärluft an. Der gesamte Luftsauerstoff wird also bei der Verbrennung verbraucht. Bei diesem geringen Sauerstoffangebot läuft der Schritt der Oxidation zu CO bevorzugt ab, was zu der Abnahme der CO<sub>2</sub>-Werte führt.

Bei geringem Primärluftvolumenstrom liegen nach dem Austreiben der flüchtigen Bestandteile erhöhte Mengen an Pyrolysekoks vor. Mit der Durchzündung des Brennstoffs steigt deshalb gegen Ende des Versuches, infolge der verbesserten Bedingungen für den Kohlenstoffabbau, der CO<sub>2</sub>-Peak weiter an.

## 4.2.1 Temperaturverlauf

Auf der linken und rechten Seite von Abbildung 4.3 sind die gemessenen Temperaturprofile für die Versuche Vers.-06 und Vers.-35 gegenübergestellt. Die Temperaturmaxima nehmen infolge der exothermen Verbrennungsprozesse zu. Sie zeigen damit das zeitliche Fortschreiten der heißen Verbrennungsfront in der Schüttung an. Es wird deutlich, dass die Verbrennungsfront von oben nach unten durch den Topf wandert. Da konvektive Trocknung infolge der Primärluftströmung im Vergleich zur Trocknung durch die Wärmeeinstrahlung nur einen geringen Anteil ausmacht, wird der Brennstoff von oben getrocknet und entzündet.



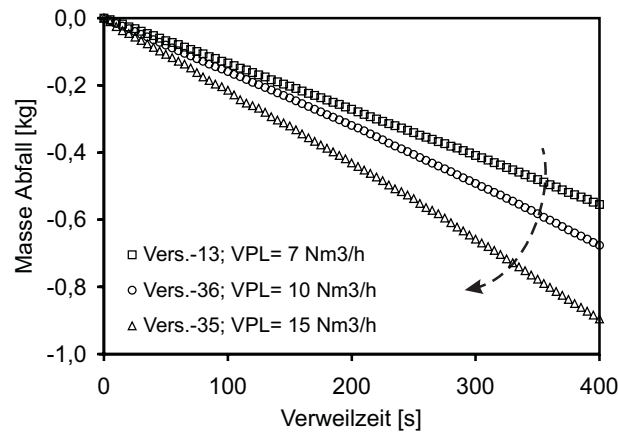
**Abbildung 4.3:** Temperaturverlauf im Festbett bei Vers.-06 (*linke Seite*;  $X_F = 20$  Mass.-%) und Vers.-35 (*rechte Seite*;  $X_F = 30$  Mass.-%) unter konstanter Zugabe von Primärluft ( $\dot{V}_{PL} = 15 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$ ) [173]

Die Temperaturen der Thermoelemente T2-T10 sinken nach Durchlaufen der jeweiligen Maxima auf ca. 700-800 °C ab. Beim absoluten Maximum steigen sie nur auf ca. 900 °C an und zum Versuchsende fallen danach alle Temperaturen auf unter 500 °C ab. In der Nähe des Rostbodens sind die Temperaturmaxima mit Werten von ca. 1150 °C am höchsten. Die kontinuierlich zugeführte Primärluft belädt sich solange mit Wasser, bis der Sättigungsdampfdruck erreicht ist. Der Brennstoff wird dadurch zunehmend konvektiv getrocknet. Im Bereich der Sintermetallplatte ist die Trocknung im Vergleich zu den darüber liegenden Schichten am weitesten fortgeschritten. Der freigesetzte Gasmassenstrom ist maximal und die freigesetzte Wärme am größten.

Durch die Vermischung der Reaktionsprodukte mit der Primärluft wird der Transport von Sauerstoff an die Partikeloberfläche verbessert und der heterogene Abbrand beschleunigt. Je weniger Brennstoffmasse  $m_{fB}$  sich im Brennstofftopf befindet, desto schneller sind die Positionen der unteren Thermoelemente erreicht. Durch die thermische Zersetzung der obersten Gutbettschicht sind die nachfolgenden Schichten der Feuerraumstrahlung ausgesetzt und die einzelnen Verbrennungsschritte laufen dort nacheinander ab.

## 4.2.2 Massenabnahme

Zur Überprüfung und Validierung des Verbrennungsmodells aus Abschnitt 3.3, insbesondere von Pyrolyse und Koksabbrand, werden die in Abbildung 4.2 dargestellten Konzentrationsverläufe in absolute Massen umgerechnet und kumuliert (4.4).



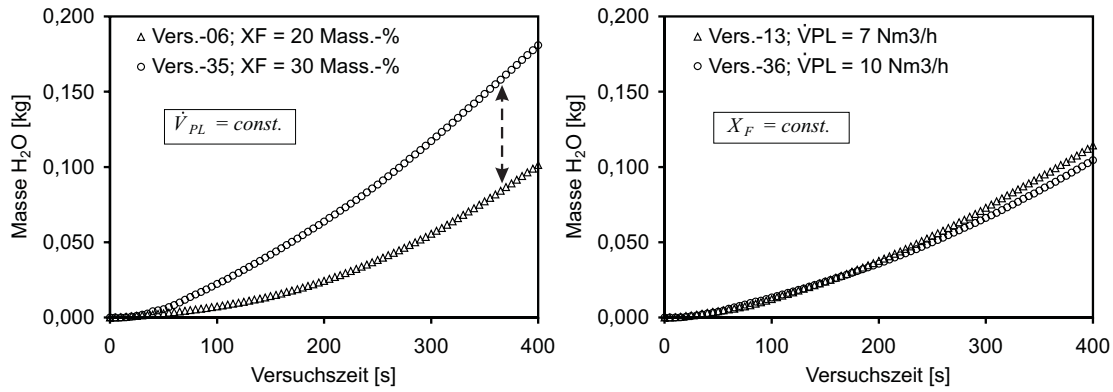
**Abbildung 4.4:** Freigesetzte Gesamtmasse bei verschiedenen Primärluftmengen

Diese Darstellung wird im Weiteren als Summenkurve bezeichnet. Die Vorstellung dahinter ist, dass die gesamte freigesetzte Gasmenge in einem Raum gesammelt wird. Die Menge der darin enthaltenen Komponenten kann sehr gut mit den Vorhersagen des kinetischen Modells verglichen werden, da hierdurch auch quantitative Aussagen möglich sind. Wie in Abbildung 4.4 zu sehen ist, nimmt die Masse des Brennstoffs  $m_{fB}$  bei den Versuchen Vers.-13, Vers.-36 und Vers.-35 jeweils schneller ab. Die Geschwindigkeit der Massenabnahme richtet sich dabei nach der Menge der Primärluft  $\dot{V}_{PL}$ . Wie im Abschnitt 4.2.4 noch genauer gezeigt wird, kann die Beschleunigung der Massenabnahme bei Steigerung der Primärluftmenge über eine Erhöhung des Sauerstoffpartialdrucks  $p_{O_2,\infty}$  und die Verringerung der Grenzschichtdicke  $\sigma_{GS}$  erklärt werden.

## 4.2.3 Trocknung

Da eine Zündung des Brennstoffs erst nach dem stark endothermen Trocknungsvorgang möglich ist, wird der Einfluss des Wassergehalts auf den gesamten Verbrennungsprozess näher untersucht. Hierzu werden Versuche mit einer Variation des Wassergehalts  $X_F$  von 7 bis ca. 34 Gew.-% miteinander verglichen (Vers.-08;  $X_F = 7\%$ , Vers.-06;  $X_F = 20\%$ , Vers.-35;  $X_F = 30\%$  und Vers.-37;  $X_F = 33,71\%$ ).

Mit sinkendem Wassergehalt nimmt der Energiebedarf für den Trocknungsvorgang ab. Damit können sämtliche Teilschritte der Verbrennung früher beginnen, da die einzelnen Prozesse, wie bereits in Abschnitt 4.2.1 gezeigt, gleichzeitig in unterschiedlichen Schichten



**Abbildung 4.5:** Freigesetzte Wassermenge bei verschiedenen Ausgangsfeuchten  $X_F$  (linke Seite) und Primärluftmengen  $\dot{V}_{PL}$  (rechte Seite)

ablaufen.

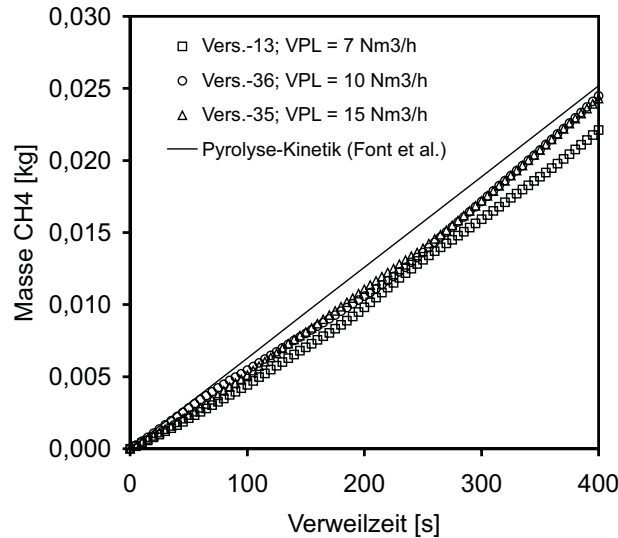
Wenn der Wassergehalt geringer ist muss weniger Energie für die Trocknung bereitgestellt werden. Das Gutbett reagiert dann schneller ab, wodurch sich die Reaktionsfrontgeschwindigkeit und der Massenstrom der anderen Verbrennungsprodukte erhöhen (siehe auch Abbildung 4.8). Gleichzeitig verringert sich die Versuchszeit. Dies führt dazu, dass bei konstanter Primärluftmenge im kürzeren Versuchszeitraum weniger Sauerstoff für den Abbrand verfügbar ist. Bei einer Holzfeuchte von 7 Gew.-% ist die Versuchszeit und  $\lambda$  jeweils um etwa 25 % geringer als bei einem Wassergehalt von 33,71 Gew.-%.

#### 4.2.4 Pyrolyse und Koksabbrand

Um das Modell für die Pyrolyse und Umsetzung des Restkokes aus Abschnitt 3.3 zu validieren, sowie verbrennungstechnische Aspekte zu charakterisieren, wird hier die Darstellung der Summenkurve gewählt. Das bedeutet, dass die freigesetzte Menge der Spezies zum Vergleich mit den Rechenergebnissen aufsummiert wird.

**Pyrolyse** In Abbildung 4.6 ist die freigesetzte Gesamtmenge an Methan ( $\text{CH}_4$ ) über der Verweilzeit im Vergleich mit der Rechnung abgebildet. Bei der Rechnung sind die gemessenen Temperaturprofile als Randbedingung für das kinetische Modell eingesetzt worden. Die Pyrolysekinetik wird auf Basis der kinetischen Parameter von FONT ET AL.[60] berechnet.

Zur Validierung sind in Abbildung 4.6 drei Versuche mit verschiedenen Volumenströmen an Primärluft ( $\dot{V}_{PL} = 7/10/15 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$ ) dargestellt. Die Gesamtmenge an Pyrolysegas ändert sich mit zunehmender Primärluftmenge nicht wesentlich. Auch das Modell zeigt keinerlei Sensitivität auf die Luftmenge, da der Pyrolysevorgang lediglich ein Edukt



**Abbildung 4.6:** Gesamtmenge Methan ( $\text{CH}_4$ ) bei verschiedenen Primärluftmengen

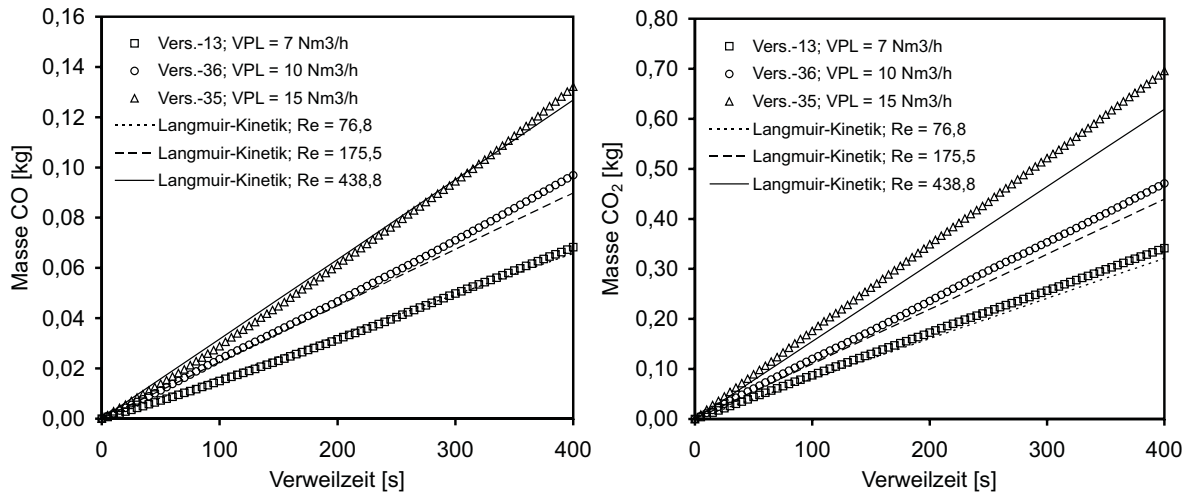
beinhaltet und damit als Reaktion 1. Ordnung ausschließlich von den herrschenden Temperaturen  $T_b$  abhängig ist.

Weil gute Übereinstimmungen zwischen Messung und Rechnung erreicht werden, wird die Pyrolyse im weiteren Verlauf der Arbeit auf Basis der kinetischen Parameter von FONT ET AL.[60] modelliert.

**Koksabbrand** Die freigesetzten Gesamt Mengen an Kohlenmonoxid ( $\text{CO}$ ) und Kohlendioxid ( $\text{CO}_2$ ) über der Verweilzeit werden in Abbildung 4.7 gezeigt. Es werden die gleichen Versuche zur Variation der Primärluftmenge wie bei der Pyrolyse dargestellt.

Die Messungen werden mit Rechnungen auf Basis der Adsorptions-Desorptions-Kinetik nach LANGMUIR[109] verglichen (siehe auch Abschnitt 3.3.4). Sowohl bei der entstehenden Gesamtmenge an Kohlenmonoxid ( $\text{CO}$ ) als auch beim Kohlendioxid ( $\text{CO}_2$ ) zeigt sich eine deutliche Separation. Je mehr Primärluft eingesetzt wird, desto schneller werden die Produktgase  $\text{CO}$  bzw.  $\text{CO}_2$  freigesetzt. Dieser Effekt hat verschiedene Ursachen. Mit zunehmendem Volumenstrom steigt der Partialdruck des Sauerstoffs  $p_{\text{O}_2, \infty}$  an, da mehr Sauerstoff mit dem größeren Luftstrom zugeführt wird. Die höhere Gasgeschwindigkeit führt außerdem zu höheren Reynolds-Zahlen  $Re_P$  der Partikel, was zu einem Anstieg der Sherwood-Zahl  $Sh_P$  und damit zu einer Deformation der Grenzschicht um die Partikel führt. Die Koksabbrandreaktion läuft deshalb entsprechend den Gleichung (3.94) und (3.95) schneller ab (siehe Seite 56). In Abbildung 4.7 sind die Reynolds-Zahlen der Partikel, die sich bei den entsprechenden Primärluftströmen ergeben, mit angegeben.

Interessant ist auch, dass die Separation zwischen den einzelnen Versuchen sowohl beim Kohlenmonoxid als auch beim Kohlendioxid immer im gleichen Verhältnis vorliegt. Der



**Abbildung 4.7:** Freigesetzte Gesamtmenge an Kohlenmonoxid (CO) (*linke Seite*) und Kohlendioxid (CO<sub>2</sub>) (*rechte Seite*) bei verschiedenen Primärluftmengen

geschwindigkeitsbestimmende Teilschritt der Koksoxidation wirkt sich somit gleichermaßen auf die Entstehung von CO und CO<sub>2</sub> aus. Es zeigt sich, dass das Produktverhältnis von CO zu CO<sub>2</sub> über die gesamte Versuchsdauer gleich bleibt. Somit ist es zulässig, den Mechanismus-Parameter  $f$  von Seite 55 als Konstante zu wählen ( $f = 0,17$ ).

Auf der rechten Seite von Abbildung 4.7 ist zu sehen, dass die Adsorptions-Desorptions-Kinetik zu einer leichten Unterbewertung der CO<sub>2</sub>-Konzentration bei hohen Primärluftmengen neigt. Dieser Effekt könnte mit der Verringerung des Stefan-Stromes durch Abnahme der Grenzschichtdicke  $\sigma_{GS}$  erklärt werden. Der Stefan-Strom wird im vorliegenden Modell nicht berücksichtigt.

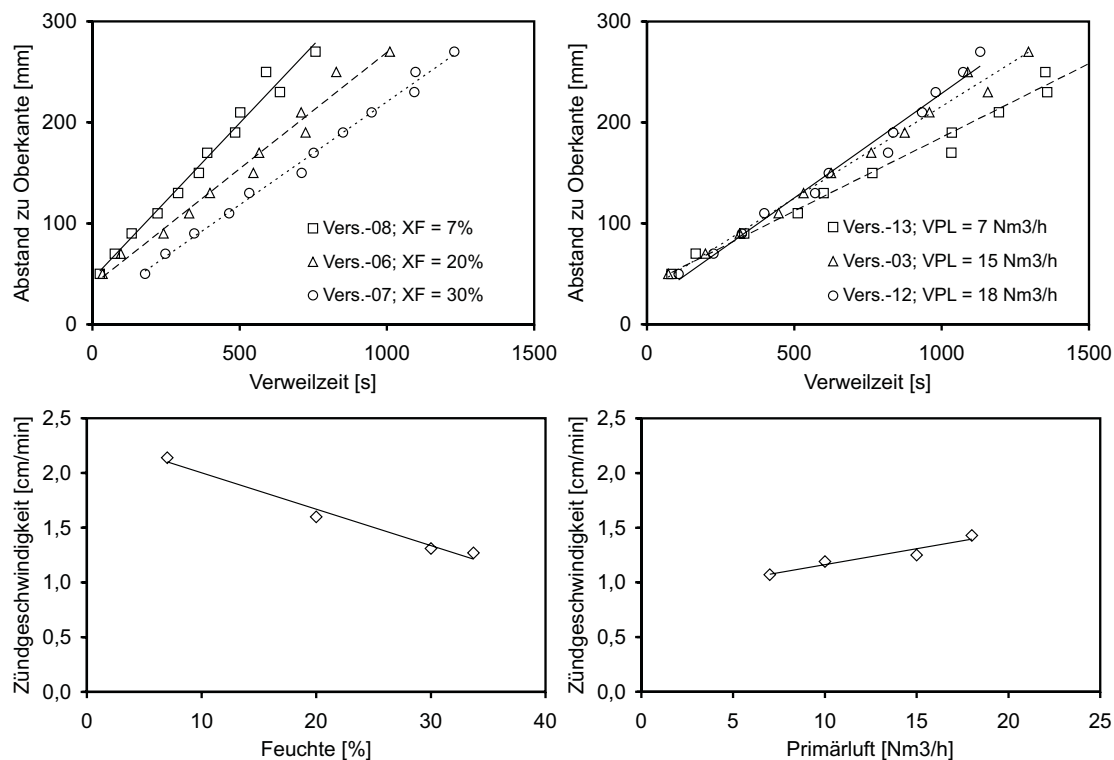
#### 4.2.5 Zündgeschwindigkeit

Auf Grundlage der Temperaturverläufe über der Versuchszeit kann die Geschwindigkeit ermittelt werden, mit der die Reaktionsfront durch das Bett wandert. In Abbildung 4.8 unten ist dargestellt, wie die Bettoberfläche in dem Brennstofftopf nach unten wandert.

Aus der Position der Maxima im Brennstofftopf kann die Geschwindigkeit berechnet werden, mit der die Reaktionsfront wandert (siehe auch Abbildung 4.3). Daraus ergibt sich die Zündgeschwindigkeit, entsprechend den jeweiligen Randbedingungen. Auf der linken Seite von Abbildung 4.8 ist der Einfluss der Brennstofffeuchte dargestellt, rechts sieht man den Primärlufteinfluss.

Wie zu erwarten, zeigt sich eine Abhängigkeit von dem Feuchtegehalt des Brennstoffs. Die bei der Überwindung der Verdampfungs- und Bindungsenthalpie benötigte Wärmemenge verlangsamt den Verbrennungsprozess. Um einen kontrollierten Abbrand des Brennstoffes





**Abbildung 4.8:** Reaktionsfront (*oben*) und Zündgeschwindigkeit (*unten*) bei unterschiedlicher Brennstofffeuchte (*linke Seite*) und Primärluft (*rechte Seite*)

mit nicht zu hohen  $C_{org.}$ - und CO-Massenströmen zu erzielen, ist ein Wassergehalt  $X_F$  bis 20 Gew.-% vorteilhaft. Er darf nicht zu hoch sein, da sonst die Abbranddauer und der Abgasvolumenstrom sehr groß werden.

Bei einer Primärluftmenge von  $18 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$  ist die Versuchszeit um etwa 50 % geringer als bei einer Primärluftmenge von  $7 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$ . Da bei den Versuchen eine unterstöchiometrische Luftzufuhr vorliegt ( $\lambda < 1$ ), steigt mit Zunahme der Primärluft der Oxidationsgrad der flüchtigen Bestandteile und somit die Wärmefreisetzung an. Der Trocknungsvorgang und die nachfolgenden Teilprozesse können schneller ablaufen. Die konvektive Trocknung des Gutbetts wirkt bei höherer Primärluftmenge zusätzlich beschleunigend (siehe rechte Seite von Abbildung 4.8).

Die maximale Temperatur ist bei einer Luftmenge von  $18 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$  um etwa  $150 \text{ °C}$  höher als bei  $7 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$  (siehe auch Abbildung 4.3). Durch die Erhöhung der Reaktionsfrontgeschwindigkeit wird der Massenstrom der Brenngase vergrößert. Mit zunehmender Primärluftmenge steht für den Abbrand mehr Sauerstoff zur Verfügung, wodurch der Kohlenstoffabbau verbessert wird.

Die hier dargestellte Brennstoffcharakterisierung ist beispielhaft für eine Vielzahl weitere Versuche, welche an der Anlage KLEAA durchgeführt worden sind. Es zeigt sich, dass die einzelnen Aussagen, die auf Grundlage der Messwerte getroffen werden, zu einem

konsistenten Gesamtbild führen. Dadurch ergibt sich eine gute Validierungsmöglichkeit für das, in Kapitel 3.2 dargestellte, chemisch/physikalische Reaktionsmodell. Das Modell zeigt im Vergleich mit den Messungen eine gute Übereinstimmung und ermöglicht die Wiedergabe des Verbrennungsvorganges bei den nachfolgenden 3D-CFD-Berechnungen. Weiter wird deutlich, dass die detaillierte Abbildung der physikalischen und chemischen Vorgänge eine *relativ* allgemeingültige Beschreibung der Verbrennung ermöglicht.

Bei zukünftigen Arbeiten bietet sich die Möglichkeit komplexere Brennstoffe zu untersuchen, und die Unterschiede einzelner Abfallkomponenten herauszuarbeiten.

# Kapitel 5

## Implementierung

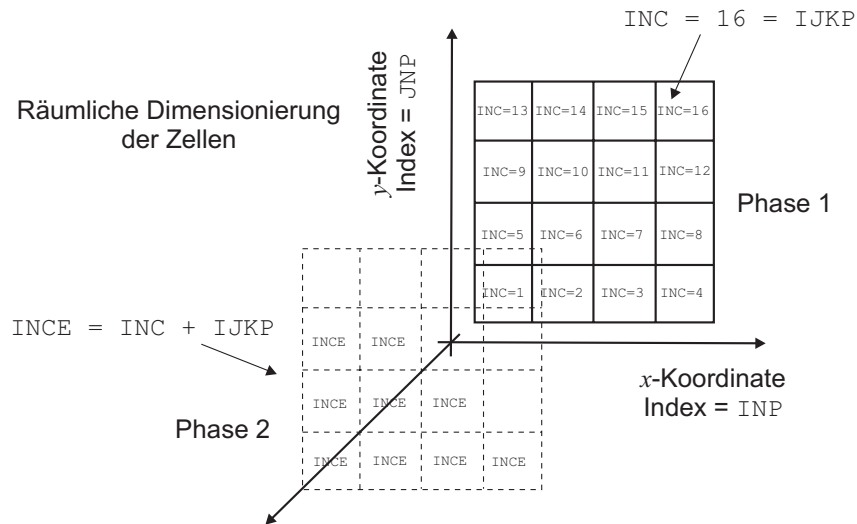
Die Implementierung des Euler/Euler-Mehrphasenmodells in AIOLOS erfolgt durch eine Erweiterung der bisherigen Programmstruktur. Dabei werden sämtliche Variablen, die für beide Phasen notwendig sind, höher dimensioniert. Dies ist bei der Euler/Euler-Formulierung im Vergleich zur Euler/Lagrange-Formulierung [198] gut möglich, da die Erhaltungsgleichungen für Partikel- und Gasphase in der Euler-Formulierung ähnlich sind.

Ob und wie ein Modell für technische Anwendungen eingesetzt werden kann, ist von verschiedenen Faktoren anhängig. Eine entscheidende Restriktion ist die Leistung der Rechner bzw. deren potentielle Performance. Die Möglichkeit, Modelle für dreidimensionale technische Anwendungen sinnvoll zu nutzen, ist meist nur bei der Verwendung komplexer Rechnerstrukturen (z.B.: *Supercomputer*) gegeben. Allerdings gestaltet sich damit auch die Implementierung schwieriger.

### 5.1 Programmstruktur

Das in Kapitel 3 aufgestellte System aus Differentialgleichungen (DGL) kann unter vertretbarem Aufwand nicht mehr analytisch aufgelöst werden. Aus diesem Grund wird es numerisch gelöst. Dies geschieht mit der Methode der finiten Volumen. Die Programmstruktur von AIOLOS basiert auf der Diskretisierung, d.h. der Aufteilung des geometrischen Raumes in einzelne Kontrollvolumen (Zellen) und der anschließenden Transformation des dreidimensionalen geometrischen Raums in eindimensionale Vektoren, welche sehr schnell angesprochen werden können. Die numerischen Löser sind so implementiert, dass sie diese Struktur verarbeiten können. Die Adressierung folgt Gesetzen, die eine sehr schnelle Rücktransformation aus dem eindimensionalen Vektor in den dreidimensionalen Raum ermöglichen. Diese Struktur wird detailliert bei BUNDSCHUH, RISIO und SCHNEIDER beschrieben [33, 165, 182].

Im Rahmen der Arbeit wird der dreidimensionale geometrische Raum auf einen vierdimensionalen Rechenraum erweitert, bei welchem die ersten drei Dimensionen die räumlichen Koordinaten  $x$ ,  $y$  und  $z$  repräsentieren. Die vierte Dimension beschreibt die einzelnen Phasen. Abbildung 5.1 zeigt die hierfür notwendige konzeptionelle Änderung der Programmstruktur von AIOLOS. Aus Gründen der Übersichtlichkeit werden dabei die ersten beiden räumlichen Koordinaten  $x$  und  $y$  und zwei Phasen nur schematisch dargestellt. Die räumlichen Koordinaten  $x,y$  und  $z$  werden in AIOLOS unter den Indizes I,J und K



**Abbildung 5.1:** Schematische Darstellung der Dimensionierung von Zellen und Phasen im Speicher

hintereinander im eindimensionalen Vektor abgelegt ( $I_{max} = INP$ ;  $J_{max} = JNP$ ;  $K_{max} = KNP$ ). Dieser kann über die eindimensionale Indizierung INC angesprochen werden. Durch dieses Vorgehen müssen bei der Berechnung keine geschachtelten Schleifen durchlaufen werden, was zu einer drastischen Verkürzung der Rechenzeit führt (siehe auch Abschnitt 5.1). Bei der Verwendung weiterer Phasen wird dieses Konzept beibehalten. Die Indizierung erfolgt nun über den Index INCE. Die Formulierung in eindimensionalen Vektoren unterstützt sehr gut die Vorgehensweise, nach welcher der Compiler die einzelnen Adressen im Speicher eines Rechners ablegt. Durch die Strukturierung wird beim Programmablauf die zum Suchen der Adressen notwendige Zeit verkürzt und die Gesamtrechenzeit reduziert.

Zur Lösung der diskretisierten Transportgleichungen können alle bisher in AIOLOS implementierten numerischen Löser eingesetzt werden (z.B.: *successive over relaxation* (SOR)). Sie werden bereits an anderer Stelle ausführlich beschrieben (siehe [100, 33, 165]). Sowohl für Gasphase als auch Partikelphase werden die gleichen Löser verwendet.

**Vektorisierung** Die Vektorisierung von Programmen ermöglicht eine Geschwindigkeits-erhöhung auf Vektorrechnern und MIMD<sup>1</sup> Systemen. Da die automatischen Vektorisierungen durch Compiler zumeist ineffizient sind, ist dies aber zu einem Großteil mit viel Handarbeit verbunden. Die Eulersche Betrachtungsweise der Partikelphase ist im Gegensatz zur Lagrangemethode sehr gut für Vektorisierung geeignet, da ihr Konzept an die in AIOLOS gut vektorisierte Beschreibung der Gasphase angelehnt ist [198].

Beispielhaft sind hier Zeilen aus dem Programm AIOLOS angegeben. Gezeigt wird eine Schleife, innerhalb welcher der konvektive Massenfluss CNV aus der Dichte RHO, der Geschwindigkeit U sowie Zellfläche AREA und Volumenfraktion E1 berechnet wird.

*PDIR PARDO FOR	Parallelisierungsdirektive für NEC-SX Rechner
*VDIR NODEP	Vektorisierungsdirektive für NEC-SX Rechner
DO IDOE=1,NINTERND*IEEDIM	Schleife über NINTERND Zellen; IEEDIM Phasen
IDO = MOD(IDOE,NINTERND)	
IF (IDO.EQ.0) IDO = NINTERND	
INC = INDIN(IDO)	Auslesen der Indizes interner Zellen
INCE= INC+(INT((IDOE-1)/NINTERND)*IJKP)	Berechnung des Indizes der Partikelphase
WFE = WF(INC,1)	östlicher Wichtungsfaktor
WFN = (1.-WF(INC,1))	nördlicher Wichtungsfaktor
OE = WFE*RHO(INCE)*E1(INCE)+WFN*RHO(INCE+1)*E1(INCE+1)	
UE = WFE*U(INCE) +WFN*U(INCE+1)	
CNV(INCE,1) = OE*UE*AREA(INC,1)	Berechnung des konvektiven Flusses
ENDDO	

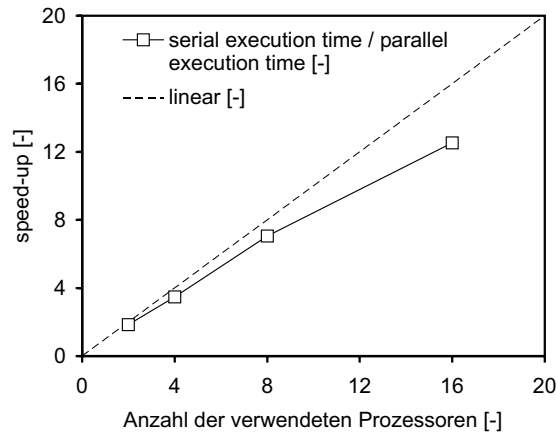
Durch die in Abschnitt 5.1 gezeigte strukturierte Programmierung kann die Berechnung des Massenflusses über alle Zellen und Phasen in nur einer DO-Schleife abgearbeitet werden. Durch die Vermeidung von inneren Schleifen sowie von Unterprogrammaufrufen innerhalb der Schleife wird die Abarbeitung sehr schnell. Die meisten Schleifen zur Beschreibung der Bewegungsgleichungen können für beide Phasen genutzt, bzw. um eine Phase verlängert werden. Dies ist ein großer Vorteil, da sich lange Schleifen ohne innere Abhängigkeiten auf Vektorprozessoren positiv auswirken. Sie lassen sich sowohl parallelisieren als auch vektorisieren.

**Parallelisierung** Die Parallelisierung erfolgt nicht durch die Gebietszerlegung, sondern mit dem NEC *Microtasking*-Dialekt auf *Loop*-Ebene. Die Hardware von *Supercomputern* bzw. Computern mit mehreren parallelen CPUs hat einen entscheidenden Einfluss darauf, wie die Modelle in der jeweiligen Programmiersprache parallelisiert werden können [17]. Die Architektur der Hardware bestimmt damit die Möglichkeiten der Leistungssteigerung. Darüber hinaus ist entscheidend, wie gut ein Compiler die jeweilige Architektur ausnutzt. Eine allgemeine Einteilung solcher Architekturen stammt von FLYNN [58, 59].

---

<sup>1</sup>MIMD = *multiple instruction streams, multiple data streams*

Um die Leistungsfähigkeit des parallelen Programms AIOLOS zu untersuchen wurden Simulationen auf dem Supercomputer NEC SX-4/32 des *Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart* (HLRS) durchgeführt. Die NEC SX-4/32 hat eine peak-performance von 64 GFLOP/s und 32 Prozessoren (CPU). Sie verfügt über insgesamt 8 GB SRAM (shared-memory). Um die Untersuchung durchzuführen wurden verschiedene Rechnungen mit jeweils 2, 4, 8, und 16 CPU durchgeführt. Die serielle Rechenzeit (*serial execution time*) wird mit der parallelen Rechenzeit (*parallel execution time*) verglichen. Ein solches speed-up Verhalten für die einphasige Gasströmung ist in Abbildung 5.2 dargestellt.



**Abbildung 5.2:** Vergleich von serieller und paralleler Rechenzeit für 2, 4, 8, und 16 Prozessoren der NEC SX-4/32

Bei dem gezeigten Beispiel wird die GDDM (siehe Abschnitt 5.2.3) für kurvilineare und kartesische Gitter verwendet (414.322 Karthesische Zellen; vier kurvilinearen Gittern mit 114.492 Zellen). Je größer die Rechengitter und damit die in Abbildung 5.1 dargestellten Felder sind, um so besser wird die Performance der Rechnung, da nicht geschachtelte möglichst lange Schleifen sowohl vektoriell als auch parallel abgearbeitet werden.

## 5.2 Randbedingungen

Das zu lösende System, das sich aus den Differentialgleichungen (3.5), (3.9), (3.11), (3.32), (3.52) und (3.65) ergibt stellt ein Randwertproblem dar. Die Randbedingungen vervollständigen die Beschreibung der Erhaltungsgleichungen und dienen dazu, die Festlegung einer einzigen Lösung für eine bestimmte Aufgabe zu ermöglichen. Die Lösungen der Gleichungen werden durch die Vorgabe der erforderlichen Randbedingungen eindeutig bestimmt.

Bei den Randbedingungen kann generell zwischen zwei Typen unterschieden werden. Bei der *Dirichlet-Randbedingung* wird auf der Berandung explizit der Wert der zu berech-

nenden Variable vorgegeben. Dieser Typ wird in der Regel für alle bilanzierten Größen an den *Einlässen* verwendet. Er spielt für die Konvergenz der iterativen Gleichungslöser eine wichtige Rolle, da das lineare Gleichungssystem hierdurch streng diagonaldominant wird. Bei der *Von Neumann-Randbedingung* wird der Wert der Variablen aus dem Gradient über die Berandung des Berechnungsgebiets vorgegeben. Der Randwert ist somit nicht fest, sondern verändert sich im Verlauf des Iterationsprozesses mit den Werten der Variablen im Inneren des Strömungsgebiets.

