Die approbierte Originalversion dieser Dissertation ist in der Hauptbibliothek der Technischen Universität Wien aufgestellt und zugänglich.
http://www.ub.tuwien.ac.at

The approved original version of this thesis is available at the main library of the Vienna University of Technology.
http://www.ub.tuwien.ac.at/eng

TECHNISCHE UNIVERSITÄT WIEN
Vienna University of Technology

DISSERTATION

Prozess- und numerische Strömungssimulation bei der Neuentwicklung einer Verbrennungsanlage für ballenförmige Biomasse

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der technischen Wissenschaften unter der Leitung von

Univ. Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Anton Friedl
Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik
und Technische Biowissenschaften, E166

eingereicht an der Technischen Universität Wien
Fakultät für Maschinenwesen und Betriebswissenschaften

vorgelegt von
Dipl.-Ing. Martin Miltner
Matr. Nr.: 9525008
Mozartgasse 603
3034 Maria Anzbach

Maria Anzbach, im September 2015 .....

Prüfungskomitee

Betreuer und Erstgutachter:	Univ. Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Anton Friedl
Externer Zweitgutachter:	Univ. Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Thomas Nussbaumer
Vorsitzender:	Univ. Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Hermann Hofbauer
Datum des Rigorosums:	16.09.2015

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe, dass alle Stellen der Arbeit, die wörtlich oder sinngemäß aus anderen Quellen übernommen wurden, als solche kenntlich gemacht sind und dass die Arbeit in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegt wurde.

Martin Miltner

Danksagung

An erster Stelle möchte ich meinem Doktorvater Univ. Prof. Dipl.-Ing. Dr. Anton Friedl danken. Durch ihn bekam ich die Möglichkeit, mit interessanten Menschen an interessanten Forschungsprojekten zu arbeiten und durch die Anstellung in seinem Forschungsbereich hat er mir die Verfassung meiner Dissertation erst ermöglicht.

In Zusammenhang damit möchte ich auch Ass. Prof. Dipl.-Ing. Dr. Michael Harasek meinen Dank aussprechen, der mich in seiner Forschungsgruppe aufgenommen und mit numerischer Strömungssimulation in Kontakt gebracht hat. In unzähligen kürzeren und längeren Gesprächen haben wir die notwendige Projektarbeit gemeinsam erörtert sowie meine eigene wissenschaftliche Arbeit strukturiert. Damit war er der am intensivsten eingebundene Betreuer meiner Dissertation und stets für konstruktive Diskussionen offen.

Weiters möchte ich auch meinem Zweitgutachter Univ. Prof. Dipl.-Ing. Dr. Thomas Nussbaumer von der Hochschule Luzern danken und meine Hochachtung aussprechen. Er hat sich in rascher und völlig unkomplizierter Weise dazu bereit erklärt, meine Dissertation in ausgesprochen kurzer Zeit gegenzulesen. Seine wissenschaftlichen Arbeiten waren mir während der Verfassung meiner Dissertation stets Inspiration und Ansporn.

Bei allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Forschungsbereiches „Thermische Verfahrenstechnik und Simulation“ möchte ich mich für die angenehme und fruchtbare Arbeitsatmosphäre bedanken. Besonderen Dank gebührt dabei Dipl.-Ing. Dr. Aleksander Makaruk, Dipl.-Ing. Christian Jordan und Dipl.-Ing. Andras Horvath für die wertvolle technische Unterstützung bei der Verwendung von Hard- und Software für die CFD sowie für die Programmierung in C++. Bei meinen studentischen Mitarbeitern Dipl.-Ing. Marlene Winkler, Dipl.-Ing. Angela Potetz, Dipl.-Ing. Karolina Brzuska und Univ. Ass. Dipl.-Ing. Dr. Berthold Stöger möchte ich mich für unzählige Laborstunden an LDA und TGA bedanken.

Weiters möchte ich mich ganz besonders bei meinem Kollegen und Freund Dr. Georg Beckmann bedanken, der in seiner Funktion als Feuerungsexperte und Versuchsleiter der Pilotanlagen in Simmering und Dürnkrut immer eine zentrale und integrative Funktion verkörpert hat. Intensive Diskussionen und Erörterungen mit ihm haben mir zu einem tieferen Verständnis der Materie verholfen.

Ganz speziell möchte ich mich bei meinen Eltern Melitta und Helmut Miltner bedanken. Ohne ihre Unterstützung und ihr Verständnis wären mir ein technisches Studium und die Verfassung einer Dissertation nicht möglich gewesen. Sie blieben mir auch stets Motivation während der langen Jahre bis hin zum Abschluss meiner Arbeit.

Meiner Frau Angela Miltner gebührt jedoch der größte Dank. Sie hat mir während des gesamten Studiums stets mit Rat und Tat zur Seite gestanden und mir auch in schwierigen Zeiten immer Mut zugesprochen und mich zum Durchhalten ermuntert. Ich bedanke mich bei ihr und meinem geliebten Sohn Oskar für das aufgebrachte Verständnis während der heißen Phase des Zusammenschreibens, die von blanken Nerven, ausgeprägtem Schlafmangel und begrenztem Zeitbudget geprägt war.

meiner Frau und meinem Sohn gewidmet

So eine Arbeit wird eigentlich nie fertig,
man muss sie für fertig erklären, wenn man nach der Zeit
und den Umständen das Möglichste getan hat.

Johann Wolfgang von Goethe

Kurzfassung

Trotz zahlreicher Technologievarianten der thermischen Nutzung von Biomasse bleibt die Verbrennung nach modernen Standards die wichtigste Prozessroute und stellt ein wesentliches Potential zur Deckung des weltweiten Primärenergiebedarfs vor dem Hintergrund des globalen Klimawandels sowie der begrenzten Verfügbarkeit fossiler Ressourcen dar. Die Entwicklung und Optimierung neuer Verbrennungsverfahren stellen sich aufgrund der hohen Standards häufig als sehr zeit- und kostenintensiv dar. Moderne Simulationswerkzeuge wie die Prozesssimulation und die numerische Strömungssimulation (CFD) können dabei wertvolle Unterstützung und Beschleunigungsmaßnahmen sein. Hierfür sind aber physikalisch fundierte und verlässliche Modelle mit hohem Detaillierungsgrad erforderlich. Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Entwicklung von Simulationstechnologien anhand eines innovativen Verbrennungssystems für ballenförmige halmgutartige Biomasse.

Nach der Vorstellung des analysierten Verbrennungskonzepts sowie experimenteller Ergebnisse aus einer Versuchsanlage mit 2 MW thermischer Leistung werden Prozesssimulation und Verbrennungsrechnung für den betrachteten Prozess dargestellt. In dieser Arbeit wurde ein dreizoniges Verbrennungsmodell implementiert, welches in der Lage ist, bei globalem Luftüberschuss des Gesamtprozesses zonal auch unterstöchiometrische Verbrennung und die Entstehung brennbarer Gaskomponenten abzubilden. Hierfür wurde das stöchiometrische Gasreaktionsmodell um einen kinetischen Ansatz erweitert. Aus den Ergebnissen der Prozesssimulation wurden in weiterer Folge die Eintrittsrandbedingungen für die numerische Strömungssimulation abgeleitet.

Für die numerische Strömungssimulation wurde ein komplexer Modellalgorithmus für die Beschreibung der heterogenen Verbrennungsschritte von Biomasse (Trocknung, Volatilisierung, Koksabbrand) entwickelt und in einem externen Solver implementiert. Dabei wurden die feste Brennstoffphase sowie deren Interaktion mit der Gasphase vollständig und dreidimensional ortsaufgelöst abgebildet. Für die Beschreibung von Strömung, Turbulenz, kinetischer Gasreaktionen und Wärmestrahlung wurden bestehende Modelle eines kommerziellen CFD-Solvers verwendet.

Die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit zeigen sehr deutlich die Potentiale moderner Simulationstechniken bei der Entwicklung und Optimierung innovativer Biomasse-Verbrennungskonzepte auf. Im konkreten Verfahren konnte gezeigt werden, dass aufgrund der langsamen Lignithermolyse keine vollständige Volatilisierung des Brennstoffes in der Primärzone erreicht werden kann und die Rostbelastung daher höher als in der ursprünglichen Anlagenauslegung ist. Die Gasanströmung in der Primärzone ist weiters durch suboptimal platzierte Luftdüsen sehr ungleichmäßig und führt zu heterogenem Abbrand der Ballenoberfläche, zu lokalen Temperaturspitzen und zur Ascheagglomeration. Schließlich konnten noch Strömungsschwachstellen im Bereich der sekundären Gasnachverbrennungszone nachgewiesen werden, die im Weiteren zu gesteigerten Schadstoffemissionen führen können. In Summe kann auf dem Wege der Simulation ein besseres Verständnis der physikalischen Vorgänge des untersuchten Prozesses und ein Einblick in messtechnisch kaum zugängliche Parameter erlangt werden.

Abstract

Despite numerous alternative technologies for thermal biomass utilisation, combustion by modern standards remains to be the most prominent route offering a considerable potential for the satisfaction of the growing global primary energy demand in the face of climate change and dwindling fossil resources. Development and optimisation of novel combustion technologies typically are highly demanding regarding time and cost due to present-day's high standards. Modern simulation tools like process simulation and computational fluid dynamics (CFD) own the capability to powerfully act as support and acceleration factors during this phase. To unfold their full potential physically well-founded models with high degree of detail have to be applied. Current work addresses the development of these simulation technologies during the evolution of an innovative combustion system for baled herbaceous biomass.

Initially, an introduction of the analysed combustion concept and some experimental results from a 2 MWth pilot plant are given. Subsequently, process simulation and combustion calculation for the considered process are discussed. A three-zoned combustion model has been implemented in this work having the ability to reproduce zonal under-stoichiometric combustion and combustible gases formation under global excess air conditions. For this purpose the stoichiometric gas reaction model has been extended with a reaction kinetic approach. Finally, the inlet boundary conditions for CFD calculations have been derived from the results of the process simulation works.

Concerning the CFD simulation a complex model algorithm capable of describing the heterogeneous biomass combustion steps (drying, volatilisation, and char burnout) has been developed and implemented in an external solver environment. The solid fuel phase as well as the interaction with the gaseous phase have been modelled rigorously with three-dimensional spatial discretisation. Flow, turbulence, kinetic gas reactions and radiative heat transfer have been accounted for applying existing models within a commercial CFD-solver.

Results of present work clearly indicate the high potential of modern simulation technologies for the development and optimisation of innovative biomass combustion concepts. Analysis of the current case shows that a complete volatilisation of the fuel can not be achieved within the primary combustion zone due to the very slow lignin thermolysis process. Subsequently, the fuel load of the afterburning grate is significantly higher than assumed in the initial plant layout. Furthermore, the non-ideal positioning of air nozzles in the primary combustion zone leads to a poor coverage of the burning bale surface, unbalanced bale burnout, thermal hot spots and local ash sintering. Additionally, several weak points in the flow inside the secondary combustion zone have been identified leading to reduced carbon burnout and increased pollutant emissions. Finally and ultimately, simulation allows for a better understanding of the physical behaviour of the analysed process and provides an insight to experimentally hardly accessible parameters.

Liste zugehöriger Veröffentlichungen

Miltner, M., Jordan, C., Harasek, M.; CFD simulation of straight and slightly swirling turbulent free jets using different RANS-turbulence models; Applied Thermal Engineering, 2015, in press.

Miltner, M., Harasek, M., Jordan, C.; On the Applicability of RANS-Turbulence Models in CFD Simulations for the Description of Turbulent Free Jets during Biomass Combustion; Chemical Engineering Transactions, 2014, 39, 913-918.

Miltner, M., Harasek, M., Friedl, A.; Application of CFD Methods to the Optimization of an Innovative Combustion Apparatus for Baled Biomass; in: Proceedings of the 1st International Workshop on CFD and Biomass Thermochemical Conversion, Leipzig, Deutschland, 2014.

Miltner, M., Harasek, M.; CFD-Simulation der Biomasseverbrennung unter Anwendung leistungsfähiger Modellansätze; Chemie Ingenieur Technik, 2014, 86(9), 1618-1619.

Miltner, M., Makaruk, A., Harasek, M., Friedl, A.; Computational fluid dynamic simulation of a solid biomass combustor: modelling approaches; Clean Technologies and Environmental Policy, 2008, 10(2), 165-174.

Miltner, M., Harasek, M.; Optimierung einer innovativen Trocknungsanlage für rieselfähige Holz- Hackgüter mittels numerischer Strömungssimulation; Chemie Ingenieur Technik, 2008, 80(9), 1318-1318.

Miltner, M., Miltner, A., Harasek, M., Friedl, A.; Process simulation and CFD calculations for the development of an innovative baled biomass-fired combustion chamber; Applied Thermal Engineering, 2007, 27(7), 1138-1143.

Miltner, M., Makaruk, A., Harasek, M., Friedl, A.; Application of Computational Fluid Dynamics (CFD) to Solid Biomass Combustion; in: Proceedings of the 15th European Biomass Conference & Exhibition, Berlin, Deutschland, 2007.

Miltner, M., Miltner, A., Makaruk, A., Harasek, M., Friedl, A.; CFD simulation of a solid biomass combustor: modelling approaches for the reduction of emissions and maximisation of the thermal efficiency; in: Proceedings of the 7th International Congress of Chemical Engineering and Process Engineering - CHISA, Prag, Tschechische Republik, 2006.

Miltner, M., Miltner, A., Harasek, M., Friedl, A.; Optimierung einer innovativen Verbrennungsanlage für ballenförmige Biomassen mittels Prozesssimulation und CFD; Chemie Ingenieur Technik, 2006, 78(9), 1168-1169.

Miltner, M., Makaruk, A., Harasek, M., Friedl, A.; CFD-modelling for the combustion of solid baled biomass; in: Proceedings of the 5th International Conference on CFD in the Process Industries CSIRO, Melbourne, Australien, 2006.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung und Motivation 1

2 Stand der Technik 5

3 Brennstoffcharakterisierung 12

3.1 Besonderheiten biogener Brennstoffe 12

3.1.1 Brennstoffanalyse 12

3.1.2 Emissionsverhalten 14

3.1.2.1 Kohlenmonoxid 14

3.1.2.2 Stickstoffoxide 15

3.1.2.3 Schwefel und Chlor 17

3.1.2.4 Staub 18

3.1.3 Ascheverhalten 20

3.2 Eingesetzte biogene Brennstoffe 21

4 Verbrennungskonzept, Ofengeometrie und experimentelle Untersuchungen 32

5 Verbrennungsrechnung und Globalbilanzierung 45

5.1 Verbrennung - Einzonenmodell 46

5.2 Verbrennung – Dreizonenmodell 52

5.3 Modellierung peripherer Anlagenteile 61

5.3.1 Wärmetauscher 61

5.3.2 Mischer 62

5.4 Modellimplementierung und Problemlösung 63

6 Numerische Strömungssimulation 70

6.1 Grundlagen der Numerischen Strömungssimulation (CFD) 72

6.2 Diskretisierung des Lösungsraumes und Gittergenerierung 74

6.2.1 Grundlagen der Gittergenerierung 75

6.2.2 Mehrgitter-Ansatz 79

6.2.3 Untersuchte Geometrie des Verbrennungsapparates und deren Diskretisierung 80

6.3 Bilanzgleichungen 84

6.3.1 Kontinuitätsgleichung 85

6.3.2 Speziesbilanzen 85

6.3.3 Impulsbilanz 86

6.3.4 Energiebilanz 87

6.4 Turbulenzmodellierung 88

6.5 Modellierung von Mehrphasenströmungen 92

6.6 Strahlungsmodellierung 94

6.7 Verbrennungsmodellierung 96

6.7.1 Beschreibung der homogenen Gasphasenreaktionen 99

6.7.2 Beschreibung der heterogenen Reaktionsschritte während der Verbrennung fester Biomasse 106

6.7.2.1 Trocknung des Feststoffes – Wasserverdampfung 113

6.7.2.2 Ausgasen der flüchtigen Bestandteile – Volatilisierung 118

Umwandlungskinetik der Volatilisierung *119*

Umwandlungsenthalpie der Volatilisierung *132*

Zusammensetzung des bei der Volatilisierung entstehenden Gases *133*

6.7.2.3 Ausbrand der residuellen Feststoffkomponenten – Koksabbrand 137

6.7.2.4 Modell zur Beschreibung der Stickstoffoxid-Bildung 148

6.7.2.5 Massenbilanz und Stoffübergang im externen Feststoff-Solver 152

6.7.2.6 Energiebilanz und Wärmeübergang im externen Feststoff-Solver 155

Effektive Wärmeleitfähigkeit im porösen Feststoff *157*

Effektiver Wärmeübergang zwischen porösem Feststoff und Fluid-Kernströmung *161*

Energiebilanz *163*

6.8 Fluiddynamische Modellierung des Feststoffs 164

6.9 Randbedingungen 168

6.10 Implementierung und Problemlösung 171

6.10.1 Numerische Methoden 171

6.10.2 Eingesetzte Software 174

6.10.3 Eingesetzte Hardware 180

6.10.4 Überwachung des Konvergenzverlaufs 180

7 Modellvalidierung für die numerische Strömungssimulation 184

7.1 Zusammenfassung der Ergebnisse der Freistrahlsimulation und Auswahl eines Turbulenzmodells für die Ofensimulation 185

7.2 Analyse des komplexen Gasreaktionsmechanismus am Testfall Rohrreaktor 187

7.3 Analyse des heterogenen Verbrennungsmodells an vereinfachter Testgeometrie 193

8 Ergebnisse der Globalbilanzierung 203

8.1 Standardbetriebszustand 204

8.2 Anfahr- und Hochfahrvorgang 208

8.3 Parametervariationen und Sensitivitätsanalyse 212

9 Ergebnisse der Numerischen Strömungssimulation 222

9.1 Simulation des Standardbetriebszustands 223

9.2 Optimierung von Betriebsbedingungen: Ausmaß der Luftstufung 246

9.3 Optimierung der Brennkammergeometrie: sekundäre Gasnachverbrennungszone 251

10 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen 255

11 Ausblick auf zukünftige Arbeiten 259

12 Formelverzeichnis 264

13 Literaturverzeichnis 273

14 Anhang 310

14.1 Stoffdaten und Materialeigenschaften 310

14.1.1 Stoffeigenschaften gasförmiger Komponenten 310

14.1.1.1 Allgemeine Stoffeigenschaften gasförmiger Komponenten 310

Dichte *310*

Spezifische Wärmekapazität *310*

Wärmeleitfähigkeit *312*

Dynamische Viskosität *313*

Laminarer Diffusionskoeffizient *315*

14.1.1.2 Binärer Diffusionskoeffizient von Sauerstoff in Luft für das Koksabbrandmodell 315

14.1.2 Stoffeigenschaften festphasiger Komponenten 317

14.1.2.1 Stoffeigenschaften von Stahl (für feste Wände) 317

14.1.2.2 Brennstoffanalysen 317

14.1.2.3 Physikalische Brennstoffeigenschaften 319

Primärbrennstoff Maisganzpflanze *319*

Rostbrennstoff Tiegelkoks *319*

14.1.2.4 Zusammensetzung der Pseudobrennstoffströme aus dem Dreizonenmodell der Globalbilanzierung 320

Immediatanalyse Primärzonen-Brennstoff *321*

Immediatanalyse Rostzonen-Brennstoff *321*

Elementaranalyse Primärzonen-Brennstoff *321*

Elementaranalyse Rostzonen-Brennstoff *321*

14.2 Theorie der Turbulenzmodellierung 322

14.2.1 Ansatz der Reynolds-Mittelung zur Turbulenzbeschreibung 322

14.2.2 Das Spalart-Allmaras-Modell (sa) 324

14.2.3 Die k-ε-Modellfamilie 325

14.2.3.1 Das Standard-k-ε-Modell (ske) 325

14.2.3.2 Das RNG-k-ε-Modell (rngke) 327

14.2.3.3 Das Realizable-k-ε-Modell (rke) 328

14.2.4 Die k-ω-Modellfamilie 329

14.2.4.1 Das Standard-k-ω-Modell (skw) 330

14.2.4.2 Das Shear-Stress-Transport-k-ω-Modell (sstkw) 331

14.2.5 Das Reynolds-Stress-Modell (rsm) 334

Modellierung der turbulenten Diffusion *335*

Modellierung der Druckspannung *335*

Modellierung der Produktion durch thermische Auftriebskräfte *336*

Modellierung der Dissipationsrate *336*

Modellierung der spezifischen turbulenten kinetischen Energie *337*

Modellierung der Wirbelviskosität *337*

14.2.6 Wandfunktionen 338

14.2.7 Turbulenter Transport von Masse und Wärme 340

14.3 Heterogene Reaktionsschritte im Rahmen der CFD-Modellierung 342

14.4 Validierung von Turbulenzmodellen am Strömungstestfall Freistrahl 346

14.4.1 Gerader Freistrahl 356

14.4.2 Schwach verdrallter Freistrahl mit Prallplatte 389

14.5 Validierung des Gasreaktionsmechanismus anhand eines Rohrreaktors 406

14.6 Validierung des Ballenmodells an vereinfachter Testgeometrie 408

14.7 Ergebnisse der Globalbilanzierung 411

14.8 Ergebnisse der CFD-Simulationen für den Verbrennungsapparat 413

1 Einleitung und Motivation

Das zwanzigste Jahrhundert war geprägt von der ungehemmten Nutzung fossiler Energieträger für die Bereitstellung von thermischer und elektrischer Energie. Die technisch vergleichsweise unkomplizierte Nutzung dieser anfänglich im Überfluss verfügbaren Primärenergieträger Kohle, Erdöl und Erdgas führte zu einer rasanten technologischen Weiterentwicklung, Industrialisierung und Automatisierung in den entwickelten Ländern dieser Welt. Letztlich führten diese Veränderungen auch zu einer gesellschaftlichen Weiterentwicklung und leiteten gegen Ende des Jahrhunderts einen Umdenkprozess ein. Der wachsende Energiebedarf aufstrebender Nationen (spätestens ab der Jahrtausendwende beispielsweise China, Indien und Brasilien) sowie die Notwendigkeit der günstigen Energiebereitstellung zur Förderung schlecht entwickelter Volkswirtschaften (speziell afrikanische und asiatische Nationen) zeigten die Endlichkeit fossiler Ressourcen auf. Gepaart mit der Erkenntnis des gravierenden Einflusses fossiler Kohlendioxidemissionen auf das globale Klima und ökologische Systeme (siehe hierzu beispielsweise Woodwell et al., 1998, Rosa et al., 2001 sowie Venema et al., 2007) entwickelte sich langsam ein gesellschaftliches Bewusstsein hinsichtlich einer nachhaltigen und ökologisch verträglichen Bereitstellung von Energie. Dieser Prozess dauert auch zum Zeitpunkt der Verfassung der vorliegenden Arbeit an; heute ist die verantwortungsvolle Energiebereitstellung nach oben skizzierten Kriterien als eine der wesentlichsten gesellschaftlichen Herausforderungen des einundzwanzigsten Jahrhunderts weitestgehend akzeptiert. Die Struktur des heutigen Energiesystems, die unvollständige Kostenwahrheit hinsichtlich vieler konventioneller oder atomarer Energieträger sowie technologische, logistische und systemische Herausforderungen bei der Nutzung alternativer Energieträger führen dazu, dass die Marktdurchdringung alternativer Energieträger, und hier speziell Biomasse, deutlich hinter ihrem Potential zurückbleiben. Dennoch ist klar festzuhalten, dass der globale Energiebedarf heute und in absehbarer Zukunft nicht alleine aus alternativen, nicht-fossilen Quellen gedeckt werden kann.

Der globale Primärenergiebedarf betrug im Jahr 2010 je nach Quelle zwischen 505 EJ (BP, 2015) und 550 EJ (EIA, 2015). Davon entfielen etwa 17 % auf die Produktion elektrischer Energie. Der globale Energiehunger führte im selben Jahr zur Emission von 30,6 Mrd. t Kohlendioxid (Lancet, 2011). Renommierte Prognosen gehen aktuell von einem jährlichen Wachstum des Primärenergiebedarfs bis 2040 in einer Größenordnung zwischen 1,4 % (BP, 2015) und 1,9 % (EIA, 2015) aus, also etwa 600 EJ für 2015, 665 EJ für 2020 und bis zu 865 EJ für 2040 (BP, 2015). Da sich der globale Primärenergiemix in diesem Zeitrahmen nur geringfügig verschieben wird (BP, 2015), sind auch für den Kohlendioxidausstoß ähnliche Steigerungsraten zu erwarten (Aboumahboub et al., 2012 sowie Akashi et al., 2011). Den Hauptanteil an dieser zukünftigen Entwicklung tragen wie zu erwarten die

heutigen Entwicklungs- und Schwellenländer bei; für Europa und die USA wird eine Bedarfsverringerung aufgrund von Effizienzsteigerungsmaßnahmen erwartet. Schätzungen zufolge werden heute rund 85 % des Primärenergiebedarfs mit fossilen Energieträgern abgedeckt. Die bereits angesprochenen Herausforderungen bei der Implementierung alternativer Energiequellen werden weiters dazu führen, dass dieser Wert in den kommenden Jahrzehnten sogar noch steigen wird (BP, 2015).