### 5.2.1 Gasphase

**Impulstransport - Wand** Die Randbedingungen für die konvektiven und diffusiven Flüsse der Gasphase an festen ruhenden Wänden sind einfach zu bestimmen. Alle Geschwindigkeitskomponenten sind dort Null. Somit sind auch keine Flüsse über die festen Wände vorhanden.

Bei der vorliegenden Modellierung wird das von PRANDTL beschriebene logarithmische Wandgesetz herangezogen [152]. Die Vorgehensweise, wie dieses implementiert ist, wird detailliert bei KNAUS[100] dargestellt. Die Wandschubspannungen  $\bar{\tau}_W$  werden dabei durch die Geschwindigkeitskomponente parallel zur Wand ausgedrückt. Sie enthält, u.a. den dimensionslosen Wandabstands  $y^+$ , die *VanKarman*-Konstante  $\kappa$  und den Abstand  $\Delta n$  normal zur Wand.

Die Implementierung der Wandrauhigkeit  $k^+$  wird ausführlich bei QI[155] behandelt. Sie wird von dem Stoßfaktor  $e$  beeinflusst, welcher für glatte, undurchlässige Wände den Wert  $e = 9,0$  annimmt. Bei rauen Kraftwerkswänden liegt er höher.

Die aus dem Wandgesetz berechneten Terme werden über Quellterme in die Impulsbilanz eingebracht. Die Turbulenzgrößen  $k$  und  $\varepsilon$  lassen sich aus dem Gleichgewicht zwischen Produktion und Dissipation der turbulenten kinetischen Energie bestimmen.

**Wärmetransport - wassergekühlte Wand** Die Wände der Reaktoren im großtechnischen Maßstab bestehen, wenn die freiwerdende Energie genutzt werden soll, aus parallelen Rohrleitungen, durch welche Wasser bzw. Wasserdampf des Dampfkreislaufs zirkuliert. Dabei wird das Wasser bedingt durch den Wärmetransport durch die Wand erhitzt und verdampft.

Unter Vernachlässigung von Wärmeleitungseffekten entlang der Wand kann der Wärmefluss  $q_{wall}$  durch die Wand<sup>2</sup> aus einer eindimensionalen Wärmebilanz errechnet werden [196,

---

<sup>2</sup> *engl.*: wall = Wand

164].

$$q_{wall} = \varepsilon_{wall} \int_{\vec{P} \cdot \vec{n} < 0} I |\vec{P} \cdot \vec{n}| d\Omega - \varepsilon_{wall} \sigma_{rad} T_{wall}^4 + \alpha_{wall} (T_G - T_{wall}) \quad (5.1)$$

Die ersten beiden Terme auf der rechten Seite der Gleichung stehen für absorbierte und emittierte Strahlung, dabei ist  $\vec{P}$  die Richtung der ankommenden Intensität  $I$  und  $\vec{n}$  der Normalenvektor senkrecht zu der Wand. Die Wandemissivität  $\varepsilon_{wall}$  hängt vom physikalischen Zustand der Wand, insbesondere deren Verschmutzung ab [215]. Vereinfacht wird häufig ein durchschnittlicher Wert von  $\varepsilon_{wall} = 0,65$  angenommen [164].

**Wärmetransport - ausgemauerte Wand** Eine ausgemauerte Wand stellt den Idealtyp einer Dirichlet-Randbedingung dar. Sie wird bei Festbettreaktoren von der Rückseite mit Kühlluft beaufschlagt und so über eine Regelung auf einer konstanten Temperatur gehalten. Dadurch ergibt sich als Randbedingung für die Enthalpiegleichung ein konstanter Wert.

**Einlass** An den Einlässen werden Dirichlet-Randbedingungen verwendet. Sofern dies möglich ist, werden die zu setzenden Werte aus Messungen gewonnen. Weil für die turbulenten Größen in der Regel keine detaillierte Messung an den Einlässen vorliegt, werden sie unter der Annahme einer gleichmäßigen Strömung über den hydraulischen Durchmesser ermittelt.

$$d_{hyd} = \frac{4 A_E}{U_E} \quad (5.2)$$

$A_E$  ist die geometrische Fläche des Einlasses und  $U_E$  dessen Umfang. Nach KNAUS[100] werden die Normalspannungen aus der turbulenten kinetischen Energie berechnet, wobei die Schubspannungen, unter der Annahme einer lokalen Isotropie, zu Null gesetzt werden.

**Auslass** An den Auslässen finden in der Regel Von Neumann'sche-Randbedingungen Verwendung. Hier liegen zumeist keine Messwerte vor, was die Verwendung von Dirichlet'schen Randbedingungen ermöglichen würde.

Die Gradienten der Erhaltungsgrößen  $\frac{\partial \phi}{\partial x_i}$  werden am Auslass zu Null gesetzt.

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} = 0 \quad (5.3)$$

Es ist darauf zu achten, dass der Auslass der Gasphase ausreichend weit stromab des betrachteten Bereichs liegt und keine Rückströmzonen über den Auslass hinweg vorhanden sind. Der Einfluss dieser Randbedingung auf stromaufliegende Bereiche bleibt damit gering.



## 5.2.2 Partikelphase

**Wand** Die auf die Wand treffenden Partikel werden von der Wand und von anderen Partikeln, die sich in der wandnahen Strömung befinden, beeinflusst. Drei verschiedene Situationen können theoretisch die Randbedingungen für die Geschwindigkeit der Partikelphase und die Granulartemperatur  $\Theta_{P,W}$  beeinflussen.

Wird eine Haftbedingung der Partikel an der Wand angenommen, nimmt die Geschwindigkeit der Partikel wegen der Wandreibung vollständig ab. Dies ist möglich, wenn die Partikelbeladung relativ gering und die Wand rauh ist bzw. wenn die Partikel zu Schlacke aufschmelzen.

$$u_{P,wall,i} = 0 \quad (5.4)$$

In diesem Fall findet eine vollkommene Dissipation der Fluktuationsbewegungsenergie statt. Für die Granulartemperatur an der Wand ergibt sich damit  $\Theta_{P,W} = 0$ .

Falls vollständige Schlupfbedingungen vorliegen, können die Partikel auf der Wand freigleiten. Diese Bedingung ist nur dann sinnvoll, wenn der theoretische Fall vorliegt, dass die Wand keine Reibung ausübt oder der Reibungseinfluss vernachlässigt werden kann.

$$\frac{\partial \vec{v}_{P,i}}{\partial n} \Big|_{wall} = 0 \quad \rightarrow \quad v_{P,wall,i} = v_{P,nb,i} \quad (5.5)$$

In der Gleichung ist  $v_{P,nb}$  die wandparallele Geschwindigkeit in der wandnächsten Nachbarzelle ( $nb$ ). An der Wand wird ein Fluss der granularen Temperatur nach QI[155] zu 0.

$$\frac{\partial \Theta_{P,wall}}{\partial n} \Big|_{wall} = 0 \quad (5.6)$$

Liegen in Bezug auf die Geschwindigkeit nach Gleichung (5.5) vollständige Schlupfbedingungen vor, so geht man für die Granulartemperatur von einem quasi adiabaten Verhalten der Wand aus. Bei BOUILLARD und DING wird deshalb vorgeschlagen, den Gradient der Granulartemperatur hier ebenfalls auf Null zu setzen [27, 46, 155].

Die teilweise Schlupfbedingung stellt einen Kompromiß zwischen den beiden oben dargestellten Bedingungen dar. Die Partikel werden in diesem Fall an der Wand nur teilweise abgebremst und können sich mit einer Schlupfgeschwindigkeit auf der Wand bewegen. Nach SOO wird angenommen, dass die Schlupfgeschwindigkeit dann proportional zu dem lokalen Geschwindigkeitsgradienten ist [194].

$$\vec{v}_{P,wall} = \pm L_{P,wall} \frac{\partial \vec{v}_P}{\partial n} \Big|_{wall} \quad \rightarrow \quad 0 < |\vec{v}_{P,wall}| < |\vec{v}_{P,nb}| \quad (5.7)$$

Das Vorzeichen in Gleichung (5.7) ändert sich in Abhängigkeit davon, welche Seite einer Zelle die Wand darstellt. Nach DING[46] kann die freie Weglänge  $L_{P,wall}$  der Partikel an der Wand als zusätzlicher Faktor verwendet werden.

Die freie Weglänge  $L_{P,wall}$  ändert sich aufgrund von Wandeigenschaften und Kollision zwischen Partikel und Wand. Im Gleichgewicht zwischen dem durch die Kollisionen zur Wand zugeführten Impulsstrom und der an der Wand auftretenden Spannung ergibt sich nach HUI[86] die Beziehung (5.8).

$$L_{P,wall} = \frac{6 \mu_P}{a_3 \cdot f_{wall} \rho_P d_P \sqrt{3} \Theta_P} \quad (5.8)$$

Der Faktor  $f_{wall}$  ist ein Maß der Wandrauhigkeit und  $a_3$  ist eine Konstante. Im dichten Bereich nimmt  $L_{P,wall}$  den Wert Null an. Bei Werten von  $\epsilon_P \geq 0,1$  bleibt  $L_{P,wall}$  an der Wand annähernd konstant, da sich Kollisions- und Reibungseffekte zwischen Partikeln und Wand statistisch in einem dynamischen Gleichgewicht befinden.

Bei extrem geringen Partikelbeladungen kann die freie Weglänge  $L_P$  unter Umständen die Abmessung der Anlagengeometrie  $D_{Anlage}$  überschreiten. Es sollte dann eine Beschränkung der Simulation eingeführt werden, um numerische Probleme bei der Berechnung zu vermeiden.

$$L_P \geq D_{Anlage} \rightarrow L_P = D_{Anlage} \quad (5.9)$$

Die Randbedingung für  $\Theta_{P,wall}$  muss durch eine Bilanzierung an einem der wandnahen, differentiell kleinen Bilanzvolumen gefunden werden. Die Wand kann damit als Quelle oder als Senke der kinetischen Energie auftreten [24, 86].

Es zeigt sich, dass die Tangentialspannung  $\sigma_{P,ij}$  der Partikel in Wandnähe gleich dem zur Wand übertragenen Impuls ist. Daraus ergibt sich die Randbedingung (5.10) für die Partikelgeschwindigkeit [155].

$$\sigma_{P,ij} = \tau_{P,ij}|_W = \frac{\pi \rho_P v_P \phi_{P,W} \sqrt{\Theta_P}}{2\sqrt{3} \left[ \frac{\epsilon_{P,max}}{\epsilon_P} - \left( \frac{\epsilon_{P,max}}{\epsilon_P} \right)^{\frac{2}{3}} \right]} \quad (5.10)$$

Der empirische Faktor  $\phi_{P,W}$  nimmt einen Wert zwischen 0 und 1 an. Er beschreibt den Anteil der Kollisionen zwischen Partikeln und Wand, welche eine tangentielle Impulsübertragung bewirken. In der Literatur sind verschiedene Werte von  $\phi_{P,W}$  angegeben. Bei PITA wird ein Wert von  $\phi_{P,W} = 0,5$  angegeben [151]. Von JOHNSON ET AL. wird ein Wert von  $\phi_{P,W} = 0,6$  ermittelt [91]. Für eine dünne Partikelwolke wird von BOLIO der Wert  $\phi_{P,W} = 0,002$  vorgeschlagen [24].

Durch die Energieverlustrate pro Flächeneinheit wird die Dissipation der kinetischen Energie während den Kollisionen beschrieben [86].

$$\gamma_W = a_4 E_P (1 - e_W^2) \frac{|v_P^{\vec{r}}|}{d_P^2 L_{P,W}} \quad (5.11)$$

Dabei ist  $a_4$  eine dimensionslose Konstante,  $E_P$  ist die Partikelfluktuationsenergie. Die Stoßzahl  $e_W$  beschreibt die Art der Stöße zwischen Partikel und Wand. Für vollkommen

elastische Stöße ist  $e_W = 1$ , dann ist keine Dissipation vorhanden. Je nach Partikelei-genschaft werden verschiedene Werte für  $e_W$  angegeben. Bei BOLIO[24] wird  $e_W = 0,7$  angegeben, bei LUN[119] ein Wert von  $e_W = 0,94$ .

**Einlass** Aus Gleichung (5.12) ergibt sich die Geschwindigkeit der senkrecht zum Einlass einströmenden Partikel. Es ist dabei auch möglich, eine Verteilung der Partikelgeschwindigkeiten anzunehmen.

$$\vec{u}_{P, \text{senkrecht}} = \frac{1}{\epsilon_P \rho_P A_E} \cdot \frac{\partial m_P}{\partial t} \quad (5.12)$$

Der Volumenanteil der Partikel am Eintritt  $\epsilon_P$  ist normalerweise aus Messungen der Schüttdichte bekannt. Eine Abschätzung ist aber auch über den Massenstrom und den Partikeldurchmesser  $d_P$  möglich. Bei dichten Suspensionen sollte ein Wert von  $\epsilon_{P, \text{max}} = 0,6$  jedoch nicht überschritten werden. Die Granulartemperatur  $\Theta_P$  wird am Einlass zu  $\Theta_P = 0$  gesetzt.

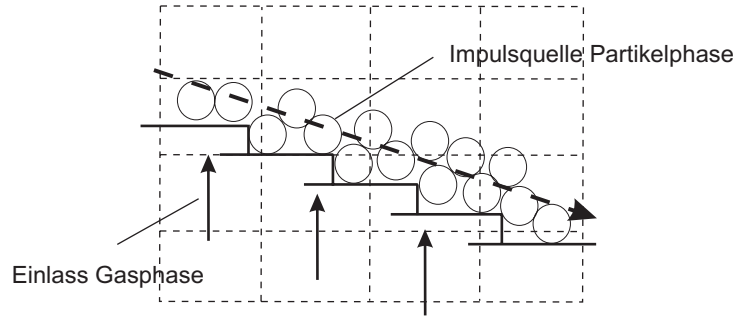
**Auslass** Am Auslass verhalten sich die Randbedingungen ähnlich wie bei der Gasphase. Analog zur Gasphase werden alle Gradienten der Partikelphase am Auslass auf Null gesetzt.

$$\left. \frac{\partial \vec{u}_P}{\partial x_i} \right|_A = \left. \frac{\partial \epsilon_P}{\partial x_i} \right|_A = \left. \frac{\partial \Theta_P}{\partial x_i} \right|_A = 0 \quad \rightarrow \quad v_{P,A} = 0 \quad (5.13)$$

**Bewegliche Fläche** Die Randbedingung *bewegliche Fläche* ist speziell für die, im Rahmen dieser Arbeit behandelten, Anwendungsfälle entwickelt worden. Bei Rostfeuerungsanlagen spielt die Roststabgeschwindigkeit des Feuerroste eine entscheidende Bedeutung (siehe auch Abbildung 2.3 auf Seite 15). Bei zu geringer Neigung des Rostes und ungünstiger Definition der Auslässe reicht die Schwerkraft als alleinige Impulsquelle nicht aus, um alle Partikel bis zum Auslass zu transportieren und damit einen stationären Zustand zu erreichen. Deshalb wird durch bewegte Roststäbe ein zusätzlicher Impulseintrag erzeugt.

Die bewegliche Fläche ist eine Dirichlet-Randbedingung. Schematisch ist die Wirkungsweise der Randbedingung *bewegliche Fläche* in Abbildung 5.3 dargestellt. Partikel können nicht durch die bewegliche Fläche hindurchdringen. Für die Gasphase ist die bewegliche Fläche ein gewöhnlicher Einlass, über welchen die Primärluft, bzw. die Gasphase, zugegeben werden kann. Damit gelten alle Randbedingungen des Gasphaseneinlasses.

In der Partikelphase wirkt die bewegliche Fläche für fast alle Erhaltungsgrößen als Wand, da kein Massentransport der Partikelphase über diese Fläche stattfindet. Lediglich für die Impulserhaltung und die Wandschubspannung wird eine Kraft bzw. Geschwindigkeit als Quellterm vorgegeben. Statt der absoluten Geschwindigkeit der Partikel  $\vec{u}_P$  wird am



**Abbildung 5.3:** Schematische Darstellung der Randbedingung *bewegliche Fläche*

Rand die relative Geschwindigkeit  $u_{P,rel}$  zur Geschwindigkeit der beweglichen Fläche  $\vec{u}_{BF}$  für die Berechnung der Spannungen verwendet.

$$u_{P,rel} = |\vec{u}_P + \vec{u}_{BF}| \quad (5.14)$$

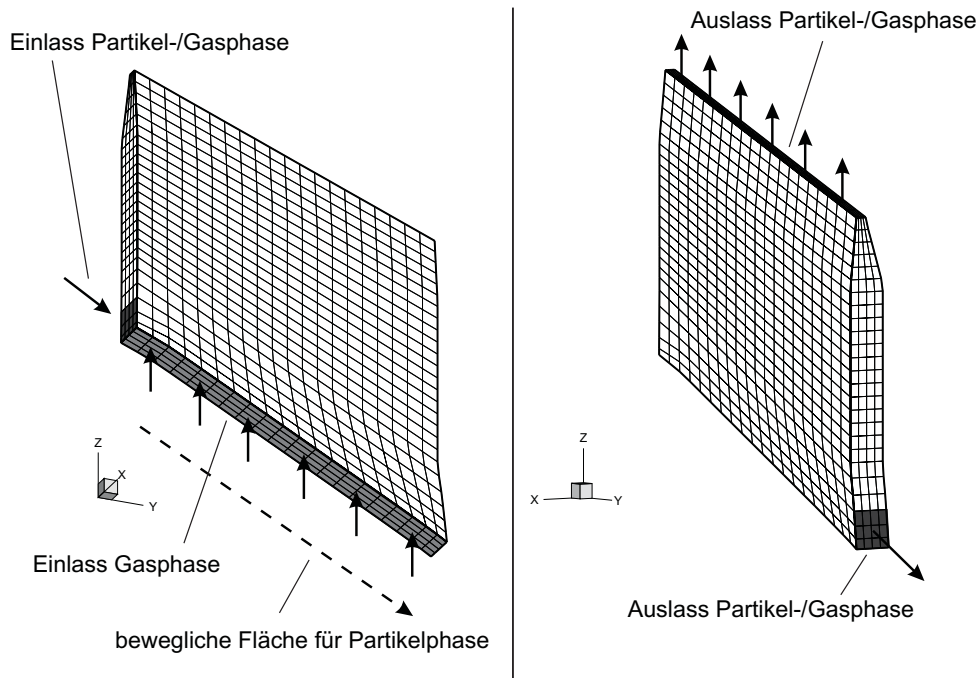
Über die Tangentialspannung  $\sigma_{P,ij}$  lässt sich die Randbedingung der Spannungen innerhalb der Partikelphase berechnen. Die Roststabgeschwindigkeit muss bei der Definition der beweglichen Fläche bekannt sein. Es ist möglich, entlang der Randbedingung verschiedene Roststabgeschwindigkeiten anzugeben. Diese werden in der Regel an den Anlagen gemessen.

### 5.2.3 Gebietszerlegung

In AIOLOS kann eine Gebietszerlegungsmethode, die *generalised-domain-decomposition methode* (GDDM) von RISIO[166], für kartesische und zylindrische Gitter sowie kurvilineare Gitter (siehe auch Anhang E) angewendet werden[175]. Die GDDM ist hilfreich, um komplexe Geometrien und deren Randbedingungen abbilden zu können. Die Methode arbeitet mit überlappenden Zellen. Um diese berechnen zu können, wurde die Lagrange-Interpolationsmethode für die Übergabe der Werte zwischen den einzelnen Untergebieten auf kurvilineare Gitter erweitert. Die Schwierigkeit bei der Verwendung der kurvilinearen Koordinaten besteht in der Berechnung der Wichtungsfaktoren, welche im Rahmen der Diskretisierung für die Interpolation der Werte in den Zellmittelpunkten benötigt werden, um den Datenaustausch zwischen Gittern mit unterschiedlicher Diskretisierung zu ermöglichen[175]. Die GDDM wird auf die hier behandelten Anwendungsfälle nicht angewandt, da sie noch nicht auf MF-Ansätze erweitert wurde.

## 5.3 Testfall - Reaktive Mehrphasenströmung

Zur Demonstration des Mehrphasenmodells und Implementierung wird ein Testfall vorgestellt. Er beinhaltet alle für die Berechnung von Rostfeuerungsanlagen wichtigen Aspekte. Die Diskretisierung des Testfalls und eine Auswahl von Randbedingungen ist in Abbildung 5.4 dargestellt. Die Ergebnisse der Rechnung zeigen den bei realen Anwendungsfällen beobachteten Verlauf der Verbrennung.

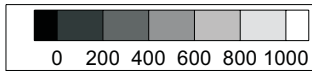
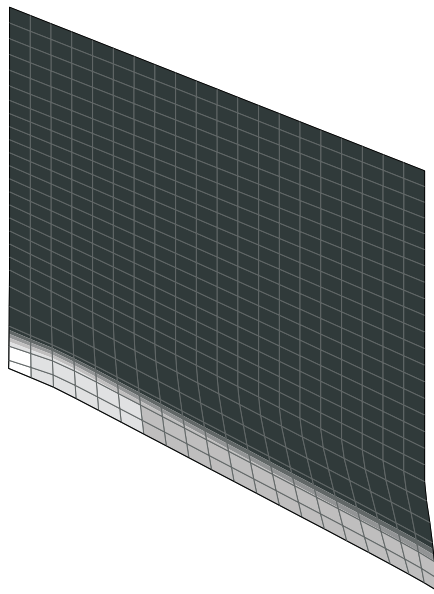


**Abbildung 5.4:** Testfall zur Berechnung von Mehrphasenströmungen mit Darstellung von Randbedingungen (3.564 Zellen)

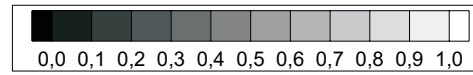
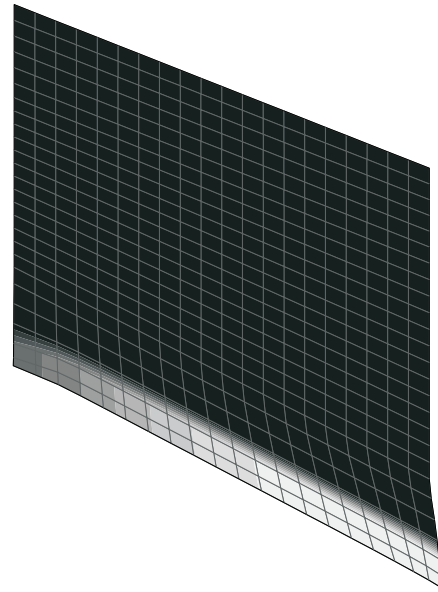
Das Gitter ist mit kurvilinearen Koordinaten diskretisiert und umfasst 3.564 Kontrollvolumen (Zellen). Die räumlichen Dimensionen entsprechen mit 4 m Länge und ca. 3,5 m Höhe realen Anwendungsfällen. Die Erdanziehungskraft  $\vec{g}$  wirkt in Richtung der  $z$ -Koordinate.

Eine Mischung aus Partikel- und Gasphase tritt auf der linken Seite am unteren Ende der Seitenwand über einen Einlass ein (siehe linke Seite Abbildung 5.4). Die Unterseite des Testfalls ist mit der Randbedingung *bewegliche Fläche* belegt und in einem Winkel von  $30^\circ$  geneigt. Es sind zwei Auslässe gesetzt, einer an der Oberseite der Geometrie und einer im unteren Teil (*rechts*). Es wird ein Massenstrom von  $\dot{m}_E = 0,0278 \text{ kg s}^{-1}$  Abfall vorgegeben. Die Elementaranalyse des Abfalls entspricht der in Tabelle C.2.

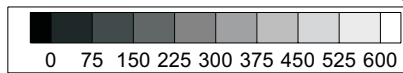
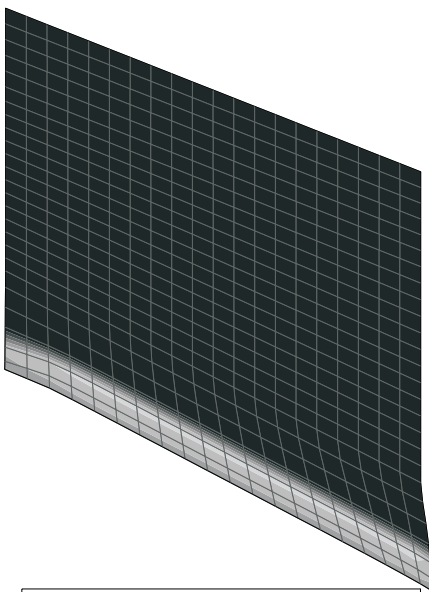
Die Simulation liefert plausible Ergebnisse. In Abbildung 5.5 sind Dichte  $\rho_P$ , Temperatur  $T_P$  und Ascheanteil  $Y_{P,Asche}$  der Partikelphase sowie der Anteil des Soliddrucks  $p_{P,z}$ , welcher in Richtung der  $z$ -Koordinate wirkt, angegeben. Es zeigt sich, dass die Parti-



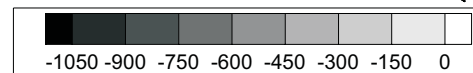
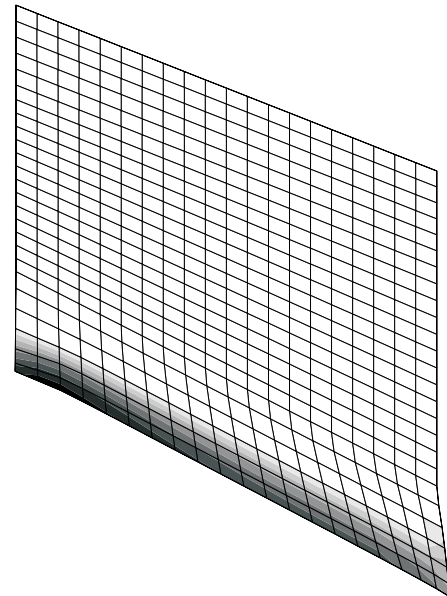
Dichte Partikel [kg m<sup>-3</sup>]



Ascheanteil [kg<sub>f</sub> kg<sub>P</sub><sup>-1</sup>]

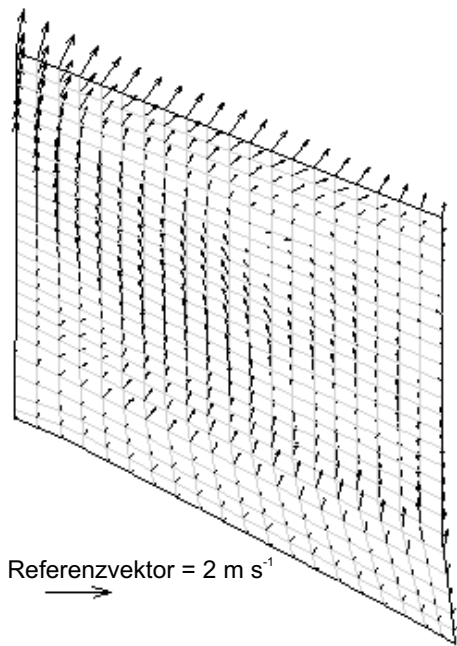


Temperatur Partikel [°C]



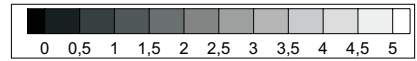
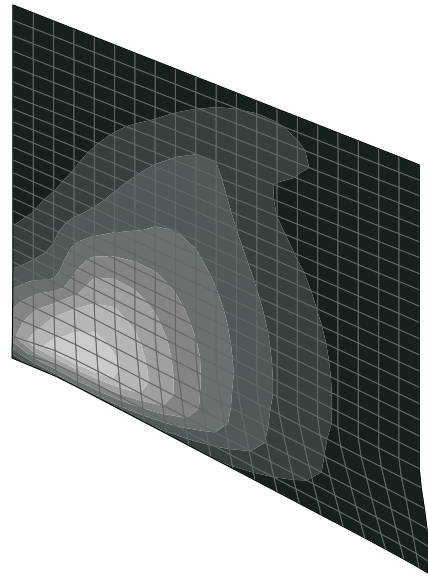
Soliddruck (z) [N]

**Abbildung 5.5:** Dichte, Temperatur, Ascheanteil und Soliddruck der Partikelphase

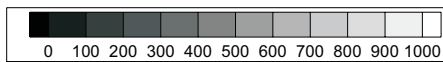
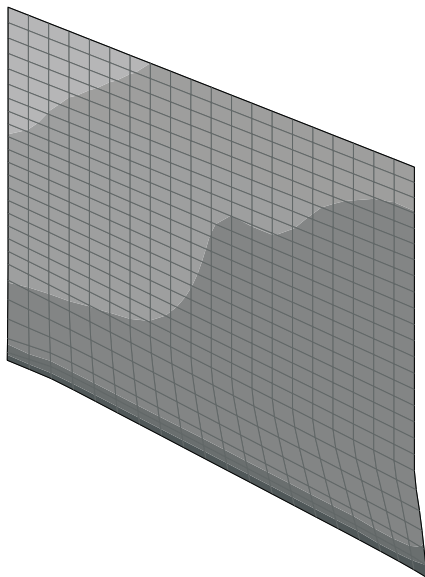


Referenzvektor =  $2 \text{ m s}^{-1}$

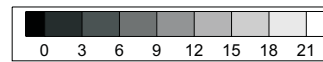
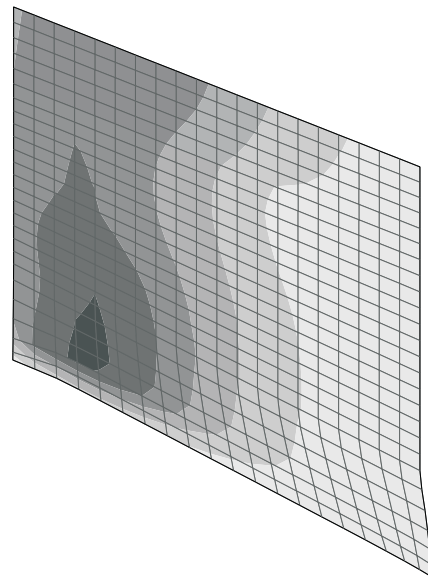
Geschwindigkeit Gasphase [ $\text{m s}^{-1}$ ]



Kohlenmonoxid [Vol-%, trocken]



Temperatur Gas [ $^{\circ}\text{C}$ ]



Sauerstoff [Vol-%, trocken]

**Abbildung 5.6:** Geschwindigkeit, Temperatur, Konzentrationsverteilungen der Gasphase

kel, bedingt durch ihre hohe Dichte, im unteren Bereich der Brennkammer verbleiben. In Abhängigkeit von Erdanziehungskraft sowie durch den Impulseintrag an der beweglichen Fläche wandern die Partikel vom Einlass zum unteren Auslass. Bedingt durch die Abbaureaktionen an den Partikeln sinkt die physikalische Dichte der Partikel  $\rho_P$  mit zunehmender Verweilzeit ab, der Ascheanteil  $Y_{P,Asche}$  der Partikel nimmt zu. Der Soliddruck der Partikelphase  $p_{P,z}$  wirkt entgegen der Erdanziehungskraft und ist definitionsgemäß negativ. Es zeigt sich, dass er mit zunehmender Höhe der darüberliegenden Brennstoffschichten ansteigt.

An den Einlässen werden sowohl Partikel- als auch Gasphase auf eine Temperatur von 30 °C gesetzt. Durch die hohen Wandtemperaturen von ca. 600 °C und den Strahlungstransport von den seitlichen Wänden sowie die heterogene Reaktion der Kokspartikel wird das Brennstoffbett sehr schnell auf bis zu 607 °C erwärmt. Hierbei ist zu berücksichtigen, dass die Partikel einen großen Anteil ihrer Enthalpie an die durchströmende Gasphase abgeben, da große Mengen an Gas zusätzlich durch die bewegliche Fläche einströmen und zur Oberseite der Brennkammer abgeführt werden.

In Abbildung 5.6 sind Geschwindigkeit, Gastemperatur  $T_G$  und Konzentrationsverteilungen, welche die Verbrennungsreaktionen der Gasphase charakterisieren, dargestellt. Das Gas hat am *beweglichen Einlass* eine Geschwindigkeit von ca. 0,4 m s<sup>-1</sup>. Bedingt durch die Massenzunahme und Erhöhung der Gastemperatur nimmt die Geschwindigkeit der Gasphase oberhalb des Betts Werte von 1 bis 2 m s<sup>-1</sup> an. Im vorderen Teil des Brennstoffbetts werden durch die chemischen Reaktionen große Mengen an Verbrennungsprodukten frei. In Abbildung 5.6 ist beispielhaft hierfür die Volumenkonzentration von Kohlenmonoxid (CO) dargestellt. Die Freisetzung führt zu einer Impulserhöhung der Gasphase bedingt durch Massentransport vom Partikel zum Gas. Zum anderen kommt es zu einer massiven Absenkung der Sauerstoffmenge (O<sub>2</sub>) und einer zusätzlichen Temperaturerhöhung durch nachfolgende homogene Verbrennungsreaktionen in der Gasphase.

Das Massenresiduum (siehe auch Abschnitt 6.1.4) des Testfalls ist im Vergleich zu Berechnungen einphasiger Gasströmungen unter Verwendung von NS-Modellen (siehe Abschnitt 2.2 auf Seite 13) höher. Hierfür ist unter anderem das verschlechterte Konvergenzverhalten bedingt durch den Massentransfer zwischen den Phasen verantwortlich. Die wesentlich höhere physikalische Dichte der Partikelphase ( $\rho_P \simeq 10^3 \cdot \rho_G$ ) führt darüber hinaus zu einem Massenresiduum auf höheren Niveau als beim Gas.



# Kapitel 6

## Technische Anwendung

In diesem Kapitel wird die Anwendung der vorliegenden Modelle an konkreten Anlagen im technischen Maßstab vorgenommen. Hierbei werden Untersuchungen für Anlagen in zwei verschiedenen Dimensionen gezeigt, im halbtechnischen und im großtechnischen Maßstab. Durch die Simulation soll der *scale-up* von der Pilotanlage hin zur großtechnischen Anwendung vereinfacht werden.

Selbst wenn sich ein technischer Prozess im Kleinen gut beherrschen lässt, bedeutet dieses nicht, dass es auch in einem größeren Maßstab möglich ist. Hierfür sind zwei Gründe verantwortlich. Zum einen nimmt mit der Größe des Reaktionsraums das Verhältnis von reagierendem Volumen zu strahlender Oberfläche der Wände zu. Zusätzlich wirken sich physikalische und chemische Effekte in unterschiedlicher räumlicher bzw. zeitlicher Dimension aus. In vielen Bereichen der Forschung werden oft ausschließlich Effekte im - *mikroskopischen* - räumlichen und zeitlichen Maßstab exakt vermessen und dann auf den - *makroskopischen* - Bereich übertragen. Je größer die räumlichen Dimensionen eines Prozesses werden, desto geringer ist meist die Anzahl der zur Verfügung stehenden Messwerte. Es wird außerdem eine breitere Fehlertoleranz akzeptiert.