Nach Sektoren gegliedert entfallen etwa 33 % des Primärenergiebedarfs auf den Transport, 29 % auf die Industrie und 27 % auf privates Wohnen (Heizen und Kühlen). Letztgenannter Bereich wird zu einem großen Teil über Biomasse (40 % des Sektors) gedeckt, wobei der Löwenanteil hierbei durch traditionelle Feuerstellen in Entwicklungsländern beigesteuert wird (Nejat et al., 2015). Moderne Formen der thermischen Biomasseverwertung können in den Sektoren Wohnen (privat und kommerziell) sowie teilweise auch in der Industrie aufgrund technisch-logistischer Eignung durchaus nennenswerte zusätzliche Potentiale erschließen.

Eine Einschätzung des energetisch verwertbaren Potentials von Biomasse für die Produktion von Strom und Wärme ist aus mehreren Gründen schwierig. Einerseits divergieren das technisch und das wirtschaftlich erschließbare Potential oft relativ deutlich wobei letzteres von den üblicherweise sehr volatilen Preisen der Biomasse sowie von den Preisen der zu ersetzenden konventionellen Energieträgern abhängt. Andererseits ist zu beachten, dass die energetische Nutzung von Biomasse in Anbetracht begrenzten Flächenangebots nicht selten in Konkurrenz zur Produktion von Nahrungs- und Futtermitteln steht. Deshalb ist es von grundlegender Bedeutung, der Nutzung dezidiert zu Energiezwecken kultivierter Pflanzen die Verwendung biogener Abfall- und Reststoffe vorzuziehen. Die energetische Verwertung reiner Energiepflanzen ist ethisch nur dann vertretbar, wenn diese als Nebenfrucht oder aber auf für die Nahrungsmittelproduktion ungeeigneten Flächen kultiviert werden (McKendry, 2002a). Außerdem sind das technische und das wirtschaftlich erschließbare Potential zu unterscheiden, viele Publikationen bleiben in dieser Hinsicht relativ vage. In einer bereits älteren Arbeit von Bain (Bain et al., 1998) wird das Potential biogener Reststoffe (inklusive Abfall- und Restholz) für die Stromproduktion für einzelne Kontinente und auch global erfasst und schlussgefolgert, dass der Strombedarf des Jahres 1998 durch die Nutzung dieser Energieträger gedeckt werden könnte (etwa 67 EJ). In einer neueren Arbeit von Gaderer und Spliethoff wird für 2011 ein thermisches Potential von 24,8 EJ für biogene Reststoffe angegeben, ergänzt um weitere 37,4 EJ für kultivierte Energiepflanzen und 41,6 EJ für Waldrestholz (Gaderer et al., 2011). Damit wird deutlich, dass biogene Energieträger aktuell zwar nicht den gesamten, aber immerhin 20 bis 25 % des globalen Primärenergiebedarfs decken könnten.

Eine wichtige Fraktion biogener Energieträger, die nicht in Konkurrenz zu Nahrungs- und Futtermitteln (wie Energiepflanzen) oder zu wesentlichen Industriesparten (wie Holz) steht, sind agrarische Abfall- und Reststoffe, die bei der landwirtschaftlichen Produktion anfallen. Das wahrscheinlich größte Potential wird dabei Stroh aus der Produktion von Cerealien wie Weizen, Gerste, Roggen und Hafer zugeordnet, einer Ressourcengruppe, die nicht zuletzt für die Verbrennung sehr interessant ist. Ergüdenler et al. leiten in einer eher konservativ angelegten Studie eine jährlich verfügbare Menge von Stroh als Nebenprodukt in einer Größenordnung von 1.200 Mio. t weltweit her (Ergüdenler et al., 1994). Bei einem durchschnittlichen Heizwert entspricht diese Masse einem thermischen Energieinhalt von etwa 20 TJ pro

Jahr. Easterly et al. erfassen in einer Arbeit die US-amerikanische Situation und sprechen von einem thermischen Potential von über 3.900 TJ für agrarische Reststoffe ergänzt um weitere 16.900 TJ bei der Nutzung kultivierter Energiepflanzen (Easterly et al., 1996). Für Österreich können repräsentative Zahlen aus dem Jahr 1998 einer Arbeit von Stoifl et al. entnommen werden. Demnach fallen hier jährlich etwa 2,1 Mio. t Getreidestroh sowie 450.000 t nutzbares Maisstroh an. Weitere 350.000 t Stroh aus Raps und Sonnenblumen mit einem Wassergehalt zwischen 60 und 70 % kommen für die energetische Verwertung mittels Verbrennung nicht infrage (Stoifl et al., 2001). Diese Mengen sind im wesentlichen als stagnant einzustufen, da von der Statistik Austria für das Jahr 2014 eine jährliche Menge von 2,16 Mio. t Getreidestroh berichtet wird (Statistik Austria, 2015). Durch die Nutzung von Getreide- und Maisstroh steht damit in Österreich ein jährliches thermisches Energiepotential in einer Größenordnung von 45 GJ zur Verfügung. Dieses theoretische Gesamtpotential steht jedoch nicht uneingeschränkt für die energetische Nutzung zur Verfügung, da ein großer Teil anderwertig im landwirtschaftlichen Bereich eingesetzt wird (Einarbeitung in die Ackerkrume zum Bodenaufbau, Einstreu in der Nutztierhaltung). Schätzungen bei Kaltschmitt et al. gehen davon aus, dass aus diesen Gründen teilweise sogar nur ein Fünftel des theoretischen Potential als für die Energiegewinnung nutzbar anzusehen ist (Kaltschmitt et al., 2001).

Die energetische Nutzung von Biomasse kann eine Reihe von Vorteilen in ein Energiesystem einbringen. Durch den im Vergleich zu fossilen Energieträgern kürzerfristig geschlossenen Kohlenstoffkreislauf weisen die meisten biomassebasierten Energieumwandlungspfade einen deutlich geringeren Kohlendioxid-Fußabdruck auf. Das Ausmaß des CO_2-Einsparungspotentials hängt dabei von zahlreichen Faktoren wie Anbau, Kultivierung und Ernte der Biomasse, Art und Wirkungsgrad des Energieumwandlungssystems sowie logistischen Rahmenbedingungen ab (Schneider et al., 2003). Unbestritten ist auch der volkswirtschaftliche Nutzen der energetischen Biomasseverwertung (Easterly et al., 1996). Niedrigere Energiedichten der Biomasse verlangen kürzere Transportwege und führen aufgrund von Dezentralisierung zu einer Stärkung der lokalen Wertschöpfung. Durch den Betrieb von Energieumwandlungsanlagen werden lokale und sichere Arbeitsplätze geschaffen, bei der Anlagenausstattung kommen häufiger lokale Technologien und lokale Lieferanten zum Einsatz. Die für eine Volkswirtschaft kostspieligen Energieimporte können reduziert werden und freiwerdendes Kapital kann in Ausbau und Forschung investiert werden. Da fossile Primärenergieträger gehäuft aus Krisenregionen bezogen werden müssen, kann die Nutzung lokaler biogener Ressourcen auch zur Steigerung der Versorgungssicherheit und politischer Unabhängigkeit beitragen. Ein weiterer Aspekt, der seit einiger Zeit verstärkt diskutiert wird, ist die Rückführung essentieller Pflanzennährstoffe aus der Biomasse zur Erhaltung der Bodenfruchtbarkeit. Hier stehen speziell der global immer knapper werdende Phosphor sowie kohlenstoffreiche Aschefraktionen zur Ertragssteigerung von schwachen Böden im Fokus (Neubauer, 2011). Schlussendlich ermöglicht die energetische Verwertung von Biomasse eine nachhaltige Energieversorgung unter Schonung fossiler Rohstoffe und bietet oftmals eine bessere Planbarkeit und eine transparentere Preisentstehung.

Die thermische Nutzung von Biomasse zur Energiebereitstellung (Verbrennung, Vergasung, Pyrolyse, Torrefizierung, hydrothermale Verfahren) ist im Vergleich zur Nutzung fossiler Energieträger von einer Reihe spezieller Charakteristika geprägt, die im Rahmen technischer Implementierung Berücksichtigung finden müssen (Neubauer, 2011). Einerseits führt wie bereits erwähnt der üblicherweise niedrigere Heizwert dazu, dass Biomasseverwertungsanlagen kapazitätsmäßig deutlich kleiner und dezentral ausgeführt werden als fossil betriebene

Anlagen. Gepaart mit nachhaltiger Logistik können solche dezentrale Anlagen aber einen wertvollen Beitrag zur Klima- und Energieversorgungsproblematik liefern (Venema et al., 2007). Andererseits weisen die meisten Biomassen im Vergleich zu fossilen Brennstoffen für die thermische Nutzung ungünstigere physikalische Eigenschaften auf. Dazu zählen vor allem Wasser- und Aschegehalt, Emissionsverhalten sowie der niedrige Ascheschmelzpunkt (Werther et al., 2000). Energieumwandlungsprozesse werden aufgrund dessen bereits thermodynamisch bei niedrigeren Umwandlungswirkungsgraden betrieben (niedrigere Betriebstemperatur, höherer Luftüberschuss). Diese beiden Faktoren (höhere spezifische Energiegestehungskosten aufgrund kleinerer Anlagen sowie niedrigerer Umwandlungswirkungsgrad) führen dazu, dass biomassebasierte Energiebereitstellung leider relativ häufig mit wirtschaftlichen Herausforderungen verbunden ist. Eine Erhöhung der Wirtschaftlichkeit biomassegefeuerter Systeme ist vor allem durch die Nutzung kostengünstiger Brennstoffe wie Rest- und Abfallfraktionen möglich (Di Blasi et al., 2000). Zusätzlich führen die genannten Faktoren dazu, dass die Neuentwicklung und Optimierung biomassebetriebener Energieumwandlungsverfahren relativ aufwändig, langwierig und kostenintensiv ist.

Moderne ingenieurswissenschaftliche Werkzeuge wie die Prozesssimulation oder die numerische Strömungssimulation sind heute in der Lage, Entwicklungsprozesse leistungs- und kosteneffizient zu unterstützen und oftmals sogar zu führen um schlussendlich das vorhandene Innovationspotential zu realisieren. Zahlreiche wissenschaftliche Arbeiten und kommerzielle Simulations-Softwarelösungen sind in diesem Themenbereich verfügbar (beispielsweise Stopford, 2002; Xia et al., 2002; Paschedag, 2004; Ducoste, 2008; Heikkinen et al., 2008; Yin et al., 2008; Naser, 2009; Blocken et al., 2011; Aslam Bhutta et al., 2012; Chaney et al., 2012; Schulz et al., 2014; Athanasios et al., 2015). Um eine wirklich verlässliche und aussagekräftige Beschreibung und Simulation des Energieumwandlungsprozesses zu erreichen, ist die Anwendung von höher entwickelten Modellierungsansätzen und Lösungsalgorithmen erforderlich. Speziell die detaillierte Behandlung heterogener Verbrennungs- oder Pyrolysevorgänge (ein großer Teil der energetisch genutzten Biomasse liegt in festem Zustand vor) ist für viele kommerzielle Algorithmen nach wie vor problematisch. Für die Entwicklung und Optimierung von Energieumwandlungsprozessen sind aber gerade diese Vorgänge von besonderer Relevanz, da nach maximaler thermischer Ausnutzung des biogenen Brennstoffes unter Minimierung schädlicher Emissionen gestrebt werden muss.

Es ist das Hauptanliegen der vorliegenden Arbeit, einen Beitrag bei der Entwicklung und Implementierung solcher erweiterter Modellalgorithmen für die Beschreibung der heterogenen Verbrennungsvorgänge bei der thermischen Nutzung von Biomasse zu leisten. Anhand eines innovativen Verbrennungskonzeptes für ballenförmige biogene Brennstoffe (sowohl Energiepflanzen als auch agrarische Reststoffe) wird gezeigt, wie solche Modellansätze entwickelt und implementiert werden, wie effiziente Simulationen durchgeführt werden sowie deren Ergebnisse für eine gezielte Prozessoptimierung genutzt werden können. Es soll die Schlussfolgerung gezogen werden, dass moderne Prozess- und numerische Strömungssimulation effektive Werkzeuge bei der Entwicklung und Optimierung innovativer verfahrenstechnischer Prozesse sind und den Ingenieur in die Lage versetzen, Innovationen in kürzerer Zeit und zu geringeren Kosten auf den Markt zu bringen.

2 Stand der Technik

Im vorliegenden Kapitel soll kurz und überblicksartig der Stand der Technik für Energieumwandlungstechnologien zur thermischen Nutzung von Biomasse gegeben werden. Dabei wird auf die einzelnen Technologien nur kurz eingegangen und auf die weiterführende Literatur verwiesen.

Basierend auf der Herkunft kann pflanzliche Biomasse in holzartige, halmgutartige sowie aquatische Typen unterteilt werden. Diese Gruppen unterscheiden sich hinsichtlich ihrer für die energetische Nutzung relevanten Parameter (Feuchte, Zellulosegehalt, Ligningehalt, Heizwert, Aschegehalt und -zusammensetzung) sehr deutlich von einander (McKendry, 2002a). Entsprechend unterschiedlich sind auch die Verfahren der Nutzung des thermischen Energieinhalts biogener Rohstoffe. Einer einführenden Arbeit von Bain et al. folgend können Technologien der thermischen Energiewandlung zum Zwecke der Bereitstellung von Wärme, Strom oder einer Kombination beider (*BHKW*, *CHP*) im Wesentlichen wie folgt kategorisiert werden (Bain et al., 1998):

- Direkte Verbrennung: Oxidation unter Luftüberschuss, oft unter gestufter Zufuhr von Verbrennungsluft oder Brennstoff, Nutzung der fühlbaren Wärme im Heißgas
- Vergasung: thermolytische Zersetzung unter Sauerstoffmangel mit dem Fokus auf gasförmigen Produkten und deren weiterer Nutzung, Wärmeversorgung des endothermen Vergasungsvorganges durch autotherme oder allotherme Prozessführung (Warnecke, 2000)
- Pyrolyse: thermolytische Zersetzung unter Sauerstoffmangel mit dem Fokus auf längerkettigen und kondensierbaren Dämpfen, oft in Verbindung mit der Produktion flüssiger Energieträger (Demirbas, 2001a)
- Karbonisierung: thermolytische Zersetzung unter Sauerstoffmangel mit dem Fokus auf Koks (auch *Holzkohle*) und Teer (Demirbas, 2001b)
- Hydrothermale Verflüssigung: Umwandlung der Biomasse in flüssige, oxygenierte Kohlenwasserstoffe durch Anwendung hohen Drucks in wässriger Umgebung (McKendry, 2002b)

Neben den genannten thermischen Verfahren sind noch verschiedene biologische Verfahren der aeroben oder anaeroben Fermentation mit verschiedenen mikrobiellen Stämmen zu erwähnen (Demirbas, 2001a; McKendry, 2002b). Hierzu zählen beispielsweise die Ethanolfermentation oder die Biogasproduktion.

In einer hervorragenden Überblicksarbeit von Spliethoff aus dem Jahr 2010 wird gezeigt, dass für die thermische Biomassenutzung aktuell vorwiegend Verbrennung und Vergasung

von wirtschaftlicher Bedeutung sind (Spliethoff, 2010). Die wichtigsten Energieträger sind nach wie vor holzartige Biomassen, jedoch werden Energiepflanzen wie *Miscanthus sinensis*, Getreide-Ganzpflanzen sowie agrarische Reststoffe wie Weizenstroh für die technische Anwendung immer wichtiger. Neben der reinen Wärmeproduktion setzt sich auch bei biogenen Brennstoffen immer mehr auch die Stromproduktion in Kombinationskraftwerken durch. Bei Verbrennungsprozessen erfolgt die Verstromung klassischerweise über einen Dampfkreislauf (*Rankine*-Prozess) mit einer Dampfturbine oder einem Dampfmotor als Arbeitsmaschine. Neue Entwicklungen führen in Richtung der Nutzung von Niedertemperatur-Abwärme des Dampfkreislaufs mittels ORC-Prozess oder Stirling-Motor (Obernberger, 1998) sowie zur Steigerung des Umwandlungswirkungsgrads durch Anwendung extern befeuerter Gasturbinen (Spliethoff, 2010). Wird Vergasung zur Stromproduktion betrieben, so erfolgt die Nutzung des Producergases heute vorwiegend in Gasturbinen oder Gasmotoren als Arbeitsmaschinen mit zusätzlicher Wärmeauskopplung (BHKW) zur Nutzung in Nahwärmenetzen. Die effizientere Umsetzung in Brennstoffzellen sowie die Produktion gasförmiger und flüssiger Treibstoffe und Energieträger aus dem Producergas sind Thema aktueller Forschungsarbeiten (Koppatz et al., 2009; Spliethoff, 2010; Rauch et al., 2013).

Aufgrund der aufwändigen Brennstofflogistik wird heute von einer Obergrenze für ausschließlich biogen befeuerte Kraftwerke in einer Größenordnung von 50 bis 100 MW_{th} ausgegangen (Spliethoff, 2010). Hinsichtlich der Dampfparameter im Rankine-Kreislauf ergibt sich bei diesen Kapazitäten eine wirtschaftlich sinnvolle Überhitzertemperatur von maximal 540 °C mit entsprechend limitierten Wirkungsgraden von bis zu 33 % (van den Broek et al., 1996). Höhere thermodynamische Wirkungsgrade sind nur bei entsprechend größer dimensionierten Anlagen erzielbar. Eine ökonomische Untergrenze für Biomasse-BHKWs anzugeben ist schwierig und von der jeweiligen Situation und der Art des biogenen Brennstoffes abhängig. Es ist jedoch davon auszugehen, dass diese Untergrenze in einem Bereich von 2 bis 5 MW_{th} anzusetzen ist (Obernberger, 1998). Einzelanlagen können jedoch, insbesondere auch in Kombination mit Wärmespeichern, auch in einer Größenordnung von 1 MW_{th} und darunter als Kraft-Wärme-Kopplung noch wirtschaftlich betreibbar sein (Wesselak et al., 2009).

Für biogene Brennstoffe bilden heute und bereits seit vielen Jahren im Prinzip drei unterschiedliche Verbrennungstechnologien den Stand der Technik. Diese drei Technologien sind Unterschubfeuerung, Rostfeuerung sowie Wirbelschichtfeuerung (Obernberger, 1998; Neubarth et al., 2000; Kaltschmitt et al., 2001; Spliethoff, 2010). Diese Technologien sind vorwiegend auf holzartige Biomassen zugeschnitten und auch hinsichtlich der verbrennungstechnischen Herausforderungen des Brennstoffs Biomasse weitgehend optimiert. Für ballenförmige halmgutartige Brennstoffe hat sich zusätzlich noch die Zigarrenfeuerung durchgesetzt, eine Technologie, die maßgeblich in Dänemark entwickelt und dort auch intensiv eingesetzt wird (Skott et al., 2000; Stoifl et al., 2001). Schließlich zählt auch die gemeinsame Verbrennung von Biomasse und Kohle in bestehenden oder adaptierten Kohlekraftwerken zum erweiterten Stand der Technik. All diese Technologien sollen im Folgenden kurz vorgestellt werden.

Unterschubfeuerungssysteme werden etwa bis zu einer Größenordnung von 20 MW_{th} und für Brennstoffe mit niedrigem Ascheanteil angewandt (Obernberger, 1998; Spliethoff, 2010). Der Brennstoff mit relativ geringer Partikelgröße wird über automatische Förderschnecken direkt aus dem Silo in eine tellerförmige Retorte in der Brennkammer transpor-

tiert, auf der sich in der Folge ein Brennstoffbett ausbildet (siehe Abbildung 2-1). Hier wird die Biomasse getrocknet und Volatilisierung findet statt. Die entstehenden Pyrolysegase steigen gemeinsam mit der dem Bett von unten zudosierten Primärluft durch das darüberliegende Glutbett auf, zünden und brennen unter Zugabe von Sekundärluft vollständig aus. An der Oberfläche des Brennstoffbetts findet schließlich die Oxidation der reaktiven Kokskomponenten statt (Spliethoff, 2010). Zu hohe Ascheanteile im Brennstoff würden hier aufgrund von Ascheschmelze und Versinterung zu einer geschlossenen inerten Schicht und weiters zu instabilem Verbrennungsbetrieb führen. Aus diesem Grund sind Unterschubfeuerungssysteme vorwiegend für Holz (Hackschnitzel, Sägemehl) geeignet und für Stroh und Ganzpflanzen nicht zu empfehlen (Obernberger, 1998). Zu den Vorteilen dieser Verbrennungstechnologie zählen der einfache und kostengünstige Aufbau sowie die hervorragende Automatisierbarkeit (Spliethoff, 2010).

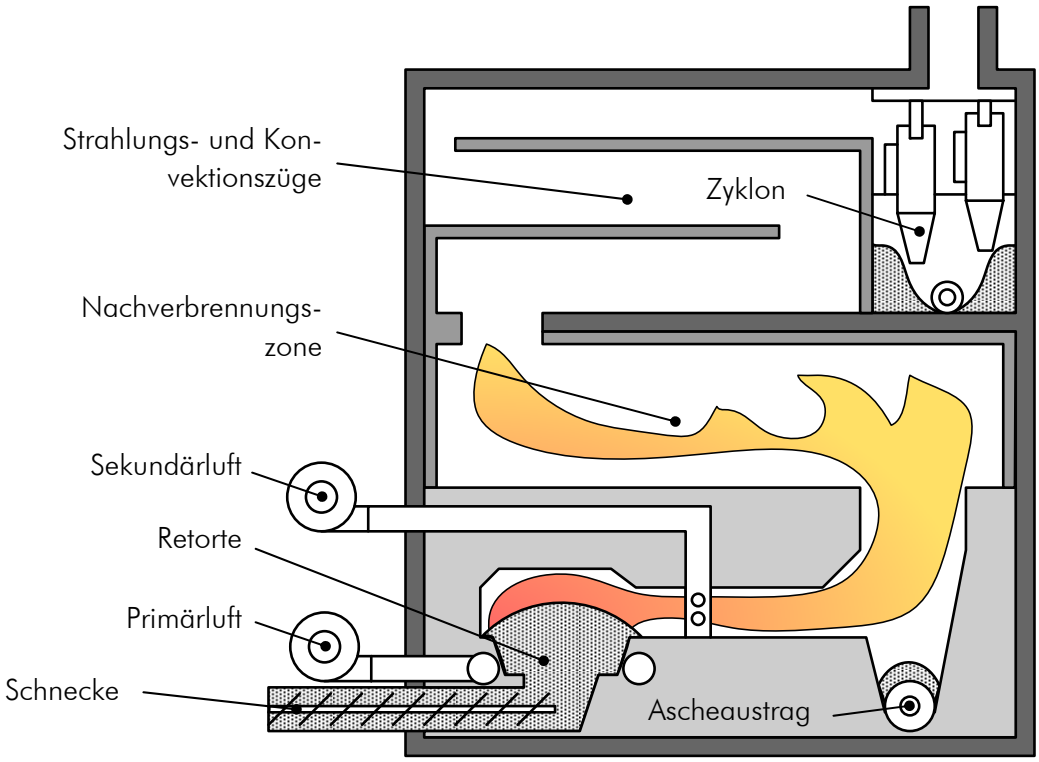


Abbildung 2-1: Unterschubfeuerung für die Biomasseverbrennung, adaptiert nach Spliethoff (Spliethoff, 2010)

Rostfeuerungssysteme sind für Verbrennungsanlagen mit einer Leistung über 1 MW_{th} die dominierende Technologie (Spliethoff, 2010). Hierbei wird der stückige Brennstoff über eine Schnecke oder einen hydraulischen Stößel als Schüttgut auf eine Rostbahn aufgebracht und von unten mit Primärluft durchströmt (siehe Abbildung 2-2). Die einzelnen Rostelemente werden üblicherweise gegeneinander bewegt um Transport und Schüren des Brennstoffes zu verbessern. Hierbei sind beispielsweise Vorschubrost, Rückschubrost, Wanderrost oder Stufenwanderrost zu unterscheiden (Görner, 1991). Die Zugabe von Primärluft kann entlang des Rosts sektional getrennt gesteuert werden, sodass die verschiedenen Phasen der Feststoffverbrennung selbst für unterschiedlichste Brennstoffe in idealer Weise mit Sauerstoff versorgt werden können. Am Ende des Rostes verbleibt inerte Asche mit nur sehr geringen Mengen Restkohlenstoff. Die bei der Pyrolyse entstehenden brennbaren Gase werden in der sekundären Gasnachverbrennungszone vollständig oxidiert. Rostfeuerungen sind für eine breite

Auswahl an Biomassen geeignet und sind auch die Technologie der Wahl bei schwierigen Brennstoffen mit hohem Wasser- oder Aschenanteil. So können neben Holz auch Rinde, Getreideganzpflanzen, Stroh, *Miscanthus* oder Energiegräser effizient verbrannt werden (Spliethoff, 2010). Die Einstellung und Aufrechterhaltung einer idealen Betthöhe entlang des Rostes sind für einen guten Ausbrand, niedrige Emissionen an Schadgasen und Staub sowie für die Vermeidung von Ascheverklumpungen von entscheidender Bedeutung (Obernberger, 1998).

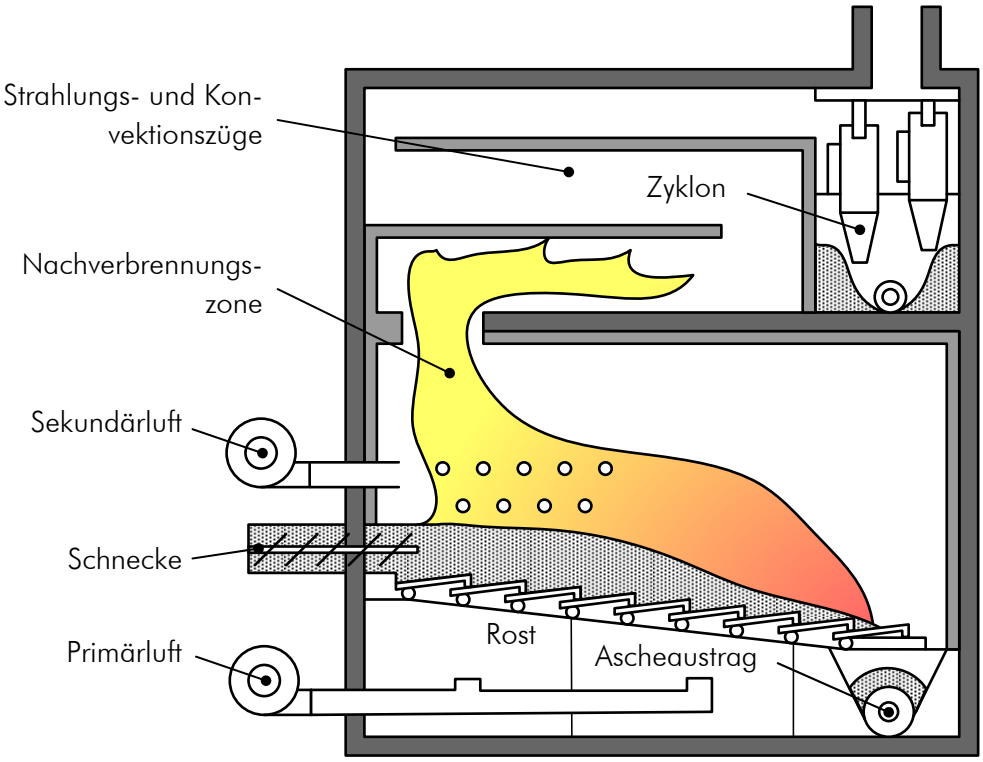


Abbildung 2-2: Rostfeuerung für die Biomasseverbrennung, adaptiert nach Spliethoff (Spliethoff, 2010) und Neubarth et al. (Neubarth et al., 2000)

Üblicherweise bei größeren Leistungsbereichen werden Wirbelschicht-Verbrennungssysteme wirtschaftlich interessant. Ab etwa 10 MW_{th} können stationäre Wirbelschicht und ab etwa 30 MW_{th} zirkulierende Wirbelschicht effizient und ökonomisch für die Biomasseverbrennung eingesetzt werden (Obernberger, 1998; Neubarth et al., 2000; Spliethoff, 2010). Bei diesen Systemen wird üblicherweise Silikatsand als Bettmaterial fluidisiert und der stückige Biomassebrennstoff direkt in dieses Bett eingebracht (siehe Abbildung 2-3). Dabei ist der Biomasseanteil im Wirbelbett mit maximal 5 % sehr gering. Die Primärluft wird über eine Verteilerplatte in das Wirbelbett eingebracht, wobei durch eine äußerst niedrige Luftverhältniszahl von etwa 0,4 die Betttemperatur in einem Bereich zwischen 800 und 900 °C gehalten wird (Spliethoff, 2010). Im Bereich über der Wirbelschicht, dem *freeboard*, wird zur Minimierung der NO_x-Emissionen die Sekundärluft in mehreren Stufen bis zum vollständigen Ausbrand der Pyrolysegase eingedüst. Gesteigerte Fluidisierungsgeschwindigkeiten führen zu einem Mitreißen der Bettpartikel mit dem Rauchgasstrom, welche in einem Heißgaszyklon abgetrennt und erneut der Brennkammer zugegeben werden können (=zirkulierende Wirbelschicht). Der bei Wirbelschichtsystemen ohnehin hohe Wärme- und Stoffaustausch wird durch die höhere Turbulenz noch einmal deutlich gesteigert, woraus eine sehr homogene Betttemperatur sowie eine stabile Verbrennung resultieren (Obernberger,

1998). Wirbelschichtsysteme sind für eine Vielzahl biogener Brennstoffe einsetzbar und die Anlagen zeigen eine sehr hohe Brennstoff-Flexibilität. Stroh und andere halmgutartige Brennstoffe sind mit diesen Systemen aber noch nicht ausreichend beherrschbar (Spliethoff, 2010). Aufgrund der intensiven Durchmischung können sehr guter Ausbrand und hohe Wirkungsgrade erzielt werden. Die ausgeprägte Luftstufung führt zu signifikanter Reduktion thermischer und brennstoffbasierter NO_x-Emissionen (van den Broek et al., 1996). Die üblicherweise eingeschränkte Teillastfähigkeit ist ein wesentlicher Nachteil dieser Technologie, kann aber auf konstruktivem Weg abgemildert werden.

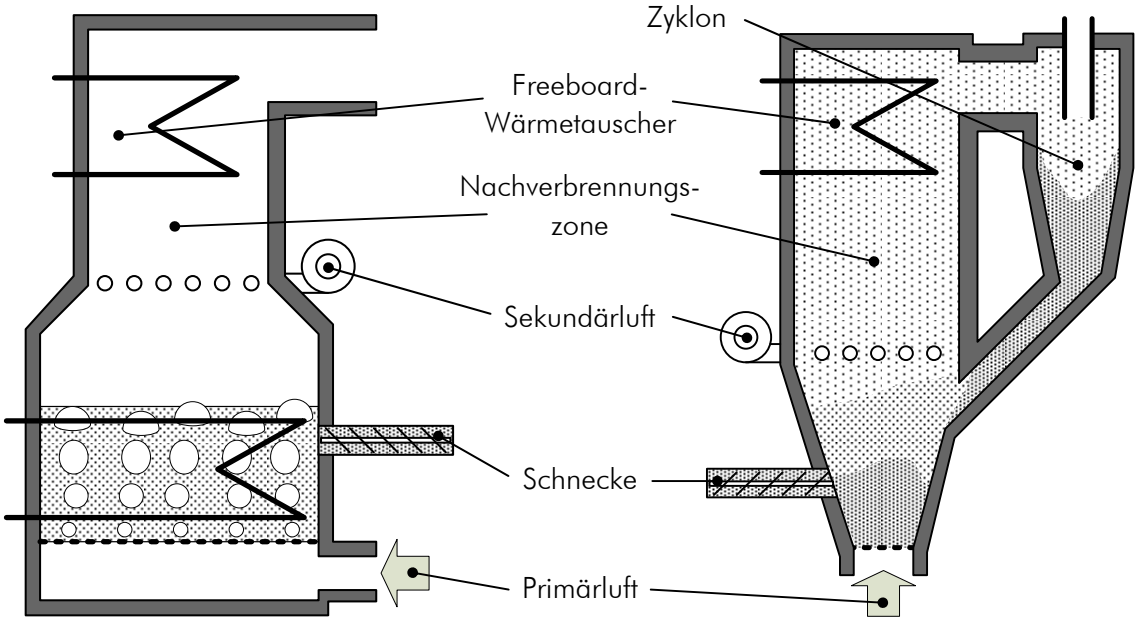


Abbildung 2-3: Stationäre Wirbelschicht (links) und zirkulierende Wirbelschicht (rechts) für die Biomasseverbrennung, adaptiert nach Spliethoff (Spliethoff, 2010) sowie Warnecke (Warnecke, 2000) und Neubarth et al. (Neubarth et al., 2000)

Eine spezielle Feuerungstechnik für ballenförmige, halmgutartige Brennstoffe ist die ursprünglich in Dänemark entwickelte Zigarrenfeuerung (Neubarth et al., 2000; Kaltschmitt et al., 2001; Spliethoff, 2010). Diese ist vom Prinzip her eine Rostfeuerung mit einem Einschubsystem, welches dem Feuerungssystem den Brennstoff in Ganzballenform, ohne vorherige Zerkleinerung, zuführt (siehe Abbildung 2-4). Sobald der Ballen mit der heißen Ofenatmosphäre in Berührung kommt, zündet der Brennstoff an der Ballenoberfläche und es fallen unverbrannte und nicht ausgegaste Ballenteile auf die Rostfläche. Dort kommt es wie bei herkömmlichen Rostfeuerungen zur Ausgasung und vollständigen Verbrennung des biogenen Brennstoffs. Am Ende des Vorschubrosts wird die verbleibende Asche über ein ausreichend dimensioniertes Ascheaustragssystem aus der Brennkammer ausgeschleust. Zur Vermeidung von Rückbrand in den Ballenzufuhrkanal ist dieser mit Wasserkühlung und einem Schleusensystem, seltener auch mit einer Inertgasbeaufschlagung mit kaltem Rauchgas, ausgestattet (Kaltschmitt et al., 2001). Der Vorteil dieser Feuerungstechnik ist der geringe Aufwand bei der Brennstoff-Vorbehandlung nach Anlieferung, die kontinuierliche und gut steuerbare Brennstoffzufuhr sowie die relativ einfache Anlagenkonstruktion. Zu den Hauptnachteilen zählen die geringe Brennstoff-Flexibilität, die Beschränkung auf eine einzige Ballengröße sowie die Tendenz zur Ausbildung ausgeprägter CO-Emissionsspitzen während des wiederkehrenden Herabfallens von Ballenteilen auf den Rost. Typische Anlagengrößen mit dieser

Feuerungstechnik liegen im Bereich zwischen 2 und 3 MW_{th}, in Dänemark sind Anlagen für Weizenstroh bis über 20 MW_{th} in Betrieb (Skott et al., 2000; Spliethoff, 2010).

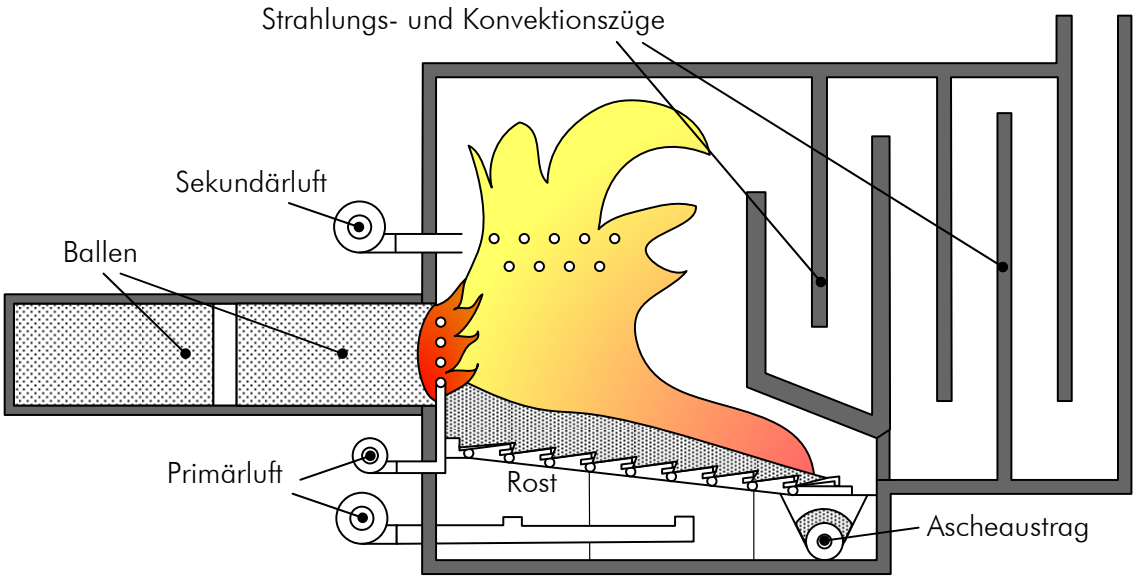


Abbildung 2-4: Zigarrenfeuerung für Ganzballen, adaptiert nach Spliethoff (Spliethoff, 2010) sowie Nielsen (Nielsen et al., 1998) und Neubarth et al. (Neubarth et al., 2000)

Eine sehr vielversprechende Methode der thermischen Biomassenutzung ist schließlich die gemeinsame Verbrennung mit Kohle in bestehenden Kohlekraftwerken (*co-firing*). Solche Kraftwerke sind heute beinahe ausschließlich als Kohlestaubfeuerung ausgeführt und tragen nach wie vor einen beträchtlichen Anteil zur Gesamtenergieversorgung bei. Durch geringe bis moderate Umbaumaßnahmen kann ein Teil des fossilen Brennstoffs durch aufgemahlene Biomasse ersetzt und der bestehende Kessel bis zu seiner Nennleistung ausgefahren werden (Bain et al., 1998; Demirbas, 2003). In der Literatur sind erfolgreiche Biomasse-Kohle-Kofeuerungsanlagen in einem Leistungsbereich von 200 bis 250 MW_{th} dokumentiert (Bain et al., 1998). Geringe Beimischgrade von 5 % können durch gemeinsame Aufmahlung der Biomasse (meist Holz) und der Kohle ohne nennenswerte Adaptierungen realisiert werden. Mittlere Beimischgrade bis etwa 20 % sind durch getrennte Brennstoffaufbereitung und Zufuhr bei sonst gleichem Kessel zu erreichen. Noch biomasse-lastigere Mischungen sind ebenfalls, jedoch nur mit signifikanten Änderungen am Kessel oder komplett neuem Feuerungssystem (Wirbelschicht) möglich (Bain et al., 1998). Die wesentlichen Vorteile von Biomasse-Kohle-Kofeuerungen sind hohe Leistungsbereiche bei vergleichsweise geringem Adaptierungsaufwand, reduzierte Treibhausgasemissionen, geringere SO_x- und NO_x-Emissionen aufgrund geringerer S- und N-Gehalte in der Biomasse sowie schließlich in vielen Fällen bei reduzierten Brennstoffkosten auch eine verbesserte Wirtschaftlichkeit der Anlagen (Bain et al., 1998; Demirbas, 2003).

Für halmgutartige biogene Brennstoffe stellt sich wegen der geringen Energiedichte und der Textur das Problem des wirtschaftlichen Transports vom Feld/Zwischenlager zum Kraftwerk/Wochenlager. Heute sind zwei Anliefervarianten Stand der Technik, die auch die Art des zu verwendenden technischen Verbrennungssystems beeinflussen (Spliethoff, 2010):

- Transport in Ballenform vom Feld zum Kraftwerk:

    - Ganzballenverbrennung ohne vorherige Zerkleinerung mittels Zigarrenfeuerung
    - Zerkleinerung der Ballen und Verbrennung in Unterschubfeuerungen, Rostfeuerungen und in begrenztem Ausmaß auch in Wirbelschichtsystemen
- Häckseln der Biomasse auf dem Feld, Pelletieren und Transport zum Kraftwerk in Pelletsform
    - Verbrennung in Unterschubfeuerungen, Rostfeuerungen und Wirbelschichtsystemen

Es ist zu beachten, dass bei der energetischen Nutzung von Stroh oder anderen halmgutartigen Biomassen völlig andere logistische Rahmenbedingungen anzutreffen sind als bei holzartigen Biomassen oder gar fossilen Brennstoffen. Einen guten Überblick über Ernte, Transport, Lagerung und Einbringung in die jeweiligen Feuerungssysteme gibt die Arbeit von Stoifl und Simon (Stoifl et al., 2001). Diese Arbeit zeigt auch die einzigartige Stellung Dänemarks was die Nutzung von Stroh zur Produktion von Strom und Wärme betrifft. Da die Arbeit ein Projekt der österreichischen Verbund AG dokumentiert, wird hier auch die österreichische Situation skizziert und eine technische Machbarkeitsanalyse hinsichtlich der energetischen Nutzung von Stroh am Kraftwerksstandort Dürnrohr durchgeführt. Dabei werden vier verschiedene Feuerungstechnologien und Kombinationsvarianten analysiert und die wirtschaftlich und technisch sinnvollste Alternative erarbeitet. Eine vergleichbare Arbeit, die aber vor allem die Situation in Dänemark beleuchtet, ist jene von Nielsen et al. (Nielsen et al., 1998); neben den wirtschaftlichen und technischen Aspekten werden hier auch die politischen und volkswirtschaftlichen Komponenten beleuchtet.

3 Brennstoffcharakterisierung

Bei der Entwicklung von Verbrennungsanlagen ist die genaue Kenntnis über die Eigenschaften der einzusetzenden Brennstoffe von grundlegender Bedeutung. Aus diesem Grund werden im vorliegenden Kapitel zunächst allgemein die Besonderheiten biogener Brennstoffe im Vergleich mit fossilen Brennstoffen erläutert. Anschließend werden jene biogenen Materialien genau charakterisiert, welche als Brennstoff für die, in der vorliegenden Arbeit dargestellte, neu entwickelte Verbrennungstechnologie untersucht wurden.

3.1 Besonderheiten biogener Brennstoffe

Die Eigenschaften von Biomasse weichen in vielen wesentlichen Punkten sehr von denen fossiler Brennstoffe ab. Dies ist zum größten Teil durch die unterschiedliche Zusammensetzung begründet, wie in den nachfolgenden Abschnitten näher erläutert wird. In den einzelnen Abschnitten wird weiters exemplarisch darauf eingegangen, welche Auswirkungen diese Unterschiede auf die Bauweise und Betriebsführung von Biomassekraftwerken im Vergleich zu fossil befeuerten Kraftwerken haben. Eine grundlegende Untersuchung der Zusammensetzungen verschiedener Biomassen und des resultierenden Einflusses auf technische Verbrennungsanlagen wird beispielsweise bei Lewandowski et al. oder Obernberger et al. (Lewandowski et al., 1997; Obernberger et al., 2006) gegeben.

3.1.1 Brennstoffanalyse

Ein Vergleich der Brennstoffanalysen von Biomassen (Tabelle 3-1) mit jenen fossiler Brennstoffe (Tabelle 3-2) zeigt mehrere Unterschiede auf. Der Kohlenstoffanteil der fossilen Brennstoffe beispielsweise ist fast doppelt so groß wie der von Biomassebrennstoffen. Das ist auch der Hauptfaktor dafür, dass die Brennwerte von Kohle und Erdöl sehr viel höher sind als die von Holz oder Stroh.

Der Wasserstoff- und der Stickstoffanteil liegen für beide Brennstoffarten in einem sehr ähnlichen Bereich, wohingegen der Schwefelanteil bei fossilen Brennstoffarten sehr viel höher liegt als bei Biomassen. Der Chloranteil dagegen verhält sich genau umgekehrt, ist also bei nachwachsenden Rohstoffen viel höher als bei Kohle und Erdöl. Damit ergibt sich, dass das molare Verhältnis von Schwefel zu Chlor für Biomassen im Bereich von 0,03 bis maximal 2

liegt, wohingegen fossile Brennstoffe Verhältnisse von über 7 und bis zu $7 \cdot 10^5$ aufweisen. Das hat vor allem für das Korrosionsverhalten der Brennstoffe eine große Bedeutung, wobei bei den betrachteten biogenen Brennstoffen speziell die, von Miltner et al. untersuchte (Miltner et al., 2006), chlorinduzierte Hochtemperaturkorrosion an den Ofenwänden und Wärmetauscherflächen wirksam wird.

Tabelle 3-1: Brennstoffanalyse verschiedener Biomassen (Hofbauer, 1992)

Parameter	Einheit	Holzhack-schnitzel	Mais-Ganzpflanze	Weizenstroh
C	wt%, TS	50,63	44,62	44,33
H	wt%, TS	6,02	5,37	5,32
O	wt%, TS	41,52	39,57	42,93
N	wt%, TS	0,35	0,41	0,57
S	wt%, TS	0,03	0,05	0,14
Cl	wt%, TS	0,02	1,48	0,50
Aschegehalt	wt%, TS	1,43	8,50	6,21
Oberer Heizwert	kJ/kg, TS	20.263	17.690	17.821
Asche Sinterbeginn	°C	1.210	920	848

Tabelle 3-2: Brennstoffanalyse verschiedener fossiler Brennstoffe (Böhmer et al., 2003; OMV, 2003; Svoboda et al., 2004; Parikh et al., 2005; Pronobis, 2005; Baehr et al., 2006; Buhre et al., 2006)

Parameter	Einheit	Kohle	Erdöl
C	wt%, TS	54 – 90	84,9 – 89,8
H	wt%, TS	3,02 – 5,39	6,5 – 13,1
O	wt%, TS	2,35 – 25,30	0,2 – 2,9
N	wt%, TS	0,55 – 1,67	
S	wt%, TS	0,46 – 5,07	1 – 2
Cl	wt%, TS	0,01 – 0,07	$<3*10^{-6}$
Aschegehalt	wt%, TS	4,50 – 24,06	<0,06
Oberer Heizwert	kJ/kg, TS	20.200 – 36.400	38.900 – 45.400
Asche Sinterbeginn	°C	1.135 - >1600	keine Angabe

Der Ascheanteil verhält sich für alle Brennstoffe sehr unterschiedlich. Generell kann aber gesagt werden, dass holzartige Brennstoffe meist einen Ascheanteil kleiner 2-3 wt%, TS aufweisen, wogegen grasartige Brennstoffe meist einen höheren Anteil von 6-10 wt%, TS haben. Erdöl hat nur einen vernachlässigbaren Gehalt an Asche, Kohle im Gegensatz dazu einen hohen Wert von bis zu 25 wt%, TS. Daraus ergibt sich vor allem bei der Verbrennung von Gräsern und Kohle ein beträchtlicher Ascheanfall, der im Fall der Gräser im günstigsten Fall als Dünger auf den Agrarflächen ausgebracht werden kann. Ansonsten muss die Asche als Abfall deponiert werden.

Der Aschesinterpunkt von Biomassebrennstoffen liegt generell niedriger als der von Kohle. Dadurch ergeben sich bei der Verbrennung von Biomasse Einschränkungen gegenüber der Kohleverbrennung, wie in Kapitel 3.1.3 näher erläutert wird. Einen guten Überblick über die Zusammensetzung verschiedener Biomassen und deren Aschen sowie die Zusammenhänge

dieser Faktoren mit dem Verbrennungsbetrieb von Biomassefeuerungsanlagen geben beispielsweise Jenkins et al. (Jenkins et al., 1998), Hansen et al. (Hansen et al., 1999) und Spliethoff (Spliethoff, 2010).

3.1.2 Emissionsverhalten

Im Zuge eines Verbrennungsvorganges kommt es unweigerlich zur Emission von gasförmigen Substanzen. Bei der Verbrennung von Biomasse handelt es sich dabei hauptsächlich um Kohlendioxid, Wasserdampf, Stickstoffoxide, Schwefeldioxide und Chlorwasserstoff. Darüber hinaus kommt es auch zur Emission von Staub. Die nachfolgende Beschreibung aller Emissionen der Biomasseverbrennung umfasst auch Unterschiede, die zu fossilen Feuerungen bestehen.