Am Institut für Technische Chemie - Bereich Thermisch Abfallbehandlung (ITC-TAB) des Forschungszentrums Karlsruhe (FZK) wurden Versuche an der Rostfeuerungsanlage TAMARA durchgeführt. Im Rahmen der Experimente konnte an der TAMARA ein umfangreiches Parameterfeld für Maßnahmen zur strömungstechnischen Optimierung des Feuerraumes und der primärseitigen Schadstoffminderung untersucht werden. An der großtechnischen Abfallverbrennungsanlage MHKW Ludwigshafen werden aus kosten- und genehmigungsrechtlichen Gründen zunächst nur ausgewählte Einstellungen, insbesondere zur Variation der Sekundärluftverteilung, vorgenommen.

## 6.1 TAMARA - Anlage im halbtechnischen Maßstab

TAMARA ist ein Akronym für *Testanlage zur Müllverbrennung, Abgasreinigung, Rückstandsverbrennung und Abwasserbehandlung*. Die Pilotanlage dient der Untersuchung des gesamten Problembereiches der Verbrennung kommunaler Abfälle, einschließlich Rauchgasreinigung, Abwasser- und Rückstandsbehandlung.

Für Validierungsexperimente, die im Rahmen einer Untersuchung zur primärseitigen Reduktion von Stickoxiden durchgeführt wurden, musste die Anlage TAMARA vorab aufgerüstet werden. Die Umrüstung sah den Umbau des Feuerraums sowie die Nachrüstung einer SCR-Reinigungsstufe (*selective-catalytic reduction*) vor. Damit kann für alle Betriebszustände die Einhaltung der genehmigten Grenzwerte, ohne Rückwirkung auf die Gaszusammensetzung im heißen Bereich der Anlage, gewährleistet werden.

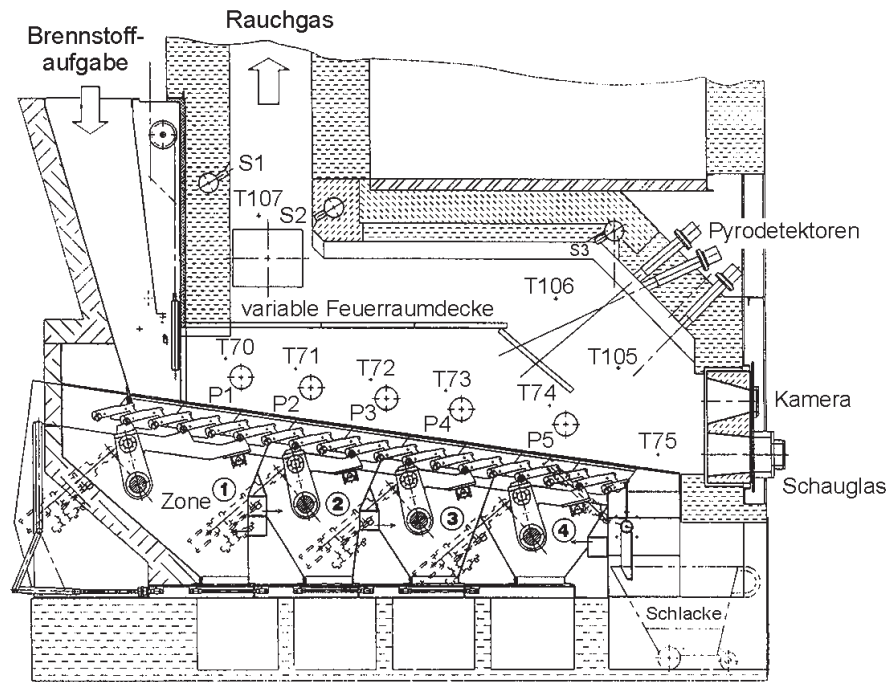
Zum Vergleich der Ergebnisse mit den Simulationsrechnungen sind, nach Abschluss der vorbereitenden Umbaumaßnahmen, *screening*-Experimente zur Luft- und Brennstoffstufung als die maßgeblichen feuerungstechnischen Einflussgrößen, durchgeführt worden. Ergänzt wurde dies durch die Messung wichtiger Gasspezies in Feuerraum [188].

### 6.1.1 Anlagenbeschreibung

TAMARA ist für einen Brennstoffdurchsatz von 150 bis 300 kg h<sup>-1</sup> und ein maximales Rauchgasvolumen von 1.000 Nm<sup>3</sup> h<sup>-1</sup> ausgelegt. Die maximale thermische Leistung liegt bei ca. 0,5 MW [127]. Der Vorschubrost der Firma EVT hat eine Länge von 3.200 mm bei einer Breite von 800 mm. Er setzt sich aus 16 Roststabreihen zusammen und ist in vier Primärluftzonen unterteilt. Die Zugabe von Sekundärluft erfolgt über die Düsenbalken S1, S2 und S3. Alle Luftmengen und der Rostvorschub können individuell geregelt werden. Über Lanzen ist an den Stützen (P1 bis P5) eine Brennstoffstufung mit gasförmigen und flüssigen Abfällen sowie die Dosierung von zusätzlichen Festbrennstoffen, wie Elektronikschrott oder Polyethylen (PE), möglich [112]. Die Anlage vor dem Umbau des Feuerraums ist schematisch in Abbildung 6.1 dargestellt. Abbildung 6.2 zeigt die Anlage nach erfolgtem Umbau.

Durch die Regelung von Brennstoffzufuhr, Verbrennungsluft und Roststabgeschwindigkeit wird ein stationärer Zustand des Feststoffbetts und der Gasphase eingestellt. Auch instationäre Bedingungen können erzeugt werden.

Zur Analyse der Vorgänge im Feuerraum können an verschiedenen Messstellen entlang des Rostes, unmittelbar über der Festbettoberfläche, Gasproben entnommen werden. Aus diesen Messwerten lassen sich entweder die Randbedingungen für eine Einphasenberechnung der Gasphase ermitteln [174], oder es kann eine Validierung des MF-Modells (siehe

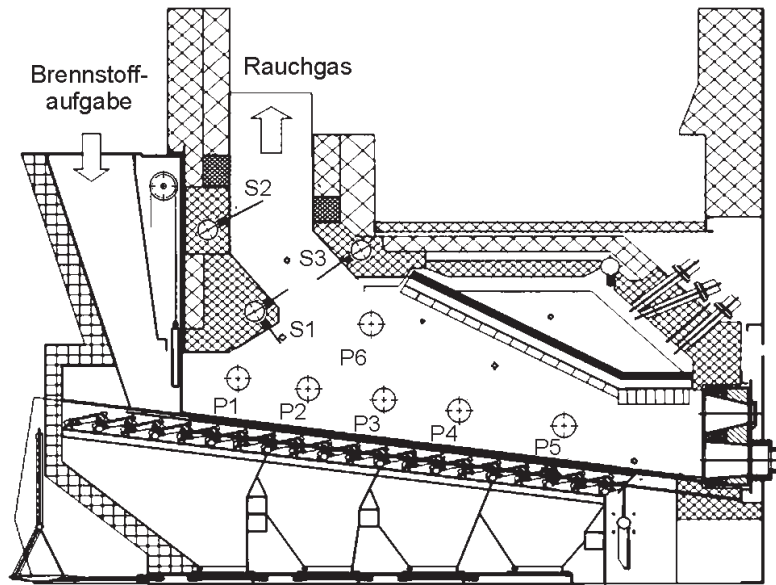


**Abbildung 6.1:** Schematische Darstellung der ursprünglichen Feuerraumgeometrie der Pilotanlage TAMARA mit variabler Feuerraumdecke [174]

Abschnitt 2.2 auf Seite 15) vorgenommen werden.

Kennzeichnend für die ursprüngliche Geometrie (Abbildung 6.1) ist eine keramische Zwischendecke aus Cordierit-Platten, mit der je nach Bestückung eine Gleich-, Mittel- oder Gegenstromfahrweise nachgestellt werden kann. Die in Abbildung 6.1 dargestellte Konfiguration der Zwischendecke wird bei Gleichstromfahrweise eingebaut. Eine weitere Besonderheit der alten Geometrie stellt die Lage des ersten Zuges, direkt oberhalb der Brennstoffzuteilung, dar. Die Strömungsführung unterscheidet sich hier von neuen Großanlagen und begünstigt darüber hinaus die Ablagerung von Flugasche auf der Zwischendecke. Wegen des zweigeteilten Feuerraumes ist die Decke im Bereich der Ausbrandzone unverhältnismäßig hoch, wodurch sich im Gasraum, je nach Fahrweise, eine große Rückströmzone ausbildet. Aufgrund dieser besonderen Geometrie des Feuerraumes bieten die, bei der ursprünglichen Geometrie installierten, Sekundärluftdüsen (S1 und S2) keine Variationsmöglichkeit zur Stufung der Verbrennungsluft.

Im Vorfeld der Neukonzeption wurden die Erfahrungen der Firma LURGI aus dem Anlagenbau in mehrere alternative Vorschläge umgesetzt und auf Realisierbarkeit untersucht, unter anderem durch CFD-Simulationen mit AIOLOS. Mit der Neugestaltung des Feuerraums sollen zusätzlich zu den vorhandenen Luftzuführungen Möglichkeiten zur gezielten, mehrfachen Luftstufung geschaffen werden. Grundlage dafür sind Ergebnisse aus Vorversuchen sowie die Simulationsergebnisse der Gasströmung.



**Abbildung 6.2:** Schematische Darstellung der Feuerraumgeometrie der Pilotanlage TAMARA nach dem Umbau zur Mittelstromfeuerung [112, 113]

Um die Übertragbarkeit von Versuchsergebnissen auf Großanlagen (*scale-up*) zu erleichtern, ist der neue Feuerraum als Mittelstromfeuerung ausgeführt worden. Der überwiegende Teil kommerzieller MVA wird heute mit diesem Feuerungstyp ausgerüstet. Dabei wird die Strömungsführung nicht durch statische Einbauten, sondern durch strömungstechnische Maßnahmen gezielt beeinflusst. Der Verschleiß an feststehenden Einbauten zur Umlenkung der Strömung wird dadurch verringert.

Von der Hauptverbrennungszone bis zum Schlackeabwurf ist eine flexible Feuerraumdecke, entsprechend den Verhältnissen in Großanlagen, schräg nach unten gezogen, so dass mögliche Rückströmzonen im vorderen Bereich der Anlage unterdrückt werden. Mit Blick auf das angestrebte Konzept der Mittelstromfeuerung wird der Bereich oberhalb des Feststoffzuteilers als strömungsumlenkende *Nase* ausgeführt, was zu einer verbesserten Einmischung der Gase aus der ersten Primärluftzone führt. Durch den in der Nase installierten zusätzlichen Sekundärluftbalken kann Luft optional in den Feuerraum oder in die Nachbrennzone eingebracht werden.

Für eine wirksame Luftstufung werden die vorhandenen Sekundärluftbalken teilweise versetzt und zusätzliche Luftzuführungen eingebaut [112]. An den Positionen S1 bis S3 befinden sich Sekundärluftbalken mit je vier nebeneinander angeordneten Düsen mit je 32 mm Durchmesser (Abbildung 6.2). Aufgabeort und -richtung der Luft kann damit zur Optimierung der Verbrennung variiert werden.

Durch Luftzuführung zwischen zweiter und dritter Primärluftzone oberhalb eines gekühlten Wandbereichs ist eine weitere Luftstufung möglich. Über dem Gutbett sind zwischen den, in Abbildung 6.2 eingezeichneten Probenahmestutzen, Felder vorgesehen, welche mit porösen, durchströmbaren Feuerfeststeinen zugestellt werden können. Durch diese Felder kann vorgewärmte Luft aus der Seitenwandkühlung in den Feuerraum eingebracht werden [112].

Um die Vergleichbarkeit zu den bisher mit der ursprünglichen Geometrie erzielten Messergebnissen zu ermöglichen ist die neue Geometrie der TAMARA mit geringem Aufwand rückbaubar.

### 6.1.2 Messtechnik

Zur Validierung und Optimierung sind Profilmessungen gasförmiger Spezies und Temperaturen in Gutbett und Feuerraum aufgenommen worden.

An den Ports P1 bis P5 etwa 250 mm oberhalb des Rosts (siehe Abbildung 6.2) wird ein Gasvolumenstrom von maximal  $3 \text{ l min}^{-1}$  direkt aus dem Feuerraum abgezogen. Dabei wird eine auf  $70 \text{ °C}$  temperierte, wassergekühlte Sonde verwendet. Bei konstant  $180 \text{ °C}$  werden aus diesem Rauchgas Feinstpartikel mit einem Quarzfaserfiltermedium vollständig abgeschieden, und danach in einer Waschstufe bei  $5 \text{ °C}$  die kondensierbaren Gasbestandteile entfernt. Der abgekühlte Gasstrom gelangt über eine beheizte Probenahmeleitung in die in Reihe geschalteten NDIR (*non-dispersive infrared*) Messsysteme. Mit NDIR werden die Konzentrationen der Spezies  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$  und  $\text{O}_2$  bestimmt. Zusätzlich kann mit NDIR Stickoxid ( $\text{NO}$ ) gemessen werden. Direkt hinter dem Partikelfilter besteht die Möglichkeit, zusätzlich ein FTIR (*fourier-transformed infrared*) Messsystem für die weitergehenden Gasanalysen anzukoppeln. Die lokalen Messungen werden bei stationären Bedingungen über einen Zeitraum von mindestens 20 min durchgeführt [188].

Das axiale Temperaturprofil entlang des Brennstoffbetts und in der Nachbrennzone wird mit Thermoelementen gemessen. Die Temperaturmessungen im Feuerraum erfolgen an den Positionen T70 bis T75 (siehe Abbildung 6.1). Zusätzlich werden Messungen direkt im Feststoffbett über die Thermoelemente T50 bis T67 durchgeführt (nicht in Abbildung 6.1 gezeigt).

### 6.1.3 Brennstoff

Als gut handhabbarer Brennstoff wird an der TAMARA Unterkorn aus der MBA<sup>1</sup> der Anlage Wetterau, gemischt mit BRAM (*Brennstoff aus Müll*), eingesetzt. *Unterkorn* sind

---

<sup>1</sup>MBA = *mechanisch-biologische Aufbereitung*

diejenigen Partikel, welche bei der Siebung durch das Sieb hindurchfallen. Dadurch wird eine relativ definierte Partikelgrößenverteilung gewährleistet. Für die Verbrennungsversuche wird das MBA-Unterkorn dabei direkt aus der laufenden Aufbereitung entnommen.

Zur Aufbereitung passiert der Brennstoff nacheinander Grobsortierung, Rotorschere und Siebtrommel mit einer Siebweite von 60 mm. Während das Überkorn aus der Siebung die Hauptmenge des heizwertreichen Sekundärbrennstoffs liefert, durchläuft das Unterkorn der Siebtrommel eine 5-tägige Intensivrotte. Danach wird das Rottegut auf eine Restfeuchte von ca. 30 % getrocknet, erneut gesiebt und das Überkorn ebenfalls der heizwertreichen Fraktion zugeschlagen. Das verbleibende Unterkorn umfasst danach ca. 40 % der Masse des Ausgangsstoffs. Die heizwertreiche Fraktion wird in Ballen gepresst.

Die Kurz- und Elementaranalyse des verwendeten Brennstoffes ist im Anhang in den Tabellen C.1 und C.2 enthalten.

Zur Heizwerteinstellung auf einen rechnerischen Mittelwert von  $H_u = 9,0 \text{ MJ kg}^{-1}$ , werden dem MBA-Unterkorn 12,5 Ma.-% BRAM beigemischt. BRAM, mit einem Heizwert von  $H_u = 17,2 \text{ MJ kg}^{-1}$ , wird dazu separat als Pellet dosiert und in der Brennstoffaufgabe mit dem MBA-Unterkorn zusammengeführt (siehe Tabelle C.4).

Der Brennstoff wird während der Versuchskampagnen in unregelmäßigen Abständen beprobt. Jeweils im Abstand von 8 h werden dazu Proben von der Dosierbandwaage entnommen (ca. 1 kg). Diese Teilproben eines Tages werden zu einer einzigen Tagesprobe zusammengefasst und analysiert. Die Brennstoffanalyse des Unterkorns eines Messtages gibt einen Hinweis auf Schwankungen während längerer Zeiträume [188]. Für den in den Tabellen C.1 und C.2 dargestellten Brennstoff ergeben sich aus der Analyse ein Mittelwert des Brennwertes von  $\bar{H}_o = 11,35 \text{ MJ kg}^{-1}$  und für einen konkreten Messtag von  $H_o = 7,42 \text{ MJ kg}^{-1}$ . Als mittlerer Heizwert ergibt sich  $\bar{H}_u = 7,45 \text{ MJ kg}^{-1}$  und  $H_u = 5,85 \text{ MJ kg}^{-1}$ .

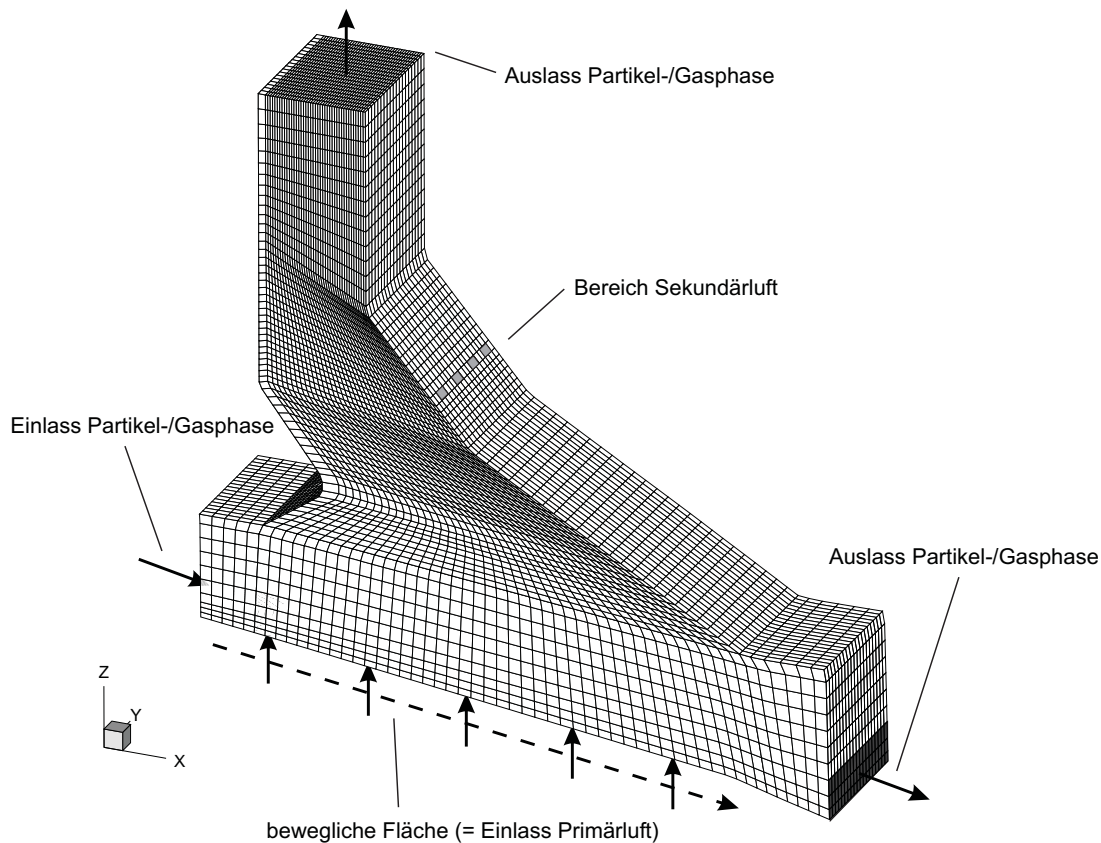
### 6.1.4 Numerische Simulation

Die Diskretisierung des Feuerraumes erfolgt mit einem kurvilinearen strukturierten BFC Gitter (*body-fitted-coordinates*). Durch die Flexibilität der BFC-Koordinaten können beliebige Geometrien mit dem Präprozessor<sup>2</sup> leicht realisiert werden. Abbildung 6.3 zeigt die vollständige Diskretisierung der neu gestalteten Feuerraumgeometrie. Das Gitter umfasst eine Diskretisierung von 81.144 Zellen. Als Diskretisierungsschema wird ein Upwind Schema 1. Ordnung verwendet. Das resultierende System aus gekoppelten linearen Gleichungen wird mittels der Gauß-Seidel-Methode (SOR<sup>3</sup>) numerisch gelöst. Als Druckkorrekturverfahren der Gasphase wird das SIMPLE Verfahren verwendet.

---

<sup>2</sup>ICEM CFD v4.0.1

<sup>3</sup>SOR = *successive over relaxation*



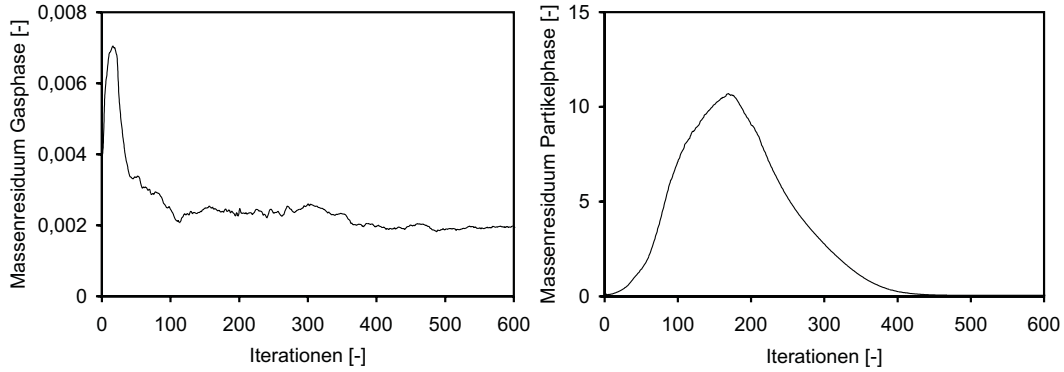
**Abbildung 6.3:** Diskretisierung der Brennkammer der halbtechnischen Anlage TAMARA mit allgemeinem kurvilinearem Gitter (81.144 Zellen)

Die Versuchsparameter definieren neben der Brennstoffzusammensetzung die Randbedingungen für die Simulation. Typische Betriebsparameter der Simulationsrechnung für Massenstrom  $\dot{m}_S$ , Heizwert  $H_U$ , Gesamtluft-  $\dot{V}_F$  und Sekundärluftstrom  $\dot{V}_{SL}$  der neuen Konfiguration sind im Anhang in Tabelle B.4 angegeben. Die Stufung der Primärluft erfolgt über alle vier Rostzonen. Der Sekundärluftanteil beträgt dabei maximal 45 %. Als Brennstoff wird die Mischung aus MBA ( $H_U = 5,8 \text{ MJ kg}^{-1}$ ) und BRAM ( $H_U = 17,2 \text{ MJ kg}^{-1}$ ) verwendet (siehe Abschnitt 6.1.3).

Für eine Euler/Euler-Mehrphasensimulation können Rechenzeiten von ca. 4 h auf einem Arbeitsplatzrechner (3,2 GHz) erreicht werden. Dabei werden für die in Abbildung 6.3 dargestellte Diskretisierung, bei Berechnungen mit einer Partikel- und der Gasphase, ca. 172 MB Arbeitsspeicher benötigt. Das Konvergenzkriterium von  $10^{-4}$  für das normierte Massenresiduum ist in den meisten Fällen nach ca. 10.000 Iterationen erreicht. Als *Konvergenz* bezeichnet man die Eigenschaft eines Diskretisierungsverfahrens, wenn der numerische Fehler mit größer werdender Anzahl von Diskretisierungsstellen abfällt [140]. In der Abbildung 6.4 sind die Massenresiduen von Gas- und Partikelphase für die ersten 600 Iterationen dargestellt. Der Konvergenzverlauf der Gasphase ist im Vergleich zur

Rechnung für Euler-Einphasenströmungen langsamer, da durch die durchströmte Partikelphase große Temperaturgradienten auf die Gasphase aufgebracht werden. Das Massenresiduum ist, bedingt durch die geringere physikalische Dichte  $\rho$  der Gase, auf einem wesentlich niedrigeren Niveau als das der Feststoffphase.

Der Austausch von Quellen bzw. Senken der Masse und des Impulses zwischen den Phasen erschwert den Lösungsverlauf.



**Abbildung 6.4:** Massenresiduen von Gasphase (*linke Seite*) und Partikelphase (*rechte Seite*) bei der numerischen Simulation der Anlage TAMARA

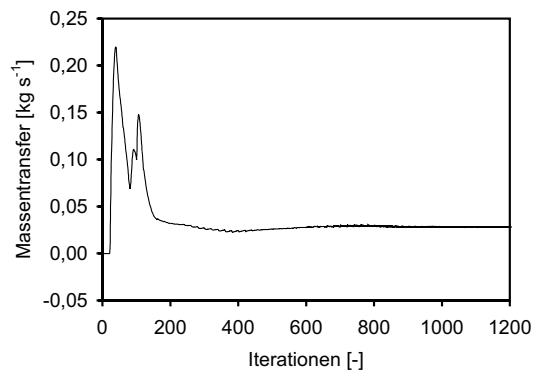
Durch die Initialisierung wird die Konvergenz der Gasphase begünstigt. Hier können bereits charakteristische Werte für die Gase im Feuerraum gewählt werden. Die im Rechenraum vorhandene Gasmasse wird während des Simulationsverlaufs nicht wesentlich verändert.

Bei der Partikelphase ist dies anders. Der Konvergenzverlauf, in Abbildung 6.4 auf der rechten Seite, zeigt in den ersten 400 Iterationen zunächst einen sehr starken Anstieg des Massenresiduums, da sich zu Beginn der Simulation noch keine Partikel innerhalb des Rechenraums befinden. Die Massenbilanz ist dann noch nicht geschlossen. Bedingt durch die als Randbedingungen gesetzten Volumenfraktionen, *füllt* sich das Rechengebiet zu Beginn des Lösungsverlaufes mit Partikeln, die aber durch die geringe Geschwindigkeit nur langsam bis zu einem Auslass gelangen können. Der Transfer zwischen den Phasen ist ebenfalls durch die Kinetik der Reaktionen verzögert. Sobald sich das Partikelbett ausgebildet hat und ein Auslass erreicht ist bzw. der Transfer von Masse zwischen Partikel- und Gasphase ausgebildet ist, sinkt das Massenresiduum wieder stark ab. Bedingt durch die höhere physikalische Dichte der Partikel erreicht es jedoch nie das Niveau der Gasphase, sondern in der Regel einen Bereich von  $10^{-3}$  bis  $10^{-4}$ .

In Abbildung 6.5 ist der Massetransfer  $S_{P,G}$  zwischen den Phasen in  $\text{kg s}^{-1}$  dargestellt. Dieser ergibt sich aus der Summe der Raten aller heterogenen Reaktionen. Er ist so definiert, dass er positive Werte annimmt, wenn Masse vom Partikel zum Gas transportiert wird. Der Massetransfer stellt ebenfalls ein Maß für den Lösungsfortschritt der Simula-



tion dar. Wenn er sich auf einem konstanten Niveau eingependelt hat, wird die Lösung stabil. Starke Schwankungen führen zu einer Verschlechterung des Konvergenzverhalten der einzelnen Phasen, da die Quellterme sich dann von Iteration zu Iteration ändern.



**Abbildung 6.5:** Transferrate der Masse zwischen Partikel- und Gasphase bei der numerischen Simulation der Anlage TAMARA

Die Transferrate kann zu Beginn einer Simulation negative Werte annehmen, da zunächst sehr viel  $\text{O}_2$  aus der Gasphase an den Partikeln adsorbiert wird. Dieser Effekt gleicht sich im Laufe der Rechnung aus, da Sauerstoffmoleküle in Form von CO und  $\text{CO}_2$  wieder vom Partikel desorbiert werden. Zusätzlich werden Kohlenwasserstoffe und Wasser vom Partikel freigesetzt, wodurch die Rate im positiven Bereich bleibt. Ein weiterer Faktor der den Verlauf der Transferrate und damit den Lösungsverlauf bestimmt, ist die Konvergenz des Strahlungsmodells (siehe Abschnitte 3.1.4.2 und 3.2.3).

### 6.1.5 Ergebnisse

Für die Validierung des Modells werden mit dem neu in AIOLOS implementierten Festbettmodell Strömungs-, Temperatur- und Konzentrationsprofile bei verschiedenen Sekundärluftkombinationen berechnet. Die Ergebnisse zeigen das strömungsmechanische und thermische Verhalten in der neu umgebauten Brennkammer unter Mittelstrombedingungen.

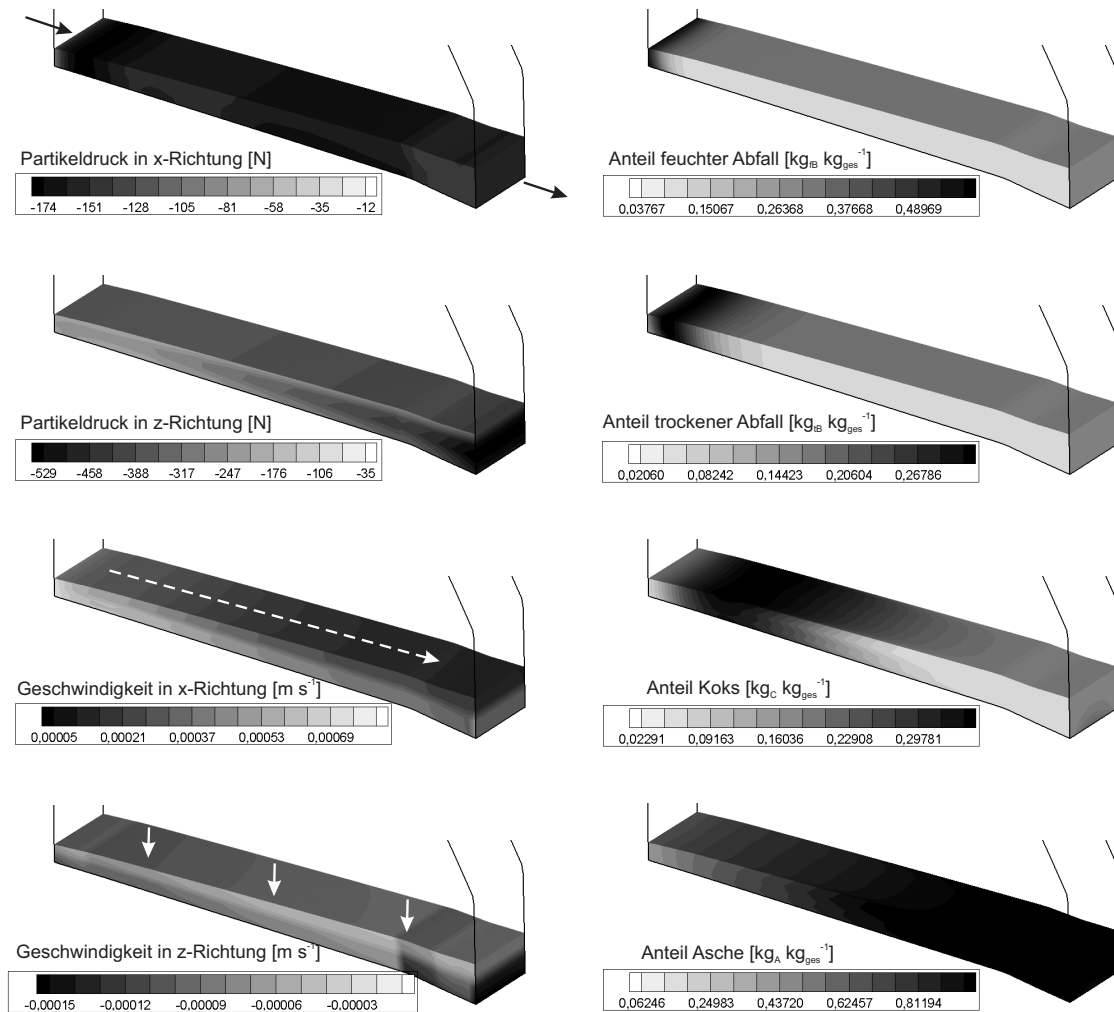
**Bewegung und Speziesverteilung im Festbett** Das Bewegungsverhalten der Partikel auf dem Rost sowie die daraus resultierende Verteilung der Brennstoffkomponenten stellt die Basis für die Beschreibung der Strömung und Reaktion im Feuerraum dar. In Abbildung 6.6 sind verschiedene Größen innerhalb der Festbettphase im unteren Teil der Anlage TAMARA abgebildet.

Entsprechend der auf die Partikel wirkenden Kräfte stellt sich im Festbett ein stationärer Bewegungszustand ein. Dieser wird durch den Partikeldruck bestimmt. Er führt zur Bewegung der Partikel entlang des Rostes und bestimmt die Form des Festbetts, wobei die Partikel, bedingt durch ihr Eigengewicht, am Boden der Anlage verbleiben und am Ausgang zum unteren Ende des Rostes wandern.

Auf der linken Seite von Abbildung 6.6 sind entlang des Rostes der wirkende Partikeldruck und die sich daraus ergebenden Geschwindigkeiten aufgetragen (*hier: x-Richtung und z-Richtung*). Der Druck wird durch die, aus der Schwerkraft resultierenden, Normalspannungen und die Impulsquelle am beweglichen Rost bestimmt. Ein geringer Teil des Partikeldrucks in  $x$ -Richtung hat seinen Ursprung im Impuls der Partikelphase am Einlass. Der Partikeldruck in  $x$ ,  $y$  und  $z$ -Richtung führt zu den jeweiligen Geschwindigkeitskomponenten. Auf der linken Seite von Abbildung 6.6 ist sowohl die Geschwindigkeit in  $x$ -Richtung als auch die Geschwindigkeit in  $z$ -Richtung dargestellt.

Der Partikeldruck in  $z$ -Richtung ist wesentlich größer als in andere Richtungen. Er wird fast ausschließlich durch die Schwerkraft hervorgerufen und bestimmt die Form des Festbetts maßgeblich. Die Schwerkraft macht damit in der Kräftebilanz den überwiegenden Anteil aus und verhindert, dass die Partikel sich frei im Feuerraum verteilen. Die resultierende Geschwindigkeit in  $z$ -Richtung ist sehr gering. Da die Partikel nicht in diese Richtung ausweichen können, wirkt primär der Anteil der Normalspannungen in  $x$ - und  $y$ -Richtung.

Die in Querrichtung zur Rostbewegung ( $y$ -Richtung) herrschenden Drücke und die sich daraus ergebenden Geschwindigkeiten sind sehr klein und werden hier nicht gezeigt. Sie beeinflussen die Gesamtbewegung der Partikelphase, da sie zusätzlich Normalspannungen bewirken und außerdem zu einer geringen lateralen Vermischung des Brennstoffs auf dem

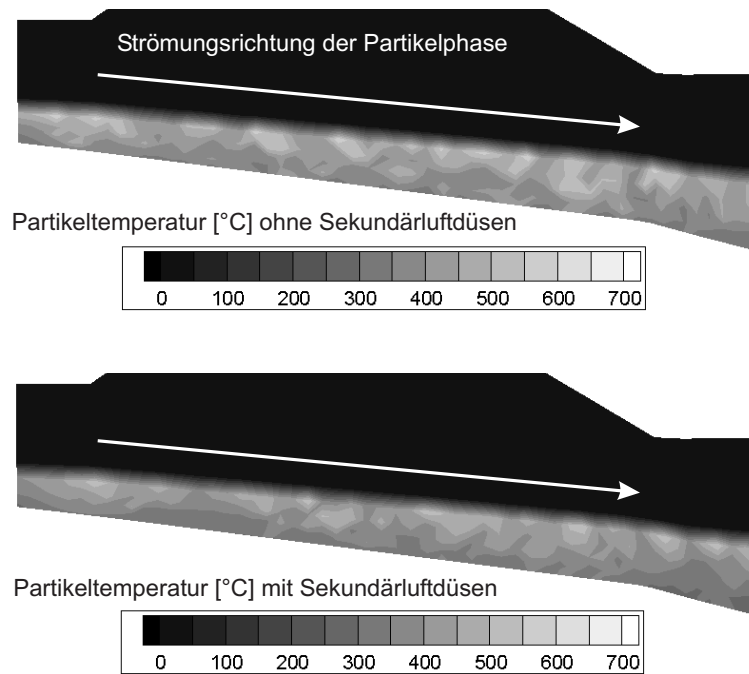


**Abbildung 6.6:** *linke Seite:* Partikeldrücke und Geschwindigkeiten innerhalb des Feststoffbetts; *rechte Seite:* Verteilung der Anteile an feuchtem und trockenem Abfall, Koks und Asche (Anteile sind bezogen auf das jeweilige Gesamtgewicht; Sekundärluftdüsen eingeschaltet)

Rost führen.

Durch die Geschwindigkeitsverteilung des Brennstoffs ergeben sich charakteristische Verteilungen der Brennstoffkomponenten entlang des Rosts. Bedingt durch den in Abschnitt 3.3 geschilderten Ablauf der verschiedenen Teilschritte kommt es in dem Müllbett entlang des Transportweges auf dem Rost zu einer charakteristischen Verteilung der einzelnen Brennstoffkomponenten. Auf der rechten Seite von Abbildung 6.6 ist oben zunächst der Anteil an feuchtem Abfall zu sehen. Nachdem die Feuchtigkeit getrocknet ist, beginnt der Anteil an trockenem Abfall zu pyrolysieren. Die Verbrennung des Koks erfolgt wesentlich langsamer, so dass dieser sich über einen größeren Bereich verteilt. Gegen Ende des Transportweges macht die Asche den überwiegenden Anteil am Partikel aus.

**Temperaturverteilung im Festbett** Die errechneten Temperaturverläufe im Inneren des Festbetts der Anlage TAMARA sind in Abbildung 6.7 dargestellt. Der obere Längsschnitt zeigt die Konfiguration ohne, unten ist der Fall mit Sekundärluft abgebildet.

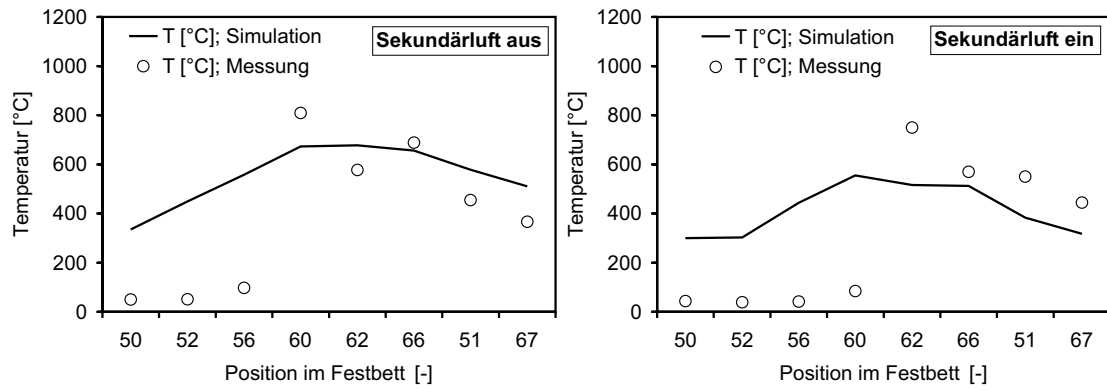


**Abbildung 6.7:** Errechnete Temperaturverläufe im Inneren des Festbetts der Anlage TAMARA ohne Sekundärlufteinsatz (*oben*) und mit Sekundärlufteinsatz (*unten*)

Es ist zu beachten, dass hier nur die Partikeltemperatur dargestellt ist. Die Gasphasentemperatur ist in der Abbildung nicht enthalten. Wo keine Partikel vorhanden sind, wird deshalb eine Temperatur von 0 °C angezeigt. Aus der Darstellung geht hervor, dass gerade im hinteren Bereich des Betts eine starke Temperaturerhöhung stattfindet. Diese ist unter anderem bedingt durch die oberhalb abgesenkte Feuerraumdecke, die als direkte Strahlungsquelle dient.

Bei den untersuchten Sekundärlufteinstellungen wird der Temperaturverlauf im Bett durch die sich ausbildende Strömungsverteilung im Brennraum geprägt. Neben der Temperaturverteilung im Feuerraum kann dadurch insbesondere die Feuerlage auf dem Rost stark beeinflusst werden.

Über die Thermolemente können im Festbett die Temperaturen direkt gemessen werden. In Abbildung 6.8 sind die gemessenen Temperaturen im Vergleich zu den simulierten Werten dargestellt. Auf der linken Seite wird die Konfiguration bei ausgeschalteten Sekundärluftbalken gezeigt, rechts sind die Werte unter Einfluss der Sekundärluft.



**Abbildung 6.8:** Vergleich zwischen gemessenen und simulierten Temperaturen im Festbett (linke Seite: ohne Sekundärluft; rechte Seite: mit Sekundärluft)

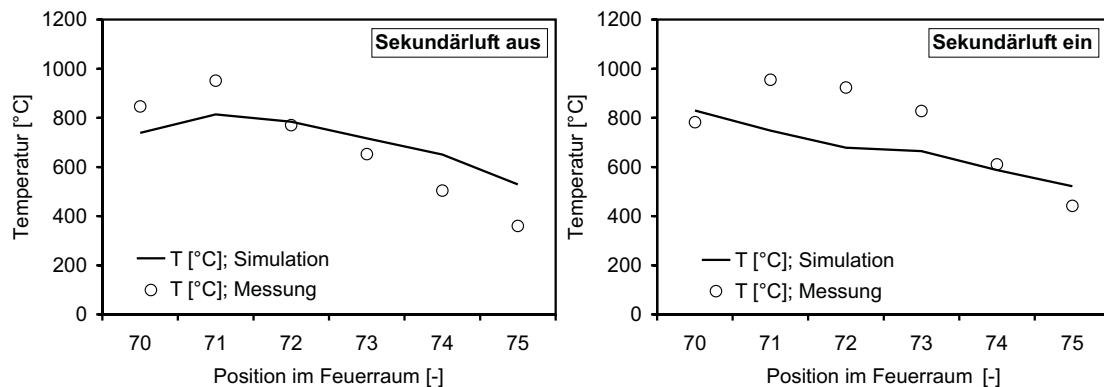
Im Vergleich zu den gemessenen Werten ist die Temperatur im vorderen Bereich des Betts zu hoch (siehe auch Abbildung 6.7). Grund hierfür ist, dass die Thermoelemente im Inneren des Betts einen mittleren Wert aus Partikeltemperatur und Temperatur der umgebenden Gasphase messen. In der Abbildung 6.8 sind aber als Simulationsergebnisse die idealen Partikeltemperaturen aufgetragen, die Gastemperatur wird dabei nicht berücksichtigt.

In der Hauptverbrennungszone, wo die Partikeltemperatur und die Gasphasentemperatur wieder ähnlicher sind, stimmt die Messung entsprechend besser mit der Rechnung überein. Gegen Ende des Rosts stimmen sie ebenfalls gut überein, da sich hier der strahlungsdominierte Wärmehaushalt in einem stationären Zustand befindet und somit von der Simulation gut wiedergegeben werden kann.

**Temperaturverteilung im Feuerraum** Gemessene und simulierte Temperaturen in der Gasphase des Feuerraums oberhalb des Gutbetts zeigen bei abgeschalteter Sekundärluft eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung (siehe Abbildung 6.9; linke Seite). Die Positionen der einzelnen Messstellen (70 bis 75) entlang des Feuerraumes werden durch die Skizzen der Anlage in Abbildung 6.1 und 6.2 in Abschnitt 6.1.1 ersichtlich. Bei eingeschalteten Luftdüsen zeigen die simulierten Werte eine Unterbewertung der Feuerraumtemperatur um maximal 200 K. Ein Grund hierfür könnte die Differenz zwischen berechneter und gemessener Partikeltemperatur im Festbett unterhalb dieses Feuerraumbereichs sein.

Für die untersuchten Sekundärlufteinstellungen sind die Temperaturprofile im Bereich der hinteren Rostzone nahezu unverändert. Die berechneten Temperaturen von ca. 600 °C am Ende der Verbrennungskammer zeigen gute Übereinstimmungen. Bei unterschiedlicher Höhe des Feuers können typische Temperaturprofile einer Mittelstromfeuerung sowohl ohne Sekundärluft als auch bei gleichmäßiger Verteilung der Sekundärluft über al-

le Düsenbalken erreicht werden. Große Temperaturunterschiede liegen dagegen für die einzelnen Lufteinstellungen oberhalb der Hauptverbrennungszone und am Übergang zur Nachverbrennungszone vor.



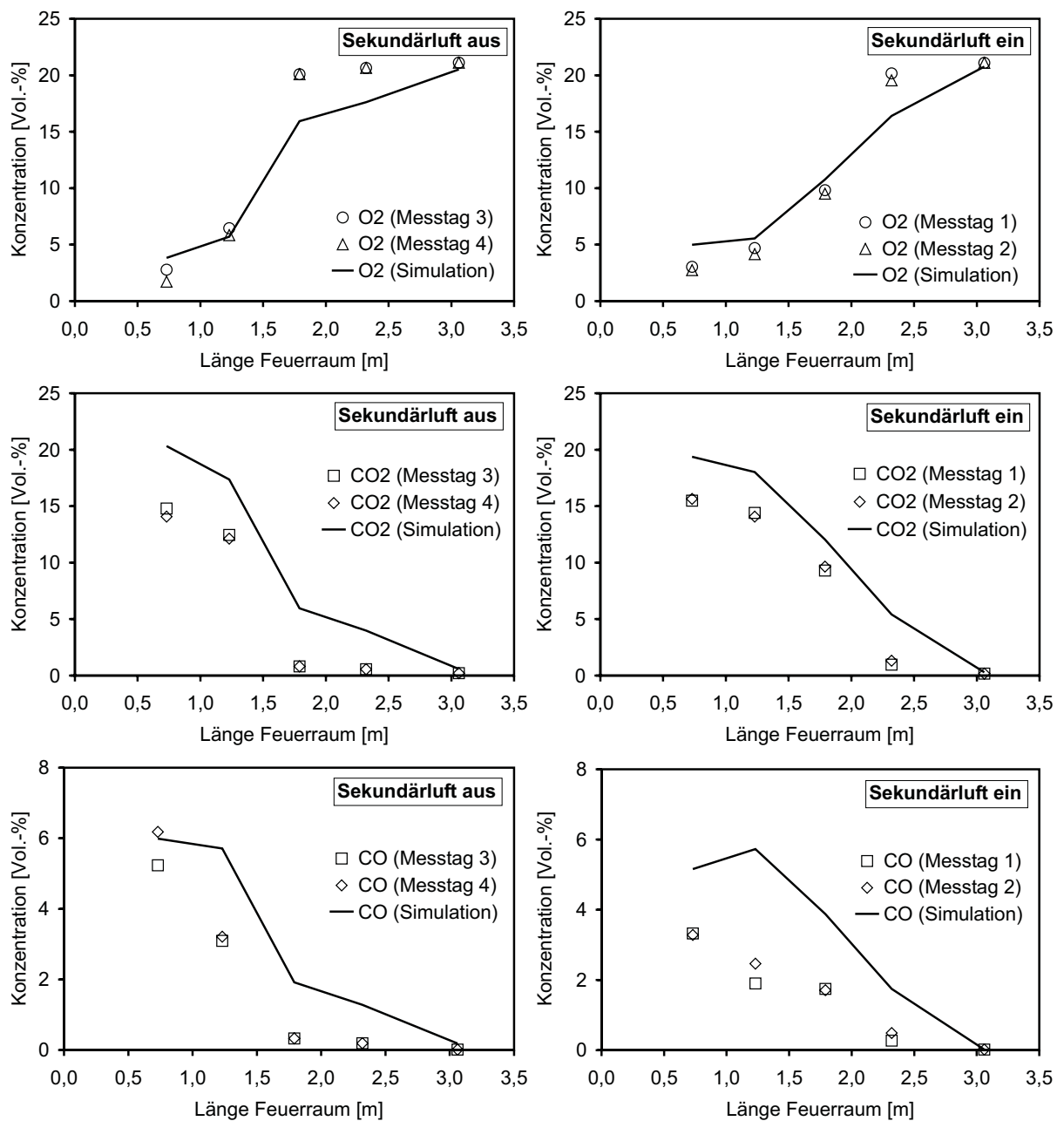
**Abbildung 6.9:** Vergleich zwischen gemessenen und simulierten Temperaturen im Feuerraum (linke Seite: ohne Sekundärluft; rechte Seite: mit Sekundärluft)

In der Hauptverbrennungszone werden für alle Sekundärlufteinstellungen Maximaltemperaturen von ca. 1000 °C gemessen. Für alle Strömungsführungen zeigen sich bei der Simulation Temperaturen von etwa 700 bis 800 °C in der Verbrennungskammer. Rechts von der Hauptverbrennungszone befindet sich kühleres Abgas mit ca. 500 °C. Hier werden nur noch wenige brennbare Gase freigesetzt. Der Brennstoff im Bett ist zu diesem Zeitpunkt bereits zu einem Großteil umgesetzt. Durch die stattfindende Trocknung des Brennstoffs liegen hohe H<sub>2</sub>O-Konzentrationen von bis zu 35 Ma.-% vor.

**Gasphasenspezies im Feuerraum** Um die chemische Reaktion der Partikel im Festbett bewerten zu können, werden Messungen der Gasphasenspezies direkt oberhalb des Festbetts durchgeführt. In Abbildung 6.10 sind Werte dieser Messungen sowohl für eingeschaltete Sekundärluft als auch ohne Sekundärlufteintrag dargestellt.

Die Messwerte stellen Mittelwerte dar und sind über der Länge der gesamten Anlage aufgenommen worden. Um die Reproduzierbarkeit zu gewährleisten wurden sind die Messungen an verschiedenen Tagen wiederholt.

Dargestellt sind die Konzentrationen der Spezies O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> und CO. An der Position der Hauptverbrennungszone liegen relativ niedrige Sauerstoffkonzentrationen vor. Das meiste O<sub>2</sub> der Primärluft wird in dieser Rostzone bereits im Bett und in kurzem Abstand darüber zu CO und CO<sub>2</sub> umgesetzt. Zusätzlich wird auch Sauerstoff bei Reaktion der freiwerdenden Kohlenwasserstoffe zu CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>O umgesetzt. Bei Einsatz der Sekundärluft zeigt sich, durch die intensivere Verbrennung, ein größerer Verbrauch an Sauerstoff oberhalb des Bettbereiches. Die CO<sub>2</sub>-Konzentrationen korrelieren mit diesem Effekt. Hier zeigen

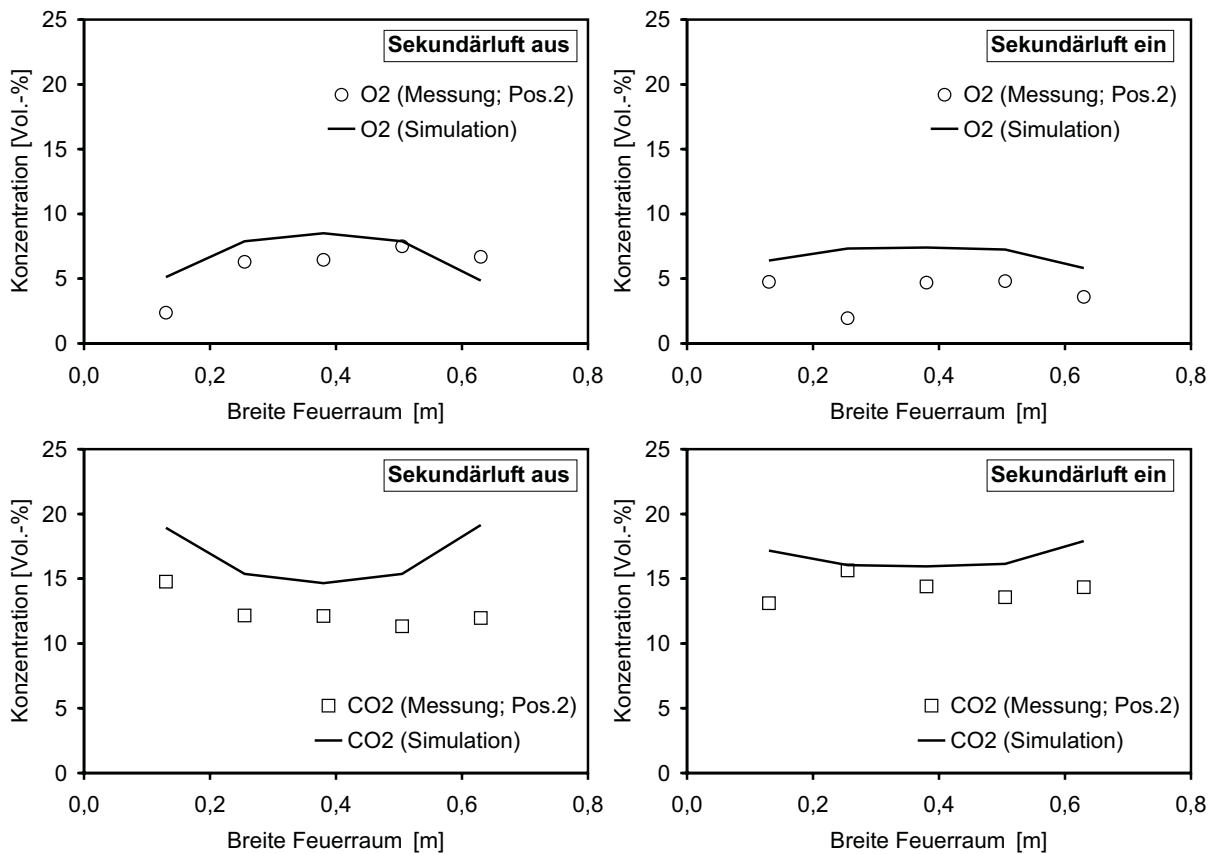


**Abbildung 6.10:** Gemessene Gasphasenspezies (O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, CO) über der Länge des Feuerraums oberhalb des Festbetts im Vergleich mit errechneten Werten (*linke Seite:* Sekundärluftdüsen geschlossen; *rechte Seite:* Sekundärluftdüsen offen)

die Simulationsergebnisse eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Werten. Die  $\text{CO}_2$ -Konzentration wird bei der Simulation nur leicht überbewertet.

In der realen Anlage TAMARA bestehen die Wände im unteren Bereich aus einer porösen Ausmauerung, durch welche im Bedarfsfall zusätzliche Plattenluft eingebracht werden kann. Diese porösen Wände sind im Rahmen der Simulation nicht berücksichtigt worden. Im Bereich der heißen Wände wird mehr Sauerstoff verbraucht. Bei den Simulationsergebnissen tritt dieser Effekt deutlicher hervor als bei den Messungen.

Um den Einfluss der Luftdüsen auf die Umsetzung in der Hauptverbrennungszone deutlich darstellen zu können, ist im vorderen Bereich des Rosts ein Profil der Konzentrationen, quer zur Hauptbewegungsrichtung des Abfalls, aufgenommen worden. Die gemessenen Sauerstoff- und Kohlendioxidkonzentrationen sind in Abbildung 6.11 dargestellt. Die Abbildung zeigt den Schnitt bei aus- und eingeschalteter Sekundärluft auf Höhe der Hauptverbrennungszone.



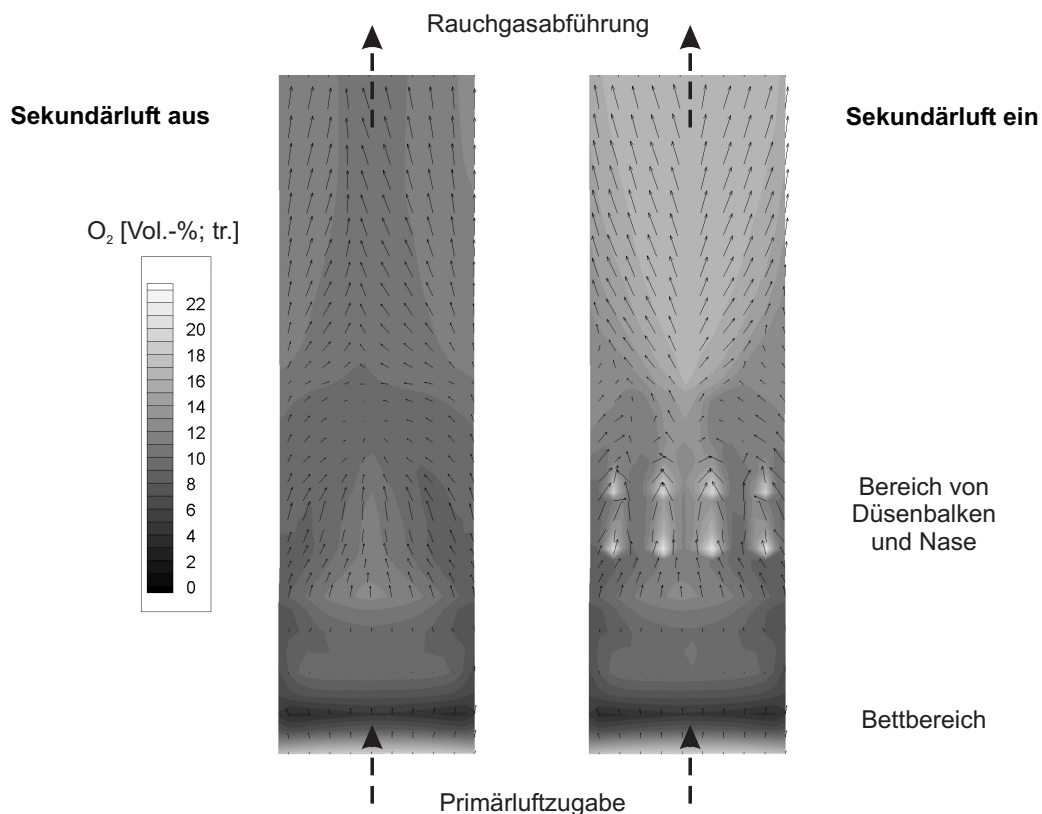
**Abbildung 6.11:** Gasphasenspezies ( $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ) über der Breite des Feuerraums (*linke Seite:* Sekundärluftdüsen geschlossen; *rechte Seite:* Sekundärluftdüsen offen)

Auch quer zur Strömungsrichtung zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und gemessenen Werten. Wie in Abbildung 6.10 und Abbildung 6.11 deutlich wird, korrelieren niedrigere  $\text{O}_2$ -Konzentrationen mit höheren  $\text{CO}_2$ -Werten. Es zeigt sich, dass



bei ausgeschalteten Sekundärluftdüsen an Messposition 2 (P2 in Abbildung 6.2) höhere Konzentrationen an  $O_2$  vorliegen. Dies bestätigt, dass die Verbrennung bei fehlender Sekundärluftzugabe weniger intensiv ist. Im Bettbereich zeigt sich bei eingeschalteten Düsen deshalb auch ein niedriger Sauerstoffgehalt.

Um die Wechselwirkungen zwischen Luftzugabe im Feuerraum und Verbrennung im darunter liegenden Bett deutlicher zu machen, sind in Abbildung 6.12 die Geschwindigkeitsvektoren im Mittelschnitt der Brennkammer dargestellt. Die Schnittebenen in Abbildung 6.12 befinden sich auf Position der Hauptverbrennungszone, wo auch die in Abbildung 6.11 dargestellten Messungen durchgeführt worden sind.



**Abbildung 6.12:** Berechnete Sauerstoffkonzentration und Geschwindigkeitsverteilung über der Breite des Feuerraums vom unteren Bettbereich bis zur Rauchgasabführung (*linke Seite:* Sekundärluftdüsen geschlossen; *rechte Seite:* Sekundärluftdüsen offen)

Die Geschwindigkeiten im Bett werden von  $0,2 \text{ m s}^{-1}$  auf ca.  $0,4 \text{ m s}^{-1}$  beschleunigt. Am Übergang vom Bett zum Feuerraum sind die Geschwindigkeiten geringer. Im Bereich der Nase werden sie nochmals auf etwa  $1,0 \text{ m s}^{-1}$  beschleunigt und erreicht im ersten Strahlungszug Werte von bis zu  $2,0 \text{ m s}^{-1}$ .

Auf der rechten Seite ist deutlich der Bereich hoher  $O_2$ -Konzentrationen im Bereich der Luftdüsen zu sehen. Durch die Düsen kommt es zu höheren Geschwindigkeiten, bedingt

durch den Impulseintrag und die schneller ablaufende chemische Reaktion. Zusätzlich wirkt sich die Querschnittsverengung, um die eindringenden Sekundärluftstrahlen herum, auf die Rauchgasströmung beschleunigend aus.

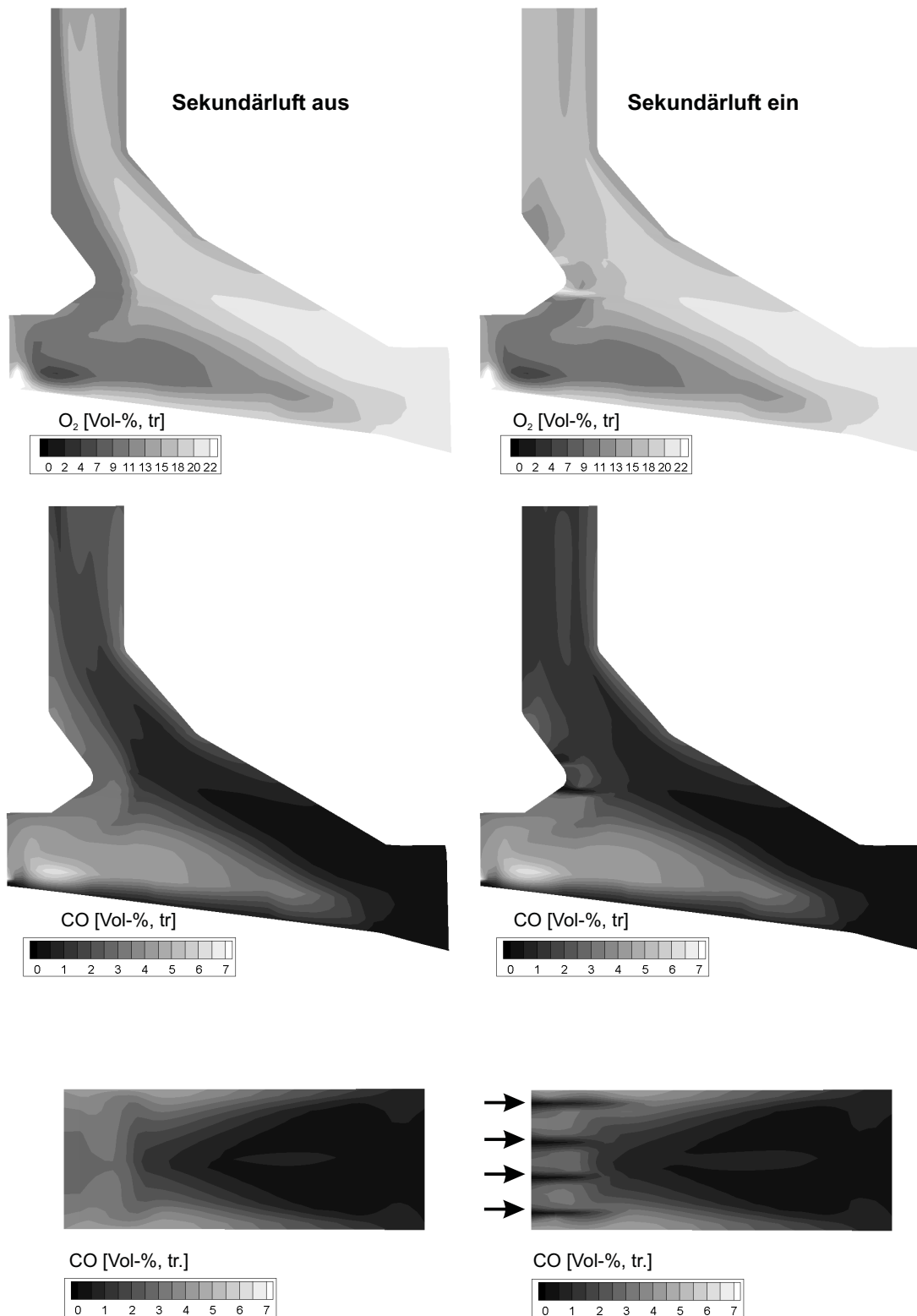
Bei Zugabe der Primärluft unterhalb des Brennstoffbettes liegt der O<sub>2</sub>-Gehalt noch auf Niveau der Umgebungsluft. Beim Austritt aus dem Bett bzw. direkt über der Oberfläche ist er auf ca. 4 bis 5 Vol.-% abgesunken. Weiter oben bewirken Verwirbelungen durch die Nase einen leichten Anstieg, da im Strahlungszug auch Rauchgas mit höherer O<sub>2</sub>-Konzentration aus dem vorderen Bereich der Rostzonen 3 bis 4 eingemischt wird (siehe auch Abbildung 6.1 auf Seite 99). Die Düsenbalken unterstützen diesen Effekt an dieser Stelle durch zusätzlichen Impuls- und Sauerstoffeintrag.

Es zeigen sich Zonen unterschiedlicher Geschwindigkeit in Abhängigkeit der Luftzugabe. Bei Einsatz der Düsen zeigt sich ein gleichmäßiges Geschwindigkeitsfeld im ersten Strahlungszug oberhalb der Nase. Ohne Sekundärluft kommt es zu einer Strahlenbildung im mittleren Bereich des Strahlungszugs. Die niedrigen Sauerstoffgehalte dort lassen auf Strahlen an unverbrannten Zwischenprodukten schließen. Die Strömungsführung zeigt, dass bei der Mittelstromfeuerung keine Rezirkulationszonen am Eintritt in den Strahlungszug verursacht werden. Ablagerungen von Flugasche, wie bei der ursprünglichen Geometrie, sind damit unwahrscheinlich.

Bei der, in Abschnitt 6.1.1 beschriebenen, Mittelstromführung der ursprünglichen Geometrie von TAMARA befand sich ein großer Wirbel (*Rezirkulationszone*) im vorderen Bereich der Anlage. Eine mögliche Strahlenbildung wird bei einem Längsschnitt durch die Anlage deutlicher. In Abbildung 6.13 sind deshalb als Beispiel für unverbrannte Produktgase die Konzentrationen von CO dargestellt. Bei fehlender Sekundärluft können höhere CO-Konzentrationen bis zum ersten Rauchgaszug vorliegen, was dann auf eine Strahlenbildung zurückzuführen ist. Aus Abbildung 6.13 geht jedoch hervor, dass das Geschwindigkeitsprofil bei der neuen Geometrie zu einer relativ gleichmäßigen Verteilung in diesem Bereich führt.

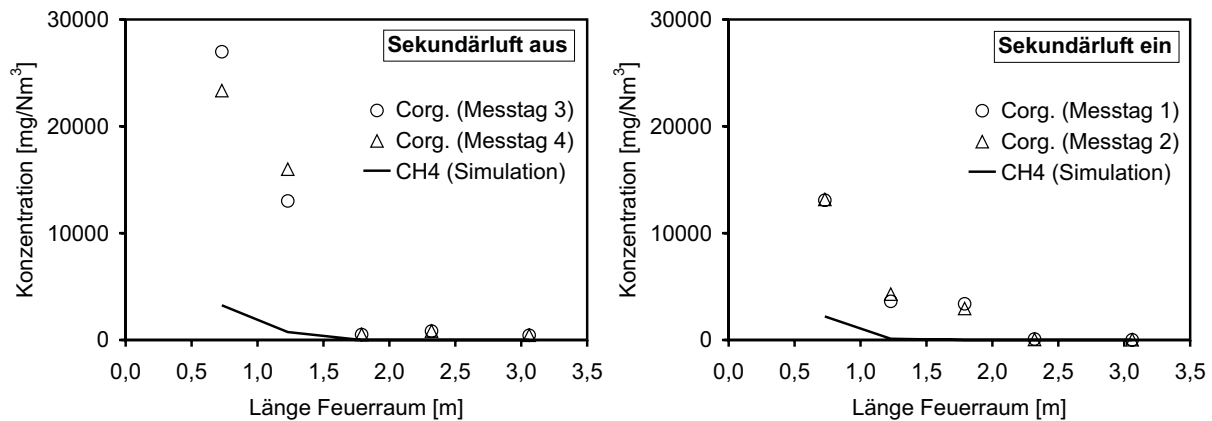
Gerade durch die Nase im vorderen Bereich wird viel Strahlungsenergie auf den unverbrannten Abfall aufgebracht. Die Position der Düsenbalken in diesem Bereich verhindert die Strahlenbildung. Ein Querschnitt auf Höhe der unteren Sekundärluftbalken zeigt eine gute Eindringung der Luft in den Feuerraum. Die Bereiche niedriger CO-Konzentration (*Pfeile* in Abbildung 6.13 unten) geben Aufschluss über die Eindringtiefe. Die optimale Nachverbrennung in diesem Bereich bietet die Möglichkeit, Schadstoffe, welche ebenfalls mit dem Rauchgas mitgeführt werden, weitgehend umzusetzen.

**Freisetzung von Kohlenwasserstoffen** Wie in Abschnitt 3.3.2 dargestellt, wird die Freisetzung von Kohlenwasserstoffen durch die Pyrolyse bewirkt. Die Konzentration an



**Abbildung 6.13:** Verteilung von Sauerstoff ( $O_2$ ) und Kohlenmonoxid ( $CO$ ) im Feuerraum der Anlage TAMARA bei Fahrweise mit Sekundärluft (*linke Seite*) und ohne Sekundärluft (*rechte Seite*); *unten*: Schnittdarstellung der  $CO$ -Konzentration auf Höhe des unteren Sekundärluftdüsenbalkens

organischem Kohlenstoff ( $C_{\text{org.}}$ ) im Brenngas wird in Abbildung 6.14 auf der Länge des Feuerraumes mit dem errechneten Pyrolyseprodukt Methan ( $\text{CH}_4$ ) verglichen. Es zeigt sich, dass die  $C_{\text{org.}}$ -Werte im vorderen Bereich der Anlage höher sind als die errechnete  $\text{CH}_4$ -Konzentration. In diesem Zusammenhang wird nochmals darauf hingewiesen, dass der gemessene organische Kohlenstoffanteil etwas andere Spezies repräsentiert, als die bei der Simulation verwendete lumping Komponente  $\text{CH}_4$ .



**Abbildung 6.14:** Konzentration an organischem Kohlenstoff ( $C_{\text{org.}}$ ) im Brenngas über der Länge des Feuerraumes im Vergleich mit errechneten Werten für Methan ( $\text{CH}_4$ ) (*linke Seite:* Sekundärluftdüsen geschlossen; *rechte Seite:* Sekundärluftdüsen offen)

Durch die neue Geometrie wird bei Einsatz der Sekundärluft ein praktisch vollständiger  $\text{CH}_4$ -Abbau erreicht. Dies ist unter anderem auf die intensive Vermischung der Rauchgase zurückzuführen. Hinter der Verbrennungszone liegen die experimentell ermittelten Konzentrationen an organischem Kohlenstoff unterhalb der Nachweisgrenze von  $1 \text{ mg Nm}^{-3}$ . Die Rechnungen zeigen dies ebenfalls.