3.1.2.1 Kohlenmonoxid

Bei der Verbrennung werden in jedem Fall die beiden Hauptverbrennungsprodukte Kohlendioxid (CO_2) und Wasser (H_2O) freigesetzt. Kommt es zu einer unvollständigen Verbrennung, dann wird auch ein mehr oder weniger großer Anteil an Kohlenmonoxid (CO) freigesetzt. Das geschieht beispielsweise dann, wenn zu wenig Sauerstoff im Verbrennungsraum vorhanden ist, um das gesamte CO zu CO_2 umzusetzen. Das heißt, dass die Luftverhältniszahl λ für den Gesamtverbrennungsprozess kleiner als eins ist. Dieser Betriebszustand ist bei Verbrennungsanlagen allerdings nicht vorgesehen und sollte daher im Normalfall nur bei Betriebsstörungen auftreten. Es kann jedoch auch dann zur Emission von Kohlenmonoxid kommen, wenn global genügend Sauerstoff im System vorhanden ist. Dafür kann es mehrere Gründe geben, die im Folgenden beschrieben werden.

Kommt es in der Ofenatmosphäre zu unzureichender Durchmischung von brennbaren Gasen und Oxidationsmittel, so können Zonen mit Sauerstoffüberschuss und Zonen mit Sauerstoffmangel entstehen. Daher kann auch bei einer ausreichenden Gesamtmenge an Sauerstoff im Gesamtsystem eine beträchtliche Menge an Kohlenmonoxid produziert und emittiert werden. Um diesen Zustand zu vermeiden, muss sichergestellt werden, dass die Reaktionsgase ausreichend durchmischt sind. Das kann dadurch erreicht werden, dass im Brennraum durch Einbauten oder intelligente Strömungsführung ein ausreichendes Maß an Turbulenz erzeugt wird.

Die Reaktionsgeschwindigkeit von CO zu CO_2 ist stark temperaturabhängig (Leuckel et al., 1979; Costa et al., 2003), wobei hohe Temperaturen die Reaktionsgeschwindigkeit signifikant erhöhen. Daher wird für vollständigen CO-Ausbrand bei niedrigeren Temperaturen eine lange Verweilzeit im Brennraum benötigt, bei hohen Temperaturen kann die Verweilzeit entsprechend kürzer sein. Auch hier gilt wieder, dass selbst bei einer hohen mittleren Gastemperatur und ausreichender mittlerer Verweilzeit nicht prinzipiell gewährleistet ist, dass wenig Kohlenmonoxid entsteht. Denn sowohl Ungleichverteilungen im Temperaturfeld (mit heißen und kalten Ofenzonen) als auch im Strömungsfeld (etwa mit Kurzschlussströmungen) können dazu führen, dass unzulässig hohe Kohlenmonoxid Emissionen entstehen. Diese enge Verknüpfung von Strömungs- und Temperaturfeld mit den auftretenden gasförmigen Emissionen macht numerische Strömungssimulation so interessant für Verbrennungsprozesse, speziell für Biomassefeuerungen.

Biomasseverbrennungen müssen im Vergleich zu fossilen Feuerungen mit relativ niedrigen mittleren Temperaturen in der Brennkammer betrieben werden (vergleiche Kapitel 3.1.3). Daher müssen die turbulente Durchmischung und/oder die Verweilzeit im Verbrennungsraum hoch gehalten werden, um die gesetzlich vorgeschriebenen Kohlenmonoxid-Grenzwerte einhalten zu können. Diese Forderung steht zum Teil in Konkurrenz mit den wirtschaftlichen Gesichtspunkten eines möglichst kleinen und damit kostengünstigeren Verbrennungsapparates. Nur die richtige Kombination von Temperatur, Verweilzeit und Turbulenz führt zu akzeptablem Emissionsverhalten der Verbrennungsanlage.

3.1.2.2 Stickstoffoxide

Bei der Verbrennung können verschiedene Stickstoffoxide entstehen, die unter dem Oberbegriff NO_x zusammengefasst werden. Dabei handelt es sich hauptsächlich um NO und zu einem geringeren Anteil um NO_2 sowie N_2O (Marutzky et al., 1999). Als intermediäre Komponenten treten unter einer Vielzahl anderer vor allem auch NH_3 und HCN auf (Hill et al., 2000). Bei der Stickstoffoxidbildung werden generell die folgenden Bildungsmechanismen unterschieden (Marutzky et al., 1999; Hill et al., 2000; Warnatz et al., 2001; Joos, 2006):

- Thermische NO_x-Bildung (Zeldovich-Mechanismus): hohe Temperaturen unter nahezu stöchiometrischen Bedingungen bzw. geringem Luftüberschuss
- Prompte NO_x-Bildung (Fenimore-Mechanismus): Komplexer Bildungsweg über kohlenwasserstoffhaltige Radikale in heißen, sauerstoffarmen Verbrennungszonen
- Über N_2O gebildetes NO_x: magere Verbrennungsbedingungen und erhöhte Drücke, üblicherweise insignifikant
- Konversion von brennstoffgebundenem Stickstoff

Da die Verbrennungstemperaturen bei Biomassefeuerungen üblicherweise unterhalb von 1300°C liegen, stammt das gebildete NO_x fast gänzlich aus dem Brennstoffstickstoff, da bei diesen Temperaturen und den üblichen Verbrennungsbedingungen sowohl thermisches als auch promptes NO_x vernachlässigt werden können (Nussbaumer, 1997a; Jenkins et al., 1998; Marutzky et al., 1999; Winter et al., 1999; Kaltschmitt et al., 2001; Salzmann et al., 2001; Warnatz et al., 2001; Joos, 2006; Löffler et al., 2008).

Die Bildung von Brennstoff-NO_x ist von mehreren Parametern abhängig. Der Wassergehalt im Brennstoff beeinflusst die Bildung indirekt dahingehend, dass bei niedrigeren Wassergehalten höhere Heißgastemperaturen und niedrigere CO Konzentrationen erzielt werden können, was letztendlich zu höheren NO_x–Konzentrationen führt (z.B. Staiger et al., 2005). Das Verhältnis von O/N im Brennstoff hat ebenfalls einen Einfluss auf die gebildete Menge an NO_x. Je niedriger das Verhältnis von O/N ist, desto höher ist der Anteil an N_2O im Gas (Hämäläinen et al., 1995). Da bei fossilen Brennstoffen das Verhältnis wesentlich niedriger ist als bei Biomassen, ist dort auch die gebildete Menge an N_2O höher als bei biogenen Brennstoffen. Darüber hinaus entsteht bei der Verbrennung von Biomasse eine wesentlich größere Menge an H-Radikalen, die bereits gebildetes N_2O zerstören (Winter et al., 1999).

Der Anteil an Brennstoffstickstoff, der von der festen Phase in die Gasphase übergeht, hängt von der Entgasungstemperatur, der Aufenthaltszeit des Brennstoffs in der Entgasungszone und dem Sauerstoffgehalt im Brennstoff ab. Dabei steigt die Entgasung mit steigendem Gehalt an Sauerstoff im Brennstoff und steigender Aufenthaltszeit des Brennstoffs in der Entgasungszone (Glarborg et al., 2003) sowie steigender Entgasungstemperatur (Hämäläinen

et al., 1995; Glarborg et al., 2003). Bei Biomassen entgast mit steigender Temperatur tendenziell mehr Stickstoff als bei Kohlen. Die gebildeten gasförmigen N-Spezies (hauptsächlich NH_3, HCN und deren Radikale, in dieser Arbeit auch als NO_x-Precursor-Spezies bezeichnet) werden teilweise mit Sauerstoff zu NO oxidiert (Warnatz et al., 2001). Je höher die Konzentration an N-Spezies im Gas ist, desto höher ist allerdings die Wahrscheinlichkeit, dass bereits gebildetes NO durch diese N-Spezies zu N_2 reduziert wird. Daher führen sowohl hohe Entgasungsraten als auch ein hoher Stickstoffgehalt im Brennstoff zu niedrigeren Gesamt-Umsetzungsgraden des Brennstoffstickstoffs zu NO_x (Keller, 1994b; Pedersen et al., 1996; Jenkins et al., 1998; Winter et al., 1999; Salzmann et al., 2001; Glarborg et al., 2003). Auf diese Thematik wird im Rahmen der Modellierung noch genauer eingegangen.

Aus der obigen Aussage, dass mit steigender Konzentration an N-Spezies im Gas die Reduktionsrate von NO zu N_2 steigt, lässt sich schlussfolgern, dass es günstiger ist, der Entgasungszone weniger Verbrennungsluft zuzuführen. Dadurch wird einerseits die Konzentration der N-Spezies hoch gehalten und andererseits steht weniger Sauerstoff zu Verfügung, der mit den N-Spezies zu NO_x reagieren kann. Im Vergleich mit einer Verbrennung mit viel Verbrennungsluft steht also ein hohes Angebot an N-Spezies einer geringen Anzahl an NO-Molekülen gegenüber. Die Wahrscheinlichkeit einer Reduktion von NO zu N_2 steigt daher (Pedersen et al., 1996; Jenkins et al., 1998). Allerdings hat diese Vorgehensweise den Nachteil, dass für die Verbrennung von Kohlenstoff zu CO_2 ebenfalls nur ein geringes Angebot an Sauerstoff zur Verfügung steht und daher die CO-Emissionen steigen (so genannte CO-NO_x-Schere). Um dieser Problematik zu entgehen, wird in der modernen Feuerungstechnik die Methode der Luftstufung angewendet (Marutzky et al., 1999; Warnatz et al., 2001; Joos, 2006).

Bei der Luftstufung handelt es sich um ein Verbrennungsprinzip, bei dem in der Zone der Brennstoffausgasung und Feststoffverbrennung (Primärzone) mit einer unterstöchiometrischen Menge an Sauerstoff, also $\lambda_{primär}<1$, oxidiert wird. Um einen möglichst vollständigen Ausbrand des Kohlenstoffs zu gewährleisten wird anschließend in einer sekundären Verbrennungszone mit $\lambda_{sekundär}>1$ das entstandene Verbrennungsgas nachverbrannt. Das Prinzip der Luftstufung in biomassegefeuerten Anlagen war in den letzten Jahren Gegenstand vieler Forschungsarbeiten (z.B. Keller, 1994a; Keller, 1994b; Nussbaumer, 1997a; Nussbaumer, 1997b; Purvis et al., 2000; Zuberbühler, 2002; Staiger et al., 2005), die im Wesentlichen zu den nachfolgend angeführten Ergebnissen führten.

Es wurde experimentell bestätigt, dass die Bildung von Brennstoff-NO_x von der Luftverhältniszahl in der primären Verbrennungszone abhängt (Keller, 1994a; Keller, 1994b; Staiger et al., 2005). Dabei findet sich ein Minimum der Emissionen bei $\lambda_{primär}=0{,}7\text{-}0{,}8$ (Keller, 1994b). Darüber hinaus wurde gezeigt, dass die NO_x-Emissionen auch mit sinkender Luftverhältniszahl der Gesamtanlage abnehmen, wobei diese Abnahme in einem weiten Bereich linear mit λ_{gesamt} erfolgt (Keller, 1994b; Purvis et al., 2000).

Im Gegensatz dazu haben in den genannten Arbeiten weder der Wassergehalt im Brennstoff noch die Anwesenheit von H_2, H_2O, CO oder CO_2 im Verbrennungsgas einen bedeutenden Einfluss auf die Bildung von NO_x gezeigt. Die Anwesenheit von CH_4 behindert allerdings die Reduktion von NO durch Konkurrenz, da es mit H- und OH-Radikalen bevorzugt reagiert, welche auch an den Reduktionsreaktionen von NO beteiligt sind. Nur unter Anwe-

senheit von Asche als Katalysator wirkt auch CH_4 als Reduktionsmittel für NO (Keller, 1994b).

Weiters wird in den Arbeiten gezeigt, dass höhere Drücke die Reduktion von NO begünstigen. Die Temperatur in der Reduktionszone weist hingegen ein Optimum bei etwa 1160 °C auf, da sich unterhalb dieser Temperatur die NO-Reduktion verlangsamt und oberhalb dieser Temperatur in verstärktem Ausmaß N_2O gebildet wird. Damit die Reduktionsreaktionen vollständig ablaufen können, ist eine Verweilzeit in der primären Reduktionszone von mindestens 0,5 Sekunden erforderlich (Keller, 1994b). Weitere Untersuchungen haben ergeben, dass die NO_x-Reduktion erhöht werden kann, wenn die Sekundärluft in mehreren Ebenen mit unterschiedlichen Volumenströmen zugeführt wird. Der Grund dafür ist, dass über einen längeren Zeitraum Reduktionsbedingungen aufrecht erhalten bleiben. Der Einfluss dieser Prozessführung auf die CO-Emissionen ist dagegen sehr gering (Staiger et al., 2005).

Die Arbeiten von Keller haben auch gezeigt, dass die Anwendung der Luftstufung nicht zu einer beliebigen Reduktion der NO_x-Emissionen führen kann. Der Grund dafür ist, dass unterhalb einer bestimmten Konzentration an N-Spezies im Verbrennungsgas die gesamte Menge an Stickstoff zu NO oxidiert wird (Keller, 1994b). Ein weiteres Ergebnis dieser Analysen ist, dass die optimalen Luftstufungsbedingungen nicht vom Stickstoffgehalt im Brennstoff abhängen (Keller, 1994b).

Eine weitere Primärmaßnahme zur Reduktion der NO_x-Emissionen ist die Brennstoffstufung (Kicherer et al., 1994; Nussbaumer, 1997a; Nussbaumer, 1997b; Salzmann et al., 2001; Xu et al., 2001; Zuberbühler, 2002), auch Reburning genannt. Dabei wird in der Primärzone mit Luftüberschuss verbrannt, wodurch viel NOx gebildet wird. Anschließend wird in einer Sekundärzone Zweitbrennstoff eingebracht und mit $\lambda<1$ verbrannt. Durch diesen Zweitbrennstoff werden CH- und N-Verbindungen in das Verbrennungsgas eingebracht, die das in der Primärzone gebildete NO_x zu N_2 reduzieren. Daher ist es auch von Vorteil, wenn der zusätzlich eingebrachte Brennstoff einen hohen Gehalt an Brennstoffstickstoff hat, da damit eine große Menge an N-Spezies für die Reduktion zur Verfügung gestellt wird. Darüber hinaus muss der Zusatzbrennstoff eine möglichst große spezifische Oberfläche haben, was bei festen Brennstoffen durch feines Aufmahlen realisiert werden kann.

Die Arbeiten der genannten Autoren belegen, dass die NO_x-Emissionen der meisten Biomasseverbrennungsanlagen auch allein mittels Primärmaßnahmen innerhalb der gesetzlich vorgeschriebenen Grenzwerte gehalten werden können. Bei fossilen Feuerungen hingegen kommt zum Brennstoff-NO_x aufgrund der hohen Verbrennungstemperaturen (>1300 °C) eine beträchtliche Menge an thermischem und promptem NO_x hinzu (Jenkins et al., 1998). Daher werden in diesen Anlagen meist zusätzlich zu Primärmaßnahmen wie Luftstufung und Low-NO_x-Burner auch Sekundärmaßnahmen vorgesehen. Dazu zählen beispielsweise Anlagen zur selektiven katalytischen Reduktion der Stickstoffoxide (Lionta et al., 1996; Marutzky et al., 1999; Sweeney et al., 2001; Qi et al., 2003a; Qi et al., 2003b; Joos, 2006), um die Grenzwerte gesichert zu unterschreiten.

3.1.2.3 Schwefel und Chlor

Bei der Verbrennung von Biomasse werden laut Kaufmann (Kaufmann, 1994) etwa 50-60 % des im Brennstoff enthaltenen Schwefels als Schwefeldioxid freigesetzt. Dabei nimmt die Frei-

setzungsrate mit steigendem Schwefelgehalt im Brennstoff leicht ab, wodurch die SO_2-Emissionen mit steigendem Schwefelgehalt unterproportional ansteigen. Der Rest des Schwefelgehaltes im Rohbrennstoff wird in der Asche eingebunden (Pedersen et al., 1996). Das Ausmaß der Einbindung von Schwefel in die Verbrennungsasche wird hierbei auch von der Zusammensetzung der Asche hinsichtlich Na, Ca und K beeinflusst (Pedersen et al., 1996).

Die experimentellen Untersuchungen von Kaufmann (Kaufmann, 1994) haben auch gezeigt, dass die Freisetzung von Chlorwasserstoff bei der Verbrennung von Biomasse bei sonst gleichen Betriebsparametern linear mit dem Chlorgehalt im Brennstoff zusammenhängt. Weiters haben die Untersuchungen ergeben, dass die HCl-Konzentration mit steigendem Wassergehalt im Rauchgas überproportional ansteigt. Insgesamt werden aber nur 10-20 % des Brennstoff-Chlors zu HCl umgesetzt (Bjorkman et al., 1997). Der weitaus größere Anteil entgast als Kaliumchlorid oder Natriumchlorid. Diese beiden Chlorspezies liefern dann einen entscheidenden Beitrag zur chlorinduzierten Hochtemperaturkorrosion (Michelsen et al., 1998; Jensen et al., 2000; Wei et al., 2005; Miltner et al., 2006). Das in der Entgasungsphase freigesetzte HCl reagiert in der Gasphase mit Sauerstoff zu Cl_2 und H_2O. Diese Reaktion ist reversibel und kann dadurch auch in der Gegenrichtung ablaufen, wobei mit steigender Temperatur das Gleichgewicht auf der Seite von Cl_2 liegt (Kaufmann, 1994). Die Auswirkungen chlorinduzierter Korrosion auf Brennkammerwände und Wärmeaustauscherflächen ist in der Literatur umfangreich dokumentiert (Bjorkman et al., 1997; Michelsen et al., 1998; Hansen et al., 2000; Nielsen et al., 2000; Frandsen et al., 2002).

Bei der Verbrennung von Kohle wird aufgrund des wesentlich höheren Schwefelgehaltes auch beträchtlich mehr SO_2 freigesetzt. Bei Wirbelschichtfeuerungen werden beispielsweise abhängig von der Betttemperatur 800-1100 ppm SO_2 freigesetzt (Khan et al., 1996), wohingegen bei der Verbrennung von Biomasse nur um die 100 ppm SO_2 entstehen (Kaufmann, 1994). Aus diesem Grund ist es bei Kohlefeuerungen meistens erforderlich, dass Sekundärmaßnahmen wie die Einbringung von Kalk zur Bindung des Schwefeldioxids oder Nasswäscher installiert werden, um die Emissionen innerhalb der gesetzlich vorgeschriebenen Grenzen zu halten.

In Kohlekraftwerken wird Chlor hauptsächlich in der Form von HCl, KCl und NaCl freigesetzt, wobei HCl meist den größten Anteil stellt (Furimsky et al., 2003). Sollen die HCl-Emissionen bei der Kohleverbrennung aus dem Rauchgas entfernt werden, etwa um Korrosion zu verhindern, so kann dies wie bei den Schwefeldioxid-Emissionen durch die Einbringung von Kalk in die Brennkammer oder in den Rauchgasstrang (Liu et al., 2000), beziehungsweise durch die Anordnung eines geeigneten Nasswäschers erreicht werden.

3.1.2.4 Staub

Bei der Verbrennung von Biomasse kommt es neben der Emission gasförmiger Komponenten auch zur Emission von Staub. Der Großteil des anfallenden Staubes liegt dabei in einem Größenbereich von 10 μm, der in feine Partikel (<1 μm) und grobe Partikel (1-20 μm) unterteilt werden kann (Nussbaumer, 2003; Oser et al., 2003; Pagels et al., 2003; Oser et al., 2004

Der Staub im Rauchgas hat zwei Quellen: einerseits können lastabhängig grobe Partikel aus der Verbrennungszone mitgerissen werden, wobei üblicherweise umso mehr Partikel

mitgerissen werden, je höher die Last und damit auch die Volumenströme sind (Pagels et al., 2003). Andererseits können Staubteilchen aus Gasbestandteilen gebildet werden. Dabei kommt es zuerst zur Keimbildung durch Abkühlung der Rauchgase beispielsweise im Kessel oder an kühleren Stellen der Brennkammerwände. Im Anschluss daran kondensieren bei weiterer Abkühlung an diesen Keimen Gasbestandteile aus, wodurch feine Partikel gebildet werden (Jenkins et al., 1998). Kommt es darüber hinaus zu chemischen Reaktionen und Koagulation, dann entstehen aus den feinen Partikeln grobe Partikel (Pagels et al., 2003). Bei der Entstehung von feinen Partikeln aus der Strohverbrennung wird davon ausgegangen, dass bei Abkühlung unter 800 °C Kaliumsulfat-Keime entstehen, auf denen im Anschluss Kaliumchlorid kondensiert (Jimenez et al., 2005; Zbogar et al., 2006).

Die Menge an gebildetem Staub bei der Biomasseverbrennung steht in direktem Zusammenhang mit der Menge und Art der entgasten Alkali- und Erdalkalisubstanzen (Pedersen et al., 1996; Jenkins et al., 1998; Dare et al., 2001; Jimenez et al., 2005), im Wesentlichen K- und Ca-Komponenten. Dabei kann die Menge an entgasten Alkalisubstanzen über den Luftüberschuss im Brennstoffbett beeinflusst werden (Nussbaumer, 2003; Oser et al., 2004). Der Grund dafür ist, dass die Alkalisubstanzen im Brennstoff als Salze vorliegen, die erst bei sehr hohen Temperaturen entgasen. Ist jedoch viel Sauerstoff in der Umgebung des Brennstoffbetts vorhanden, so werden aus den Salzen Oxide gebildet, die bereits bei üblichen Verbrennungstemperaturen entweichen. Zur Verringerung der Staubmenge sollte in der Brennstoffzone daher mit möglichst wenig Sauerstoff verbrannt werden. Wird die Biomasseverbrennung nach dem Prinzip der Luftstufung betrieben, so kann diese Bedingung erfüllt werden. Der Zusammenhang zwischen der Entstehung und der Ablagerung von Staub und dem Gehalt anorganischer Komponenten im Brennstoff wurde beispielsweise bei Jensen et al. (Jensen et al., 1997) für weizenstrohgefeuerte Verbrennungsanlagen größeren Maßstabs untersucht.

Eine weitere Möglichkeit zur Verringerung der Staubmenge ist es, die Menge an vorhandenen Alkalien im Brennstoff zu verringern. Dazu kann beispielsweise der Erntezeitpunkt von Getreide optimiert werden, da etwa der Kaliumgehalt in der Pflanze umso niedriger ist, je später die Pflanze geerntet wird (Schneider et al., 2005). Darüber hinaus wird die Menge an Kalium auch durch Auswaschen der Biomasse verringert (Jenkins et al., 1996; Christensen et al., 1998; Jenkins et al., 1998; Dayton et al., 1999; Jensen et al., 2001; Bakker et al., 2002). Auch die Zugabe verschiedenster Additive zum biogenen Brennstoff stellt eine mögliche Abhilfe dar (z.B. Kalk, Bentonit, Sand, Dicalciumphosphat), welche die genannten Asche- und Staubbildungsmechanismen auf positive Weise beeinflussen und Ablagerungen minimieren kann (Tobiasen et al., 2007).

Die Untersuchung der Zusammensetzung der Staubpartikel aus Biomasseverbrennungen hat gezeigt, dass die feinen Partikel hauptsächlich aus K, Cl und S bestehen und mit steigender Partikelgroße der Chlorgehalt immer weiter abnimmt (Christensen et al., 1998; Pagels et al., 2003). Mit steigender Verbrennungstemperatur steigt auch der Anteil an Phosphor im Staub (Jimenez et al., 2005). Neben diesen Hauptkomponenten finden sich auch noch in geringeren Mengen Na, Ca, Mg, Si, Al und Fe (Bridgwater et al., 1995; Nussbaumer, 2003) im Staub aus Biomasseverbrennungsanlagen.

Nach Christensen et al. (Christensen et al., 1998) weist der Staub aus Kohleverbrennungsanlagen eine Häufung in der Partikelgrößenverteilung im Bereich von 0,1 μm und im Bereich von 2-50 μm auf. Hier entsteht der Staub durch Keimbildung von Eisen- und Mag-

nesiumoxiden, an denen im Anschluss SiO_2 kondensiert. Die Hauptbestandteile des Staubes sind Oxide und Sulfate der Elemente Si, Al, Fe, Mg und Ca. Im Vergleich zu Biomasse ist der Feinanteil bei Staub aus der Kohleverbrennung inhomogener in der Zusammensetzung und hat einen geringeren Anteil an feinen Partikeln. (Christensen et al., 1998).