Anhand der Ergebnisse wird deutlich, dass die neu entwickelte TAMARA optimal an den gewünschten Verbrennungsablauf angepasst ist. Das angewandte Modell kann für ähnliche Untersuchungen und Parameterstudien zur Optimierung von großtechnischen Anlagen eingesetzt werden. Nach der Implementierung von weiteren, für die Abfallverbrennung wichtigen Reaktionskinetiken, können mit dem Modell auch direkte Voraussagen über die Entstehung komplexerer Schadstoffe gemacht werden.

## 6.2 MHKW Ludwigshafen - Anlage im technischen Maßstab

Als Anwendungsfall im großtechnischen Maßstab wird der Kessel 1 des Müllheizkraftwerks (MHKW) Ludwigshafen ausgewählt. Das Einzugsgebiet des MHKW umfasst sieben Städte und Landkreise mit ca. 1.300 km<sup>2</sup> und annähernd 670.000 Einwohnern. Die Anlage deckt außerdem rund 70 % des Fernwärme- und 10 % des Strombedarfs der Stadt Ludwigshafen. Zur Verbesserung der technischen Eigenschaften und Anpassung an den gestiegenen Heizwert  $H_u$  des Brennstoffs ist ein Umbau des MHKW durchgeführt worden. Hierbei ist die Feuerraumgeometrie des Kessels 1 von Gleich- auf Mittelstromfeuerung umgestellt worden. Da der Einfluss der Sekundärluft auf den Strömungsverlauf im 1. Zug (Strahlungszug) des Kessels bei diesem neuen Konzept eine entscheidende Rolle spielt, ist er in der Planungsphase durch begleitende Simulationsrechnungen strömungstechnisch optimiert worden.

### 6.2.1 Anlagenbeschreibung

Die gesamte Anlage ist für einen Jahresdurchsatz von bis zu 180.000 Mg a<sup>-1</sup> genehmigt. Sie umfasst drei Verbrennungslinien und zwei Rauchgasreinigungslinien. Dabei können zwei komplette Linien gleichzeitig betrieben werden, was einer Leistung von 24 Mg h<sup>-1</sup> entspricht. Die Feuerungssysteme sind auf einen mittleren Heizwert von  $\bar{H}_u = 8.000$  kJ kg<sup>-1</sup> für Linie 2 und 3 und  $\bar{H}_u = 12.000$  kJ kg<sup>-1</sup> für die neue, von *LURGI Energie und Entsorgung GmbH* umgebaute, Linie 1 ausgelegt. Die Feuerraumgeometrie des neuen Kessels 1 ist in Abbildung 6.15 dargestellt.

Wie in der Einleitung in Abbildung 1.2 bereits dargestellt, wird der Brennstoff mit dem Müllkran aus einem Bunker in die Aufgabetrichter aufgegeben und rutscht durch den Beschickungsschacht auf eine Aufgabevorrichtung. Der Beschickungsschacht ist so bemessen, dass eine ausreichende Füllhöhe des Betts zur Luftabdichtung gegeben ist. Im oberen Teil des Schachts ist eine Absperrklappe angeordnet. Dadurch wird verhindert, dass Rauchgase zurückströmen. Die Aufgabevorrichtung besteht aus einem hydraulisch zu betätigenden Schieber, der den Brennstoff gleichmäßig auf den Rost aufgibt. Die Aufgabefolge dieses Schiebers ist stufenlos zwischen 4 und 50 Doppelhuben pro Stunde regelbar. Das Verhältnis von Vorlauf zu Rücklauf beträgt etwa 1:5. Der Aufgabeschieber übernimmt dabei zwei Funktionen, zum einen die Müllaufgabe (Arbeitshub) und zum anderen den Räumetrieb (Räumhub). Dieser Vorgang dient beim Abfahren der Anlage zum Entleeren des Aufgabetischs. Die reagierende Schüttung durchwandert den Feuerraum, auf sich langsam drehenden Rostwalzen (siehe auch Abbildung 2.3 auf Seite 15). Unterhalb der

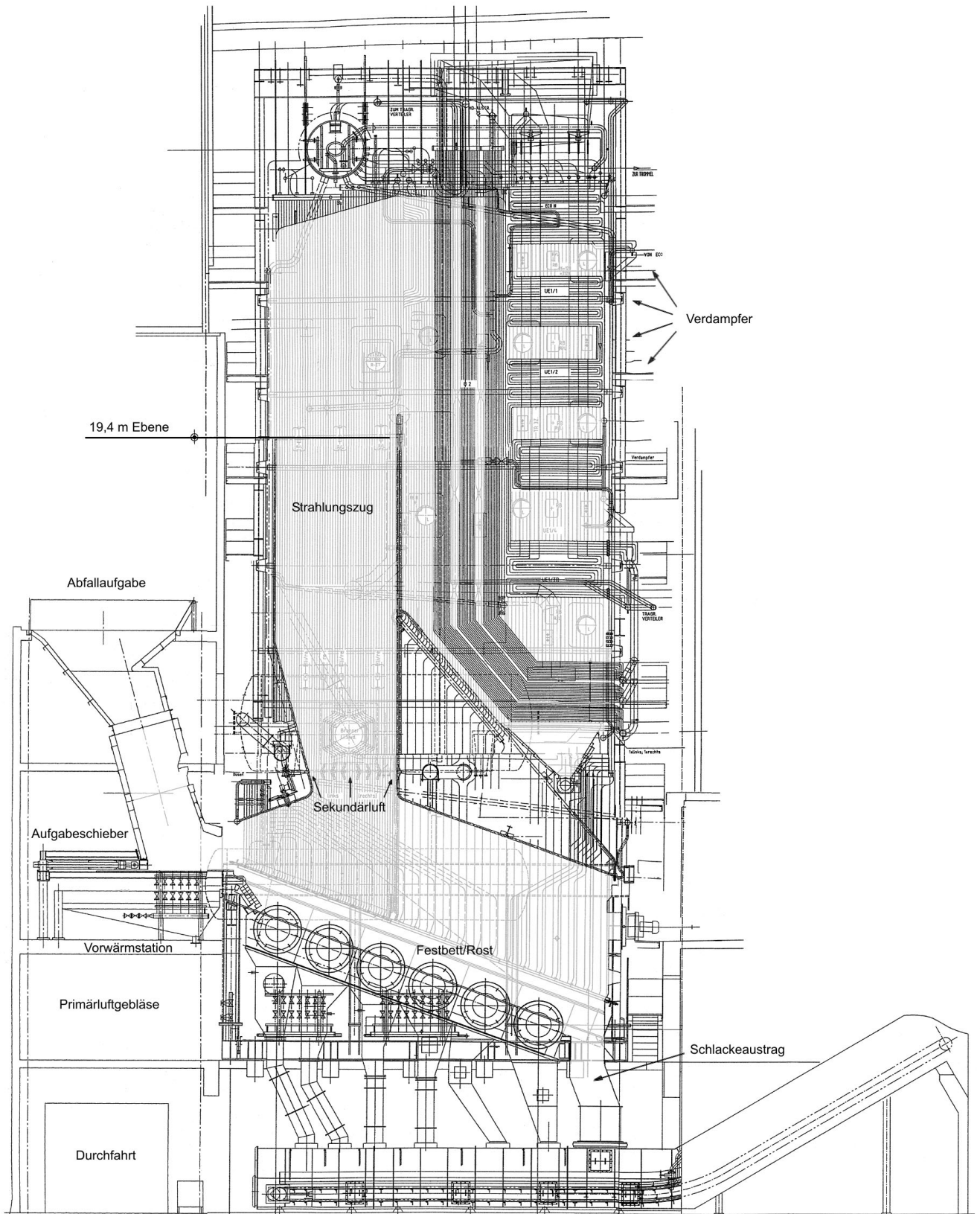
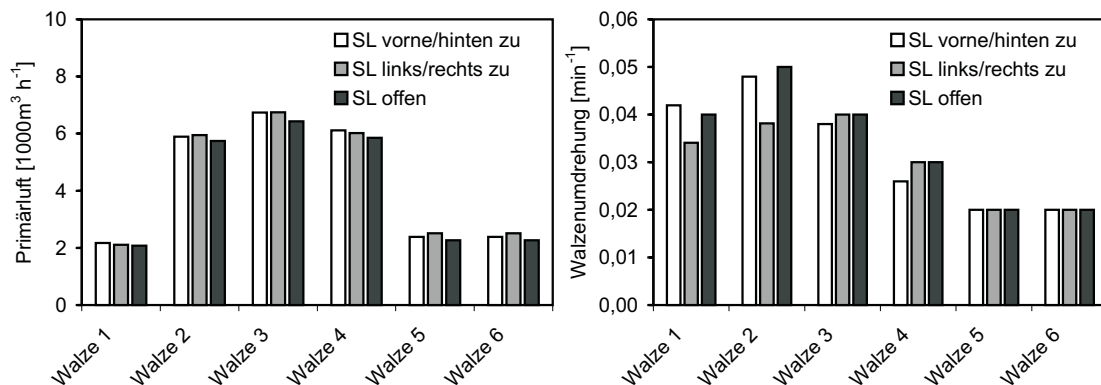


Abbildung 6.15: Schematische Darstellung - Kessels 1 MHKW Ludwigshafen

Walzen sind Rostdurchfalltrichter angeordnet. Die einzelnen Trichter leiten das durchrieselnde Gut über Aschefallrohre auf die Austragsvorrichtungen. Der ausgebrannte Müll und der Rostdurchfall gelangen über den Schlackeaustrag in einen mit Wasser gefüllten Nassentschlacker. Dort wird die heiße Schlacke abgekühlt und in den Schlackenbunker abgeworfen. Die in der Feuerung frei werdende Wärme wird im Dampferzeuger genutzt.

**Walzengeschwindigkeit und Primärluft** Die Primärluft wird über sechs Kanäle in den Feuerraum eingebracht (siehe Abbildung 6.15). Die vorgewärmte Luft wird dabei von unten durch den Rost eingeblasen. Das Brennstoffbett wird davon im Kreuzstrom durchströmt. Dabei wird jedem Primärlufttrichter die Verbrennungsluft über die Steuerung getrennt zugeführt. Die Luft zu den ersten fünf Walzen wird durch zwei Vorwärmer auf die für die Verbrennung optimale Temperatur vorgewärmt.

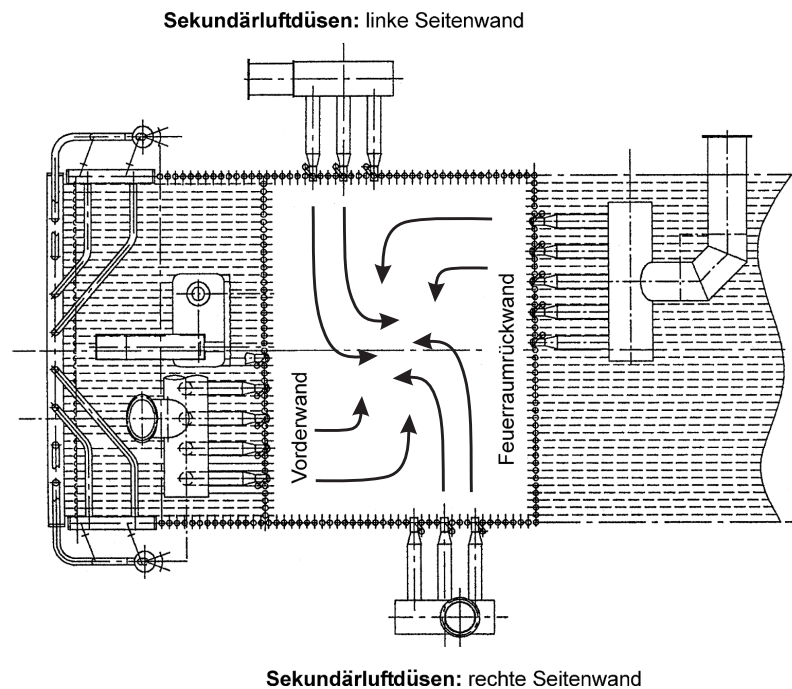
In Abbildung 6.16 ist die Verteilung der Primärluft auf die sechs Rostwalzen während des Messzeitraumes dargestellt. Die Luftstufung unter dem Rost erfolgt gemäß Abbildung 6.16 über alle sechs Walzen. Die Walzen unterhalb des Strahlungszugs erhalten die meiste Sekundärluft. Die Verteilung der Luft wird während die Messungen durchgeführt werden manuell eingestellt, um den Einfluss der Sekundärluft auf die Verbrennungsführung isoliert betrachten zu können.



**Abbildung 6.16:** Verteilung des Primärluftvolumenstroms in  $[\text{m}^3 \text{h}^{-1}]$  auf die sechs Rostwalzen (*linke Seite*); Walzenumdrehung in  $[\text{min}^{-1}]$  (*rechte Seite*)

Auf der rechten Seite von Abbildung 6.16 ist die Walzenumdrehung in  $[\text{min}^{-1}]$  dargestellt. Sie gibt die Impulsquelle für das Festbettmodell vor und beeinflusst somit direkt die Verweilzeit des Abfalls auf dem Rost und die Lage der Hauptverbrennungszone. Die Geschwindigkeiten der ersten vier Rostwalzen werden im Normalbetrieb in Abhängigkeit der Dampfleistung, des  $\text{O}_2$ -Gehaltes und der Temperatur am Feuerraumende geregelt. Während die Versuche laufen wird die Steuerung der Geschwindigkeit von Walze 1 bis 3 ebenfalls von Hand vorgenommen, um die einzelnen Tests vergleichen zu können. Die Regelung der Walzen 4 bis 6 erfolgt automatisch.

**Sekundärluft** In Abbildung 6.17 ist ein Schnitt durch den Kessel auf Höhe der Sekundärluft dargestellt. Er zeigt die neue Anordnung der vier Düsenbalken. Jeweils drei Düsen sind an den Seitenwänden angebracht, je fünf weitere auf Vorder- und Rückwand.



**Abbildung 6.17:** Schematische Darstellung der Strömungsführung auf Höhe der Sekundärluftdüsen nach Umbau zur Mittelstromfeuerung (*Kessel 1; MHKW Ludwigshafen*)

Die Düsengruppen sind versetzt zueinander angeordnet. Durch diese Anordnung wird, neben der zusätzlichen Sauerstoffzufuhr, ein Tangentialkreis der Rauchgase auf Höhe der Hauptausbrandzone erzeugt (siehe auch Abbildung 2.1). Bei optimaler Verteilung der Sekundärluftmenge setzt dieser sich bis in die höheren Regionen des Strahlungszuges fort. Durch diesen Impulseintrag kommt es zu einer Erhöhung der turbulenten kinetischen Energie und einer zusätzlichen Vermischung von Gaskomponenten und Sauerstoff. Damit werden die Abbaureaktionen der Zwischenprodukte (z.B. CO) begünstigt. Bei STAPF[195] wird von einem ähnlichen Effekt bei einem Drehrohrföfen berichtet.

Im Abschnitt 6.2.5 wird anhand von Messungen und Simulationsrechnungen exemplarisch der Einfluss der Sekundärluftdüsen auf das Strömungsfeld und die primärseitige Reduktion von Schadstoffen ermittelt. Dabei werden drei verschiedene Einstellungen untersucht. Neben der Standardfahrweise, bei der alle Düsenbalken gleichermaßen beaufschlagt sind, werden zunächst die Balken auf Vorder- und Rückwand geschlossen. Beim dritten Versuch sind diese offen und die Düsen an den Seitenwänden verschlossen.

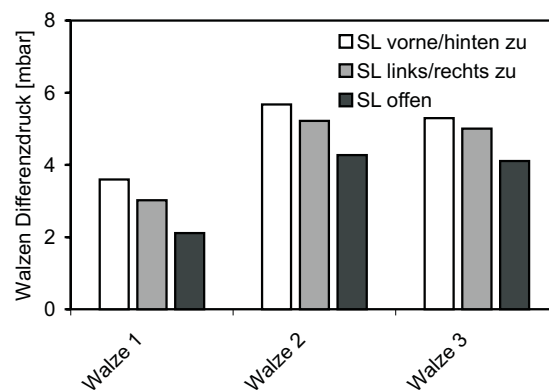


**Rauchgasreinigung** Das aus den Kesseln austretende Rauchgas wird über Rauchgaskanäle den Rauchgasreinigungsanlagen zugeführt. Diese umfassen jeweils die Komponenten Sprühtrockner, Elektrofilter und dreistufiges Wäschersystem. Zusätzlich erfolgt nach dem Austritt aus der Nasswäsche in einem ersten Katalysatorpaket eine selektivkatalytische Reduktion der Stickoxide (SCR) und in einem zweiten die Dioxin- und Furanminderung (DFM) durch Oxidation [128]. Die primärseitige Reduzierung der Schadstoffe im Feuerraum vermindert den Aufwand für diese sekundären Reinigungsmaßnahmen.

## 6.2.2 Brennstoff

Als Brennstoff des MHKW wird Hausmüll, hausmüllähnlicher Gewerbemüll und Sperrmüll genutzt. Sperrmüll wird vor dem Einbringen in den Müllbunker in der Sperrmüllschere zerkleinert. Im Bunker wird der Brennstoff mit den Müllkränen durchmischt, um eine gleichmäßige Verteilung einzelner Anlieferungen zu erreichen. Dies führt zu der Homogenisierung des Brennstoffs.

Die exakte Analyse des Brennstoffs während des Betriebs ist nur sehr schwer möglich. Im Rahmen der Messkampagne sind vereinzelt Proben genommen und am IVD analysiert worden. Bei der Simulation wurden charakteristische Erfahrungswerte verwendet [188]. Durch eine Differenzwägung (vor und nach dem Abkippen) wird das Gewicht des angelieferten Brennstoffs bestimmt. Das Gewicht des aufgegebenen Abfalls wird dabei durch eine Waage des Müllkrans ermittelt. Der Walzendifferenzdruck, während der hier behandelten Messkampagne, ist in Abbildung 6.18 dargestellt. Er wird für die ersten drei Rostwalzen von der Leitwarte aufgenommen.



**Abbildung 6.18:** Walzendifferenzdruck für die Rostwalze 1 bis 3 in [mbar]

Der gemessene Differenzdruck gibt einen Hinweis auf den Druckverlust über der Festbettschüttung. Damit kann sowohl eine Aussage über die Höhe des Festbetts, als auch über die Gasviskosität und den Verschmelzungsgrad der Partikel im Inneren der Schüttung

gemacht werden. Bei Kenntnis oben genannter Größen aus der Simulation bzw. expliziten Probenahmen im Müllbett, lässt sich über den Walzendifferenzdruck bei späteren Betriebsfahrten das entsprechende Szenario im Bett besser identifizieren. Ein Vergleich des Walzendifferenzdruck mit den Simulationen wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit jedoch nicht durchgeführt.

Durch die Schwierigkeit der Brennstoffbestimmung werden die Simulationen nur für repräsentative Brennstoffe durchgeführt. Durch den Relativvergleich zwischen den behandelten Einstellungen ist eine qualitative Aussage gegeben.

### 6.2.3 Messtechnik

Die Beprobung der Anlage zur Untersuchung des Einflusses der in Abbildung 6.17 dargestellten Sekundärluftdüsenanordnung und die gleichzeitige Validierung des neuen Modells in AIOLOS fand im Juli 2002 statt. Sie wurde von der Firma LURGI unter Begleitung des Autors (IVD) durchgeführt. Im gleichen Zeitraum sind vom FZK Untersuchungen des Brennbetts mit einer Infrarotkamera (IR) durchgeführt worden. Weiter wurden Analysen der Schlacke vorgenommen.

Bei der manuellen Beprobung des Kessels durch LURGI und IVD wurde im Rahmen dieser Arbeit eine Netzmessung durchgeführt. Hierbei wurden Konzentrationen der Spezies  $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $NO$  und  $SO_2$  sowie der Gastemperatur über ein Netz von neun gleichmäßig auf einer Ebene verteilten Messpunkten aufgenommen. Die Netzmessung entspricht hierbei nicht der Norm<sup>4</sup>. Nach dieser muss auf zwei übereinanderliegenden Ebenen gemessen werden. Die Messung kann aber trotzdem zur Validierung der Simulationsrechnung gut verwendet werden. Emissionswerte und Betriebswerte werden durch stationäre Messeinrichtungen des Prozessleitsystems erfasst.

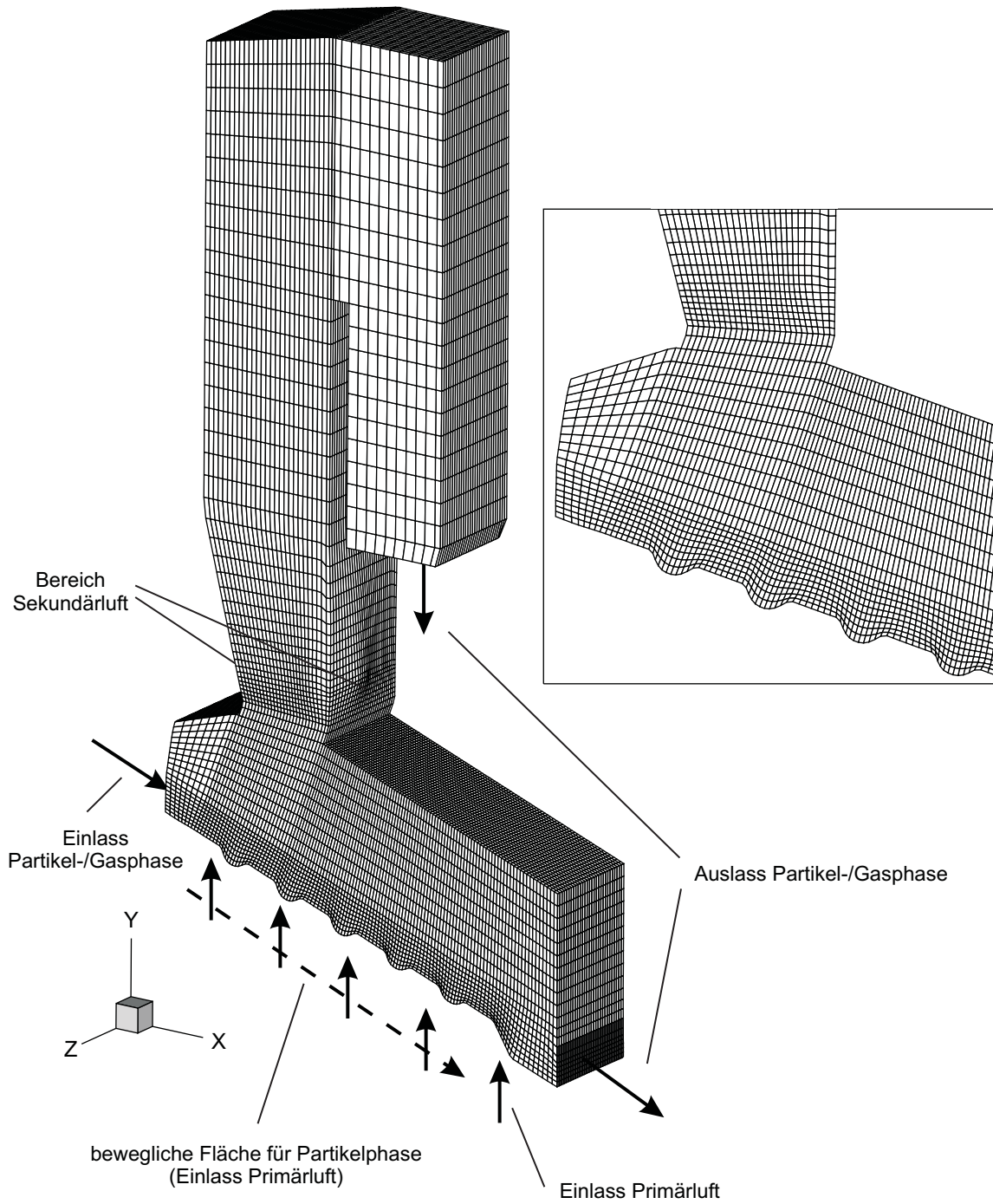
### 6.2.4 Numerische Simulation

Für das MHKW Ludwigshafen umfasst das Rechengebiet den Feuerraum mit Walzenrost und den ersten Strahlungszug der Brennkammer mit der Umlenkung in den Bereich der konvektiven Wärmeübertragern.

Die Diskretisierung erfolgt mit einem allgemeinen kurvilinearen Gitter. Somit können Gitterlinien in Bereichen großer Gradienten konzentriert werden. In Abbildung 6.19 ist die Diskretisierung des neu gestalteten ersten Kessels des MHKW Ludwigshafen dargestellt. Das gesamte Gitter besteht aus 251.675 Zellen.

---

<sup>4</sup>DIN 1122; gemäß 17. BImSchV



**Abbildung 6.19:** Diskretisierung der Brennkammer der großtechnischen Anlage MHKW Ludwigshafen (Kessel 1) mit allgemeinem kurvilinearem Gitter (251.675 Zellen);  
*Detaildarstellung:* Diskretisierung der einzelnen Rostwalzen

Die Detaildarstellung auf der rechten Seite von Abbildung 6.19 zeigt die Diskretisierung des vorderen Teils des Walzenrosts mit einzeln abgesetzten Walzen. Die Zellgröße des Gitters ist im unteren Bereich verfeinert worden, um eine bessere Auflösung der Vorgänge im Festbett erhalten zu können. Für eine Simulationsrechnung werden bei der hier abgebildeten Diskretisierung, unter Verwendung des Euler/Euler-Mehrphasenmodells, ca. 800 MB Arbeitsspeicher benötigt.

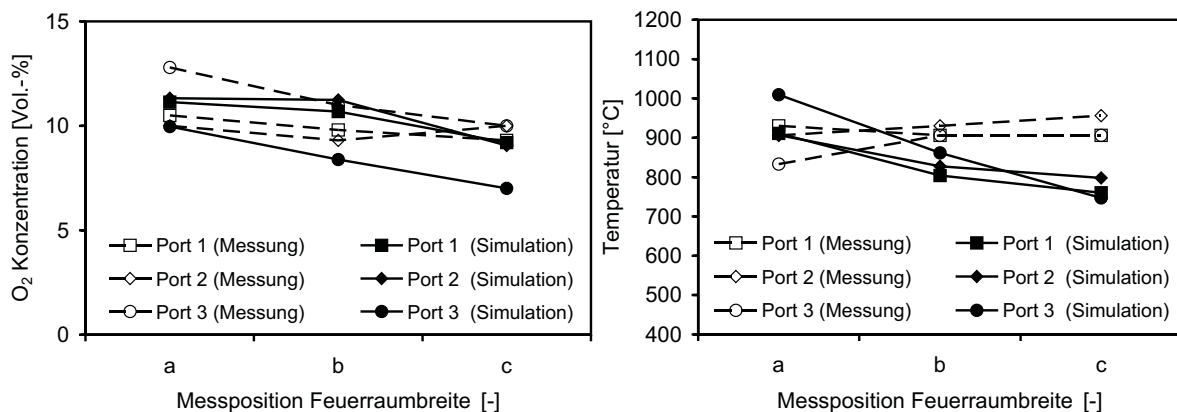
Bis zum Erreichen der Konvergenz wird für das dargestellte Gitter auf einem durchschnittlichen Arbeitsplatzrechner (3,2 GHz) eine Rechenzeit von ca. 7 h benötigt. Das Konvergenzkriterium von  $10^{-3}$  für das normierte Massenresiduum der Partikelphase kann dabei nach ca. 6.000 Iterationen erreicht werden. Das Residuum der Gasphase liegt niedriger.

## 6.2.5 Ergebnisse

Am MHKW ist im Rahmen der Arbeit eine Messkampagne von insgesamt 17 Messtagen durchgeführt worden. Hier werden beispielhaft Ergebnisse während eines Messtages dargestellt, an dem die Zugabe der Sekundärluft variiert worden ist.

Um die Ausbildung der Strömung im ersten Strahlungszug zu untersuchen, werden zunächst die Düsenbalken an Vorder- und Rückseite des Strahlungszugs ausgeschaltet (siehe auch Abbildung 6.17). Danach werden nur die Düsen an rechter und linker Seitenwand abgeschaltet. Die Menge und Aufteilung der Primärluft wird über alle Einstellungen konstant gehalten (siehe auch Abbildung 6.16). Es wird gezeigt, dass im Vergleich zur Standardeinstellung mit vollständig geöffneten Düsenklappen beide Varianten nur zu einem suboptimalen Verbrennungsprozess führen.

**Sauerstoffverteilung und Rauchgastemperatur** Zur Validierung der Simulation wird eine Netzmessung auf der Höhe  $h = 19,4$  m durchgeführt (siehe Abbildung 6.15). An drei gleichmäßig über der Seitenwand platzierten Ports (Port 1, 2 und 3) wird mit einer wassergekühlten Absaugsonde das Rauchgas aufgenommen. Um das Profil über der Ebene aufzunehmen, wird mit der Sonde jeweils in einer Tiefe von 70 cm, 2 m und 3,3 m (Tiefe a, b und c) gemessen. Die Ports werden bei angebrachter Lanze abgedichtet, um das Eintreten von zusätzlichem Sauerstoff in den Feuerraum zu vermeiden. Neben der Netzmessung werden Mitschriebe des Prozessleitsystems ausgewertet. Diese Daten werden sowohl zur Bestimmung der Randbedingungen als auch zur Validierung verwendet.

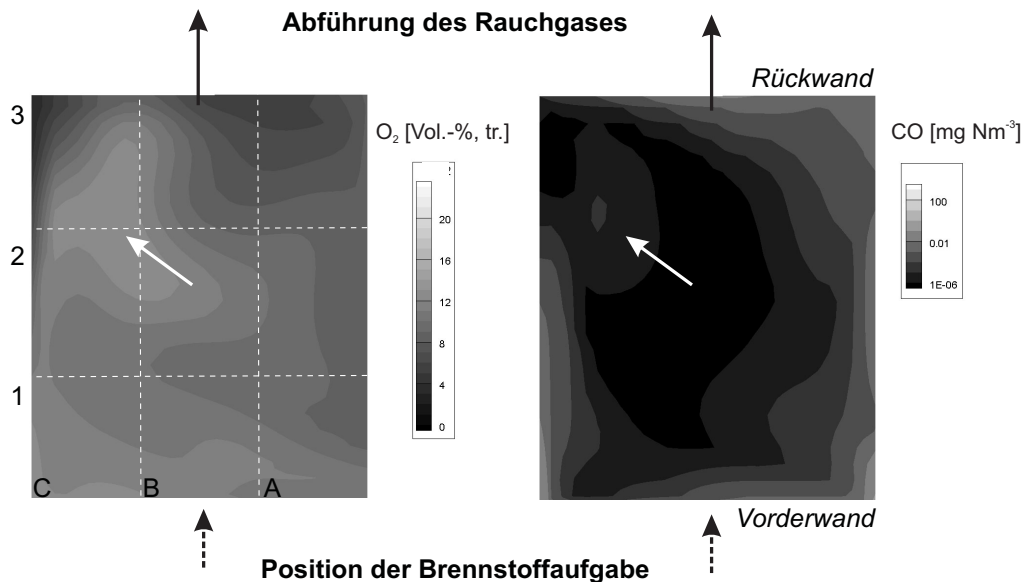


**Abbildung 6.20:** Validierungsmessung auf Höhe der Messebene 19,4 m über den Tiefen 70 cm, 2 m und 3,3 m (Tiefe a, b und c): Sauerstoffverteilung (*linke Seite*); Gastemperatur (*rechte Seite*)

Zur Validierung werden die Netzmessungen mit Simulationsergebnissen verglichen. Abbildung 6.20 zeigt einen Vergleich zwischen Messung und Rechnung bei regulärem Betrieb mit der Einstellung, dass alle Düsenbalken offen sind.

Die O<sub>2</sub>-Konzentrationen auf der linken Seite (Abbildung 6.20) zeigen gute Übereinstimmungen. Sie liegen alle im Bereich von etwa 10 Vol.-%. Die Temperaturen liegen in der gleichen Größenordnung. Es ergeben sich aber größere Abweichungen zwischen gemessenen und simulierten Werten. Zunächst zeigt der Vergleich, dass die Simulation über den Abbau-mechanismus und Wärmehaushalt in der Anlage quantitative Aussagen zulässt. Die qualitativen Abweichungen bei der Temperatur können zum einen durch Inhomogenitäten des vermessenen Müllbettes erklärt werden. Auf der anderen Seite kann die Strömung des Rauchgases eine Erklärung liefern.

Zu diesem Zweck sind in Abbildung 6.21 Simulationsergebnisse auf Höhe der Messebene abgebildet. Bei der O<sub>2</sub>-Konzentration auf der linken Seite sind die einzelnen Positionen des Netzplanes mit eingezeichnet. Im Bereich der Position C2 und C3 im hinteren Bereich zeigt sich eine Asymmetrie im Strömungsfeld (*weißer Pfeil*), die auch bei den Messungen in Abbildung 6.20 beobachtet werden kann. In diesem Bereich niedriger O<sub>2</sub>-Konzentrationen liegt eine Strähne mit erhöhten CO-Werten.



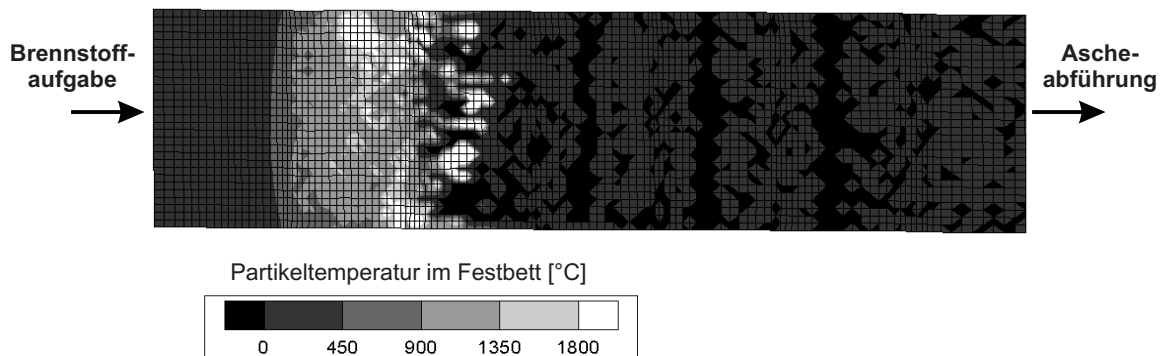
**Abbildung 6.21:** Berechnete Verteilung von Sauerstoff (*linke Seite*) und Kohlenmonoxid (*rechte Seite*) auf Höhe der Messebene (19,4 m)

Es liegt deshalb nahe, dass die ungleichmäßigen Profile in Abbildung 6.20 ihren Ursprung in einer großflächigen Verwirbelung über der Breite des Feuerraums haben. Dieser Tangentialwirbel wird durch die Zuführung der Sekundärluft mit den Düsenbalken unterhalb der Messebene hervorgerufen (siehe auch Abbildung 6.23).

**Temperaturverteilung im Festbett** Nach der Trocknung des Brennstoffs beginnen die unterschiedlichen Verbrennungsphasen. In Abbildung 6.22 zeigen sich genau unterhalb des ersten Strahlungszugs die maximalen Partikeltemperaturen, da dort die Wärmestrahlung

aus dem darüberliegenden Strahlungszug direkt auf das Brennstoffbett trifft. Für die Einzelpartikelbilanz entsteht dadurch eine große Enthalpiequelle. Bei der Mittelstromfeuerung liegt die Hauptverbrennungszone optimalerweise immer in diesem Bereich. Dahinter kühlt der Brennstoff auf seinem weiteren Weg durch den Feuerraum immer weiter ab.

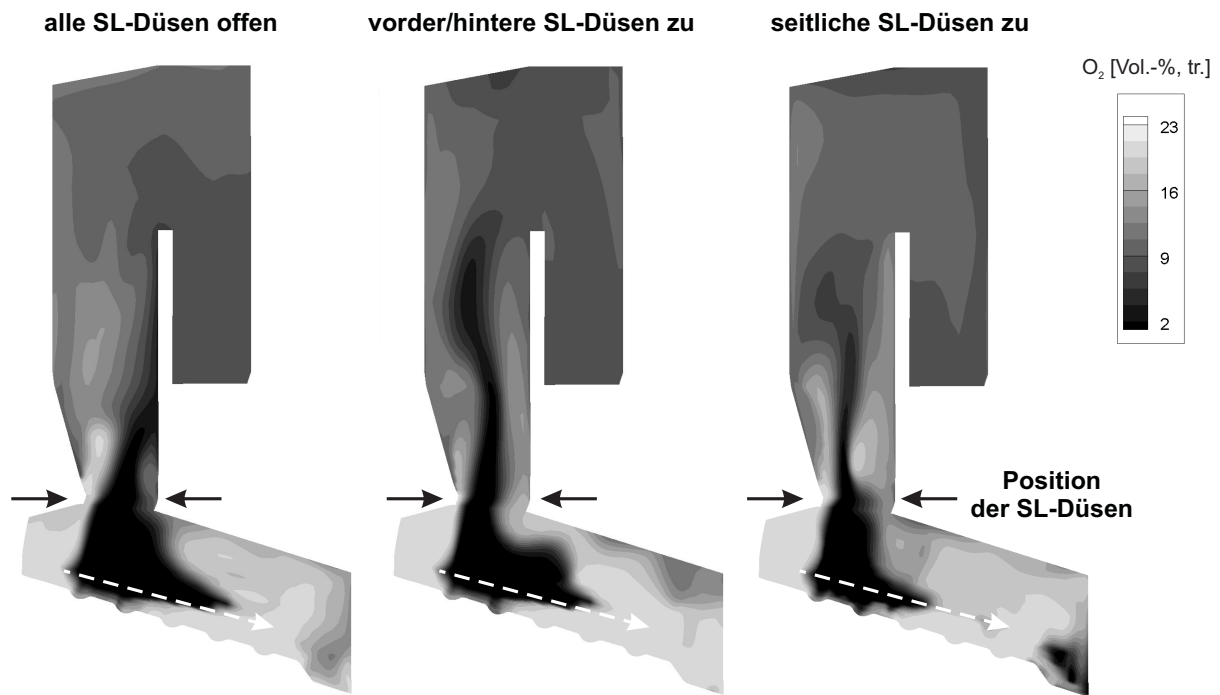
Im Temperaturprofil (Abbildung 6.22) zeichnen sich deutlich die Positionen der Zwickel zwischen den einzelnen Rostwalzen ab. An diesen Stellen liegen mehr Partikel bei gleich bleibender Strahlungsquelle durch die darüberliegende Feuerraumdecke. Die spezifische Enthalpie der Partikel bleibt damit bei der Rechnung konstant, die Gesamtenthalpie in diesem Bereich nimmt jedoch ab.



**Abbildung 6.22:** Verteilung der Partikeltemperatur im Inneren des Festbettes

Die Partikeltemperatur im Bereich der vierten Rostzone (siehe Abbildung 6.15) sind für die untersuchten Varianten nahezu unverändert. Die hohen Partikeltemperaturen führen zur Aufheizung des durchströmenden Gases. Die Bewegung des durch den Brennstoff gebildeten Festbetts bestimmt damit die Zusammensetzung und räumliche Verteilung der Gasphase. Die sich ausbildende Gasströmung im Brennraum prägt wiederum maßgeblich den Enthalpieaustausch zwischen Feuerraum und Feuerlage auf dem Rost. Große Temperaturunterschiede zwischen den einzelnen Einstellungen liegen im Rauchgas oberhalb der Hauptverbrennungszone und am Übergang zur Nachverbrennungszone vor. In der Hauptverbrennungszone werden für alle untersuchten Konfigurationen maximale Temperaturen von ca. 1.000 °C errechnet.

**Sekundärlufteinfluss** In Abbildung 6.23 ist die Sauerstoffverteilung im Mittelschnitt der Brennkammer dargestellt. Bei vollständiger Beaufschlagung kann sich der gewünschte Tangentialwirbel hinter den Düsen gut entwickeln (siehe auch Abbildung 6.17). Der zugeführte Luftsauerstoff wird dann schnell durch den sich ausbildenden großen Wirbel mit dem Rauchgas vom Bett vermischt. Direkt über dem vorderen Bereich des Betts zeigen sich bei allen Düsenkonfigurationen maximale Konzentrationen an O<sub>2</sub> von ca. 20 Vol.-%. Durch die Trocknung im Bett liegen dort H<sub>2</sub>O-Werte von bis zu 25 Vol.-% vor. Im Bereich



**Abbildung 6.23:** Berechnete Sauerstoffverteilung im Feuerraum des MHKW Ludwigshafen bei vollständig geöffneten Sekundärluftdüsen (*linke Seite*), geschlossenen Düsen an Vorder- und Rückwand (*Mitte*) sowie seitlich geschlossenen Düsen (*rechte Seite*)

der Hauptverbrennungszone oberhalb der Rostwalzen 2 bis 3 sinken die Sauerstoffwerte auf ca. 1 Vol.-% ab. Diese Verbrennungszone reicht von der Oberfläche des Bettes bis in den ersten Strahlungszug hinein, wo die Rauchgase weiter umgesetzt werden.

Auf der linken Seite von Abbildung 6.23 sind deutlich Bereiche schlechter Durchmischung am Ende des Bettes zu erkennen. Diese bilden sich zu Strähnen aus. In diesem Bereich tritt durch die weit nach unten gezogene Feuerraumdecke kein ausgeprägtes Rezirkulationsgebiet auf. Dadurch wird nur ein geringer Teil der Rauchgase zurückgeführt.

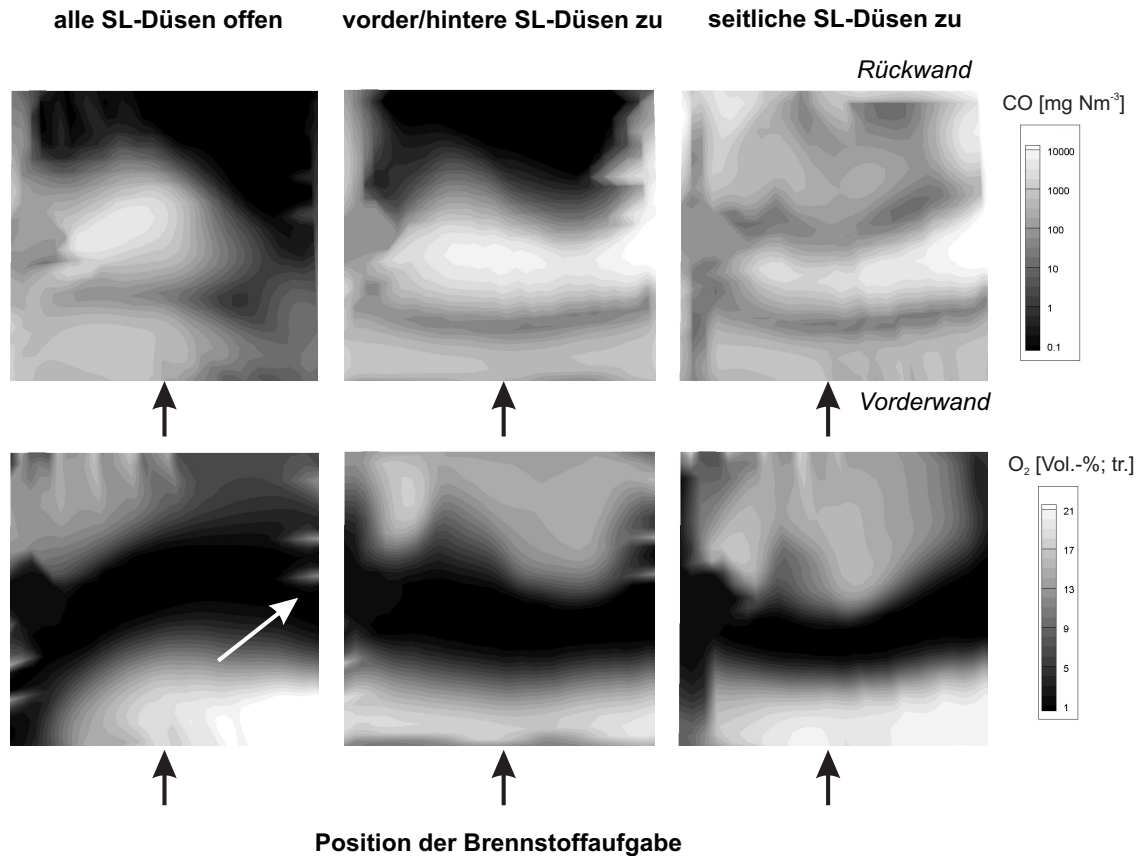
Bei fast allen untersuchten Lufteinstellungen wird bis zum Ende der Brennkammer ein vollständiger Abbau von CO erreicht, was auf das überstöchiometrische Luftverhältnis und die intensive Vermischung der Rauchgase zurückzuführen ist. Die experimentell ermittelten Konzentrationen an CO als auch der Kohlenwasserstoffe im Strahlungszug liegen dann unterhalb der Nachweisgrenze von  $1 \text{ mg Nm}^{-3}$ .

Wenn die seitlichen Düsenbalken geschlossen sind, können auch im hinteren Bereich des Rosts noch Zonen niedriger  $\text{O}_2$ -Konzentrationen vorliegen. Grund hierfür ist ein unvollständiger Ausbrand des Brennstoffs, der dann weiter CO und  $\text{CO}_2$  freisetzt.

Die Verteilung von  $\text{O}_2$  und CO auf Höhe der Sekundärluftebenen ist in Abbildung 6.24



dargestellt. Auf der linken Seite ist die Konfiguration mit vollständig geöffneten Düsen abgebildet. Rechts sind die Düsenbalken an Vorder- und Rückwand und an den Seiten geschlossen. Der weiße Pfeil zeigt die Erhöhung der Sauerstoffkonzentration durch das Eindringen eines Sekundärluftstrahls in den Feuerraum an. Die Position der einzelnen Düsen ist durch diese Strahlen gut zu erkennen. Wo viel Sauerstoff vorhanden ist, kann das Kohlenmonoxid besser oxidiert werden.



**Abbildung 6.24:** Berechnete Kohlenmonoxid- und Sauerstoffverteilung auf Höhe der Sekundärluft bei vollständig geöffneten Düsen (*linke Seite*), an Vorder- und Rückwand geschlossenen Düsen (*Mitte*) und seitlich geschlossenen Düsen (*rechte Seite*)

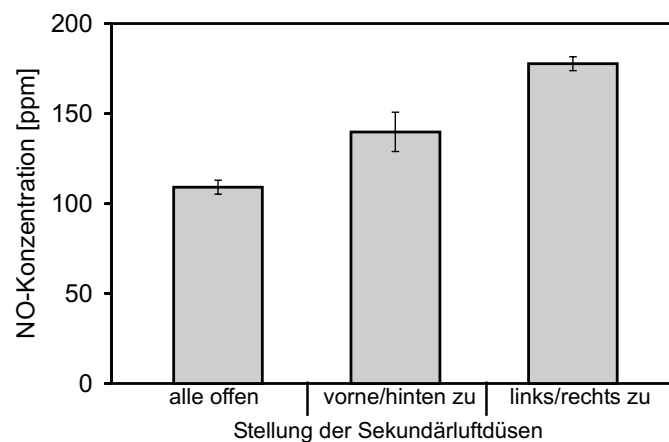
Wie aus der Abbildung 6.24 ersichtlich wird, kann nicht bei allen Betriebsweisen die gleiche Vermischung der Rauchgase in der Brennkammer erreicht werden. Dieses Ergebnis deckt sich mit den Messergebnissen. Die Optimierung der Verbrennungsführung dient dabei nicht nur der besseren Umsetzung von CO. Ein viel wichtigerer Aspekt ist die mit der Strömungsführung verbundene Reduktion der Schadstoffe im Rauchgas.

Typische Konzentrationsprofile einer Mittelstromfeuerung können nur bei gleichmäßiger Verteilung der Sekundärluft über alle vier Düsenbalken erreicht werden. Wie in Abbildung 6.17 dargestellt, wird durch die Einstellung eines Tangentialkreises über den gesamten Bereich des ersten Zuges eine fast vollständige Vermischung der Rauchgase bis zum Austritt

aus dem Feuerraum erreicht.

**Primärseitige Schadstoffreduktion** In Abbildung 6.25 ist die gemessene Konzentration von Stickstoffoxid (NO) in [ppm] am Ende des Kessels bei den untersuchten Stellungen der Düsen dargestellt. Es zeigt sich deutlich, dass die Mittelwerte der Stickstoffoxidkonzentration bei Verteilung der Luft auf alle Sekundärluftdüsen am geringsten sind.

Der Effekt war im Rahmen der Messkampagne reproduzierbar und ist an weiteren Messungen mit zusätzlichen Parametervariationen nachgefahren worden. Die NO-Werte sind Mittelwerte über mehrere Stunden. Die geringe Standardabweichung von den Mittelwerten, in Abbildung 6.25 durch kleine Striche dargestellt, ist ein Zeichen für die Stationarität des Prozesses.



**Abbildung 6.25:** Konzentration von Stickstoffoxid (NO) bei Anwendung von primärseitigen Maßnahmen der optimierten Sekundärluftzuführung (*Kessel 1; MHKW Ludwigshafen*)

Eine Hypothese ist für die NO-Reduktion ist, dass bei vollständig geöffneten Düsen sehr schnell viel CO aus dem Festbett freigesetzt wird. Dieses kann dann weiter oben, im Bereich des Sekundärluftwirbels, umgesetzt werden und bewirkt dadurch einen *reburning*-Effekt.

Die Stickstoffoxidkonzentration in Abbildung 6.25 ist hier beispielhaft für weitere Schadstoffkomponenten aufgeführt. Die optimierte Vermischung oberhalb der Hauptverbrennungszone führt zur Reduktion vieler Schadstoffe (z.B. Dioxine und Furane). Die primärseitige Maßnahme hilft somit, die Kosten für die sekundäre Rauchgasreinigung zu senken.

# Kapitel 7

## Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird ein mathematisches Euler/Euler-Mehrphasenmodell zur numerischen Simulation einer dispersen Phase aus reagierenden Partikeln in Kombination mit turbulenter reagierender Gasphasenströmung vorgestellt. Anwendungsgebiet sind industrielle Feuerungen mit komplexen Geometrien. Grundlage des Modells ist die Lösung der Erhaltungsgleichungen von Masse, Impuls und Energie bei Diskretisierung mittels Finite Volumen Methode auf kurvilinearen Berechnungsgittern. Die Modelle werden anhand von Versuchsanlagen validiert und auf Gas/Feststoff-Reaktoren, in diesem Fall Rostfeuerungen, in praxisrelevanten Maßstäben angewendet.

Im Rahmen der Arbeit wurde neben einem Abbrandmodell zur Beschreibung des Verbrennungsvorganges ein Modell zur Beschreibung des Brennstofftransportes durch einen 3D-Kontinuumsansatz entwickelt. Dieses beschreibt auf der Basis von stationären Erhaltungsgleichungen die Verteilung der idealisierten Komponenten feuchter Brennstoff, pyrolysefähiger Brennstoff, Restkoks und Asche. Grundlage der Bewegung der Partikel und damit der Verteilung im Bilanzgebiet sind die auf die Partikelphase wirkenden physikalischen Kräfte, hier insbesondere die Schwerkraft, der Impulseintrag durch die Bewegung der Roststäbe, die Widerstandskraft der durchströmenden Gasphase sowie Spannungsverläufe an den Grenzen der Kontrollvolumen. Die Bilanzierung der Kräfte innerhalb eines Kontrollvolumens erfolgt aus den resultierenden Normal-, Schub- und Druckspannungen.

Abfall ist ein sehr heterogener Festbrennstoff. Für jeden Brennkammertyp ist eine detaillierte Kenntnis der Brennstoffcharakteristik erforderlich. Neben den individuellen Eigenschaften verschiedener Müllsorten können jedoch charakteristische allgemeingültige Kriterien herausgearbeitet werden, welche den Verbrennungsvorgang maßgeblich beeinflussen. Dabei werden für die Simulation wichtige physikalische und chemische Brennstoffeigenschaften beschrieben. Zudem stützt sich die Arbeit auf Betriebsdaten verschiedener Anlagen, mit denen in Abhängigkeit von Heizwert, Feuchte, Elementaranalyse und Par-

tikelgröße eine gesicherte Datenbasis für das Abbrandverhalten dargestellt werden kann. Das Modell für die Einzelpartikel beinhaltet physikalische Beschreibungen wie Trocknung von gebundener Feuchte, Pyrolyse von Kohlenwasserstoffen und Diffusionsprozesse in Grenzschicht und Poren der Partikel.

Die Reaktionsraten stellen zugleich Quell- und Senkenterme der Transportgleichungen dar. Weiter werden Einzelmodelle für Feuerraumstrahlung, Leitung von Wärme und konvektive Wärmeübertragung eingesetzt. Die dreidimensionale Betrachtung der Partikelphase bei Implementierung in das CFD-Programm AIOLOS ermöglicht eine direkte Kopplung mit der Verteilung der Feuerraumstrahlung. Diese wird über die Discrete-Ordinates Methode beschrieben. Die maßgebliche Quelle der Strahlungsintensität in der Gasphase resultiert aus Emissionen der Wände und des Müllbetts. Die Enthalpiequelle durch die Strahlungsintensität stellt wiederum eine maßgebliche Größe bei der Enthalpiebilanz am Einzelpartikel dar.

Für die chemischen Reaktionen in der Gasphase wird basierend auf einem detaillierten Reaktionsmechanismus, dem GRI-Mech 3.0, ein globaler chemischer Reaktionsmechanismus zur Beschreibung der Umsetzung der gasförmigen Kohlenwasserstoffe und von molekularem Wasserstoff eingesetzt. Der Mechanismus zeigt bei unterschiedlichen Luft zu Brennstoff Verhältnissen und einem großen Temperaturbereich gute Übereinstimmung mit Ergebnissen, die unter Zugrundelegung von detaillierter Kinetik gewonnen werden. Die chemische Reaktionskinetik ist mit dem  $k, \varepsilon$ -Turbulenzmodell gekoppelt.

Insgesamt zeigen die Anwendungsfälle sowohl qualitativ als auch quantitativ, dass mit dem vorliegenden Abbrandmodell und der CFD-Simulation des Feuerraumes die Modellierung von MVAs erfolgreich durchgeführt werden kann.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit findet das Modell Anwendung bei der Optimierung der Sekundärluftverteilung von Anlagen im technischen Maßstab. Der Designprozess der Pilotanlage TAMARA des Forschungszentrums Karlsruhe konnte in der Planungsphase ebenso begleitet werden wie der Umbau der großtechnischen Anlage MHKW Ludwigshafen.

Im Gegensatz zur Regulierung der Abfallmenge oder -homogenität wirkt sich eine Änderung von Primär- und Sekundärluftverteilung direkt auf den Verbrennungsprozess aus. Deshalb dienen diese, neben dem Einsatz zusätzlicher Ölbrenner, als die Hauptstellgröße der Feuerleistungsregelung.

Die folgenden Ergebnisse konnten herausgearbeitet werden. Bei unterstöchiometrischer Luftzufuhr ( $\lambda < 1$ ) im Bereich des Brennstoffbetts, werden mehr flüchtige Bestandteile freigesetzt. Die nachfolgenden Oxidationsreaktionen dieser Bestandteile laufen bei optimaler Führung der Sekundärluft schneller ab und erzeugen im oberen Bereich des Feuer-

raumes zusätzliche Wärme. Der Trocknungsvorgang im Bett läuft schneller ab, wenn diese Strahlungsenergie gezielt eingesetzt werden kann.

Bei geringerem Primärluftvolumenstrom im vorderen Bereich des Brennstoffbetts liegen nach dem Austreiben der Flüchtigen größere Mengen an Pyrolysekoks vor. Der geschwindigkeitsbestimmende Teilschritt bei der heterogenen Reaktion dieser vergleichsweise großen Kokspartikel ist die Diffusion von Sauerstoffmolekülen in der Grenzschicht um die Partikel. Infolge dieses heterogenen Kohlenstoffabbaus erhöht sich der CO-Gehalt im Feuerraum. Durch eine geringe Primärluftvorgabe im vorderen Bereich des Rostes nimmt der Rauchgasstrom insgesamt ab. Hier fehlender Sauerstoff kann gezielt durch den Einsatz von Sekundärluftdüsen der Gasphase zugesetzt werden. Dabei ist darauf zu achten, dass die Eindüsung von Sekundärluft neben der Funktion als O<sub>2</sub>-Quelle die turbulente kinetische Energie in der Hauptverbrennungszone der Gasphase erhöht und damit den Umsatz zusätzlich beschleunigt. Erfolgt die Eindüsung an Stellen hoher Temperatur - und damit niedriger Gasviskosität - verschlechtert dies den Vermischungsvorgang. Mit zunehmender Primärluftmenge steht für den Abbrand im hinteren Bereich des Rostes mehr Sauerstoff zur Verfügung, so dass der Kohlenstoffabbau dort verbessert wird.

Zur Führung und Beurteilung betrieblicher Maßnahmen mit dem Ziel einer Verbesserung der Verbrennung bietet die Simulation eine kostengünstige Alternative im Vergleich zu experimentellen Untersuchungen. Sie hat sich als ein kosteneffizientes, ingenieurtechnisches Werkzeug für die Analyse und Optimierung erwiesen und kann begleitend zur Planung der Anlagenfahrweise eingesetzt werden. Eine individuelle Einstellung der MVAs auf den jeweiligen Brennstoff ist damit möglich.

**Ausblick** Das vorliegende Modell kann in unterschiedlichen Punkten erweitert und verbessert werden. Derzeit wird der Abfall als homogener Brennstoff betrachtet, hier kann als Input jeweils nur eine Partikelklasse aufgelöst werden. Die Charakterisierung des Brennstoffs und die Beschreibung des Transports sollte einschließlich der entsprechenden Größenklassenverteilung erfolgen.

Um den Einfluss kurzfristiger starker Schwankungen in der Brennstoffzusammensetzung und folglich des Heizwertes beschreiben zu können, sollte der Transportprozess des Betts auf dem Rost instationär beschreibbar sein. Dabei kann die Simulation der Gasphase infolge stark unterschiedlicher Zeitskalen des Müllbetttransportes und der Rauchgasströmung als quasistationär angesehen werden. Der Brennstoff auf dem Rost hat eine Verweilzeit von etwa 90 min im Gegensatz zu maximal 4 s für die Gasphasen.

Weiterhin stellt das vorliegende Euler-/Euler-Mehrphasenmodell durch seine Implementierung in das 3D-Feuerraumsimulationsprogramm AIOLOS eine maßgebliche Grundlage für die Beschreibung reagierender, zirkulierender Wirbelschichten dar, da es zum einen

bereits die höhere Dimensionierung der Transportgleichungen beinhaltet und außerdem auf analogen physikalischen Modellen zur Beschreibung von disperser und kontinuierlicher Phase aufbaut.

In Bezug auf zusätzliche Validierungsmöglichkeiten sollten weitere praktische Erfahrungen mit dem Einsatz des Modells an großtechnischen Anlagen gesammelt werden. Neben der Validierung des Programms können dadurch primärseitige feuerungstechnische Maßnahmen verbessert werden. Durch geeignete Stufung der Verbrennungsluft und gezielte Umbauten der Feuerraumgeometrie kann der Rauchgasvolumenstrom verringert werden. Emissionen im Rohgas oder Feinstpartikel werden weiter reduziert.

Die Feuerraumsimulation, mit dem neu in AIOLOS implementierten Euler/Euler-Ansatz, erlaubt die Untersuchung der Einflüsse verschiedenster Verfahrensparameter wie Schwankungen im Brennstoffband und Luftzugabe. Eine Primärluftverteilung, bei der die Luft in der Hauptverbrennungszone zurückgenommen und dadurch der Ausbrand verzögert wird, wirkt sich in Kombination mit der dargestellten Sekundärluftführung günstig auf die Höhe von Emissionen aus. Die Gesamtluftzahl spielt dabei eine untergeordnete Rolle wodurch eine Reduzierung des Volumenstroms der Rauchgase und damit eine Senkung der Kosten möglich wird. Für Rostfeuerungen interessant wäre in diesem Zusammenhang eine weiter abgesenkte Gesamtluftzahl im Bereich von  $\lambda = 1,0$  bis  $1,1$ .

# Anhang A

## Modellkonstanten

Die Modellkonstanten werden zur Schließung des Turbulenzmodells in den Kapiteln 3.1 und 3.4 sowie in dem in Kapitel 3.2 dargestellten Reaktionsmodell benötigt. Über die Verwendung dieser Konstanten herrscht in der Literatur im allgemeinen Übereinstimmung.

**Tabelle A.1:** Modellkonstanten zur Beschreibung der Turbulenz [92]

Konstante	$C_\mu$	$C_{\varepsilon,1}$	$C_{\varepsilon,2}$	$C_{\varepsilon,3}$	$C_{\varepsilon,4}$	$C_{\varepsilon,5}$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$
	0,09	1,44	1,92	1,20	0,41	2,13	1,00	1,30

**Tabelle A.2:** Konstanten für Langmuir-Adsorptions-Desorptions Kinetik [51]

		$A$	$E$
		[kg m <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup> ]	[kJ kmol <sup>-1</sup> ]
Adsorption	$k_{ads}$	31,4	4.350
Desorption	$k_{des}$	100,4	45.000

**Tabelle A.3:** Reaktionskonstanten für globale Kinetik nach HAUTMAN [81]

Reaktion		$A$ [kmol m s K]	$b$ [-]	$E$ [cal kmol <sup>-1</sup> ]
(1)	$k_{1,1}$	$7,28 \cdot 10^9$	0,5	40.000
(2)	$k_{1,2}$	$5,42 \cdot 10^9$	0,0	30.000
(3)	$k_{1,3}$	$1,00 \cdot 10^8$	0,0	2.000

**Tabelle A.4:** Reaktionskonstanten für globale Kinetik nach JONES und LINDSTEDT [93]

Reaktion		$A$ [kmol m s K]	$b$ [-]	$E$ [cal kmol <sup>-1</sup> ]
(1)	$k_{2,1}$	$4,40 \cdot 10^{11}$	0,0	30.000
(2)	$k_{2,2}$	$3,00 \cdot 10^8$	0,0	30.000
(3f)	$k_{2,3f}$	$2,75 \cdot 10^9$	0,0	20.000
(3r)	$k_{2,3r}$	$5,56 \cdot 10^7$	0,0	10.000
(4)	$k_{2,4}$	$1,00 \cdot 10^6$	0,0	2.000

**Tabelle A.5:** Reaktionskonstanten für die Pyrolyse von Hausmüll

	$A$ [s <sup>-1</sup> ]	$E$ [kJ kmol <sup>-1</sup> ]
THURNER UND MANN[210]	$5,16 \cdot 10^6$	84.000
NUNN ET AL.[136]	$3,40 \cdot 10^4$	69.000
ALVES UND FIGUEIREDO[5]	$7,00 \cdot 10^4$	83.000
PYLE UND ZAROR[154]	$3,00 \cdot 10^3$	69.000
FONT ET AL.[60]	$2,98 \cdot 10^3$	73.100



# Anhang B

## Versuchsparameter

Bei sämtlichen Versuchen an der Anlage KLEAA lag ein Heizwert  $H_u$  von  $11.000 \text{ kJ kg}^{-1}$  vor.

**Tabelle B.1:** Versuche zur Variation der Primärluftmenge  $\dot{V}_{PL}$  der Anlage KLEAA

	$\dot{V}_{PL}$ [Nm <sup>3</sup> h <sup>-1</sup> ]	$X_F$ [Ma.-%]	$m_I$ [kg]	$\tau$ [min]
Vers.-13	7,0	30,0	0,185	51,0
Vers.-36	10,0	30,0	0,185	40,8
Vers.-35	15,0	30,0	0,185	29,3

**Tabelle B.2:** Versuche zur Variation der Feuchte  $X_F$  der Anlage KLEAA

	$\dot{V}_{PL}$ [Nm <sup>3</sup> h <sup>-1</sup> ]	$X_F$ [Ma.-%]	$m_I$ [kg]	$\tau$ [min]	$\lambda$ [-]
Vers.-08	15,0	7,00	1,010	25,3	0,71
Vers.-06	15,0	20,00	0,597	25,6	0,72
Vers.-35	15,0	30,00	0,185	29,3	0,83
Vers.-37	15,0	33,71	0,000	32,8	0,93

In Tabelle B.3 sind die Auslegungsdaten des Rostes des MHKW Ludwigshafen enthalten, u.a. sind der Brennstoffmassenstrom  $\dot{m}_P$ , die Drehzahl der Walzen  $f_W$ , deren Länge  $l_W$  und der Durchmesser  $d_W$  sowie die Rostneigung  $\alpha_{Rost}$  angegeben.

**Tabelle B.3:** Auslegungsdaten des Walzenrostes des MHKW Ludwigshafen [128]

	$\dot{m}_S$ [t h <sup>-1</sup> ]	$f_W$ [h <sup>-1</sup> ]	$l_W$ [mm]	$d_W$ [mm]	$\alpha_{Rost}$ [-]
Walzenrost	9	0,6 - 12,0	3000	1500	20°

**Tabelle B.4:** Versuchsparameter der Pilotanlage TAMARA [188]

Brennstoff	$\dot{m}_P$ [kg h <sup>-1</sup> ]	$\dot{V}_F$ [m <sup>3</sup> h <sup>-1</sup> ]	$\dot{V}_{SL}$ [m <sup>3</sup> h <sup>-1</sup> ]
MBA/BRAM	140 und 200	< 700	< 250

# Anhang C

## Stoffdaten

**Tabelle C.1:** Kurzanalyse des MBA-Unterkorns für die Versuche an TAMARA [188]

			Mittelwert	Wert (17.10.01)
Wassergehalt	w	[Ma.-%]	$28,5 \pm 6,2$	34,8
Asche	a	[Ma.-%]	$30,7 \pm 0,7$	31,8
Flüchtige	V	[Ma.-%]	$34,0 \pm 0,8$	29,3
C + Asche	NV	[Ma.-%]	$36,1 \pm 0,9$	35,8
Fixer Kohlenstoff	C	[Ma.-%]	$5,4 \pm 0,2$	4,0

**Tabelle C.2:** Elementaranalyse des MBA-Unterkorns für die Versuche an TAMARA [188]

			Mittelwert	Wert (17.10.01)
Kohlenstoff	C	[Ma.-%]	$23,30 \pm 2,20$	18,80
Wasserstoff	H	[Ma.-%]	$3,20 \pm 0,30$	3,40
Sauerstoff	O	[Ma.-%]	$21,80 \pm 1,30$	9,50
Stickstoff	N	[Ma.-%]	$1,20 \pm 0,50$	0,80
Schwefel	S	[Ma.-%]	$0,40 \pm 0,10$	0,40
Chlor	Cl	[Ma.-%]	$0,63 \pm 0,20$	0,40
Fluor	F	[Ma.-%]	$0,13 \pm 0,03$	< 0,03

**Tabelle C.3:** Modellfeststoffe für die Kaltrostversuche [13]

Modellmaterial	$d_P$ [mm]	$m_P$ [g]	$\hat{\rho}_P$ [kg m <sup>-3</sup> ]	$\rho_P$ [kg m <sup>-3</sup> ]
Blähton	ca. 8-25	0,22-1,13	400	-
Holzkuugeln	15	0,90-1,00	350	550
Keramikkugeln	10	1,38	1400	2200
Keramikkugeln	15	2,25-2,44	1300	2200
Keramikkugeln	20	9,40	1200	2200

**Tabelle C.4:** Brennstoffkennwerte des MBA Unterkorns für die Versuche an TAMARA [188]

		Mittelwert	Wert (17.10.01)
Brennwert $H_o$ (Analyse)	[MJ kg <sup>-1</sup> ]	11,35	7,424
Heizwert $H_u$ (Analyse)	[MJ kg <sup>-1</sup> ]	7,45	5,851

# Anhang D

## Vergleichszahlen

**Lewis-Zahl** Die Lewis-Zahl ist eigentlich keine Vergleichszahl, sondern ein Gütegrad. Sie setzt den Wärmeleitstrom ins Verhältnis zum Diffusionsstrom.

$$Le = \frac{Sc}{Pr} \quad (\text{D.1})$$

**Nusselt-Zahl** Die Nusselt-Zahl von Partikeln  $Nu_P$  beschreibt den Wärmeübergang zu dem Partikel durch ein Fluid mit definierter Wärmeleitung. Es gibt unterschiedliche Ansätze für die Nusselt-Zahl. Der Ansatz von RANZ und MARSHALL ist eine Korrelation für Gasströmungen mit geringer Partikelbeladung  $\epsilon_P$  in einem Bereich von  $Re_P < 3,0 \cdot 10^5$  und  $Pr > 0,6$  [156, 157].

$$Nu_P = 2,0 + 0,64 Re_P^{\frac{1}{2}} Pr^{\frac{1}{3}} \quad (\text{D.2})$$

Der Ansatz von GUNN[76] gilt für hohe Volumenfraktionen der Partikelphase von bis zu  $\epsilon_P = 0,65$ .

$$Nu_P = (7 - 10\epsilon_G + 5\epsilon_G^2)(1 + 0,7Re_P^{0,2}Pr^{\frac{1}{3}}) + (1,33 - 2,4\epsilon_G + 1,2\epsilon_G^2)Re_P^{0,7}Pr^{\frac{1}{3}} \quad (\text{D.3})$$

Die Korrelation ist für den Bereich der Reynolds-Zahlen von bis zu  $Re_P = 10^5$  einsetzbar.

**Prandtl-Zahl** Die Prandtl-Zahl ( $Pr$ ) ist eine nach Ludwig Prandtl benannte dimensionslose Kennzahl eines Fluids, d.h. eines Gases oder einer Flüssigkeit. Sie ist definiert als Verhältnis zwischen kinematischer Viskosität und thermischer Diffusivität.

$$Pr = \frac{\eta_G c_{p,G}}{\lambda_{G,0}} \quad (\text{D.4})$$

Mit der dynamische Viskosität des Fluids  $\eta$  in  $[\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}]$ , der Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  in  $[\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}]$  und der spezifische Wärmekapazität  $c_p$  in  $[\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}]$ . Die Prandtl-Zahl entspricht dem Verhältnis zwischen der durch innere Reibung (Viskosität) erzeugten Wärme

und der abgeführten Wärme in einer Strömung. Sie ist eine reine Stoffgröße (Materialparameter) des Fluids. Für ein Modellgas aus einheitlichen harten Kugeln mit anziehender Dipolwechselwirkung ergibt sich unabhängig von der Temperatur der Wert  $Pr = \frac{2}{3} = 0,667$ .