3.1.3 Ascheverhalten

In Kapitel 3.1.2.4 wurde bereits auf staubförmige Emissionen von Verbrennungsanlagen, welche auch als Flugasche bezeichnet werden, näher eingegangen. Darüber hinaus bleibt auch noch die Bodenasche, ein fester Rückstand des Brennstoffes nach der Verbrennung, zurück (Kaltschmitt et al., 2001). Beide Aschefraktionen sind bei vollständiger Verbrennung frei von unverbranntem Kohlenstoff. Bei unvollständigem Ausbrand durch nicht optimale Verbrennungsführung kann die Bodenasche allerdings auch beträchtliche Mengen an unverbranntem Kohlenstoff beinhalten. Bei ungünstigen Strömungsbedingungen können auch unverbrannte Brennstoffbestandteile aus der Verbrennungszone in nachfolgende Anlagenteile mitgerissen werden, wo sie als Bestandteil der Flugasche abgelagert werden. Unverbrannte Brennstoffbestandteile wirken sich aufgrund ihres Restheizwertes immer negativ auf den thermischen Wirkungsgrad der Verbrennungsanlage aus. Weiters kann durch zu hohe Kohlenstoffgehalte die weitere Nutzung der Aschefraktion behindert (z.B. Ausbringung als Dünger oder Nutzung als Rohstoffquelle), bzw. die Entsorgung als Reststoff erschwert werden (Marutzky et al., 1999; Kaltschmitt et al., 2001).

In Kapitel 3.1.1 wurde gezeigt, dass die Aschesintertemperatur von üblichen Biomassen zwischen 800 °C und 1300 °C liegt. Bei fossilen Brennstoffen, sofern sie überhaupt nennenswerte Ascheanteile aufweisen, liegt die Aschesintertemperatur dagegen bei 1100 °C bis über 1600 °C. Die tatsächliche Größenordnung der Aschesintertemperaturen hängt wesentlich von der Zusammensetzung der jeweiligen Asche ab, hier speziell von den Anteilen der Oxide von Alkalien und Erdalkalien (Jenkins et al., 1998). Bei Überschreiten der Aschesintertemperatur beginnen die Aschepartikel zu agglomerieren und sich auf Oberflächen abzulagern. Durch dieses Verschlacken wird meist die Funktionsfähigkeit des Verbrennungsapparates eingeschränkt; Heizflächen und Ofenwände werden belegt, das Aschenaustragssystem und die Feststoffverbrennungszone werden stark beeinträchtigt (Jenkins et al., 1998; Pronobis, 2005; Joos, 2006). Daher müssen bei der Verbrennung von Biomasse die Temperaturen in der Brennkammer so geführt werden, dass in der Umgebung der Feststoffverbrennungszone möglichst 800-850 °C nicht überschritten werden (Wesselak et al., 2009). Feuerungen für fossile Brennstoffe können hingegen meist relativ problemlos mit Verbrennungstemperaturen bis zu 1500 °C betrieben werden.

Um bei Biomasseanlagen die Temperaturen auf das erforderliche Niveau abzusenken, muss gegenüber fossilen Feuerungen zusätzlicher Aufwand betrieben werden. Eine Methode hierzu ist der Betrieb mit erhöhtem Luftüberschuss, da die Wärmekapazität des überschüssigen Luftvolumens kühlend auf die Ofenatmosphäre wirkt. Dadurch sinkt allerdings die Leistung im Dampfkessel und der thermische Wirkungsgrad der Verbrennungsanlage wird reduziert (Marutzky et al., 1999). Aus diesem Grund wird bei modernen Biomassefeuerungsanlagen die Methode der Rauchgasrezirkulation angewendet. Dazu wird abgekühltes Rauchgas zwischen Dampfkessel und Kamin entnommen und in die Verbrennungszone zurückgeführt. Aufgrund der Zusammensetzung des Rauchgases hat dieses eine wesentlich höhere spezifi-

sche Wärmekapazität als die Frischluft und ermöglicht eine bessere Regulierung der Brennkammertemperaturen. Weiters wird auch die Leistung im Wärmetauscher und damit der thermische Wirkungsgrad kaum reduziert. Der Wassergehalt des Rauchgases bewirkt schließlich noch eine Erhöhung der Reaktionsgeschwindigkeit der Oxidation von Kohlenmonoxid und unverbrannten Kohlenwasserstoffen. Damit macht sich der Mehraufwand eines zusätzlichen Gebläses und zusätzlicher Rohrleitungen mehr als bezahlt.

Abschließend soll noch erwähnt werden, dass durch die Lagerung des Brennstoffes an der freien Atmosphäre speziell über längere Zeiträume signifikante Veränderungen im Brennstoff herbeigeführt werden können. Speziell durch das Auswaschen anorganischer Komponenten durch die natürliche Witterung (Regen) können interessante Effekte erzielt werden. In der Literatur (Raveendran et al., 1995; Di Blasi et al., 1999b; Di Blasi et al., 2000) wird davon berichtet, dass das Auswaschen, das sogenannte *leaching*, von Elementen wie K, Na, Ca in Kombination mit Si, Cl und S einerseits zu einer Reduktion des inerten Brennstoffanteiles um bis zu 50 % und andererseits zu einer Verbesserung des thermischen Verhaltens der verbleibenden Asche (Erhöhung des Ascheschmelzpunktes) führen kann. Die Reduktion des inerten Anteils im Brennstoff führt dann automatisch zu einer entsprechenden Erhöhung des Heizwertes (Di Blasi et al., 1999b). Andererseits ist bekannt, dass einige der genannten Elemente bei der Verbrennung katalytisch wirksam sind, sodass sich bei gelaugtem Stroh die Verbrennungscharakteristik (Zündzeitpunkt, Ausgasungsverhalten) verschlechtert. Hinzu kommt, dass bei zu langer Lagerung des Brennstoffes bei zu großer Feuchtigkeit der mikrobielle Abbau der organischen Substanz (Rotte) überhand nimmt und die damit verbundene Reduktion des Heizwertes zum Problem wird. DiBlasi et al. (Di Blasi et al., 1999b; Di Blasi et al., 2000) streichen aber in ihren Arbeiten heraus, dass bei kontrollierter Auswaschung die positiven Effekte bei weitem überwiegen und dass die Veränderung der relevanten Verbrennungscharakteristika minimal ist. Die signifikanteste verbrennungstechnische Veränderung ist aufgrund der deutlichen Reduktion der Oxidationsgeschwindigkeit der reaktiven Kokskomponente gegeben (siehe Kapitel 6.7.2.3), auf die im Zuge der Auslegung der Ausbrandzone Rücksicht genommen werden muss.

3.2 Eingesetzte biogene Brennstoffe

Das Verbrennungskonzept und die darauf aufbauende konstruktive Auslegung des Verbrennungsapparates zielen grundsätzlich auf eine möglichst breite Basis an einsetzbaren biogenen Brennstoffen ab. Als Voraussetzung für die energetische Verwertung im vorgestellten Verbrennungsapparat gilt jedoch die technisch machbare sowie wirtschaftlich sinnvolle Verfügbarkeit des jeweiligen biogenen Brennstoffes in Ballenform (siehe hierzu auch Nielsen et al., 1998). Für die Auslegung des in der vorliegenden Arbeit präsentierten Verbrennungsapparates wurden die Abmessungen des verwertbaren Brennstoffballens wie folgt festgelegt: Länge 180 cm, Breite 120 cm, Höhe 70 cm (Norm-Ganzballen). Aus diesen Abmessungen ergeben sich ein Ballenvolumen von 1,512 m^3 und eine verbrennungstechnisch relevante Ballenstirnfläche von 0,84 m^2.

Als Referenzbiomasse wurde zu Beginn der Projektierung Mais als Ganzpflanze gewählt. Daraus ergibt sich ein relativ inhomogener Brennstoff, bestehend aus Kolben, Stängeln mit

und ohne Wurzeln sowie Blättern in wechselnder Verteilung. Im Rahmen des Gesamtprojektes wurde die Pflanzung verschiedener Maissorten auf verschiedenen Bodentypen untersucht, um eine, für die Produktion von Biomasse zur thermischen Nutzung als Brennstoff, gut geeignete Kombination zu finden (Hartmann et al., 2000 sowie Schneider et al., 2005). Diese Biomasse in Ballenform wurde für die vorliegende Arbeit sowohl bei der Simulation als auch im praktischen Betrieb der Verbrennungsanlage als Standardbrennstoff verwendet. Darüber hinaus wurden erste experimentelle Untersuchungen mit ungarischem Energiegras durchgeführt, welches ebenfalls ballenförmig, allerdings mit wesentlich kleineren Abmessungen (halbe Länge in alle Raumrichtungen) zur Verfügung stand. In den neueren experimentellen und theoretischen Arbeiten wurde schließlich Weizenstroh in obig genanntem Ballenformat untersucht. Als weitere Brennstoffe sollen zukünftig etwa auch Gerstenstroh, Roggenstroh, Reisstroh, Sonnenblumen, Zuckerrübenblätter, Grasschnitt oder diverse Energiegräser wie Miscanthus untersucht werden. Weiters sind auch Beimischungen von nicht ballenförmigen Biomassen wie Hülsen, Schalen, Zweigen sowie agrarischen oder agroindustriellen Rest- und Abfallstoffen denkbar.

Während der Durchführung der Verbrennungsversuche am Standort Simmering sowie während der Anlageninbetriebnahme in Dürnkrut konnte die Maßhaltigkeit der zur Verfügung gestellten Maisganzpflanzen-Ballen mit ±5 cm abgeschätzt werden. Das mittlere Gewicht der verbrannten Brennstoffballen betrug 289 kg, wodurch sich eine mittlere Dichte der Maisganzpflanzen-Ballen von 191 kg/m^3 errechnet. Darüber hinaus wurde über einen längeren Zeitraum die Zusammensetzung der Ballen hinsichtlich der Verteilung von Kolben, Stängeln und Blättern beurteilt. Dadurch kann abgeschätzt werden, dass der verwendete Brennstoff im Durchschnitt eine volumetrische Zusammensetzung von etwa 20 % Kolben, 55 % Stängeln und 25 % Blättern aufweist. Die Verteilung dieser Komponenten im Ballen ist mehr oder weniger zufällig, räumliche Anhäufungen konnten nicht beobachtet werden. Weiters zeigte sich, dass im Wesentlichen auch die Textur der Biomasse im Ballen, also die räumliche Ausrichtung, in alle Raumrichtungen als weitestgehend homogen anzusehen ist. Diese Vereinfachung ist speziell aufgrund der relativ großen Unterschiede zwischen den einzelnen Brennstoffballen durchaus zutreffend. Ausgewählte Fotos des ballenförmigen Primärbrennstoffes, dessen Lagerung sowie die Zufuhr zum Einschubsystem sind Abbildung 3-1 zu entnehmen.

Abbildung 3-1: Der Brennstoff Mais-Ganzpflanze in Ballenform (links: Einzelballen; mitte: Mieten im Ballenlager; rechts: Ballenzufuhr zum Einschubsystem)

Da sich ein biogener Brennstoff in seiner Zusammensetzung wesentlich von einem fossilen Brennstoff unterscheidet, ist für die Neuentwicklung eines Verbrennungskonzeptes die Erstellung einer Immediatanalyse unumgänglich. Diese Untersuchung des Brennstoffes beschreibt neben dem Wassergehalt auch den Gehalt an flüchtigen sowie nichtflüchtigen Komponenten

und den Aschegehalt. Von den in dieser Arbeit untersuchten Brennstoffen wurden zahlreiche derartige Analysen erstellt (siehe Kapitel 14.1.2.2); zur Beschreibung des Brennstoffes zu Simulationszwecken wurde aus diesen Einzeluntersuchungen eine gemittelte Immediatanalyse errechnet, welche in Tabelle 3-3 dargestellt ist. Die nichtflüchtigen Bestandteile werden im Allgemeinen auch als Tiegelkoks bezeichnet und setzen sich aus einem reaktiven Anteil (Koksgehalt) und dem nichtreaktiven Ascheanteil zusammen. Es zeigt sich, dass Biomasse, und hier speziell auch halmgutartige Biomasse durch einen hohen Anteil an flüchtigen Bestandteil und einen reduzierten Heizwert gekennzeichnet ist. Der Wassergehalt des Brennstoffes ist großen Schwankungen unterworfen (zwischen etwa 8 und 20 %) und hängt vor allem vom Erntezeitpunkt sowie von der Lagerung und der Pressdichte der Ballen ab. Der Wassergehalt gibt hierbei die Wassermasse bezogen auf die Gesamtmasse des feuchten Brennstoffes an, während die Brennstofffeuchte die Wassermasse bezogen auf den trockenen Brennstoff bezeichnet.

Tabelle 3-3: Gemittelte Immediatanalyse des eingesetzten Maisganzpflanzen-Brennstoffes (Padouvas, 2003a)

Parameter	Einheit	Wert
Wassergehalt	wt%, roh	8,65
Flüchtige Bestandteile	wt%, TS	74,87
Nichtflüchtige Bestandteile	wt%, TS	25,13
Koksgehalt (reaktiv)	wt%, TS	19,42
Aschegehalt (inert)	wt%, TS	5,71
Oberer Heizwert	kJ/kg, TS	18.116
Unterer Heizwert	kJ/kg, TS	16.781

Tabelle 3-4: Gemittelte Elementaranalyse des eingesetzten Maisganzpflanzen-Brennstoffes (Padouvas, 2003a)

Parameter	Einheit	Wert
C	wt%, TS	45,94
H	wt%, TS	6,08
O	wt%, TS	40,54
N	wt%, TS	1,05
Rest (S, Cl, Mg, Ca, …)	wt%, TS	6,39

Eine zweite wesentliche Charakterisierung des Brennstoffes ist durch die Elementaranalyse möglich, welche die Häufigkeit der einzelnen chemischen Elemente in der Matrix der Biomasse beschreibt. Auch hier wurden zahlreiche Analysen erstellt (siehe Kapitel 14.1.2.2) und daraus eine mittlere, repräsentative Zusammensetzung für die im Zuge der vorliegenden Arbeit durchgeführten Simulationen zusammengestellt, welche in Tabelle 3-4 wiedergegeben ist. Biomasse zeichnet sich durch einen sehr hohen Sauerstoffgehalt aus, welcher bei fossilen Brennstoffen aufgrund der langzeitigen Abbauvorgänge bereits verflüchtigt und nur noch in wesentlich niedrigeren Gehalten nachweisbar ist. Ähnliches gilt, vor allem bei geologisch älteren Kohlen, auch für Wasserstoff. Bezüglich des Verbrennungsverhaltens sowie des Sauerstoffbedarfs zur vollständigen Verbrennung ist diese Tatsache von großer Relevanz. An dieser Stelle ist darauf hinzuweisen, dass für die, im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten, Simulationen lediglich die Elemente Kohlenstoff, Wasserstoff, Sauerstoff und Stick-

stoff genauer untersucht wurden. Von allen anderen vorkommenden Elementen wurde vereinfacht angenommen, dass sie während der Verbrennung nicht in die Gasphase übergehen und deshalb als Aschebestandteile („Rest") subsummierbar sind. Dies gilt auch für Schwefel und Chlor, welche zwar durchaus gasförmige Emissionen verursachen, aber nur mit hohem Aufwand mit numerischer Strömungssimulation zu beschreiben sind.

Für die Verbrennungsführung ebenfalls ausschlaggebend ist das thermische Verhalten der unbrennbaren Aschebestandteile, speziell der Ascheschmelzpunkt. Hier zeigt sich einer der großen Problemkreise der Biomasseverbrennung, nämlich die relativ niedrigen Temperaturen, bei der Biomasseaschen zu versintern und zu schmelzen beginnen. Daraus resultiert unmittelbar die Gefahr der Verschlackung von Rosten durch Bodenasche aber auch die Ablagerung und Verschlackung durch Flugasche im Rauchgaszug. Diesem Gefahrenpotenzial muss eine intelligente Auslegung eines Verbrennungsprozesses für Biomasse Rechnung tragen. Das thermische Verhalten der Asche des in dieser Arbeit verwendeten Biomassebrennstoffes ist in Tabelle 3-5 angeführt. Die angegebenen Ascheschmelzpunkte wurden dabei im Rahmen des Projekts anhand des tatsächlich verwendeten Brennstoffes ermittelt, die spezifische Wärmekapazität wurde mangels eigener Messungen der Literatur entnommen.

Tabelle 3-5: Thermisches Verhalten der Asche des Maisganzpflanzen-Brennstoffes (Hartmann et al., 2003a; FLUENT, 2005)

Parameter	Einheit	Wert
Spezifische Wärmekapazität	kJ/kgK	0,795
Sinterbeginn	°C	908
Erweichungspunkt	°C	918
Sphärischpunkt	°C	1.033
Halbkugelpunkt	°C	1.062
Fließpunkt	°C	1.098

Die jeweiligen, für die betrachtete Verbrennungstechnologie ebenfalls in Frage kommenden Brennstoffe Energiegras und Weizenstroh wurden ebenfalls oben genannten Analysen unterzogen. Die Ergebnisse sind gesammelt dem Kapitel 14.1.2.2 zu entnehmen.

Zur Charakterisierung des Abbrandverhaltens des biogenen Brennstoffes kann die thermogravimetrische Analyse (*TGA*) wertvolle Informationen liefern. Dabei wird der Gewichtsverlust des Brennstoffes bei der Einwirkung erhöhter Temperaturen unter kontrollierten Bedingungen analysiert. Hierfür wird eine sehr kleine Menge gemahlenen und homogenisierten Brennstoffs in einem Analyseofen mit einstellbarer Gasatmosphäre (Spülstrom) nach einem definierten Temperaturprogramm aufgeheizt und der Gewichtsverlauf durch sehr präzise Wägung untersucht. Zusätzlich zur Auswertung der integralen Gewichtskurve kann auch deren erste Ableitung nach der Zeit (Abbrandrate) in Form der differentiellen thermischen Analyse (*TGA-DTA*) untersucht werden. Wärmekapazitäten sowie Wärmetönungen während der ablaufenden Umwandlungsprozesse können durch Anwendung der TGA-DSC (*differential scanning calorimetry*) ermittelt werden. In der Literatur sind zahlreiche Arbeiten dokumentiert, die die Anwendung und den Nutzen thermogravimetrischer Untersuchungen darlegen, von denen einige ausgewählte Stellen kurz erwähnt werden sollen. In der grundlegenden Arbeit von Stenseng et al. (Stenseng et al., 2001b) wird gezeigt, was TGA bei der Erfassung heterogener Verbrennungsvorgänge leisten kann. Einige Beispiele für mögliche Auswertungsmethoden thermogravimetrischer Ergebnisse sind bei Conesa et al. (Conesa et al., 2001) dar-

gestellt. Thermogravimetrische Untersuchungen hoher Präzision und mit hohem wissenschaftlichen Anspruch werden seit vielen Jahren regelmäßig von einer ungarischen Forschergruppe um Várhegyi (Várhegyi et al., 1989a; Várhegyi et al., 1989b; Várhegyi et al., 2002; Várhegyi et al., 2006; Várhegyi et al., 2009; Várhegyi et al., 2011a; Várhegyi et al., 2011b) veröffentlicht. Die Entwicklung geeigneter Modelle zur Beschreibung des thermischen Verhaltens von Brennstoffen ist für Arbeiten, die die Modellierung und Simulation eines technischen Verbrennungsprozesses zum Ziel haben, erwartungsgemäß von besonderem Interesse. Sehr gute Arbeiten hierfür sind auch von Backreedy et al. sowie von Arenillas et al. (Backreedy et al., 1999; Arenillas et al., 2001.) verfügbar. Obwohl diese Arbeiten lediglich das Abbrandverhalten fossiler Kohlen untersuchen, wird hier sehr gut dokumentiert, wie bei der Ermittlung von Volatilisierungs- und Abbrandkinetiken vorzugehen ist. Die Auswertung von TGA-Resultaten hinsichtlich der Ermittlung einer Umwandlungskinetik wird beispielsweise auch bei Habibi et al. (Habibi et al., 2007) anhand eines komplexen Modells für Kunststoff gezeigt. Umfangreiche Untersuchungen des thermischen Abbaus verschiedener organischer Materialien sowie deren konstituierender Komponenten Zellulose, Hemizellulose und Lignin in Reinform geben beispielsweise die Arbeiten von Font et al. (Font et al., 2001), Williams et al. (Williams et al., 1996) oder Yang et al. (Yang et al., 2006; Yang et al., 2007). Die Untersuchung von Reinkomponenten und der Vergleich mit komplexen Biomassen zum Zwecke fundierterer Modellierungsansätze werden in der Literatur häufig durchgeführt. Stenseng et al. (Stenseng et al., 2001a) untersuchen beispielsweise mittels TGA-DSC die Thermolyse von Stroh, vergleichen diese mit Reinzellulose und approximieren damit die Abbaukinetik der komplexen Biomasse. Murugan et al. (Murugan et al., 2008) führen eine ähnliche Arbeit mit Lignin aus Hartholz durch. Eine ausführliche thermogravimetrische Untersuchung verschiedenster Holzarten mit anschließender sehr genauer Modellierung des Pyrolyseverhaltens ist Gronli et al. (Gronli et al., 2002) zu entnehmen. Reina et al. beschäftigen sich in ihrer Arbeit (Reina et al., 1998) mit der Pyrolyse von Abfallholz, während bei Branca et al. (Branca et al., 2007) die Rinde einer bestimmten Holzart untersucht wird; auch diese beiden Arbeiten beginnen mit einer thermogravimetrischen Analyse und enden schließlich bei einem kinetischen Modell der thermolytischen Umsetzung.

Auch das thermolytische Verhalten weniger standardisierter lignozellulosischer und halmgutartiger Pflanzen und Energiepflanzen wird durch Literaturarbeiten vergleichsweise gut abgedeckt. Bei Bridgeman et al. (Bridgeman et al., 2007) findet sich als Teil einer größeren Arbeit das Pyrolyseverhalten zweier lignozellulosischer Energiepflanzen, Ghaly et al. (Ghaly et al., 1993) untersuchen das Volatilisierungsverhalten von Weizenstroh, Maiti et al. (Maiti et al., 2007) jenes von Senfstroh, Calvo et al. (Calvo et al., 2004) jenes von Reisstroh und Mansaray et al. (Mansaray et al., 1999) schließlich untersuchen und modellieren die Thermolyse von Reisschalen. Raveendran et al. untersuchen in einer bereits älteren Arbeit (Raveendran et al., 1996a) die Pyrolyse von Maiskolben und Weizenstroh mittels TGA-DSC und vergleichen das thermische Verhalten mit anderen Biomassen. Darüber hinaus wird auch die Verteilung der bei der Pyrolyse entstehenden Produkte analysiert und modelliert. Abschließend seien noch die Arbeiten von Senneca at al. (Senneca et al., 2002a; Senneca et al., 2002b; Senneca, 2007) genannt, die die Pyrolyse verschiedener Biomassen in reduzierender Atmosphäre sowie die Verbrennung des entstehenden reaktiven Kokses in oxidierender Atmosphäre untersucht und mit dem Verhalten verschiedener polymerer Reststoffe verglichen haben.