**Reynolds-Zahl** Die Reynolds-Zahl bezieht die Trägheit eines Fluid auf dessen innere Reibung. Es werden Reynolds-Zahlen für die Strömung um unterschiedlich geformte Körper bzw. durch Strömungskanäle angegeben. Im Rahmen der Arbeit wird hauptsächlich die Reynolds-Zahl  $Re_P$  der Umströmung von Partikeln eingesetzt.

$$Re_P = \frac{|\vec{u}_P - \vec{u}_G| d_P \rho_G}{\mu_G} \quad (\text{D.5})$$

**Schmidt-Zahl** Die Schmidt-Zahl setzt die innere Reibung des Fluids ins Verhältnis zum Diffusionsstrom der Gasphasenspezies  $i$  und stellt damit ein Analogon zu der Prandtl-Zahl dar.

$$Sc = \frac{\mu_G}{\hat{\rho}_G D_{G,i}} \quad (\text{D.6})$$

**Sherwood-Zahl** Die Sherwood-Zahl setzt, analog zu der Nusselt-Zahl bei der Wärme, den Stoffübergangstrom von Gasen in die Grenzschicht um das Partikel ins Verhältnis zum Diffusionsstrom in dieser Schicht.

$$Sh_P = (7 - 10\epsilon_G + 5\epsilon_G^2)(1 + 0,7Re_P^{0,2}Sc_P^{\frac{1}{3}}) + (1,33 - 2,4\epsilon_G + 1,2\epsilon_G^2)Re_P^{0,7}Sc_P^{\frac{1}{3}} \quad (\text{D.7})$$

# Anhang E

## Jacobi-Transformation

Um komplexe Geometrien von Reaktoren abbilden zu können, werden die Erhaltungsgleichungen auf Grundlage von allgemeinen kurvilinearen Koordinaten formuliert. Auch bei geringer Anzahl an Kontrollvolumen (Zellen) können somit komplizierte Geometrien realitätsnah diskretisiert werden. Komplexe Berechnungsgebiete aus dem physikalischen Raum werden auf einen rechtwinkligen Berechnungsraum abgebildet [100, 144]. Basis hierfür ist die Durchführung einer Jacobi-Transformation. Eine detaillierte Beschreibung der Grundlagen wird von PERIĆ[144, 145] gemacht. Weitere Angaben zur Implementierung befinden sich bei NOLL[135] und OERTEL[140].

Im Vergleich zu Rechnungen mit kartesischen Koordinaten wächst die Rechenzeit bei kurvilinearen Gittern ungefähr um den Faktor 2,4 an. Der Speicherbedarf erhöht sich in AIOLOS um etwa 36 % [100, 172]. Lediglich bei vektoriiellen Größen muss eine Umrechnung mit der inversen Jacobi-Matrix durchgeführt werden [100]. Für die kurvilinearen Koordinaten wird dazu die Transformationsvorschrift (E.1) formuliert.

$$x_i = (x, y, z) \quad \longrightarrow \quad \xi_i = (\xi, \eta, \zeta) \quad (\text{E.1})$$

Wenn  $\xi$ ,  $\eta$  und  $\zeta$  unabhängige Koordinaten sind, liegen die Berandungen der Kontrollvolumen auf der Oberfläche  $\xi = \text{const}$ . Sie werden auf die in (E.2) angegebenen Koordinaten abgebildet.

$$x_1 = x(\xi, \eta, \zeta) \quad x_2 = y(\xi, \eta, \zeta) \quad x_3 = z(\xi, \eta, \zeta) \quad (\text{E.2})$$

Die Koordinatentransformation wird durch die inverse Jacobi-Matrix  $\bar{J}_j^i$  beschrieben. Eine analytische Lösung dieser Transformationsvorschrift muss für jeden Fall hergeleitet werden. Aus diesem Grund erfolgt die Berechnung beim Lösen der Erhaltungsgleichungen numerisch.

$$\bar{J}_j^i = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \quad (\text{E.3})$$

Voraussetzung für die Transformation ist, dass die Jacobi-Matrix nicht singulär ist und ihre Inverse deshalb immer existiert ( $\det J > 0$ ). Damit wird das Rechtssystem im physikalischen Raum auf ein Rechtssystem im Berechnungsraum abgebildet. Die Transformationsvorschrift einer beliebigen Variablen  $\phi$  der Transformationsgleichung ergibt unter Anwendung der Kettenregel die Gleichung (E.4).

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial \xi_j} = \bar{J}_J^i \frac{\partial \phi}{\partial \xi_j} \quad (\text{E.4})$$

Oft wird die Transformation nicht durch Terme der Form  $\frac{\partial \xi_j}{\partial x_i}$  ausgedrückt, sondern gemäß der Cramerschen Regel durch die Terme  $\frac{\partial x_j}{\partial \xi_i}$ .

$$\bar{J}_J^i = \frac{\beta_j^i}{|J|} \quad (\text{E.5})$$

$\beta_j^i$  ist die Adjunkte der Jacobi-Matrix  $J$ . Im Rahmen der Arbeit wird für die Transformationsvorschrift eine analytische Lösung verwendet.

Für die Geschwindigkeiten der Feststoffphase  $u_P$  im globalen Koordinatensystem lässt sich aus den in der Spannungsbilanz ermittelten Massenströmen ein analytischer Ausdruck berechnen. Der aus der Koordinatentransformation resultierende Tensor  $B_j^i$  ist dabei durch Gleichung (E.6) definiert.

$$B_j^i = \beta_k^i \beta_k^j \quad (\text{E.6})$$

Die Elemente des Tensors  $B_j^i$  werden mit dem Symbol  $b$  bezeichnet.

$$B = \begin{vmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} & b_{1,3} \\ b_{2,1} & b_{2,2} & b_{2,3} \\ b_{3,1} & b_{3,2} & b_{3,3} \end{vmatrix} \quad (\text{E.7})$$

Es wird eine Normierung der Massenströme  $\dot{m}_{P,i}$  mit der effektiven Dichte der Partikelphase  $\hat{\rho}_P$  durchgeführt.

$$\tilde{m}_i = \frac{1}{\hat{\rho}_P} \cdot \frac{\partial m_{P,i}}{\partial \hat{\rho}_P} \quad (\text{E.8})$$

Damit ergibt sich für die Geschwindigkeiten der Partikelphase  $u_{P,i}$  der Ausdruck (E.9).

$$u_{P,i} = \frac{\tilde{m}_3 b_{i,i} b_{k,i} + \tilde{m}_2 b_{j,k} b_{k,i} + \tilde{m}_3 b_{j,i} b_{k,j} - \tilde{m}_1 b_{j,k} b_{k,j} - \tilde{m}_2 b_{j,i} b_{k,k} + \tilde{m}_1 b_{j,j} b_{k,k}}{-b_{1,3} b_{2,2} b_{3,1} + b_{1,2} b_{2,3} b_{3,1} + b_{1,3} b_{2,1} b_{3,2} - b_{1,1} b_{2,3} b_{3,2} - b_{1,2} b_{2,1} b_{3,3} + b_{1,1} b_{2,2} b_{3,3}} \quad (\text{E.9})$$

Die bei der Lösung des Spannungsmodells der Partikelphase durchgeführte Umrechnung der Massenströme in Geschwindigkeiten führt zu einer Verringerung der Rechenzeit.



Bei der Diskretisierung des Rechengebietes können Gitter auf Basis von körperangepassten Koordinatensystemen mit kartesischen bzw. zylindrischen Gittern gekoppelt werden. Die Implementierung dieser Kopplung in AIOLOS sowie deren mathematische Grundlage, sind ausführlich in [175] dargestellt.

Ein sehr interessanter und bisher im Bereich CFD wenig beachteter Aspekt ist, dass sich die Verwendung der Jacobi-Transformation nicht nur zur Linearisierung der Geometrie eines Rechengebiets eignet. In Kapitel 3.4 wird gezeigt, dass sich die Konzentrationsverläufe chemischer Spezies während der Reaktion ebenfalls über eine Jacobi-Transformation linearisieren lassen. Sie werden in einen linearen Konzentrationsraum abgebildet und können deshalb mit linearen Lösern berechnet werden.

# Anhang F

## Stofftransport von Feststoffen

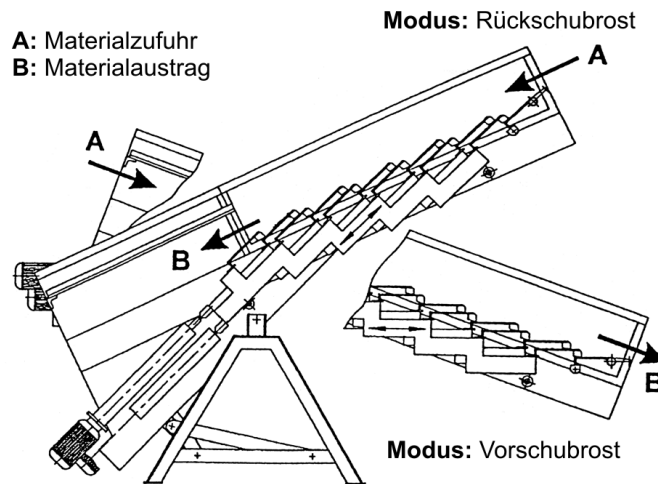
Um die Bewegung von Partikeln auf dem Rost zu beschreiben, bieten sich drei verschiedene Methoden an. Es kann ein auf Labormaßstab verkleinerter Modellaufbau verwendet werden oder es werden Versuche direkt an Großanlagen durchgeführt. Eine dritte Möglichkeit ist die direkte numerische Simulation mit *discrete-particle-models* (DPM).

**Literaturübersicht** Der Stofftransport von Feststoffen wird in Kaltversuchen von WIESE ET AL.[221] und BECKMANN[13] für Keramik und Holz untersucht. BEHNKE[15] stellt ähnliche Untersuchungen mit Kunststoffkugeln vor. Von SWITHEBANK ET AL.[199] werden Untersuchungen durchgeführt, bei denen sehr kleine Partikel sowohl über ein Vorschub- und Rückschubrost als auch über ein Walzenrost wandern. Außerdem werden von dieser Gruppe Sonden verwendet, welche vom Bett realer MVAs mittransportiert werden können. Sehr interessante Arbeiten auf dem Gebiet stammen auch von GOH[69]. Detaillierte Simulationen mit DPM liefern darüber hinaus Einblicke in die physikalischen Grundlagen. Solche Rechnungen werden beispielsweise von PETERS[148] oder KRÜLL[104] vorgestellt.

### F.1 Anlagenbeschreibung

Der Einfluss der Rostbewegung auf die Durchmischung wird in Kaltversuchen von WIESE ET AL. und BECKMANN am *Clausthaler Institut für Umwelt und Technik* (CUTEK) und bei der Firma MARTIN GmbH für Umwelt- und Energietechnik durchgeführt [13, 221]. Sie verwenden das *Kaltmodell* eines schrägen Rosts, auf dem eine Schicht von Partikeln transportiert wird. Die Kraftübertragung erfolgte durch von unten angetriebene Roststäbe.

Das Kaltrostmodell des CUTEK wurde bei der Firma MARTIN GmbH entwickelt. Es ist in Abbildung F.1 dargestellt. Mit der Versuchsanlage sollen die Unterschiede zwischen der



**Abbildung F.1:** Kaltmodell zur Untersuchung des Verweilzeitverhaltens der Partikelphase [13]

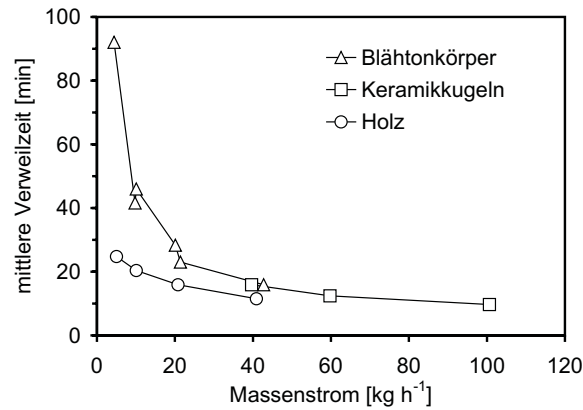
Bewegung auf dem Vorschub- und dem Rückschubrost untersucht werden.

Das Verweilzeitverhalten kann somit ohne die Beeinflussung durch den Verbrennungsprozess untersucht werden. Die Anlage besteht aus einem 600 mm breiten und 1.200 mm langen Rost, der aus einzelnen Roststäben zusammengesetzt ist. Die Roststäbe werden elektrisch angetrieben, ihre Geschwindigkeit ist regelbar. Der Feststofftransport über der Länge erfolgt durch eine Impulsaufgabe mittels dieser bewegten Elemente. Die Zufuhr des Modellbrennstoffs über einen Beschickungstisch ist vergleichbar mit einem großtechnischen Rostsystem.

Wie in Abbildung F.1 dargestellt, ist das Kaltmodell in der Mitte drehbar gelagert. Dadurch kann entweder der Betriebsmodus des Vorschubrosts oder des Rückschubrosts nachgeahmt werden. Die Kraftübertragung erfolgt durch von unten angetriebene Roststäbe.

Die Modellbrennstoffe werden aus Stoffen gewählt, die von ihren Eigenschaften her dem Brennstoff ähnlich sind. Auf dieser Grundlage werden Verweilzeitsummenkurven ermittelt. In Abbildung F.2 ist für das Rückschubrost die mittlere Verweilzeit  $\bar{\tau}$  [min] über dem Massenstrom  $\frac{\partial m}{\partial t}$  [kg h<sup>-1</sup>] unter Verwendung unterschiedlicher Modellstoffkörper dargestellt [13, 221].

Nach Einstellung eines stationären Zustandes wird zu einem bestimmten Zeitpunkt  $t_0$  eine mit Farbstoff markierte Menge des Modellfeststoffes als *Tracer* in einer Pulsfunktion aufgegeben. Bei den Untersuchungen werden insbesondere die Rauigkeit der unterschiedlichen Materialien als identisch angenommen. Formfaktoren können vernachlässigt werden, da alle Materialien in Kugelform gebracht worden sind. Wie in Abbildung F.2 dargestellt ist, hat insbesondere die physikalische Dichte  $\rho_P$  sowie der Durchmesser der Partikel einen entscheidenden Einfluss auf den Massenstrom der Partikel [221]. Entsprechend Tabelle C.3 haben sowohl die Blähtonkörper als auch die Holzkugeln ungefähr die



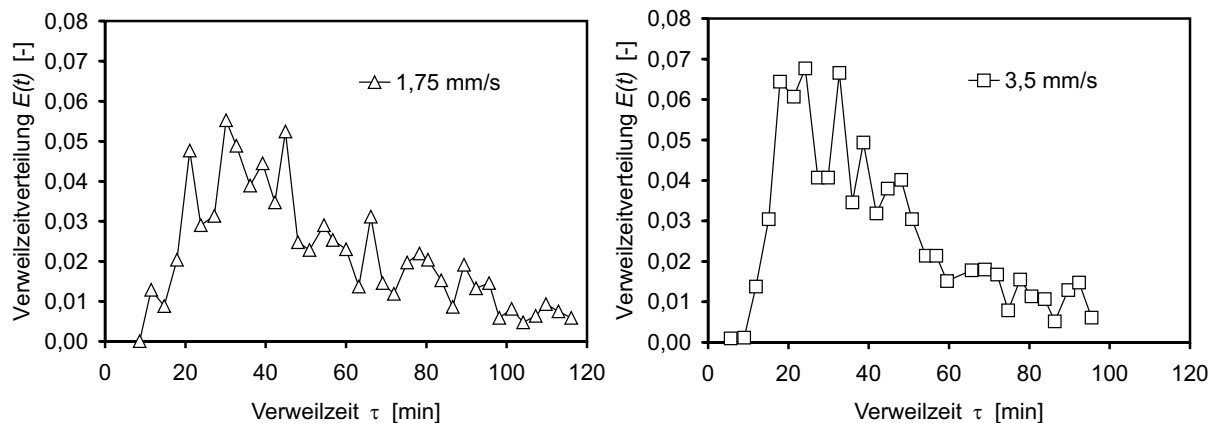
**Abbildung F.2:** Mittlere Verweilzeit über Massenstrom für unterschiedliche Modellfeststoffkörper beim Rückschubrost [13, 221]

gleiche Dichte, dementsprechend ähnlich ist folglich der Massenstrom. Bei den schwereren Keramikugeln ist er höher. Bei gleichem Durchmesser  $d_P$  ist die Verweilzeit der Holzpartikel und der Keramikpartikel trotz unterschiedlicher Dichte gleich. Auch die Messungen an dem Blähton bestätigen, dass der Partikeldurchmesser einen entscheidenden Einfluss auf die Verweilzeit hat.

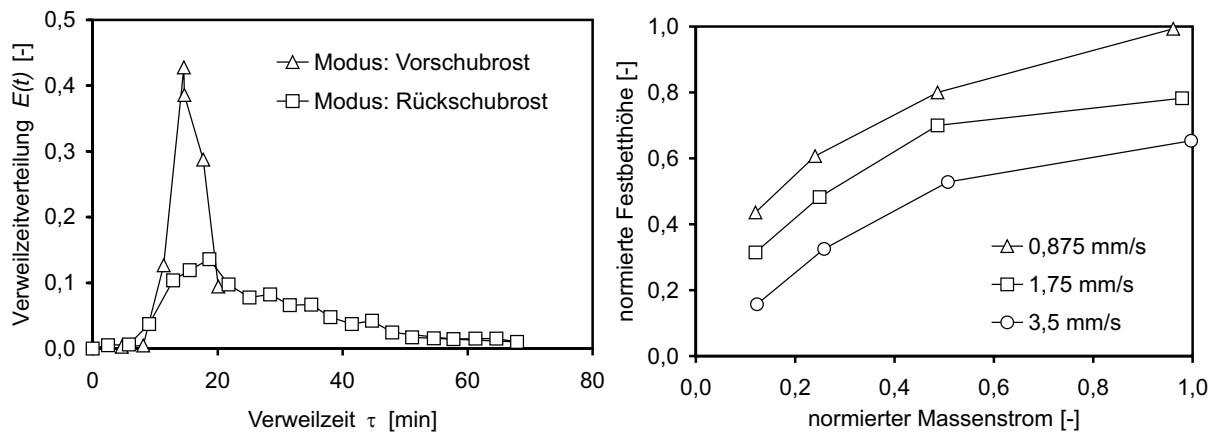
## F.2 Einfluss der Roststabgeschwindigkeit

Eine Erhöhung der Roststabgeschwindigkeit führt absolut zu einer Verringerung der mittleren Verweilzeit  $\bar{\tau}$  auf dem Rost und hat zusätzlich noch einen Einfluss auf die Verweilzeitverteilung  $E(t)$  der Partikel auf dem Rost (siehe Abbildung F.3).

Durch die erhöhte Geschwindigkeit wird der diffusive Anteil im Vergleich zum konvektiven Anteil am Impuls verringert. Ebenfalls stark beeinflusst wird die sich ausbildende Betthöhe. Es zeigt sich, dass mit ansteigendem Massenstrom die Festbetthöhe bei allen Roststabgeschwindigkeiten zunimmt, bei geringeren Roststabgeschwindigkeiten sogar mehr als bei hohen. Dieser Effekt kann als eine Art Aufstauung der Partikel interpretiert werden (siehe Abbildung F.4). Auch der Betriebsmodus hat einen Einfluss auf die Verweilzeit auf dem Rost. Beim Vorschubrost ist die Verweilzeitverteilung in der Regel stärker abgegrenzt und die Verweilzeit ist insgesamt höher, da die Rückvermischung nicht in dem Maß wie beim Rückschubrost stattfindet.



**Abbildung F.3:** Verweilzeitverteilung  $E(t)$  über der Verweilzeit  $\tau$  [min] bei einer Roststagesgeschwindigkeit von  $1,75 \text{ mm s}^{-1}$  (*linke Seite*) und  $3,5 \text{ mm s}^{-1}$  beim Rückschubrost (*rechte Seite*) [13, 221]



**Abbildung F.4:** Einfluss des Betriebsmodus auf die Verweilzeit auf dem Rost (*linke Seite*) und Einfluss der Roststagesgeschwindigkeit beim Rückschubrost auf die Betthöhe bei unterschiedlichen Massenströmen (*rechte Seite*) [13, 221]

# Literaturverzeichnis

- [1] ADAMS, T. A.: A simple Fuel Bed Model for Predicting Particulate Emissions from a Wood Waste Boiler. In: *Combustion and Flame* (1980), Nr. 39, S. 225–239
- [2] AHMED, S. ; KUMAR, R. ; HELT, J. E.: Computer Simulation of a Municipal solid Waste Incinerator. In: *JAPCA* (1989), Nr. 39, S. 1328–1333
- [3] ALDER, B. J. ; WAINWRIGHT, T. E.: Studies in Molekular Dynamics. II: Behaviour fo a Small Number of Elastic Spheres. In: *J. Chem. Phys.* (1960), Nr. 33, S. 1439
- [4] ALDUSHIN, A. P. ; MATKOWSKY, B. J. ; SHKADINSKY, K. G. ; SHKADINSKAYA, G. V. ; VOLPERT, V. A.: Combustion of porous Samples with Melting and Flow of Reactants. In: *Combustion Science and Technology* (1994), Nr. 99, S. 313–343
- [5] ALVES, S. S. ; FIGUEIREDO, J. L.: Pyrolysis Kinetics of Lignocellulosis Materials by Multistage Isothermal Thermogravimetry. In: *Journal Anal. Appl. Pyrolysis* 13 (1988), S. 123–134
- [6] ANNAMALAI, K. ; RYAN, W.: Interactive Processes in Gasification and Combustion - II. Isolated Carbon, Coal and Porous Char Particles. In: *Prog. Energy Combust. Sci.* 19 (1993), S. 383–446
- [7] AREND, W.: *Untersuchungen über das aerodynamische Verhalten nicht backender Kohle auf Wanderrosten*, Technische Hochschule, Dissertation, Diss., 1933
- [8] ATKINS, P. W.: *Physikalische Chemie*. VCH Verlag, Weinheim, 1996
- [9] BALZER, G. ; SIMONIN, O.: Extension of Eulerian Gas-Solid Flow Modelling to Dense Fluidized Bed. In: *Proc. 5th Int. Symp. on Refined Flow Modelling and Turbulence Measurements*. Paris, (Frankreich) : P.L. Violet, ed., 1993
- [10] BEARNS, M. ; HOFMAN, H. ; RENKEN, A.: *Chemische Reaktionstechnik: Lehrbuch der Technischen Chemie, Band 1., 2. Auflage*. Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 1992

- [11] BECKMANN, M.: *Mathematische Modellierung und Versuche zur Prozeßführung bei der Verbrennung und Vergasung in Rostsystemen zur thermischen Rückstandsbehandlung*. CUTEC-Schriftenreihe Nr. 21, Papierflieger, Clausthal-Zellerfeld, 1995
- [12] BECKMANN, M ; SCHOLZ, R.: Zum Feststoffumsatz bei Rückständen in Rostsystemen. In: *Brennstoff-Wärme-Kraft* (1994), Nr. 46(5), S. 218–229
- [13] BECKMANN, M. ; SCHOLZ, R.: Residence Time Behaviour of Solid Material in Grate Systems. In: *5th European Conference on Industrial Furnaces and Boilers*. Espinho-Porto, (Portugal), 2000
- [14] BECKMANN, M. ; WIESE, C. ; DAVIDOVIC, M. ; SCHOLZ, R.: Gasification of Waste Material in Grate Systems. In: *Proceedings of the 1997 International Conference on Incineration and Thermal Treatment Technologie*. Oakland, (CA USA), 1997
- [15] BEHNKE, M.: Der Martin-Rückschub-Rost mit neuer Feuerungsleistungsregelung. In: *Tagungsband zum VDI-Seminar: Emissionsarme, reststofforientierte Feuerungs-, Verbrennungs- und Vergasungstechniken für Prozeß- und Industrief Feuerungen sowie Restabfallverbrennungsanlagen*. VDI-Bildungswerk (Hrsg.), Düsseldorf, 1994
- [16] BEHRENDT, Th.: *Thermodynamische Modellierung des Betriebsverhaltens einer Hausmüllverbrennungsanlage am Beispiel TAMARA*, VDI Verlag, Düsseldorf, Diss., 1992
- [17] BERRETH, A. ; RÜCKERT, F. U. ; FÖRTSCH, D. ; RISIO, B. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K. R. G.: Implementation of Complex Chemical Reaction Mechanisms into a 3D Furnace Simulation Code. In: *The forth result-workshop of the HLRS (Supercomputing Centre of Stuttgart University)*. E. Krause, W. Jäger (eds.), Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2001
- [18] BILITEWSKI, B.: Stand und Prognosen der Entsorgungssituation für Siedlungsabfälle in Deutschland. In: *Technische Universität Dresden, TA-Datenbank-Nachrichten* 9 (2000), Nr. 1
- [19] BILITEWSKI, B. ; HÄRDITTE, G. ; MAREK, K.: Grundlagen der Pyrolyse von Rohstoffen. In: THOME-KOZMIENSKY, K.J. (Hrsg.): *Pyrolyse von Abfällen*. Berlin : EF-Verlag für Energie- und Umwelttechnik, 1985, S. 1–77
- [20] BIMSCHV, 17.: Siebzehnte Verordnung zur Durchführung des Bundesimmissionsschutzgesetzes: Verordnung über Verbrennungsanlagen für Abfälle und ähnliche brennbare Stoffe / BGBl. I. 1990. – Forschungsbericht

- [21] BIRD, R. B. ; STEWARD, W. E. ; LIGHTFOOT, E.N.: *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons, Inc., 1960
- [22] BLECKWEHL, S.: *Simulation des Abbrandverhaltens unterschiedlicher Hausmüllfraktionen in einem Batch-Prozess*. Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen (IVD), Universität Stuttgart, Diplomarbeit NR. 2699, 2002
- [23] BOEMER, A.: *Euler/Euler-Simulation der Fluidodynamik blasenbildender Wirbelschichten*, Technische Hochschule Aachen, Diss., 1996
- [24] BOLIO, E. J. ; YASUNA, J. A. ; SINCLAIR, J. L.: Dilute Turbulent Gas-Solid Flow in Risers with Particle-Particle Interactions. In: *AIChEJ*. 41 (1995), Nr. 6
- [25] BOLTZMANN, L.: *Vorlesungen über Gastheorie, (Nachdruck)*. Friedrich Vieweg, Braunschweig, 1981
- [26] BORGWART, W.: *Müllfeuerung*. Erich Schmidt Verlag, 1975
- [27] BOUILLARD, J. X. ; LYCZKOWSKI, R. W. ; GIDASPOW, D.: Porosity Distributions in a Fluidized Bed with an Immersed Obstacle. In: *AIChEJ*. 35 (1989), Nr. 6
- [28] BOWMAN, C. T. ; HANSON, R. K. ; DAVIDSON, D. F. ; GARDINER, W. C. J. ; LISSINSKY, V. ; SMITH, G. P. ; GOLDEN, D. M. ; FRENKLACH, M. ; GOLDENBERG: <http://www.berkeley.edu/>. (2000)
- [29] BRAUN-UNKHOFF, M. ; FRANK, P. ; KOGER, S. ; LEUCKEL, W. ; STAPF, D.: Evaluation of NO<sub>x</sub>-Reburning Models Under Large Scale Conditions. In: *5th International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment*. Lisbon (Portugal), 1999, S. 1023–1032
- [30] BRINK, A.: *Eddy Break-Up Based Models for Industrial Diffusion Flames with Complex Gas Phase Chemistry*. Abo Akademi University, 1998
- [31] BRUCH, C.: *Beitrag zur Modellierung der Festbettverbrennung in automatischen Holzfeuerungen*, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich (ETH Nr. 14040), Diss., 2001
- [32] BRYDEN, K. ; RAGLAND, K.: Numerical Modelling of a deep, fixed Bed Combustor. In: *Energy and Fuels* (1996), Nr. 10, S. 269–275
- [33] BUNDSCHUH, A.: *Ein paralleles Mehrgitterverfahren zur numerischen Simulation stationärer und dynamischer Betriebszustände industrieller Feuerungen*, Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen (IVD), Universität Stuttgart, Diss., 2001



- [34] CAMPBELL, S. C. ; WANG, D. G.: Particle Pressure in Gas-Fluidized Beds. In: *J. Fluid Mech.* 227 (1991), S. 495–508
- [35] CARNAHAN, N. F. ; STARLING, K. E.: Equation of State for Non-Attracting Rigid Spheres. In: *J. Chem. Phys.* 51 (1969), S. 635–636
- [36] CHAPMAN, S. ; COWLING, T. G.: *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Third. Cambridge University Press, 1970
- [37] CHEN, J.-Y.: A General Procedure for Constructing Reduced Reaction Mechanism with Given Independent Relations. In: *Combustion Science and Technology* 89 (1988), Nr. 57
- [38] CHEONG, K. ; SONG, T.: An alternative Discrete Ordinates Method with Interpolation and Source Differencing for two-dimensional Radiative Transfer Problems. 32 (1997), S. 107–125
- [39] CHUI, E. H. ; RAITHBY, G. D.: Computation of Radiant Heat Transfer on a non-orthogonal Mesh using the finite Volume Method. 23 (1993), S. 269–288
- [40] CROWE, C. T. ; SHARMA, M. P. ; STOCK, D. E.: The Particle-Source-in-Cell (PSI-cell) Model for Gas-Droplet Flows. 99 (1977), S. 325–332
- [41] CROWE, C. T. ; TROUTT, T. R. ; CHUNG, J. N.: Numerical Models for Two-Phase Turbulent Flows. In: *Annu. Rev. Fluid Mech.* 28 (1996), S. 11–43
- [42] DAMKÖHLER, G.: In: EUCKEN, A. (Hrsg.) ; JACOB, M. (Hrsg.): *Der Chemieingenieur*. Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1937, Kapitel 3, S. 359
- [43] DATE, A. W.: Complete Pressure Correction Algorithm for the Solution of Incompressible Navier-Stokes Equations on a nonstaggered Grid. In: *Numerical Heat Transfer* 29 (1996), S. 441–458
- [44] DAW, C. S. ; O'BRIEN, T. J. ; SYAMLAL, M. ; NICOLETTI, P.: Correlating Pressure-Drop and voidage Measurements with Gas-Solids Contacting in gas-fluidized Beds. In: *AIChE 1992 National meeting, Miami Beach, November, 1992*
- [45] DE MARCO, A. G. ; LOCKWOOD, F. C.: A new Flux Model for the Calculation of Radiation in Furnaces. In: *La rivista dei combustibili* 29 (1975), Nr. 5-6, S. 184–196
- [46] DING, J. ; GIDASPOW, D.: A Bubbling Fluidization Model Using Kinetic Theory of Granular Flow. In: *AIChE J.* 36 (1990), Nr. 4, S. 523–538

- [47] DING, J. ; LYCZKOWSKI, R. W. ; BURGE, S. W. ; GIDASPOW, D.: Three-Dimensional Models of Hydrodynamics and Erosion in Fluidized Bed Combustors. In: *AIChE Symp.* 88 (1992), Nr. 289
- [48] DOORMAAL, J. P. ; RAITHBY, G. D.: Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Fluid Flows. In: *Numerical Heat Transfer* 7 (1984), S. 147–163
- [49] ERTESVAG, I.S. ; MAGNUSSEN, B.F.: The Eddy Dissipation Turbulence Energy Cascade Model. In: *Combust. Sci. Tech.* (2000)
- [50] ESSENHIGH, R. H.: An Integration Path for the Carbon-Oxygen Reaction with Internal Reaction. In: *Proc. Combust. Inst.* 22 (1988), S. 89–96
- [51] ESSENHIGH, R. H.: Rate Equations for the Carbon-Oxygen Reaction: An Evaluation of the Langmuir Adsorption Isotherm at Atmospheric Pressure. In: *Energy & Fuels* 5 (1991), Nr. 1, S. 41–46
- [52] ESSENHIGH, R. H.: Influence of Initial Particle Density on the Reaction Mode of Porous Carbon Particles. In: *Combustion and Flame* 99 (1994), S. 269–279
- [53] FATEHI, M. ; KAVIANY, M.: Adiabatic reverse Combustion in a Packed Bed. In: *Combustion and Flame* (1994), Nr. 99, S. 1–17
- [54] FEDERLE, H.: *Thermodynamische Betrachtung über den Einfluß von Pyrolysetemperatur und Wassergehalt auf die Pyrolyse von Abfällen*, TU Berlin, Diss., 1977
- [55] FIVELAND, W. A.: A Discrete Ordinates Method for Predicting Radiative Heat Transfer in Axisymmetric Enclosures. In: *ASME paper* 106 (1982), Nr. 82-HT-20, S. 699–706
- [56] FIVELAND, W. A.: Discrete Ordinates Solutions of the Radiative Transport Equation for Rectangular Enclosure. In: *J. Heat Transfer* 106 (1984), S. 699–706
- [57] FIVELAND, W. A.: Three-dimensional Heat-Transfer Solutions by the Discrete-Ordinates Method. In: *AIAA J. Thermophysics* 2 (1988), Nr. 4, S. 309–316
- [58] FLYNN, M. J.: Very high-speed Computing Systems. In: *Proceedings of the IEEE* (1966), Nr. 54, S. 1901–1909
- [59] FLYNN, M. J.: *Some Computer Organizations and Their Effectiveness*. IEEE Trans. Comput., Vol. C-21, 1972

- [60] FONT, R. ; MARCILLA, A. ; VERDU, E. ; DEVESA, J.: Kinetic of the Pyrolysis of Almond Shells and Almond Shells Impregnated with  $\text{CoCl}_2$  in a Fluidised Bed Reactor and in a Pyroprobe 100. In: *Ind. Eng. Chem. Res.* 29 (1990), Nr. 9, S. 1846–1855
- [61] FORD, N. ; COOKE, M. ; SAGE, P.: Modelling of fixed Bed Combustion. In: *Fuel Processing Technology* (1993), Nr. 36, S. 55–63
- [62] FÖRTSCH, D.: *A Kinetic Model of Pulverized-Coal Combustion for Computational Fluid Dynamics*, Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen (IVD), Universität Stuttgart, Diss., 2002
- [63] FÖRTSCH, D. ; RÜCKERT, F. U. ; SABEL, T. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K. R. G. ; RISIO, B. ; BERRETH, A.: Ein Vergleich verschiedener globaler Reaktionsmodelle anhand der Simulation eines kohlegefeuerten Großkraftwerkskessels. In: *Verbrennung und Feuerungen*. 20. Deutscher Flammentag, Essen, 2001
- [64] FRANK-KAMENETSKII, D. A.: *Stoff- und Wärmeübertragung in der chemischen Kinetik*. Springer Verlag, Heidelberg, 1959
- [65] FREUNDLICH, H.: *Über die Adsorption in Lösungen*. Verlag Wilhelm Engelmann, Leipzig, 1906
- [66] FREY, H.H. ; PETERS, B. ; HUNSINGER, H. ; VEHLow, J.: Experimental and Numerical Evaluation of the Combustion Process in a Pilot Waste Incinerator. In: *5th International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment*. Lissabon (Portugal), 1999
- [67] GHIRELLI, F.: *Modelling of Combustion in the Gas Phase of a Grate Furnace*. Göteborg, Schweden : Department of Energy Conversion, Chalmers University of Technology, 2002
- [68] GIDASPOW, D.: *Multiphase Flow and Fluidization - Continuum and Kinetics Theory Description*. Academic Press, San Diego, USA, ISBN0-12-282470-9, 1994
- [69] GOH, Y. R. ; SIDDALL, R. G. ; NASSERZADEH, R. ; SWITHEBANK, J. ; LAWRENCE, D. ; GARROD, N. ; JONES, B.: Mathematical Modelling of the burning Bed of a Waste Incinerator. In: *J. of the Institute of Energy* (1998), Nr. 71, S. 110–118
- [70] GÖRRES, J.: *Modellierung stark verdrallter Kohlenstaub-/Biomasseflammen mit der Methode der Finiten Elemente*, Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen (IVD), Universität Stuttgart, Diss., 1996