Die thermogravimetrischen Analysen in dieser Arbeit wurden mit einer TGA-Waage vom Typ Cahn TG-121 des Herstellers ATI Cahn Inc. durchgeführt. Die Apparatur erlaubt Untersuchungen mit verschiedenen Temperaturprogrammen (isotherm, Rampen von 0 bis etwa 50 °C/min) und unter Anwendung einstellbarer Gasatmosphären durch Mischung verschiedener Reingase (Stickstoff, Sauerstoff, synthetische Luft). Die praktischen Arbeiten verliefen dabei in zwei Etappen. Zunächst wurden mit der fein vermahlenen rohen Biomasse verschiedene Aufheizprogramme in inerter Atmosphäre mit Stickstoff-Spülung durchgeführt, um das Trocknungs- und Pyrolyseverhalten der Biomasse zu untersuchen. Der in diesem Schritt produzierte Biomasse-Koks wurde in der zweiten Phase unter Einsatz oxidierender Atmosphäre (synthetische Luft) und verschiedener Temperaturprogramme verbrannt (Koksausbrand). In einer Arbeit von Grotkjær et al. (Grotkjær et al., 2003) werden ebenfalls TGA-DTG-Ergebnisse für Stroh gezeigt, die unter inerter Stickstoffatmosphäre sowie unter Luftatmosphäre erhalten wurden. Der Vergleich zeigt dort exzellent das unterschiedliche Verhalten des Brennstoffes unter oxidierenden und reduzierenden Bedingungen auf. Orfão et al. (Orfão et al., 1999) zeigen einen ähnlichen Vergleich für die drei konstituierenden Biomassekomponenten Zellulose, Hemizellulose (Xylan) und Lignin. Es ist sehr klar zu erkennen, dass bei Anwendung oxidierender Atmosphäre die Volatilisierung früher einsetzt und dass der auftretende Peak im Massenverlust durch den zweiten Peak der Koksverbrennung bei höheren Temperaturen abgelöst wird. Um den Einfluss der Aufheizrate auf das thermische Verhalten zu analysieren, wurden Untersuchungen mit verschiedenen Aufheizraten (linear steigende Temperaturrampen) durchgeführt. Um feststellen zu können, ob die TGA-Untersuchungen tatsächlich im kinetikdominierten Bereich durchgeführt wurden und keine Limitierung des chemischen Umsatzes durch Stoff- oder Wärmeübergang zu berücksichtigen ist, wurden darüber hinaus verschieden hohe Spülgasströme sowie verschieden hohe Einwaagen der rohen Biomasse in die TGA-Apparatur untersucht. Einen Überblick über die durchgeführten TGA-Experimente, die in Stickstoff-Atmosphäre durchgeführt wurden, gibt Tabelle 3-6.

Tabelle 3-6: Wesentliche Parameter der durchgeführten thermogravimetrischen Untersuchungen mit Stickstoff-Atmosphäre

Bezeichnung	Aufheizrate [°C/min]	Spülstrom [Nml/min]	Einwaage [mg]
TGA 1-1	10,00 (10 °C/min)	96,3	58,08
TGA 1-2	10,08 (10 °C/min)	29,6	59,87
TGA 1-3	10,11 (10 °C/min)	96,3	28,63
TGA 2-1	20,01 (20 °C/min)	96,3	66,67
TGA 2-2	19,90 (20 °C/min)	29,6	60,59
TGA 2-3	19,82 (20 °C/min)	96,3	33,80
TGA 3-1	40,86 (40 °C/min)	101,9	60,46
TGA 3-2	40,19 (40 °C/min)	29,5	58,95
TGA 3-3	39,69 (40 °C/min)	96,3	26,40

Es wurden Experimente mit Temperaturrampen von 10, 20 und 40 °C/min durchgeführt. Unter Berücksichtigung der Balleneinschubgeschwindigkeit und einer approximativen Ofentemperatur von 950 °C ergibt sich rein rechnerisch eine mittlere Temperaturrampe von etwa 33 °C/min. Die Simulationen mit den entwickelten Modellen zeigen, dass die Temperatur im Ballen nicht linear steigt, sondern eine stetig zunehmende Steigung der Temperaturrampe bei geringer werdender Entfernung zur brennenden Ballenoberfläche zu erwarten ist. Die

Simulationen zeigen, dass im Volatilisierungsbereich der zu erwartende Temperaturgradient zwischen 20 und 40 °C/min zu liegen kommt. Für die vorliegende Arbeit sind also nur diese beiden Temperaturrampen interessant, die TGA-Experimente mit einer Rampe von 10 °C/min werden lediglich zu Vergleichszwecken dargestellt.

Abbildung 3-2 zeigt die Verläufe der beobachteten Gewichtsabnahme (nichtkonvertierte Restmasse) während der erwähnten Temperaturprogramme in Abhängigkeit von der Versuchszeit für alle TGA-Experimente des Maisganzpflanzen-Brennstoffs unter Stickstoff-Atmosphäre. Der Zeitpunkt Null wurde mit dem erstmaligen Überschreiten einer Temperatur von 35 °C mit positivem Gradienten gleichgesetzt (übliche Annahme bei vergleichbaren Arbeiten). Die verwendete Apparatur zeichnet den Gewichtsverlauf jede Sekunde auf, die dargestellten Kurven sind zwecks Erhöhung der Übersichtlichkeit also stark ausgedünnt.

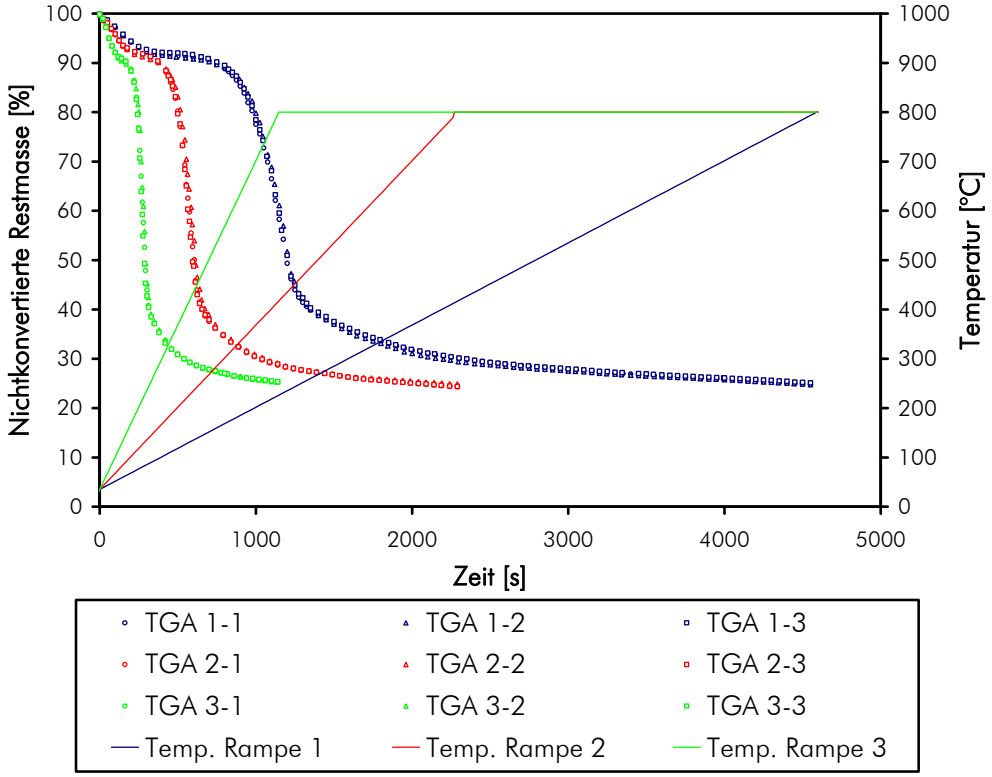


Abbildung 3-2: TGA-Kurven für den Biomassebrennstoff Mais-Ganzpflanze im gesamten Volatilisationsbereich - nichtkonvertierte Restmasse in Abhängigkeit von der Zeit für verschiedene Aufheizraten und Spülung mit Inertgasstrom inklusive Temperaturrampen

Alle Kurven zeigen sehr deutlich eine erste Gewichtsabnahme mit anschließendem mehr oder weniger stark ausgeprägtem Plateau, welches mit dem Abschluss des Trocknungsprozesses der rohen Biomasse gleichzusetzen ist. Im Anschluss erfolgt ein starker Gewichtsverlust aufgrund der Ausgasung der flüchtigen Bestandteile, welcher mit zunehmender Versuchszeit (und steigender Temperatur) immer flacher gegen einen Grenzwert ausläuft. Bei idealen Volatilisierungsbedingungen ist dieser Grenzwert mit dem Anteil des Tiegelkoks aus der Brennstoff-Immediatanalyse gleichzusetzen. Zur besseren Auflösung des relativ schnell ablaufenden Trocknungsprozesses ist dieser in Abbildung 3-3 vergrößert dargestellt.

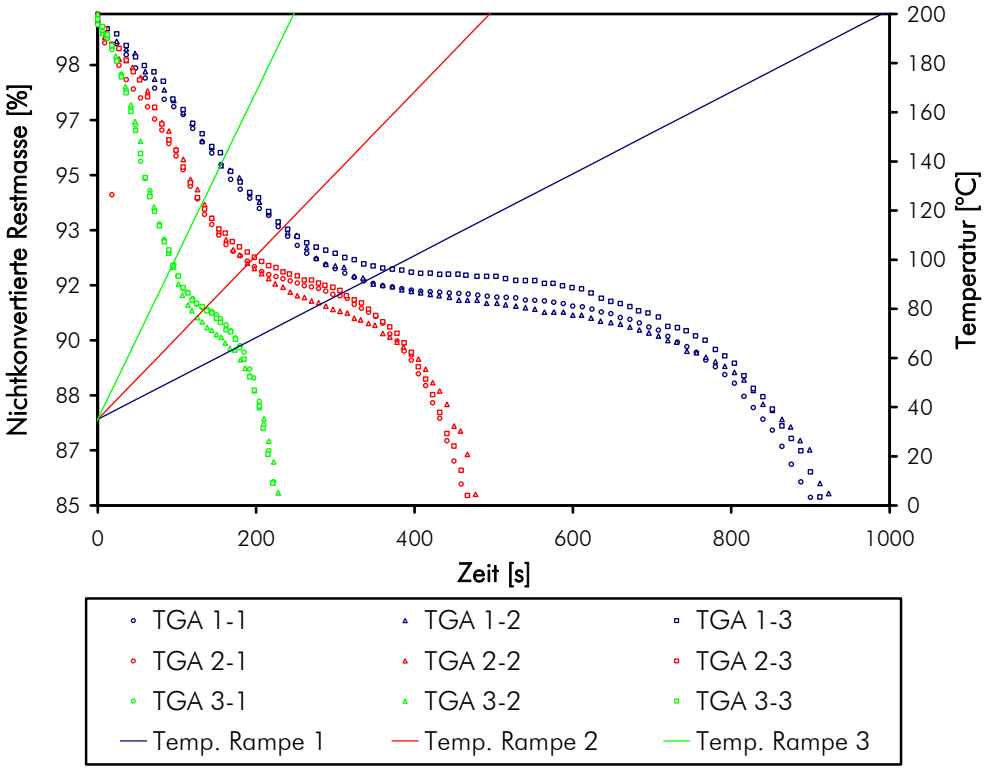


Abbildung 3-3: TGA-Kurven für den Biomassebrennstoff Mais-Ganzpflanze im Trocknungsbereich - nichtkonvertierte Restmasse in Abhängigkeit von der Zeit für verschiedene Aufheizraten und Spülung mit Inertgasstrom inklusive Temperaturrampen

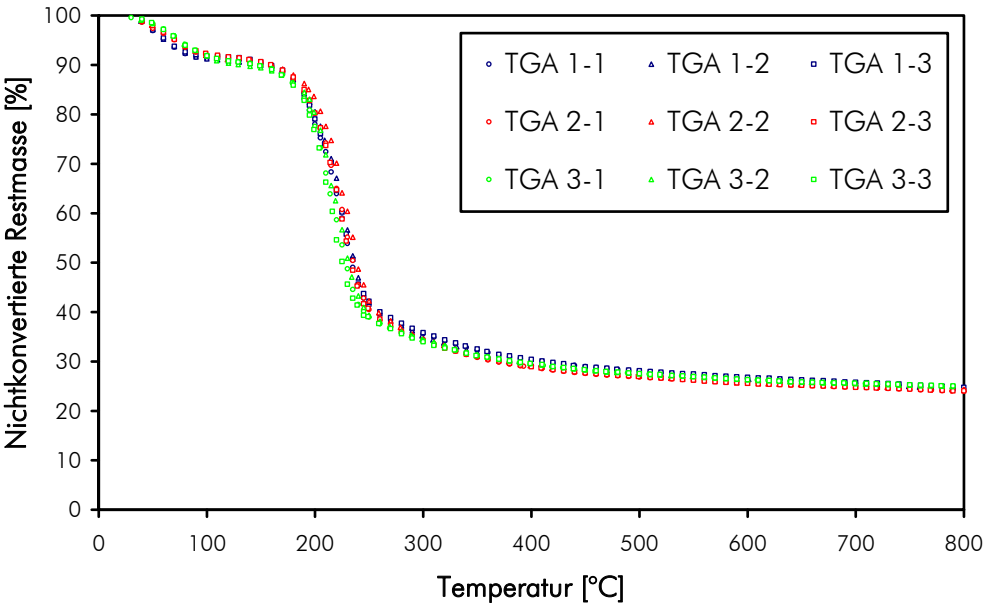


Abbildung 3-4: TGA-Kurven für den Biomassebrennstoff Mais-Ganzpflanze im gesamten Volatilisationsbereich - nichtkonvertierte Restmasse in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Aufheizraten und Spülung mit Inertgasstrom

Aufgrund der unterschiedlichen Aufheizraten ist ein direkter quantitativer Vergleich der einzelnen Ergebnisse in dieser Darstellung relativ schwer. Wird die nichtkonvertierte Restmas-

se hingegen in Abhängigkeit von der jeweiligen Temperatur aufgetragen, so ergibt sich eine wesentlich verbesserte Vergleichbarkeit. Für den gesamten Volatilisierungsbereich ist diese Auswertung in Abbildung 3-4 dargestellt, die Detailauswertung für den Trocknungsvorgang findet sich in Abbildung 3-5.

Beide Diagramme zeigen sehr deutlich, dass die Gewichtsabnahme während der unterschiedlichen TGA-Experimente im Wesentlichen unabhängig von der verwendeten Temperaturrampe ist. Unter Berücksichtigung der Wiederholgenauigkeit der Versuche und der Homogenität der untersuchten Biomasseproben sind alle Kurven als koinzident zu bezeichnen.

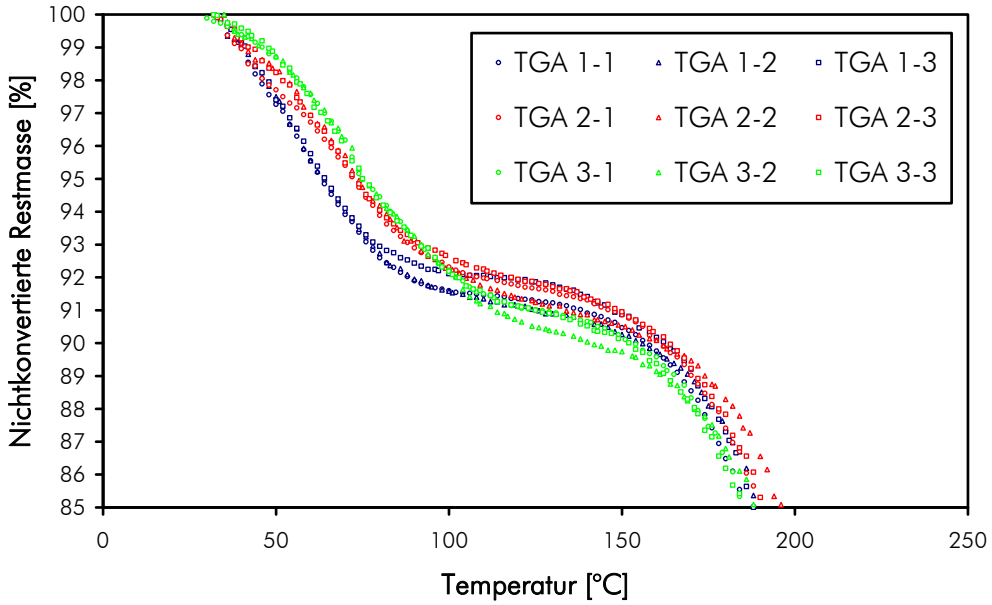


Abbildung 3-5: TGA-Kurven für den Biomassebrennstoff Mais-Ganzpflanze im Trocknungsbereich - nichtkonvertierte Restmasse in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Aufheizraten und Spülung mit Inertgasstrom

Die TGA-Kurven des Trocknungs- und des Volatilisierungsvorgangs zeigen weiters, dass (im untersuchten Bereich) weder der Volumenstrom des inerten Spülgases noch die Einwaage an roher Biomasse einen Einfluss auf den Verlauf der Gewichtsabnahme während der durchgeführten Experimente aufweisen. Aus dieser Tatsache wird in den Kapiteln 6.7.2.1 und 6.7.2.2 abgeleitet werden, dass die TGA-Experimente im kinetikdominierten Regime durchgeführt wurden und keine Limitierung durch den Stoff- oder Wärmeaustausch aufgetreten sind. Damit ist die Ermittlung der Kinetik der chemischen Umsetzung direkt ohne zusätzliche Modellierung des Stoff- oder Wärmetransports möglich.

TGA-Untersuchungen mit dem Ziel der Reaktionsaufklärung des Koksausbrands werden in oxidierender Atmosphäre durchgeführt und gestalten sich wesentlich schwieriger als jene für Trocknungs- und Ausgasungsprozesse. Die wesentlichsten Gründe hierfür sind einerseits der Stofftransport des Reaktanten Sauerstoff an die Partikeloberfläche, sodass bei ungeschickter Wahl der experimentellen Bedingungen eine nur schwierig auswertbare Überlagerung der chemischen Kinetik und des Stoffüberganges auftritt. Andererseits ist der Koksabbrand ein ausgeprägt exothermer Vorgang, der zu einer spontanen Zündung und einhergehender unkontrollierter Selbsterwärmung der Probe führen kann, sodass über tatsächliche Partikeltemperaturen keine gesicherten Aussagen mehr getroffen werden können. Russel et al. (Russell et al., 1998) erläutern diese Probleme im Zuge der Entwicklung eines TGA-

Verfahrens zur Bestimmung der Koksoxidationskinetik und zeigen, dass durch Untersuchung sehr kleiner Probemengen (2-5 mg) und Anwendung von sauerstoffabgereicherter Ofenatmosphäre dennoch aussagekräftige Resultate erhalten werden können. Durch die kleine Probemenge mit größerer spezifischer Oberfläche zur Ofenatmosphäre wird einerseits der Stofftransport signifikant erhöht und andererseits die unkontrollierte Temperaturerhöhung im Falle der Zündung reduziert. Der geringere Sauerstoffgehalt führt zu einer Reduktion der Oxidationsgeschwindigkeit, wodurch die Selbsterwärmung der Probe ebenfalls abgeschwächt wird. Untersuchungen bei mehreren Sauerstoffgehalten erlauben in der Folge die Extrapolation der chemischen Reaktionsrate auf Luftverhältnisse. Ähnliche Hinweise liefern auch die Arbeiten von Várhegyi et al. (Várhegyi et al., 2006; Várhegyi et al., 2011b).

Die für die vorliegende Arbeit zur Verfügung stehende TGA-Apparatur war für belastbare Untersuchungen des Koksabbrandes nur bedingt geeignet. Während die großen Probemengen der Trocknungs- und Volatilisierungsuntersuchungen (30 bis 70 mg) mit sehr guter Genauigkeit erfasst werden konnten, war die Waagenpräzision für die erforderlichen geringen Probemengen für den Koksabbrand nicht mehr ausreichend. Einerseits führte das Signalrauschen zu einer deutlichen Schwächung der Signifikanz der TGA-Kurven selbst, andererseits erschwerte die zu geringe Genauigkeit auch die Möglichkeit der erforderlichen Kompensation des thermischen Auftriebs des Probenträgers sowie des Strömungswiderstandes gegen den Spülgasstrom (siehe Russell et al., 1998); der Beitrag an Messungenauigkeit aufgrund beider Effekte bezogen auf das Messsignal ist bei geringen Probemengen relativ groß. Bei den erwähnten großen Probemengen der Volatilisierungsuntersuchungen trugen diese Unsicherheiten nur zu geringen Messfehlern bei. Die im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten TGA-Analysen des Koksabbrandes werden deshalb nicht zur Modellentwicklung, sondern lediglich zur Validierung von Modellen aus der Literatur herangezogen.

Tabelle 3-7: Wesentliche Parameter der durchgeführten thermogravimetrischen Untersuchungen mit oxidierender Atmosphäre

Bezeichnung	Spülstrom (Luft / N_2 / gesamt) [Nml/min]	O_2-Gehalt [vol%]	Volatilisierungs-programm	Startgewicht [mg]
TGA 4-1	96,3 / 0,0 / 96,3	20,95	n.a.	12,46
TGA 4-2	58,8 / 39,1 / 97,9	12,58	TGA 1-3	7,16
TGA 4-3	39,2 / 58,9 / 98,1	8,37	TGA 2-3	8,22
TGA 5-1	29,2 / 0,0 / 29,2	20,95	n.a.	12,45
TGA 5-2	19,6 / 9,8 / 29,4	13,97	TGA 1-2	14,69
TGA 5-3	9,9 / 19,6 / 29,5	7,03	TGA 2-2	14,89

Nachdem durch TGA-Untersuchung des Volatilisierungsvorgangs in der TGA-Apparatur eine Koksprobe hergestellt wurde, konnte durch Zugabe synthetischer Luft als Oxidationsmittel der Koksabbrand untersucht werden. Zu diesem Zweck wurde nach Erreichen eines stationären Waagensignals unter Inertatmosphäre bei gleichbleibender Temperatur (800 °C) das Spülgas von Reinstickstoff auf synthetische Luft bzw. ein Gemisch aus Reinstickstoff und synthetischer Luft umgeschaltet. Der einsetzende Koksabbrand wurde sodann bei konstanter Temperatur von 800 °C gravimetrisch untersucht; Temperaturrampenprogramme wurden zwar ebenfalls durchgeführt, wurden für die vorliegende Arbeit allerdings nicht herangezogen. Durch unterschiedliche Mischung von synthetischer Luft mit Stickstoff als Spülgas wur-

den in der TGA-Ofenatmosphäre unterschiedliche Sauerstoffpartialdrücke eingestellt und untersucht. Insgesamt wurden 6 Experimente zum Koksabbrand mit unterschiedlichen Sauerstoffpartialdrücken, Spülgas-Volumenströmen und Einwaagen durchgeführt. Eine Zusammenstellung dieser Experimente und alle wesentlichen Parameter sind in Tabelle 3-7 gegeben. Es wird klar, dass für eine echte Modellentwicklung an dieser Stelle deutlich mehr Versuchsläufe mit jeweils nur einem variablen Parameter durchgeführt werden müssten. Die Validierung fertiger Literaturmodelle ist anhand der durchgeführten Versuche allerdings sehr gut möglich.

Als Ergebnis der Koksabbranduntersuchungen sind in Abbildung 3-6 die zeitlichen Verläufe der nichtkonvertierten Restmasse (normiert auf das jeweilige Gewicht bei Umschaltung auf oxidierende Ofenatmosphäre) aller durchgeführten TGA-Experimente dargestellt. Auch hier wurde zur Erhöhung der Übersichtlichkeit die Anzahl der Kurvenpunkte stark ausgedünnt. Die blauen Kurven stellen dabei die Läufe mit hohem Spülgas-Volumenstrom dar, die roten Kurven jene mit niedrigerem Volumenstrom. Jeweils drei unterschiedliche Sauerstoffpartialdrücke wurden untersucht.

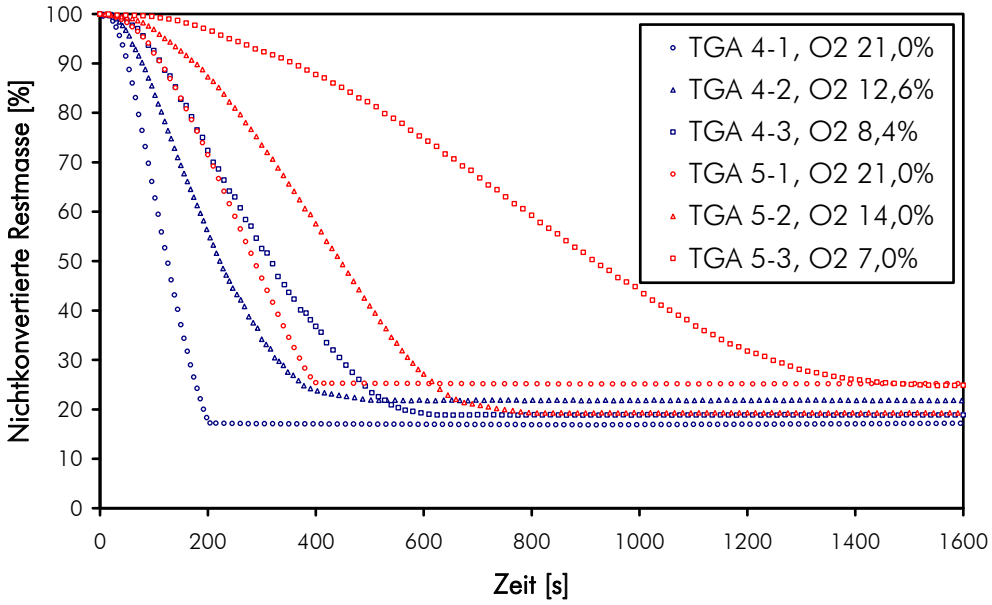


Abbildung 3-6: TGA-Kurven für Koks aus dem Biomassebrennstoff Mais-Ganzpflanze in oxidierender Atmosphäre - nichtkonvertierte Restmasse in Abhängigkeit von der Zeit bei verschiedenen Spülgas-Volumenströmen und Sauerstoffgehalten

Alle Kurven zeigen einen mehr oder weniger schnellen Umsatz des Kokses und schwenken schließlich auf einen konstanten Wert ein, welcher dem inerten Aschenanteil im Brennstoff entspricht. Im Unterschied zur Volatilisierung zeigt sich beim Koksabbrand wie erwartet ein starker Einfluss des Sauerstoffgehaltes der Ofenatmosphäre sowie des Spülgas-Volumenstromes. Grob ausgedrückt ist bei einer Reduzierung des Sauerstoffgehaltes von 21 aus 14 vol% etwa von einer Verdoppelung der Abbranddauer auszugehen, bei weiterer Reduktion auf 7 vol% erfolgt eine weitere Verdopplung der Dauer. Der starke Einfluss des Spülgas-Volumenstroms auf die Abbranddauer macht darüber hinaus deutlich, dass die durchgeführten TGA-Untersuchungen sehr wesentlich durch den Stoffübergang limitiert werden und zur mathematischen Beschreibung des Koksabbrandes als Schlussfolgerung eine Modellkombination aus chemischer Kinetik und Filmdiffusion zu entwickeln ist.