- [71] GORT, R.: *On the Propagation of a Reaction Front in a Packed Bed Thermal Conversion of Municipal Solid Waste and Biomass*, Universiteit Twente, Enschede, Diss., 1995
- [72] GOULDIN, F. C.: Combustion Simulation: A New Tool for the Design of Waste Incinerators. In: *Engineering, Cornell quarterly* 24 (1990), S. 20–28
- [73] GRAD, H.: On the Kinetik Theory of Rarefied Gases. In: *Commun. Pure Appl. Math.* 2 (1949), S. 331
- [74] GREMYACHKIN, V. M. ; RÜCKERT, F. U.: Regimes of a Porous Carbon Particle Combustion in Oxygen. In: *Proceedings of the European Combustion Meeting*. European Sections of the Combustion Institute, Orléans (Frankreich), 2003
- [75] GUMZ, W. ; KIRSCH, H. ; MACKOWSKY, M.-T.: *Schlackenkunde, 6. Auflage*. Springer-Verlag, 6. Auflage, 1958
- [76] GUNN, D. J.: Transfer of Heat or Mass to Particles in Fixed and Fluidized Beds. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* (1978), Nr. 21, S. 467–476
- [77] HAMEL, S ; KRUMM, W.: Die Kinetik der Vergasung und Verbrennung unterschiedlicher Abfälle, Biomassen und Kohlen in der blasenbildenden Wirbelschicht. In: *DGMK-Fachbereichstagung*. Velen/Westfalen, 1998, S. 351–358
- [78] HAN, X. ; RÜCKERT, F. U. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K. R. G. ; KOGER, S. ; BOCKHORN, H.: Computational Modelling of the NO<sub>x</sub>-Reduction Process by Hydrocarbon Reburning with Reduced Kinetics. In: *6th International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment*. July 9-12, Oporto (Portugal), 2001
- [79] HAN, X. ; RÜCKERT, F. U. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K. R. G. ; KOGER, S. ; BOCKHORN, H.: Computational Modelling of the NO<sub>x</sub>-Reburning by Hydrocarbons in Coal Furnaces with Reduced Kinetics. In: *Combustion Science and Technology* 175 (2003), Nr. 3, S. 523–544
- [80] HARTNER, P. ; RAUPENSTRAUCH, H. ; STANDINGER, G.: Computersimulation einer Brennstoffschüttung: Einflußfaktoren für die Abbrandgeschwindigkeit. In: *Vortrag auf der Achema 1997*. Frankfurt, 1997
- [81] HAUTMAN, D. J. ; DRYER, F. L. ; SCHUG, K. P. ; GLASSMAN, I.: A Multiple-step Overall Kinetic Mechanism for the Oxidation of Hydrocarbons. In: *Combustion Science and Technology* 25 (1981), S. 219–235
- [82] HEMSATH, K. H.: *Zur Berechnung der Flammenstrahlung*, Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen (IVD), Universität Stuttgart, Diss., 1969

- [83] HOTTEL, H. C. ; SAROFIM, A. F.: *Radiative Transfer*. New York : McGraw Hill, 1967
- [84] HOWARD, J.B. ; WILLIAMS, G.C. ; FINE, D.H.: Kinetics of Carbon Monoxide Oxidation in Postflame Gases. In: *Proc. Combust. Inst.* 14 (1972), S. 975–986
- [85] HOWELL, J. R.: Thermal Radiation in participating Media: the Past, the Present, and some possible Futures. 110 (1988), S. 1220–1229
- [86] HUI, K. ; HAFF, P. K. ; UNGAR, J. E. ; JACKSON, R.: Boundary Conditions for High-Shear Grain Materials. In: *J. of Fluid Mech.* 145 (1984), S. 223–233
- [87] HUNSINGER, H. ; JAY, K. ; VEHLow, J. ; SEIFERT, H.: Investigation on the Combustion of various waste fractions inside a grate furnace. In: *Proceedings from the 7th Annual North American Waste-to-Energy Conference*. Tampa, Fla. May 17-19, Silver Springs, Md: SWANA, 1999, S. 199–212
- [88] JACKSON, R.: Some Mathematical and Physical Aspects of Continuum Models for the Motion of Granular Materials. In: MEYER, R. E. (Hrsg.): *Theory of Dispersed Multiphase Flow*. London : Academic Press, 1983, S. 291–337
- [89] JAMALUDDIN, A. S. ; SMITH, P. J.: Predicting radiative Transfer in axisymmetric Cylindrical Enclosures using the Discrete Ordinates Method. 62 (1988), S. 173–186
- [90] JENKINS, J. T. ; SAVAGE, S. B.: A Theory for the Rapid Flow of Identical, Smooth, Nearly Elastic Spherical Particles. In: *J. Fluid Mech.* 130 (1983), S. 187
- [91] JOHNSON, P. C. ; JACKSON, R.: Frictional-Collisional Constitutive Relations for Granular Materials with Application to Plane Shearing. In: *J. Fluid Mech.* 176 (1987), S. 67–93
- [92] JONES, W. P. ; LAUNDER, B. E.: The Prediction of Laminarization with a two-Equation Model of Turbulence. 15 (1972), S. 301–314
- [93] JONES, W. P. ; LINDSTEDT, R. P.: Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion. In: *Combustion and Flame* 73 (1988), S. 233–249
- [94] JÜTTNER, F.: Reaktionskinetik und Diffusion. In: *Z. phys. Chemie* 65 (1909), S. 595–623
- [95] KÆR, S.K.: *Numerical Investigation of Deposit Formation in Straw-fired Boilers*, Institute of Energy Technology, Aalborg University, Dänemark, Diss., 2001

- [96] KALSEN, Th. ; GÖRNER, K.: Simulation und Optimierung einer Müllverbrennungsanlage. In: *Modellierung und Simulation von Dampferzeugern und Feuerungen*. VDI Bericht 1390 (VDI-GET-Tagung), 1998, S. 227–241
- [97] KAYAKOL, N. ; SELUK, N. ; CAMPPELL, I. ; GÜLDER, Ö. L.: Performance of the Discrete Ordinates Method in a Gas Turbine Combustor Simulator. In: *1st Mediterranean Combustion Symposium*. Antalya, Turkey, 1999
- [98] KEE, R. J. ; RUPLEY, F. M. ; MILLER, J. A.: CHEMKIN-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics, SAND89-8009 / Sandia National Laboratories. 1991. – Forschungsbericht
- [99] KESSEL, L. B. M. ; BREM, G.: A dynamic Model of a Municipal Waste Incinerator. In: *VDI Bericht* (1995), Nr. 1193, S. 421–428
- [100] KNAUS, H.: *Simulation turbulenter reagierender Zweiphasenströmungen in industriellen Feuerungen mit komplexer Geometrie*, Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen (IVD), Universität Stuttgart, Diss., 2000
- [101] KNAUS, H. ; SCHNEIDER, R. ; HAN, X. ; STRÖHLE, J. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K. R. G.: Comparison of Different Radiative Heat Transfer Models and their Applicability in Coal-Fired Utility Boiler Simulations. In: *4th International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment*. July 7-10, Lisbon (Portugal), 1997
- [102] KNAUS, H. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K.R.G.: Evaluation of the 3D-Furnace simulation code AIOLOS by comparing CFD predictions of gas compositions with in-furnace measurements in a 210 MW coal-fired utility boiler. In: *Progress in Computational Fluid Dynamics* 1 (2001), S. 62–69
- [103] KONNOV, A. A.: <http://hompages.vub.ac.be>. (2000)
- [104] KRÜLL, F.: *Verfahren zur numerischen Simulation von Müllrostfeuerungen*, Ruhr-Universität Bochum, Diss., 2001
- [105] KRÜLL, F. ; KREMER, H. ; WIRTZ, S.: Feuerraumsimulation einer Müllverbrennungsanlage bei gleichzeitiger Simulation der Verbrennung auf dem Rost. In: *Modellierung und Simulation von Dampferzeugern und Feuerungen*. VDI Bericht 1390 (VDI-GET-Tagung), 1998, S. 199–212
- [106] KUIPERS, J. A. M.: *A Two-Fluid Micro Balance Model of Fluidized Beds*, University Twente, Niederlande, Diss., 1990

- [107] KUO, J. T.: Estimation of burning Rates in Solid Waste Combustion Furnaces. In: *Combustion Science and Technology* (1998), Nr. 137, S. 1–29
- [108] KUO, J. T. ; HSU, W. S. ; YO, T.-C.: Effect of Air Distribution on Solid Fuel Bed Combustion. In: *J. of Energy Resources Technology* (1998), Nr. 119, S. 120–128
- [109] LANGMUIR, I.: Chemical Reactions at Low Pressure. In: *J. Am. Chem. Soc.* 37 (1915), S. 1139–1366
- [110] LAUNDER, B. E. ; SPALDING, D. B.: The Numerical Computation of Turbulent Flows. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 3 (1974), S. 269–289
- [111] LAUNDER, B.E. ; MORSE, A.: Numerical Prediction of Axisymmetric Free Shear Flows with second order Reynolds Stress Closure. In: *Turbulent Shear Flows I* (1978), S. 279ff
- [112] LEIBOLD, H. ; HUNSINGER, H. ; SEIFERT, H. ; RÜCKERT, F. U. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K. R. G. ; PETERS, B. ; KREBS, L.: Neugestaltung des Feuerraums einer halbertechnischen Hausmüllverbrennungsanlage zur primärseitigen Schadstoffminderung. In: *Verbrennung und Feuerungen*. 20. Deutscher Flammentag, Essen, 2001
- [113] LEIBOLD, H. ; RÜCKERT, F. U. ; WALTER, R. ; SEIFERT, H. ; HEIN, K. R. G.: NO<sub>x</sub>-Reduction by Primary Measures Experiences with the Reconstructed Combustion Chamber of the TAMARA Grate Incineration Plant. In: *IT3 '02 Conference*. New Orleans, Louisiana, 2002
- [114] LEYE, A. R.: *Die Verbrennung auf dem Rost*, Technische Hochschule, Berlin, Diss., 1933
- [115] LINKA, S.: *Untersuchung der Eigenschaften von Schlacken und Schmelzen in technischen Feuerungen*, Lehrstuhl für Energieanlagen und Energieprozesstechnik (LE-AT), Ruhr-Universität Bochum, Diss., 2003
- [116] LIU, J. ; SHANG, H. M. ; CHEN, Y. S.: Predictions of radiative transfer in general body-fitted coordinates. 31 (1997), S. 423–439
- [117] LOCKWOOD, F. C. ; SHAH, N. G.: A new Radiation Solution Method for Incorporation in General Combustion Prediction Procedures. In: *18th Symp. (Int.) on Comb.*, 1980, S. 1405–1414
- [118] LOHF, A.: *Modellierung der chemisch-physikalischen Vorgänge im Müllbett von Rostfeuerungsanlagen*, Institut WAR (Wasserversorgung · Abwassertechnik · Abfalltechnik), Technische Universität Darmstadt, Diss., 1999

- [119] LUN, C. K. K. ; SAVAGE, F. B.: The Effects of Impact Velocity Dependant Coefficient of Restitution Stress Developed by Sheared Granular Materials. In: *Acta Mechanica* 63 (1986), S. 15–44
- [120] LUN, C. K. K. ; SAVAGE, F. B. ; JEFFREY, D. J. ; CHEPURNIY, N.: Kinetic Theory for Granular Flow: Inelastic Particles in Couette Flow and Slightly Inelastic Particles in a General Flowfield. In: *Journ. of Fluid Mech.* 140 (1984), S. 323–351
- [121] LUTZ, A. E. ; KEE, R. J. ; RUPLEY, F. M. ; MILLER, J. A.: SENKIN: A Fortran Program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics with Sensitivity Analysis, SAND87-8248 / Sandia National Laboratories. 1988. – Forschungsbericht
- [122] MAGEL, C.: *Simulation chemischer Reaktionskinetik in turbulenten Flammen mit detaillierten und globalen Mechanismen*, Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen (IVD), Universität Stuttgart, Diss., 1997
- [123] MAGNUSSEN, B.F.: Modeling of  $NO_x$  and Soot Formation by the Eddy Dissipation Concept. In: *Int. Flame Research Foundation, 1st Topic Oriented Technical Meeting, 17-19 Oct., Amsterdam, Holland, 1989*
- [124] MAGNUSSEN, B.F.: The Eddy Dissipation Concept. In: *XI Task Leaders Meeting - Energy Conversion in Combustion, IEA, 1989*
- [125] MALALASEKER, W. ; VERSTEEG, H. K. ; HENSON, J. C. ; JONES, J. C.: Calculation of radiative Heat Transfer in Combustion Systems. In: *5th International Conference on Combustion Technologies for a Clean Environment*. Lisbon, Portugal, 1999, S. 1001–1015
- [126] MARCARD, W.: *Rostfeuerungen*. VDI-Verlag GmbH, Berlin, 1934
- [127] MERZ, A. ; VOGG, H.: TAMARA - Ein Forschungsinstrument des Kernforschungszentrum Karlsruhe zur Abfallverbrennung. In: *Abfallwirtschaftsjournal* 1 (1989), Nr. 11, S. 111–116
- [128] MHKW-LUDWIGSHAFEN: *Betriebshandbuch*. Ludwigshafen, 2002
- [129] MIH, W. C.: An Empirical Shear Stress Equation for General Solid-Fluid Mixture Flows. In: *Int. J. Multiphase Flow* 4 (1992), Nr. 19, S. 683–690
- [130] MODEST, M. F.: *Radiative Heat Transfer*. New York : McGraw Hill, 1993
- [131] MORF, L. ; RECHBERGER, H.: *Vorlesung Thermische Verfahren der Entsorgung: Die Verbrennung (Feuerung)*. Institut für Wassergüte und Abfallwirtschaft : TU Wien, 2004



- [132] MUELLER, C.: *Numerische Simulation industrieller Verbrennungsprozesse unter Verwendung von reaktionskinetischen Ansätzen und Wirbelzerfallsmodellen*. Ph.D. thesis, Ruhr University of Bochum, 1998
- [133] NASSERZADEH, V. ; SWITHENBANK, J. ; JONES, B.: Three-Dimensional Modelling of a Municipal Solid-Waste Incinerator. In: *Journal Inst. Energy* (1991), Nr. 64, S. 166–175
- [134] NIEUWLAND, J.J.: *Hydrodynamic Modelling of Gas-Solid Two-Phase Flows*, Twente University, The Netherlands, Diss., 1994
- [135] NOLL, B.: *Numerische Strömungsmechanik*. Springer Verlag, Hamburg, 1992
- [136] NUNN, T. R. ; HOWARD, J. B. ; LONGWELL, J. P. ; PETERS, W. A.: Product Composition and Kinetics in the Rapid Pyrolysis of sweet Gum Hardwood. In: *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* 24 (1985), S. 836–844
- [137] O'BRIEN, T. J. ; SYAMLA, M.: A Validation Study of the Moving Bed Coal Gasification Model, MGAS. In: *8th Pittsburgh Coal Conference, Pittsburgh, PA, October 14-18, 1991*
- [138] O'BRIEN, T. J. ; SYAMLAL, M.: NIMPF: A nonisothermal Multiparticle fluidized Bed hydrodynamic Model. In: *Numerical Methods for Multiphase Flows, ASME symp. Ser.* Bd. 91, 1990
- [139] O'BRIEN, T. J. ; SYAMLAL, M.: Fossil fuel circulating fluidized Bed: Simulation and Experiment. In: *AICHE Symposium Series* 87 (1991), Nr. 281
- [140] OERTEL, H. ; LAURIEN, E.: *Numerische Strömungsmechanik*. Friedr. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, Braunschweig/Wiesbaden, 2002
- [141] OGAWA, S. ; UMEMURA, A. ; OSHIMA, N.: On the Equation of Fully Fluidized Granular Materials. In: *J. Appl. Math. Phys.* (1980), Nr. 31
- [142] ÖZIIK, M. N.: *Radiative Transfer and Interactions with Conduction and Convection*. New York : John Wiley & Sons, Inc., 1973
- [143] PATANKAR, S. V.: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. New York : Hemisphere Publishing Corporation, 1980
- [144] PERIĆ, M.: *A Finite Volume Methode for the Prediction of Three-Dimensional Fluid Flow in Complex Ducts*, Mech. Eng. Dept., Imperial College of Science and Technology, London (England), Diss., 1985

- [145] PERIĆ, M. ; FERZIGER, J. H.: *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, Hamburg, 1997
- [146] PETERS, B.: A Model for the Numerical Simulation of Devolatilization and Combustion of Waste Material in Packed Beds / Research Center Karlsruhe, KfK-Bericht Nr. 5385. 1994. – Forschungsbericht
- [147] PETERS, B.: A Detail Model for Devolatilization and Combustion of Waste Materials in Packed Beds. In: *3rd European Conference on Industrial Furnaces and Boilers*. Lissabon, (Portugal), 1995, S. 86–105
- [148] PETERS, B.: *Thermal Conversion of Solid Fuels*. London : WIT Press, 2003
- [149] PETERS, B. ; KREBS, L. ; FREY, M.: Numerische Simulation einer Müllverbrennungsanlage. In: *Verbrennung und Feuerrung: 17. Deutscher Flammentag. VDI-Bericht Nr. 1193*. VDI-Gesellschaft Energietechnik (Hrsg.), Düsseldorf, 1995, S. 624
- [150] PETERS, N. ; ROGG, B.: *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1993
- [151] PITA, J. A. ; SUNDARESAN, S.: Gas-Solid flow in vertical tubes. In: *AIChEJ*. 39 (1993), Nr. 4, S. 541–551
- [152] PRANDTL, L. ; OSWATITISCH, K. ; WIEGHARDT, K.: *Führer durch die Strömungslehre*. Vieweg, 8. Auflage, Braunschweig, 1984
- [153] PRASAD, D. ; KYTÖMAA, H. K.: Particle Stress and Viscous Compaction During Shear of Dense Suspensions. In: *Int. J. Multiphase Flow* 21 (1995), Nr. 5, S. 775–785
- [154] PYLE, D. L. ; ZAROR, C. A.: Heat Transfer und Kinetics in the Low Temperature Pyrolysis of Solids. In: *Chem. Eng. Sci.* 39 (1984), Nr. 1, S. 147–158
- [155] QI, H.: *Euler/Euler-Simulation der Fluidodynamik zirkulierender Wirbelschichten*, Technische Hochschule Aachen, Diss., 1997
- [156] RANZ, W. E. ; MARSHALL JR., W. R.: Evaporation from Drops; Part I. In: *Chemical Engineering Progress* 48 (1952), Nr. 3, S. 141–146
- [157] RANZ, W. E. ; MARSHALL JR., W. R.: Evaporation from Drops; Part II. In: *Chemical Engineering Progress* 48 (1952), Nr. 4, S. 173–180
- [158] RAUPENSTRAUCH, H.: *Ein Beitrag zur Computersimulation reagierender Schütttschichten*, Technische Universität Graz, Diss., 1991

- [159] RAUPENSTRAUCH, H.: Selbsterwärmung gasdurchströmter Schüttungen brennender Feststoffe. In: *Vortrag auf der Achema 1997*. Frankfurt, 1997
- [160] RAUPENSTRAUCH, H. ; STAUDINGER, G.: Der Einfluß der Brennstoffeuchte auf die Wassergasreaktion in Wanderbettfeuerungsanlagen. In: *Vortrag auf der Achema 1997*. Frankfurt, 1997
- [161] RAVICHANDRAN, M. ; GOULDIN, F.C.: Numerical Simulation of Incinerator Overfire Mixing. In: *Comb. Sei. Techn.* (1992), Nr. 85, S. 165–185
- [162] RHIE, C.M. ; CHOW, W.L.: Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. 21 (1983), Nr. 11, S. 1525–1532
- [163] RICCIUS, O: CFD-Einsatz für Müllverbrennungsanlagen. In: *Modellierung und Simulation von Dampferzeugern und Feuerungen*. VDI Bericht 1390, 1998, S. 215–226
- [164] RICHTER, S.: *Numerische Simulation der Flugashedeposition in kohlegefeuerten Dampferzeugern*, University of Stuttgart, Diss., 2002
- [165] RISIO, B.: *Effizienz und Verlässlichkeit numerischer Vorhersagen zur rechnergestützten Optimierung von Großkraftwerksbrennkammern*, Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen (IVD), Universität Stuttgart, Diss., 2000
- [166] RISIO, B. ; FÖRTSCH, D. ; U., Schnell. ; HEIN, K.R.G.: Prediction of Pulverized Coal-Fired Utility Boiler Performance on Individually Discretized Irregular Overlapping Grids. In: *4th Internat. Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment*. July 7-10, Lisbon (Portugal), 1997
- [167] ROBERTS, G. W. ; SATTERFIELD, C. N.: Effectiveness Factor for Porous Catalysts. Langmuir-Hinshelwood Kinetic Expressions. In: *Ind. Eng. Chem. Fund.* 4 (1965), Nr. 3, S. 288–293
- [168] ROGERS, J. E. L. ; SAROFIM, A. F. ; HOWARD, J. B. ; C., Williams G. ; FINE, D. H.: Effect of Underfire Air Rate an a Burning Simulated Refuse. In: *Proceedings National Incineration Conference*. ASME, New York, 1972
- [169] ROGERS, J. F.-L. ; SAROFIM, A. F. ; HOWARD, J. B. ; WILLIAM, G. C. ; FINE, D. H.: Combustion Characteristics of Simulated und Shredded Refuse. In: *15th Symposium (Int.) of Combustion*. The Combustion Institut, Pittsburg, 1974, S. 1137–1148

- [170] ROSIN, P. ; KAYSER, H. G. ; FEHLING, R.: *Die Zündung fester Brennstoffe auf dem Rost*. Berichte der Technisch-Wirtschaftlichen Sachverständigenausschüsse der Reichskohlerates, Berlin, 1935
- [171] ROSSBERG, M. ; WICKE, E.: Transportvorgänge und Oberflächenreaktionen bei der Verbrennung graphitischen Kohlenstoffs. In: *Chem-Ing.-Techn.* 28 (1956), Nr. 3, S. 181–189
- [172] RÜCKERT, F. U. ; SABEL, T. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K. R. G. ; RISIO, B.: Comparison of different Global Reaction Mechanisms for Coal-Fired Utility Boilers. In: *Progress in Computational Fluid Dynamics* 3 (2003), Nr. 2-4, S. 130–139
- [173] RÜCKERT, F. U. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K. R. G. ; BLECKWEHL, S. ; LEIBOLD, H. ; SEIFERT, H.: Simulation des Abbrandverhaltens in einem Batch-Prozess. In: *Modellierung und Simulation von Dampferzeugern und Feuerungen*. VDI Berichte 1664 (VDI-GET-Tagung), Braunschweig, 2002
- [174] RÜCKERT, F. U. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K. R. G. ; PETERS, B. ; KREBS, L. ; HUNSINGER, H.: Simulation verschiedener Feuerungsprinzipien einer Rostfeuerungen. In: *Modellierung und Simulation von Dampferzeugern und Feuerungen*. VDI Berichte 1534 (VDI-GET-Tagung), Braunschweig, 2000
- [175] RÜCKERT, F. U. ; STRÖHLE, J. ; SABEL, T. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K. R. G.: Advantages of Combining Different Grid Types for 3D Furnace Modelling. In: *6th International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment*. July 9-12, Oporto (Portugal), 2001
- [176] RUMMER, B.: *Simulation der Trocknung, Pyrolyse und Vergasung großer Brennstoffpartikel*, Institut für Apparatebau, Mechanische Verfahrenstechnik und Feuerungstechnik, Diss., 1998
- [177] RUPPERT, H.: *Untersuchungen zum Abbrandverhalten heizwertarmer fester Abfälle in Drehrohrverbrennungsanlagen*, Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen (IVD), Universität Stuttgart, Diss., 2002
- [178] SAASTAMOINEN, J. J. ; TAIPLE, R. ; HORTTANAINEN, M. ; SARKOMAA, P.: Propagation of the Ignition Front in Beds of Wood Particles. In: *Combustion and Flame* (2000), Nr. 123, S. 214–226
- [179] SAKAMI, M. ; CHARETTE, A. ; DEZ, V. le: Application of the Discrete Ordinates Method to combined conductive and radiative Heat Transfer in a two-dimensional complex Geometry. 56 (1996), Nr. 4, S. 517–533

- [180] SANTAMARIA-CARNICERO, J. ; RÜCKERT, F. U. ; FÖRTSCH, D. ; SPRICH, J. ; STAIGER, B. ; BERGER, R. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K. R. G.: Numerical Simulation of a Grate-Firing-System for Biomass. In: *6th European Conference on Industrial Furnaces and Boilers*. Estoril, (Portugal), 2002
- [181] SCHLÜNDER, E.-U. ; TSOTSAS, E.: *Wärmeübertragung in Festbetten, durchmischten Schüttgütern und Wirbelschichten*. Georg Thieme Verlag, 1988
- [182] SCHNEIDER, R.: *Beitrag zur numerischen Berechnung dreidimensionaler reagierender Strömungen in industriellen Brennkammern*, Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen (IVD), Universität Stuttgart, Diss., 1998
- [183] SCHNELL, U.: *Wirkungsgradoptimierte Kraftwerkstechnologie zur Stromerzeugung aus fossilen Brennstoffen: Anforderungen, Verfahrenskonzepte, Modellbildung und Simulation*. Düsseldorf : VDI Verlag, 1998
- [184] SCHNELL, U.: Numerical Modelling of Solid Fuel Combustion Processes using advanced CFD-based Simulation Tools. In: *Progress in Computational Fluid Dynamics* 1 (2002), Nr. 4, S. 208–218
- [185] SCHNELL, U. ; SCHNEIDER, R. ; MAGEL, H.-C. ; RISIO, B. ; LEPPER, J. ; HEIN, K. R. G.: Numerical Simulation of Advanced Coal-Fired Combustion Systems with In Furnace NO<sub>x</sub> Control Technologies. In: *3rd Internat. Conference Technologies for a Clean Environment*. July 3-6, Lisbon (Portugal), 1995
- [186] SCHUHMACHER, F. ; MEICHELBOCK, H. ; MERZ, A. ; VOGG, H.: Entwicklung und Inbetriebnahme eines Laborofens zum Studium der Verbrennung von Reststoffen auf Rostsystemen. In: *Preprints zum GVC-Symposium Afallwirtschaft*. Gesellschaft für Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (Hrsg.), Würzburg, 1994, S. 563–567
- [187] SCHWISTER, K.: *Taschenbuch der Verfahrenstechnik*. Fachbuchverlag Leipzig, 2001
- [188] SEIFERT, H.: *Primärseitige Stickoxidminderung als Beispiel für die Optimierung des Verbrennungsvorgangs in Abfallverbrennungsanlagen*. Abschlußbericht: HGF-Strategiefonds-Projekt, Forschungszentrum Karlsruhe, 2003
- [189] SHIN, D.H. ; CHOI, S.: The Combustion of Simulated Waste Particles in a fixed Bed. In: *Combustion and Flame* (2000), Nr. 121, S. 167–180
- [190] SHKADINSKI, K. V. ; SHKADINSKAYA, G.V. ; MATKOWSKY, B. J. ; VOLPERT, V. A.: Combustion Synthesis of a porous Layer. In: *Combustion Science and Technology* (1992), Nr. 88, S. 257–270

- [191] SKREIBERG, O.: Woodsim - a Mass and Heat Balance Program for Batch Combustion Processes of Solid Fuels. In: *IEA Bioenergy Working Group Meeting* (1997)
- [192] SMOOKE, M. D.: *Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1991
- [193] SOLOMON, P. F. ; SERIO, M. A. ; SUUBERG, E. M.: Coal Pyrolysis: Experiments, Kinetic Rates and Mechanisms. In: *Prog. Energy Combust. Sci.* 65 (1992), S. 133–220
- [194] SOO, S. L.: *Fluid Dynamics of Multiphase Systems*. Blaisdell, Waltham, MA, 1967
- [195] STAPF, D. ; KICHERER, A. ; KOLB, Th. ; WÖLFERT, A. ; SEIFERT, H.: Verbrennung im Drehrohrofen: Modellierung, Betriebs- und Technikumsversuche. In: *VDI-Berichte 1313* 15 (1997)
- [196] STRÖHLE, J.: *A Radiative Non-Gray Gas Model for the Simulation of Coal Combustion*, Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen (IVD), Universität Stuttgart, Diss., 2003
- [197] STRÖHLE, J. ; KNAUS, H. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K. R. G.: A Radiation Model for the Numerical Simulation of Coal-Fired Furnaces Using Body-Fitted Grids. In: *Combust. Sci. Technol.* 153 (2000), S. 127–139
- [198] STRÖHLE, J. ; RÜCKERT, F. U. ; RISIO, B. ; SCHNELL, U. ; HEIN, K. R. G.: A Vectorised Lagrangian Particle Model for the Numerical Simulation of Coal-Fired Furnaces. In: *The fifth result-workshop of the HLRS (Supercomputing Centre of Stuttgart University)*. E. Krause, W. Jäger (eds.), Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2002
- [199] SWITHENBANK, J. ; NASSERZADEH, V. ; GOH, R. ; SIDDALL, R.G.: *Fundamental Principles of Incineration Design*, 1997
- [200] SYAMLAL, M.: A Review of Granular Stress Constitutive Relations / DOE/MC 21353-2372, NTIS/DE87006499. 1987. – Forschungsbericht
- [201] SYAMLAL, M.: The Particle-Particle drag Term in a multiparticle Model of Fluidization / DOE/MC 21353-2373, NTIS/DE87006500. 1987. – Forschungsbericht
- [202] SYAMLAL, M.: MFIx Documentation, User's Manual / DOE/METC-95/1013, DE95000031. 1994. – Forschungsbericht
- [203] SYAMLAL, M. ; BISSETT, L. A.: METC Gasifier Advanced Simulation (MGAS) Model / DOE/METC-92/4108, DE92001111. 1992. – Forschungsbericht

- [204] SYAMLAL, M. ; ROGERS, W. ; O'BRIEN, T. J.: MFIX Documentation, Theory Guide / DOE/METC-94/1004, DE94000087. 1993. – Forschungsbericht
- [205] TANKA, T. ; TSUJI, Y.: Numerical Simulation of Gas-Solid Two-Phase Flow in a Vertical Pipe: On the Effect of Inter-Particle Collisions. In: *Proc. 4th int. Symp. on Gas-Solid Flows* Bd. 121. ASME FED, 1991, S. 123–128
- [206] TANNER, E.: *Der Temperaturverlauf im Brennstoffbett und im Rost bei der Verbrennung von Steinkohle*, Technische Hochschule, Darmstadt, Diss., 1933
- [207] TECHNISCHE-ANLEITUNG-SIEDLUNGSABFALL: *Umweltrecht 8. Auflage*. DTV Verlage, 1994
- [208] THIELE, E. W.: Relation Between Catalytic Activity and Size of Particles. In: *Ind. Eng. Chem.* 31 (1939), S. 916–920
- [209] THUNMAN, H.: *Principles and Models of Solid Fuel Combustion*, Department of Energy Conversion, Chalmers University of Technology, Göteborg, Schweden, Diss., 2001
- [210] THURNER, F. ; MANN, U.: Kinetic investigations of wood pyrolysis. In: *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* 20 (1981), S. 432–488
- [211] TSOTSAS, E.: Über die Wärme- und Stoffübertragung in durchströmten Festbetten: Experimente, Modelle, Theorien. In: *VDI-Fortschrittsbericht, VDI Reihe 3, Düsseldorf: VDI-Verlag* (1990), Nr. 223
- [212] UMWELTBUNDESAMT: *Thermische Behandlung von Abfällen*. <http://www.umweltbundesamt.de>, 2004
- [213] VISKANTA, R. ; MENGÜ, M. P.: Radiation heat transfer in combustion systems. 13 (1987), S. 97–160
- [214] WAKAO, N. ; KATO, K.: Effective Thermal Conductivity of Packed Beds. In: *Journal Chemical Engineering Japan* (1969), Nr. 2, S. 24–33
- [215] WALL, T.F ; BHATTACHARYA, S.P. ; ZHANG, R.P. ; GUPTA, R.P. ; HE, X.: The Properties and Thermal Effects of Ash Deposits in Coal-Fired Furnaces. 19 (1993), S. 487–504
- [216] WARNATZ, J. ; MAAS, U. ; DIBBLE, R.W.: *Combustion*. Springer Verlag, 1996
- [217] WARNATZ, J. ; V., Karbach ; KLAUS, P.: <http://www.ca.sandia.gov/tdf/>. (1997)

- [218] WERKMEISTER, H.: *Versuche über den Verbrennungsverlauf bei Steinkohlen mittlerer Korngrößen*, Technische Hochschule Hannover, Diss., 1932
- [219] WICKE, E.: Contributions to the Combustion Mechanism of Carbon. In: *Proc. Combust. Inst.* Bd. 5, 1954, S. 245–252
- [220] WIEHN, G.C.: *Kostenorientierte Auslegung müllgefeuerter Verbrennungsanlagen*. Aachen : Shaker Verlag, 1995
- [221] WIESE, C. ; BUSCH, M.: Verweilzeitverhalten von Feststoffen in Rostsystemen. In: *VGB-Fachtagung Thermische Abfallverwertung*. Essen, 1999
- [222] WOLF, C. ; BECKMANN, R.: Kosteneinsparungspotentiale bei der Verbrennung von Abfällen in Rostfeuerungsanlagen. In: *DGMK Tagungsbericht 9802*, 1998
- [223] WOLF, C. ; HILLER, R. ; CREMER, I.: Strömungssimulation von Müllverbrennungsanlagen in Teillastbereichen. In: *Modellierung und Simulation von Dampferzeugern und Feuerungen*. VDI Berichte 1534 (VDI-GET-Tagung), Braunschweig, 2000
- [224] WURZENBERGER, J. C.: *A Combined Packed Bed and Single Particle Model Applied to Biomass Combustion*, Graz University of Technology, Diss., 2001
- [225] ZEHNER, P.: Experimentelle und theoretische Bestimmung der effektive Wärmeleitfähigkeit durchströmter Kugelschüttungen bei mäßigen und hohen Temperaturen / VDI-Forschungsheft 558., Düsseldorf : VDI-Verlag. 1972. – Forschungsbericht
- [226] ZELDOWITSCH, J. B.: On the Theory of Reactions on Powders and Porous Substances. In: *Acta Physicochim. URSS* 10 (1939), Nr. 4, S. 583–628
- [227] ZHOU, L.: *Theory and numerical Modelling of turbulent Gas-Particle Flows and Combustion*. Science Press and CRC Press, Inc., Beijing, 1993
- [228] ZINSER, W.: *Zur Entwicklung mathematischer Flammenmodelle für die Verfeuerung technischer Brennstoffe*, Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen (IVD), Universität Stuttgart, Diss., 1985