4 Verbrennungskonzept, Ofengeometrie und experimentelle Untersuchungen

Die erwähnten Spezifika eines biogenen Brennstoffes resultieren in einer Reihe von Randbedingungen für ein Verbrennungskonzept und einen neu zu entwickelnden Verbrennungsapparat. Zu den wesentlichsten Eckpunkten zählen die Kontrolle der Verbrennungstemperatur aufgrund des niedrigen Ascheschmelzpunktes, eine gestufte Verbrennung zur Reduktion der Emissionen von Stickstoffoxiden sowie die Bereitstellung ausreichender Reaktionszeit für einen möglichst vollständigen Ausbrand hinsichtlich brennbarer Gase und reaktiver Kokskomponenten im Feststoffstrom. Die Entwicklung eines innovativen Verbrennungssystems prägt weitere Randbedingungen auf, die signifikante Verbesserungen zum bestehenden Stand der Technik bieten sollen. Hierzu zählen die folgenden Zielfaktoren:

- eine kompakte und platzsparende Brennkammer, die zur Reduktion der thermischen Trägheit (und damit zur Erhöhung der Betriebsdynamik) ein Mindestmaß an Ausmauerungsmasse aufweisen soll
- höchstmögliche Effizienz der Verbrennung durch Verwendung von Rauchgasrezirkulation bei vergleichsweise niedrigen Luftverhältniszahlen
- als Brennstoff soll jegliche Biomasse, die in Ballenform gebracht werden kann, ins Auge gefasst werden; der Fokus soll auf kostengünstigem Material aus dem Bereich agrarischer Reststoffe liegen
- Bereitstellung thermischer Energie in einem einzelnen Strom, im konkreten Fall eines Heißgasstroms, unter Vermeidung von flüssigkeitsbasierten Kühlsystemen im primären Verbrennungsteil. Dadurch auch Vorteile im sicherheitstechnischen Konzept der Anlage
- Bereitstellung thermischer Energie in einer Qualität, die einen effizienten Betrieb einer dampfkreislaufbasierten Kraft-Wärme-Kopplung sicherstellt
- hinsichtlich der Anlagengröße wird ein dezentraler Leistungsbereich zwischen 500 kW_{th} und 5 MW_{th} (Brennstoffwärmeleistung) angestrebt

All diese Spezifika dienten als Ausgangspunkt für die Entwicklung eines innovativen Verbrennungskonzepts, welches in der vorliegenden Arbeit mit den Mitteln der Simulation untersucht und optimiert wurde. Dieses spezielle Konzept wird im Folgenden detaillierter dargestellt. Zur Erreichung der gesteckten Ziele wird zunächst eine globale Luftverhältniszahl zwischen 1,4 (für große Anlagen über etwa 1,5 MW_{th}) und 1,7 (für kleine Anlagen mit 500 kW_{th}) definiert. Dass eine stabile und vollständige Verbrennung des biogenen Brennstoffes unter diesen Verhältnissen möglich ist, wurde in ausgedehnten Verbrennungsversuchen

an einer Versuchsanlage mit einer Brennstoffwärmeleistung von 2,18 MW_{th} nachgewiesen. Die Nutzung von Brennstoffen mit deutlich unterschiedlichen Heizwerten oder Materialfeuchten erfordert unter Umständen eine Anpassung der Luftverhältniszahlen, welche am besten ebenfalls durch Verbrennungsversuche evaluiert werden kann. Wenn zur Vermeidung von Ascheerweichung eine Verbrennungstemperatur im Bereich zwischen 750 bis 800 °C angestrebt wird, so ist bei den genannten Luftverhältniszahlen ein relativ großes volumetrisches Rauchgasrezirkulationsverhältnis von 1,0 bis 1,2 erforderlich (siehe Kapitel 5 und 8). Diese Minimierung des Luftüberschusses bei gleichzeitiger Maximierung der Rauchgasrezirkulationsrate führt zu einem hohen feuerungstechnischen Wirkungsgrad der Verbrennungsanlage.

Es wird eine dreistufige Verbrennung implementiert, die eine weitestgehende Trennung der Ausgasung flüchtiger Brennstoffkomponenten und der Verbrennung des festen Kokses gemeinsam mit einer Stufung der Verbrennungsluftzuführung vorsieht. Die Primärzone wird unterstöchiometrisch betrieben und bildet den Ort der Brennstofftrocknung und der Gasfreisetzung aus dem Brennstoff (Volatilisierung). Das zugeführte Gasgemisch aus Verbrennungsluft und Rauchgasrezirkulat (oft auch als *Wind* bezeichnet) wird über eine Anzahl von Primärdüsen direkt auf die Ballenoberfläche geblasen. Die sich ausbildenden turbulenten Freistrahlen sind so gestaltet, dass sie einen starken Impakt (Impulsaustausch) auf die Ballenoberfläche ausüben. Durch relativ hohe Gasgeschwindigkeit und hohe Turbulenz wird der Stoff- und Wärmeaustausch zwischen Ballen und Gas signifikant gesteigert. Der relativ hohe Anteil flüchtiger Komponenten, der den meisten biogenen Brennstoffen eigen ist, kann auf diese Weise deutlich effizienter und in kürzerer Zeit freigesetzt werden. Zusätzlich versorgt ein der Ballenoberfläche direkt gegenüber angeordnetes Strahlungsblech, welches aufgrund seiner Ausführung auf hoher Temperatur gehalten wird, die endothermen Vorgänge in der Primärzone mit thermischer Energie. Die thermische Isolation des Strahlungsblechs gegenüber der relativ kühlen inneren Brennkammerwand sorgt dafür, dass dieses Blech im Regelbetrieb rotglühend ist.

Die in der Primärzone freigesetzten brennbaren Gase werden in der Sekundärzone (Gasnachverbrennungszone) in zwei Stufen mit frischer Verbrennungsluft versorgt, sodass durch überstöchiometrische Verhältnisse ein weitestgehend vollständiger Ausbrand gewährleistet wird. Die gestufte Luftzuführung führt zu einer deutlichen Reduktion in der Bildung von Stickstoffoxiden. Die Sekundärluftdüsen in den beiden Ebenen der Luftzuführung sind azentrisch ausgerichtet und erzeugen im Verbrennungsgas einen Drall (in den beiden Ebenen gegenläufig), wodurch die turbulente Sauerstoffeinmischung verbessert wird. Das Design der Nachbrennzone bietet diesem Gas im Anschluss eine definierte Verweilzeit zur Erreichung eines hohen Ausbrandgrades.

Die nichtflüchtigen Komponenten des biogenen Brennstoffs gelangen im Anschluss an die Volatilisierung in die Feststoff-Ausbrandzone. Diese ist als Rostverbrennung konzipiert und wird in Form einer herkömmlichen und kommerziell erhältlichen Unterschubfeuerung für Holzhackschnitzel realisiert, welche für die Verbrennung von Biomassekoks adaptiert wurde. Damit sind ein bivalenter Betrieb (Holzhackschnitzel oder/und Biomasseballen) sowie ein zügiger Anlagenstart durch eine leistungsfähige Zusatzfeuerung möglich. Aufgrund des hohen Heizwertes der residuellen Koksfraktion des Biomasseballens wird der Nachverbrennungsrost bei relativ hoher Rostbelastung betrieben (etwa 2,6 MW_{th}/m^2). Die kompakte Bauweise und optimierte Primär- und Sekundärlufteindüsung führt zu einer spezifischen Rostfläche, die mit 0,386 m^2/MW_{th} etwa halb so groß wie bei einer herkömmlichen Zigarrenfeu-

erung ist (Marutzky et al., 1999). Dennoch wird dem Feststoff ausreichend Verweilzeit zur Verfügung gestellt, sodass in Kombination mit einer sehr genauen Temperaturregelung (schnelle und intelligente Rezirkulationsgas- und Frischluftdosierung) und optimaler Sauerstoffeinmischung ein guter Ausbrandgrad in der ausgetragenen Aschefraktion erzielt werden kann. Der Rost weist im heißen Teil keine beweglichen Teile auf; der Ascheaustrag erfolgt in radialer Richtung durch mehrachsiges Rütteln.

Alle drei Verbrennungszonen können komplett unabhängig voneinander mit Frischluft sowie Rezirkulationsgas beaufschlagt werden, sodass eine individuelle Regelung der Luftverhältniszahl und der Verbrennungstemperatur für jede Zone realisierbar ist. Da der Verbrennungsapparat weitestgehend ausmauerungslos gestaltet ist, wird zur Begrenzung der Blechtemperaturen der inneren Brennkammerwände eine Doppelmantelkonstruktion verwendet, welche mit der Mischung aus Frischluft und Rezirkulationsgas durchströmt wird. Dies führt einerseits zu einer Kühlung der inneren Bleche und andererseits zu einer inhärenten Gasvorwärmung. Es ist sogar denkbar, das Luft/Rezirkulationsgas-Gemisch für eine Zone durch den Mantel einer anderen Zone zu leiten, um einen gezielten Wärmetransport von einer exothermen zu einer endothermen Verbrennungszone zu realisieren (z.B. von der Rostzone zur Primärzone). Die Vorteile der ausmauerungslosen Konstruktion liegen in einer hohen Prozessdynamik, in schnellen Anfahr- und Abfahrprozeduren sowie in einem hervorragenden Lastfolgeverhalten. Durch einen entsprechend ausgeklügelten und schnellen Regelungsalgorithmus kann über die zahlreichen Regelorgane ein stabiler Betrieb selbst bei schwankenden Brennstoffeigenschaften sowie eine effiziente Steuerung transienter Betriebszustände erreicht werden. Ein verfahrenstechnisches Fliessbild des beschriebenen Verbrennungskonzepts ist Abbildung 4-1 zu entnehmen (Rauchgasreinigungseinrichtungen sind der Einfachheit halber nicht dargestellt).

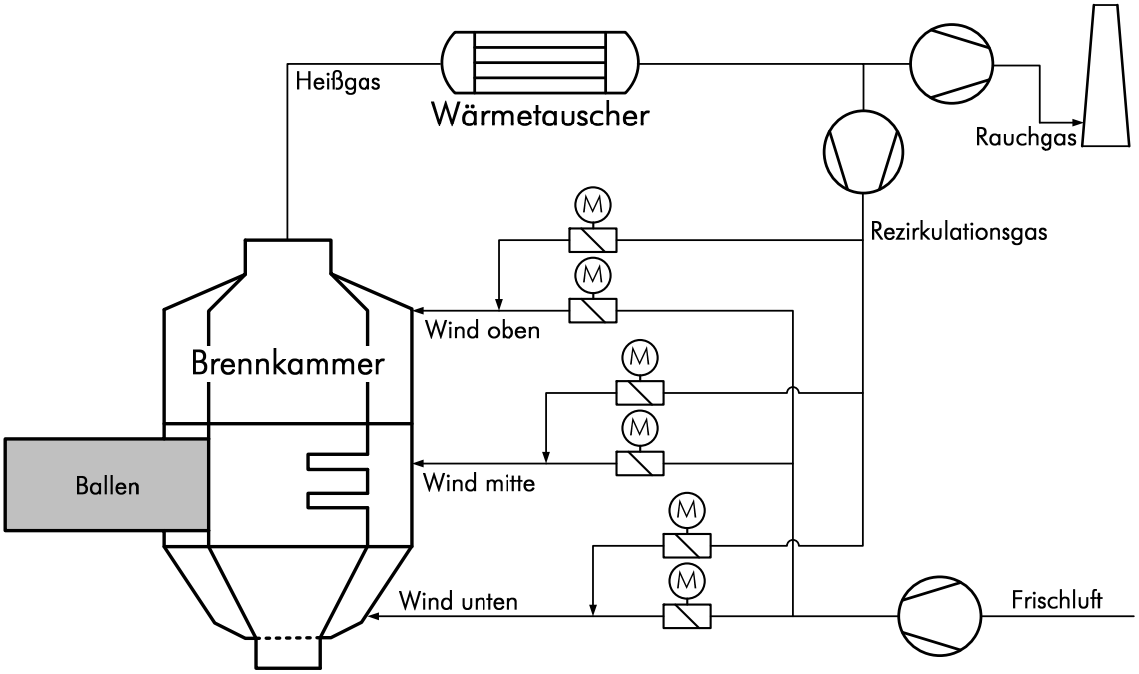


Abbildung 4-1: Verfahrenstechnisches Fließbild des Verbrennungskonzepts

Bei einem Kaltstart der Verbrennungsanlage aus dem Stand-by sind die Brennkammertemperaturen für einen gestuften Verbrennungsbetrieb deutlich zu niedrig. Speziell die unterstöchiometrische Ausgasung in der Primärzone verlangt Mindesttemperaturen von etwa

600 °C, damit die endotherme Gasfreisetzung zur Erzeugung eines brennbaren Gases überhaupt sinnvoll ablaufen kann. Während des Starts werden deshalb alle Zonen der Brennkammer überstöchiometrisch betrieben, sodass durch die Verbrennung genug Wärme freigesetzt wird, um den Ofen rasch auf Betriebstemperatur zu bringen. Die Zündung selbst wird durch einen Betrieb der Unterschubfeuerung mit Holzhackschnitzeln erreicht, wodurch nach etwa 10 Minuten eine ausreichende Temperatur des Verbrennungsgases erreicht werden kann, sodass durch Beaufschlagung der Primärluftdüsen mit reiner Verbrennungsluft der Ballen selbstständig gezündet werden kann. Anschließend erfolgt das Hochfahren im überstöchiometrischen Betrieb („Düsenbetrieb") bis dauerhaft und stabil eine kritische Mindesttemperatur überschritten wird. Dann wird durch stufenweise Reduktion des Luftüberschusses in der Primärzone (Dosierung von Rezirkulationsgas) unter gleichzeitiger Luftzufuhr in der Sekundärzone eine gestufte Verbrennung etabliert, ein Teil der Verbrennung also in die Gasnachverbrennungszone verschoben („Shiftbetrieb"). Diese Betriebsform stellt dann den Standardbetriebszustand dar.

Die gesamte, durch die Verbrennung freigesetzte thermische Energie wird in Form eines Heißgasstromes bereitgestellt, wodurch die weitere energetische Nutzung nachhaltig vereinfacht wird. Durch die Trennung von Verbrennung und Wärmeauskopplung kann ein einfacher und kostengünstiger Abhitzekessel für Heißgas verwendet werden. Neben der Dampferzeugung beispielsweise in einem Rankine-Kreislauf (Produktion von elektrischer Energie durch eine Dampfturbine oder einen Dampfmotor, Abwärme zur Fernwärme-Auskoppelung) sind auch die direkte Heißgasproduktion für industrielle Trocknungsprozesse oder die Anwendung eines Wärmeträgeröl-Kreislaufes Möglichkeiten der Nutzung der freigesetzten thermischern Energie. In der vorliegenden Arbeit wird die Energienutzung nach der Verbrennung lediglich in Form eines nicht näher spezifizierten Wärmetauschers implementiert.

Abbildung 4-2 zeigt eine Schnittdarstellung der Brennkammer, in der die beschriebenen Charakteristika deutlich werden. Zusätzlich enthält diese Darstellung auch eine Detailansicht der Primärdüsen. Die Brennkammer mit einer Leistung von 2,18 MW_{th} enthält sechs Primärdüsen, wobei die obere Düsenreihe zur Verbesserung der Strahlverteilung auf der Ballenoberfläche einen 12°-Knick nach unten aufweist (die Freistrahlen erfahren aufgrund des Verbrennungsgases aus der Rostzone eine Ablenkung nach oben). Die zwei linken sowie die zwei rechten Primärdüsen enthalten weiters Drallkörper, die die Freistrahlen jeweils in eine leichte gegenläufige Drehung versetzen. Die beiden mittleren Düsen sind drallfrei. Alle Primärdüsen sind darüber hinaus zur Erhöhung des Impulses der Freistrahlen mit einer Prallplatte ausgestattet, die 50 % des Rohrquerschnittes abdeckt. Der Balleneinschub weist von seiner Decke her eine Einschnürung auf, die eine verbesserte Abdichtung zwischen Wandblech und Ballen herbeiführen und damit zu einer Minimierung der Rückbrandgefahr beitragen soll. Dies wird durch eine Kühlung des Einschubkanals durch mantelseitige Umströmung mit Primärgas unterstützt. In der vorliegenden Arbeit sollen keine komplett bemaßten Konstruktionsunterlagen sondern lediglich zur Orientierung die wichtigsten Abmessungen der Brennkammer mit einer Brennstoffwärmeleistung von 2,18 MW_{th} gegeben werden. Die Höhe der Brennkammer beträgt knapp 3,85 m von der Rostoberfläche bis zur Heißgasleitung, der Durchmesser des äußeren Mantels beträgt 2,4 m. Die Brennkammerseele weist einen Querschnitt von 1,5 x 1,5 m auf. Aus diesen Daten ergeben sich ein heißes Brennkammervolumen von etwa 6,159 m^3 und ein spezifisches Brennkammervolumen von 2,81 m^3/MW_{th}. Die Querschnittsfläche des Ballens beträgt wie bereits erwähnt 0,84 m^2 und die oberflächenspezifische Wärmeleistung weist entsprechend einen Wert von 2,6 MW_{th}/m^2 auf. Der Durchmes-

ser der Rostfeuerung beträgt 0,644 m und ergibt eine aktive Rostoberfläche von 0,33 m^2. Bei einer rechnerischen Rostbelastung von 844 kW_{th} ergibt sich auch für die spezifische Wärmeleistung der Rostfeuerung ein Wert von 2,6 MW_{th}/m^2. Eine Zusammenfassung der wesentlichsten kennzeichnenden Parameter des beschriebenen Feuerungskonzeptes ist in Tabelle 4-1 dargestellt.

Tabelle 4-1: Kennzeichnende Parameter der untersuchten innovativen Verbrennungstechnologie

Parameter	Wert im Auslegungszustand
Brennstoffwärmeleistung	2,18 MW_{th}
Wärmetauscherleistung	1,75 MW_{th}
globale Luftverhältniszahl	1,4
globales Rezirkulationsverhältnis	1,17
Ballenquerschnittsfläche	0,84 m^2
Hauptabmessungen aussen (Breite x Tiefe x Höhe)	2,4 x 2,4 x 3,85 m
Hauptabmessungen Brennkammerseele	1,5 x 1,5 x 3,85 m
heißes Gesamtvolumen	6,159 m^3
heißes Volumen Primärzone	2,714 m^3
heisßes Volumen Sekundärzone	2,634 m^3
heißes Volumen Rostzone	0,811 m^3
spezifisches Brennkammervolumen	2,81 m^3/MW_{th}
aktiver Querschnitt Primär- und Sekundärzone	2,25 m^2
aktive Rostoberfläche	0,33 m^2
spezifische Rostbelastung	2,6 MW_{th}

Die in der vorliegenden Arbeit dargestellten Simulationsrechnungen trugen maßgeblich zu einer Optimierung des Brennkammerdesigns bei, der überwiegende Teil der in Kapitel 9 präsentierten Ergebnisse beziehen sich auf die 2. Generation der Brennkammer. Abbildung 4-3 zeigt im Vergleich dazu die ursprüngliche Auslegung (1. Generation) des Verbrennungsapparates. Aufgrund technischer und finanzieller Rahmenbedingungen konnten nur geringfügige Verbesserungsmaßnahmen auch umgesetzt werden, die sich im Wesentlichen auf die Primärluftdüsen, den Strahlungsschirm sowie die Konstruktion der Rostfeuerung beschränkten. Basierend auf den Erfahrungen mit der 2. Generation wurde dann eine vollständig neue Konstruktion vorgeschlagen, die in Form einer kleineren Brennkammer mit einer Leistung von 480 kW_{th} auch realisiert wurde (3. Generation). Ein Schnittbild dieser Variante ist ebenfalls in Abbildung 4-3 dargestellt (Kuttner et al., 2010). Neben der verfahrenstechnischen Maßstabsreduktion sind die wesentlichsten Änderungen der Sekundärzone (Gasnachverbrennung) zuzuordnen. Die Dosierung von sekundärer Verbrennungsluft geschieht nur mehr auf einer Düsenebene und an dieser Stelle wird der Querschnitt der Brennkammer zur Verbesserung der Gaseinmischung deutlich eingezogen („Wespentaille"). Durch eine wesentliche Verlängerung der Verweilzeit in der Sekundärzone wird der Gasausbrand signifikant verbessert und es kann eine Betriebsweise mit noch stärkerer Reduktion der NO_x-Emissionen gefahren werden. Auch die spezifische Rostfläche der Feststoff-Nachverbrennungszone wurde merklich vergrößert, sodass bei gleichbleibender Grundfläche des Verbrennungsapparates ein deutlich besserer Ausbrand der Aschefraktion sichergestellt werden kann. Die Simulationen an dieser Geometrie sind allerdings nicht Gegenstand der vorliegenden Arbeit.

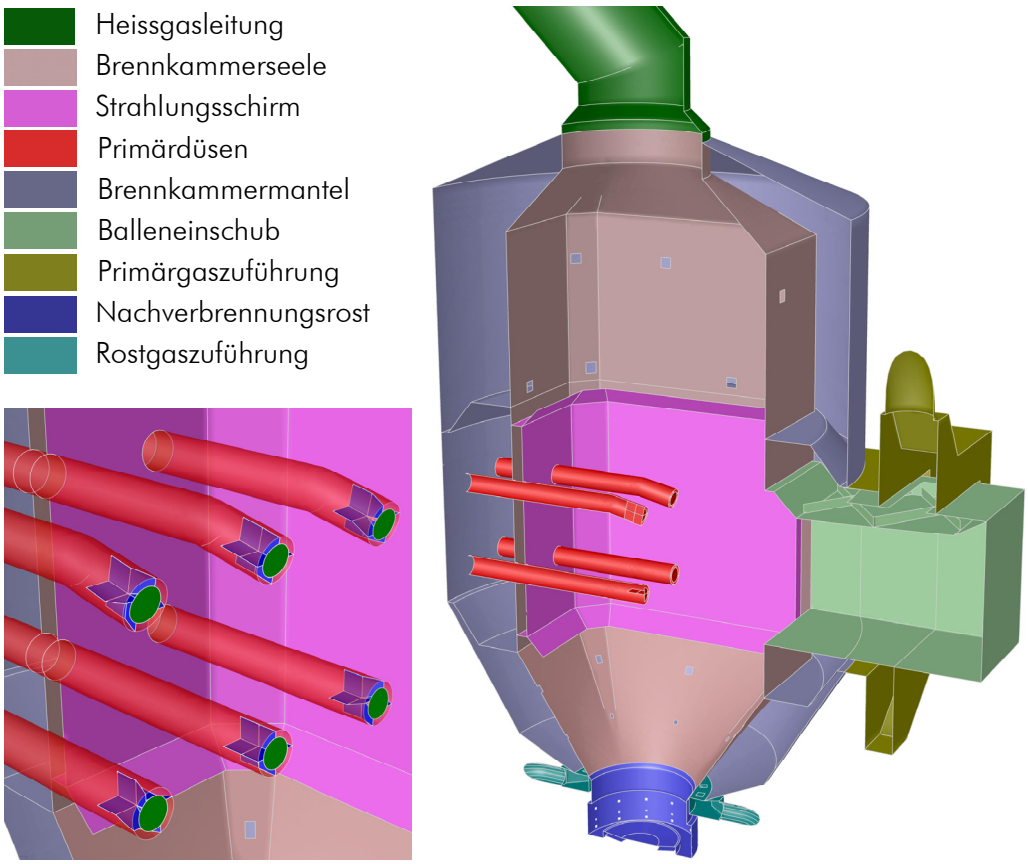


Abbildung 4-2: Schnittdarstellung des Verbrennungsapparats und Detailansicht der Primärdüsen (Brennkammer der 2. Generation, Leistung 2,18 MW_{th})

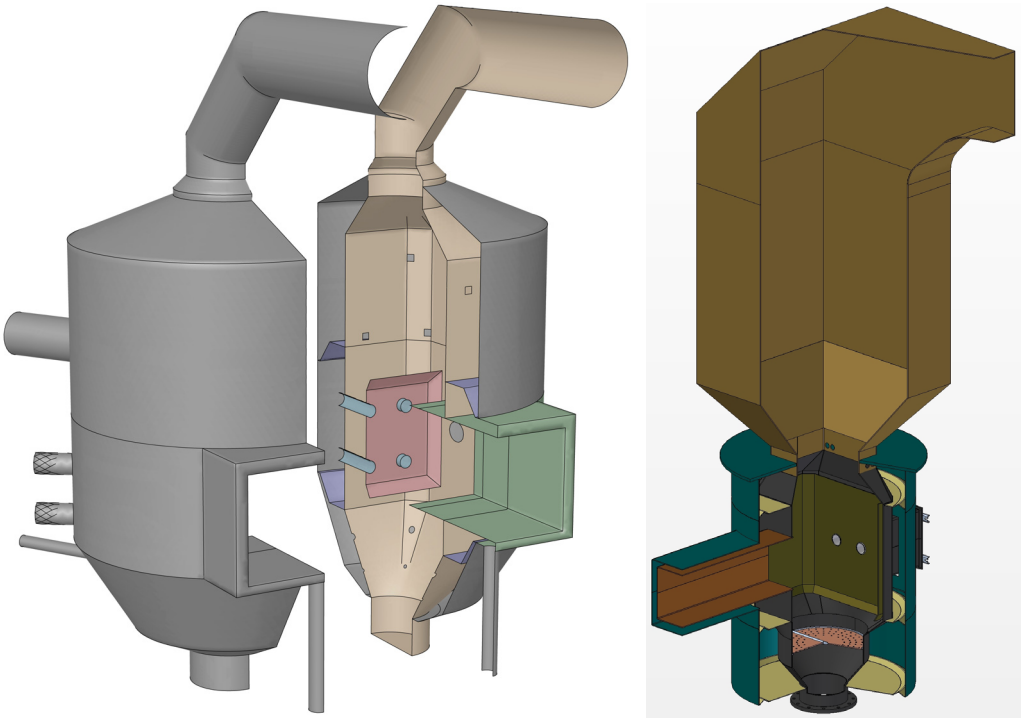


Abbildung 4-3: Schnittdarstellungen der Brennkammern unterschiedlicher Entwicklungsstufen und Leistungsklassen (links: 1. Generation, 2,18 MW_{th}; rechts: 3. Generation, 480 kW_{th})

Die Brennkammern der 1. und der 2. Generation wurden in vollem Maßstab (2,18 MW_{th}) in einer Versuchsanlage realisiert und an zwei verschiedenen Standorten über einen Zeitraum von fast zwei Jahren betrieben und wissenschaftlich begleitet. Die ersten experimentellen Arbeiten fanden am Standort des Kraftwerks Wien-Simmering statt und zielten auf eine grobe Evaluierung der Verbrennungstechnologie, Abschätzung der Größen wesentlicher Betriebsparameter sowie eine Evaluierung und erste Optimierung der Brennkammer-Geometrie ab. Die Brennkammer-Geometrie während der durchgeführten Untersuchungen entsprach im Wesentlichen der 1. Generation. Die zonale Aufteilung des Ofens sowie die Gasbeauschlagung wurden konzeptkonform umgesetzt, als Wärmesenke wurde ein Quenchkühler mit Wasserdirekteinspritzung eingesetzt. Zwei Fotos dieser Versuchsanlage sind Abbildung 4-4 zu entnehmen.

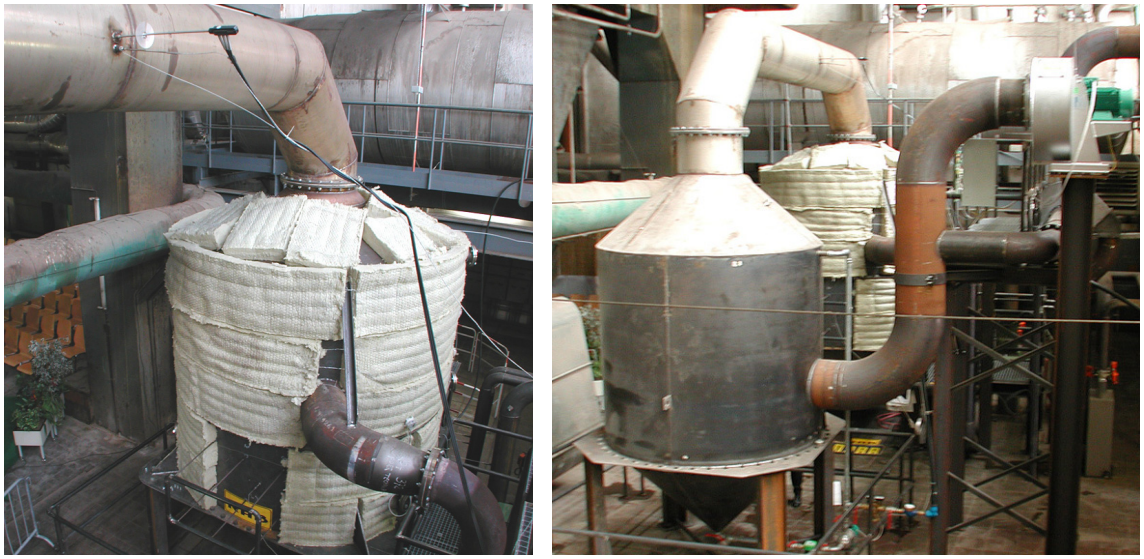


Abbildung 4-4: Versuchsanlage am Standort KW Simmering (links: Außenansicht Brennkammer und Heißgasleitung; rechts: Überblick mit Quenchkühler im Vordergrund)

Nach Abschluss der experimentellen Arbeiten an der Versuchsanlage in Wien-Simmering wurde die Brennkammer konstruktiv adaptiert und als 2. Generation am Standort Dürnkrut in Niederösterreich implementiert. Die Brennkammer war hier in einer kompletten Pilotanlage mit Dampfkreislauf, Stromproduktion durch Dampfmotor, Wärmeauskopplung für ein Nahwärmenetz, Rauchgasreinigungsstrang (Zyklon und Tuchfilteranlage) sowie komplexem Balleneinschubsystem und Ballenlager integriert. Diese Anlage wurde zur Demonstration der Technologie über längere Zeiträume, zur weiteren Optimierung wesentlicher Anlagenparameter sowie zur Entwicklung eines adäquaten Automatisierungssystems betrieben.

Abbildung 4-5 zeigt ein Panoramafoto der Kesselhalle dieser Pilotanlage. Abbildung 4-6 zeigt das rein elektrisch betriebene Balleneinschubsystem sowie die Kopfumlenkung der Brennkammer und die Heißgasleitung zum Dampfkessel. Der wissenschaftlich-experimentelle Betrieb der beiden Anlagen lieferte wertvolle Daten zur Validierung und Optimierung der in der vorliegenden Arbeit entwickelten Modelle. Die solchermaßen geschärften Ansätze unterstützten umgekehrt die Weiterentwicklung der Brennkammergeometrie und der Betriebsparameter der Anlage. Zunächst konnte aus den experimentellen Arbeiten sowie aus den Erkenntnissen der TGA-Untersuchungen eine ungefähre Abbrandgeschwindigkeit des Ballens abgeschätzt werden. Diese Abbrandgeschwindigkeit ist sehr wesentlich abhängig von der Intensität der Anströmung (also dem Volumenstrom des Frischluft/Rezirkulationsgas-

Gemisches) sowie vom Sauerstoffgehalt des der Primärzone zugeführten Gases (also dem Verhältnis aus Frischluft und Rezirkulationsgas). Für das vorliegende Verbrennungskonzept kann eine maximale Abbrandgeschwindigkeit von etwa 6 cm/min für einen stabilen Dauerbetrieb angegeben werden, sodass bei Ballen mit 180 cm Länge etwa alle 30 Minuten ein neuer Ballen zugeführt werden muss. Die Querschnittsfläche des Ballens legt dann nur noch die Anlagenleistung fest (zwei Ballen nebeneinander bedeuten doppelte Anlagenleistung bei gleicher Einschubgeschwindigkeit). Auf diese Art und Weise kann die erforderliche Querschnittsfläche beziehungsweise die Anlagengröße bei vorhandenem Ballenmaß festgelegt werden.

Abbildung 4-5: Pilotanlage am Standort Dürnkrut (von rechts nach links: Brennkammer, Umlenkung der Heißgasleitung, Dampfkessel, Dampfarmaturen, Dampfmotor, Rauchgasfilter), *Quelle: Greenpower Anlagenerrichtungs- und Betriebs-GmbH*

Abbildung 4-6: Pilotanlage am Standort Dürnkrut (links: Balleneinschubsystem; rechts: Kopf der Brennkammer)

Weiters wurden repräsentative Versuchsfahrten ausgewählt, die sich aufgrund des Lastpunktes und der konkreten Betriebsweise sowie aufgrund der vorhandenen Datenqualität und –konsistenz für eine Bilanzierung eigneten. Während eines stationären Betriebszustandes wurden dann Mittelwerte der wesentlichen Betriebsparameter gebildet, die die Grundlage für weiterführende CFD-Simulationen bildeten. In Tabelle 4-2 werden diese Ergebnisse für eine Versuchsfahrt an der Anlage in Simmering (SI_ZF42, Bilanzzeitraum 177 Minuten) sowie eine Versuchsfahrt an der Anlage in Dürnkrut (DK_ZF25, Bilanzzeitraum 152 Minuten) zusammengefasst. Ein Volllast-Betriebszustand sowie eine Zwei-Drittel-Teillast werden in dieser Tabelle mit dem Auslegungszustand verglichen. Heißgas- und Rauchgasvolumenstrom konnten an der Anlage in Dürnkrut zum Zeitpunkt der Versuchsdurchführung nicht erfasst werden,

weshalb diese Werte rechnerisch ergänzt werden mussten. Die Gehalte an Kohlenmonoxid und Stickstoffoxiden im Rauchgas werden im Auslegungszustand nicht festgelegt, hier sind in der Tabelle die behördlich vorgeschriebenen Emissionsgrenzwerte angeführt.

Tabelle 4-2: Wesentliche Ergebnisse zweier repräsentativer Versuchsfahrten an der Verbrennungs-Pilotanlage im Vergleich zum Auslegungszustand

Parameter	Einheit	SI_ZF42	DK_ZF25	Auslegung
Lastpunkt	%	109	64	100
Luftverhältniszahl	-	1,52	1,95	1,40
Rezirkulationsrate	-	0,86	0,59	1,17
Sekundärzone				
Frischluftstrom	Nm^3/h	1.633	97	1.538
Rezirkulationsgasstrom	Nm^3/h	770	631	810
Blechtemperatur	°C	611	602	-
Primärzone				
Frischluftstrom	Nm^3/h	935	2.014	720
Rezirkulationsgasstrom	Nm^3/h	1.294	469	1.484
Blechtemperatur	°C	346	154	-
Rostzone				
Frischluftstrom	Nm^3/h	653	1.285	715
Rezirkulationsgasstrom	Nm^3/h	870	909	1.184
Blechtemperatur	°C	468	524	-
Heißgasstrom	Nm^3/h	6.576	(5.859)	6.856
Heißgastemperatur	°C	742	747	756
Rauchgasstrom	Nm^3/h	3.222	(3.850)	3.377
Rauchgastemperatur	°C	178	149	160
Rosttemperatur	°C	779	963	800
O_2-Gehalt Rauchgas	vol%, trocken	6,87	11,02	5,28
CO-Gehalt Rauchgas	mg/Nm^3, trocken	158	239	(250)
NO_x-Gehalt Rauchgas	$mgNO_2/Nm^3$, trocken	175	469	(250)

Der Bilanzzeitraum der Versuchsfahrt SI_ZF42 stimmt sehr gut mit dem Auslegungszustand überein. Die Luftverhältniszahl ist etwas zu hoch, die Rezirkulationsrate entsprechend etwas zu niedrig. Aus diesem geringfügig unterschiedlichen Betriebszustand ergeben sich auch die abweichenden Volumenströme von Frischluft und Rezirkulationsgas in den drei Verbrennungszonen. Hier ist allerdings noch die Messungenauigkeit der Volumenstrommessung zu berücksichtigen, die in dieser Implementierung mit etwa 5 % angegeben werden kann. Sehr wesentlich ist auch die Tatsache, dass die vorgeschriebenen Emissionsgrenzwerte sehr bequem eingehalten werden können. Im Gegensatz hierzu stellt der ausgewertete Bilanzzeitraum der Versuchsfahrt DK_ZF25 einen überstöchiometrischen Teillastbetrieb dar, der die Vorzüge der gestuften Verbrennung sehr gut erkennen lässt. In Primär- und Rostzone werden aufgrund der hohen Luftverhältniszahl kaum unverbrannte Gase wie Kohlenmonoxid oder verschiedene Kohlenwasserstoffe gebildet, sodass die Gasnachverbrennungszone weitgehend inaktiv geschalten ist (*Düsenbetrieb*). Das Resultat dieses Betriebs ist ein deutlich zu hoher Gehalt an Stickoxiden im Rauchgas. Die hohe Temperatur in der Rostzone (Gas und

Wand) kombiniert mit hohen Gasvolumenströmen lässt auf eine momentan sehr hohe Rostbelastung schließen, die aufgrund der damit reduzierten Gasverweilzeit auch zu einer Erhöhung der Kohlenmonoxidkonzentration im Rauchgas führt. Ein solcher Betriebszustand ist typisch für einen Anfahrvorgang zur Temperierung der Verbrennungsanlage. In Summe zeigen die Versuchsergebnisse klar, dass das Verbrennungskonzept mit den im Rahmen der Prozesssimulation avisierten Betriebsparametern in einer realen Großanlage sehr gut umsetzbar ist. Die auftretenden Abweichungen zwischen Experiment und Simulation beziehungsweise Auslegungszustand sind gut erklärbar. Die gesammelten Messdaten sind für eine Validierung der entwickelten Modelle der Globalbilanzierung und der numerischen Strömungssimulation von großer Bedeutung und hoher Qualität.

Aufgrund der geringen Masse besitzt der Verbrennungsapparat wie bereits eine hohe Dynamik, weshalb das instationäre Verhalten für die Prozessführung von großer Bedeutung ist. Die dezentrale Größe des Anlagenkonzepts und die Konstruktion der Brennkammer erlauben in gewissem Umfang einen Start-Stopp-Betrieb der Verbrennungsanlage, weswegen auch der Anfahrvorgang und die Temperierung für den Prozess relevant sind.

Abbildung 4-7 zeigt Momentaufnahmen der brennenden Ballenoberfläche während eines solchen Anfahr- und Hochfahrvorganges.

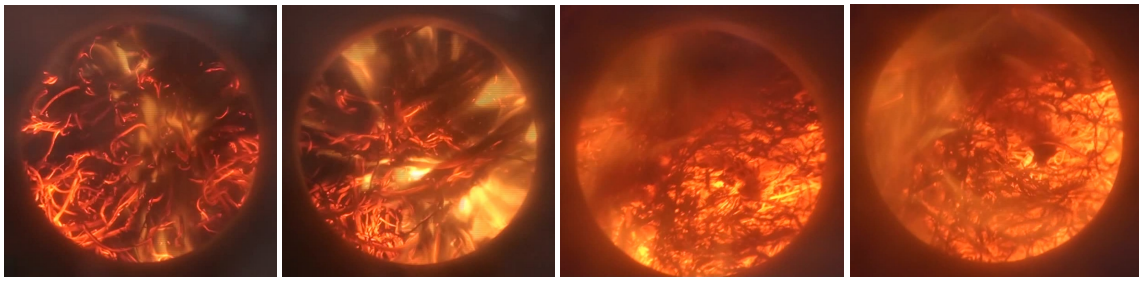


Abbildung 4-7: Momentaufnahmen der brennenden Ballenoberfläche im Zuge des Anfahrvorganges der Verbrennungsanlage

Abbildung 4-8 zeigt den zeitlichen Verlauf der wesentlichsten Gas- und Brennkammertemperaturen während des knapp fünfstündigen Versuchsbetriebs SI_ZF42. Etwa 10 Minuten, nachdem die Unterschubfeuerung (Rost) gezündet wurde, zündet instantan auch der Ballen, was in einem sprungartigen Anstieg der Heißgastemperatur zu erkennen ist. Dann dauert es weitere 75 Minuten (etwa bis zur Versuchsminute 100), bis die Brennkammer auf Betriebstemperatur ist und der reguläre Betrieb (*Shiftbetrieb*) eingeleitet werden kann.

Während des Regelbetriebes durchbrechen die Phasen des Ballennachladens den kontinuierlichen Prozess. In Abbildung 4-8 sind diese Phasen grau hinterlegt und zeigen ihren größten Einfluss auf die Rauchgastemperatur. Muss ein Ballen nachgeladen werden (wie erwähnt alle 30 Minuten), so wird der Vorschub gestoppt, der Einschubstempel vollständig zurückgefahren, ein frischer Ballen über ein Schleusensystem eingelegt und dieser mit dem Einschubstempel auf Kontakt nach vorne eingeschoben. Während dieses vier- bis fünfminütigen Vorgangs erfolgt praktisch keine Brennstoffzuführung, wesentliche Gasvolumenströme werden reduziert, die Ballenoberfläche brennt geringfügig in den Einschubkanal zurück (etwa 5 cm) und die abgegebene Heizleistung sinkt stark ab. Diese sehr nachteilige Prozedur war an beiden Anlagenstandorten einzuhalten und führte zu einem stark instationären Verhalten des Anlagenbetriebs. Für einen kommerziellen Langzeitbetrieb der Verbrennungsanlage ist

der Einschub zu adaptieren und ein sekundäres Transportsystem anzuordnen, welches auch während der Nachladephase des Hauptstempels einen Vorschub des gerade brennenden Ballens sicherstellt. Noch deutlicher ist der instationäre Betrieb in Abbildung 4-9 zu erkennen, in der die zeitlichen Verläufe der analysierten Gasbestandteile (Sauerstoff, Kohlenmonoxid sowie Stickstoffmonoxid und Stickstoffdioxid) dargestellt sind. Stickstoffoxide werden als NO_2 angegeben und gemeinsam mit Kohlenmonoxid auf einen Sauerstoffgehalt von 13 % hochgerechnet. In dieser Form sind die tatsächlichen Emissionen mit den Emissionsgrenzwerten von je 250 mg/Nm³, die als strichlierte Gerade ebenfalls im Diagramm eingetragen sind, zu vergleichen.

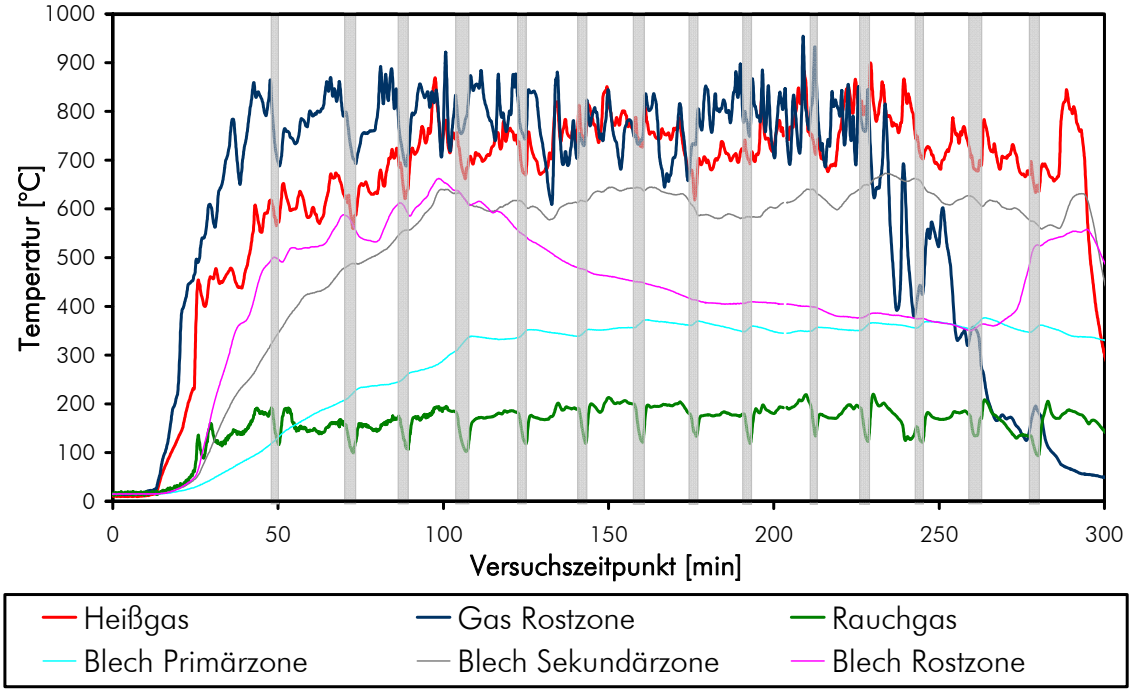


Abbildung 4-8: Verläufe der relevantesten Gas- und Brennkammertemperaturen während der repräsentativen Versuchsfahrt SI_ZF42

Abbildung 4-9 zeigt, dass der Emissionsgrenzwert für Stickstoffoxide erst mit Erreichen der gestuften Verbrennung nach Versuchsminute 100 eingehalten werden kann, dann aber im Wesentlichen konstant während des gesamten Betriebes sehr deutlich. Die Kohlenmonoxidemissionen zeigen immer wieder deutlich ausgeprägte Spitzen, die vorwiegend auf die diskontinuierlichen Ballennachladephasen zurückgeführt werden können. Hier kommt es immer wieder vor, dass große Teile des Ballens aus dem Einschubkanal auf den Nachverbrennungsrost herabstürzen und damit sprungartig deutlich mehr Brennstoff verfügbar und in der Folge ein ausgeprägter Sauerstoffmangel zu verzeichnen ist. Durch eine kontinuierliche Ballenzuführung kann dieses Problem zumindest deutlich reduziert werden. In den emissionsrelevanten 30-Minuten-Mittelwerten verschwinden diese Spitzen aber, sodass die Emissionsgrenzwerte als Ganzes deutlich unterschritten werden können.

Sehr wertvolle Informationen liefert auch die Analyse der ausgetragenen Rostaschefraktion, welche für beide präsentierten Versuchszeiträume durchgeführt wurde. Dabei zeigt sich, dass kein vollständiger Ausbrand der Bodenasche erzielt werden kann und damit nennenswerte Gehalte an brennbaren Komponenten (Koks) vorliegen, die zu einer Wirkungsgradreduktion beitragen. Die Analyse der Bodenasche von der Versuchsanlage in Simmering ergibt

einen Inertstoffanteil von lediglich 36 wt% und entsprechend einen Glühverlust von 64 wt%, der in einem oberen Restheizwert von 16,4 MJ/kg resultiert (Padouvas, 2003a). Die Elementarbilanz weist dabei Kohlenstoff als dominierende nichtinerte Komponente aus (91 wt%). Für einen effizienten Betrieb und eine sinnvolle Verwertbarkeit des Aschestromes ist dieser Kohlenstoffgehalt deutlich zu hoch. Die Analyse der Bodenasche von der Pilotanlage in Dürnkrut zeigt bereits eine deutliche Verbesserung des Ausbrandgrades und einen Glühverlust von 10 wt% (Padouvas, 2004). Diese Größenordnung ist für technische Biomasseverbrennungssysteme durchaus nicht unüblich (Kaltschmitt et al., 2001).

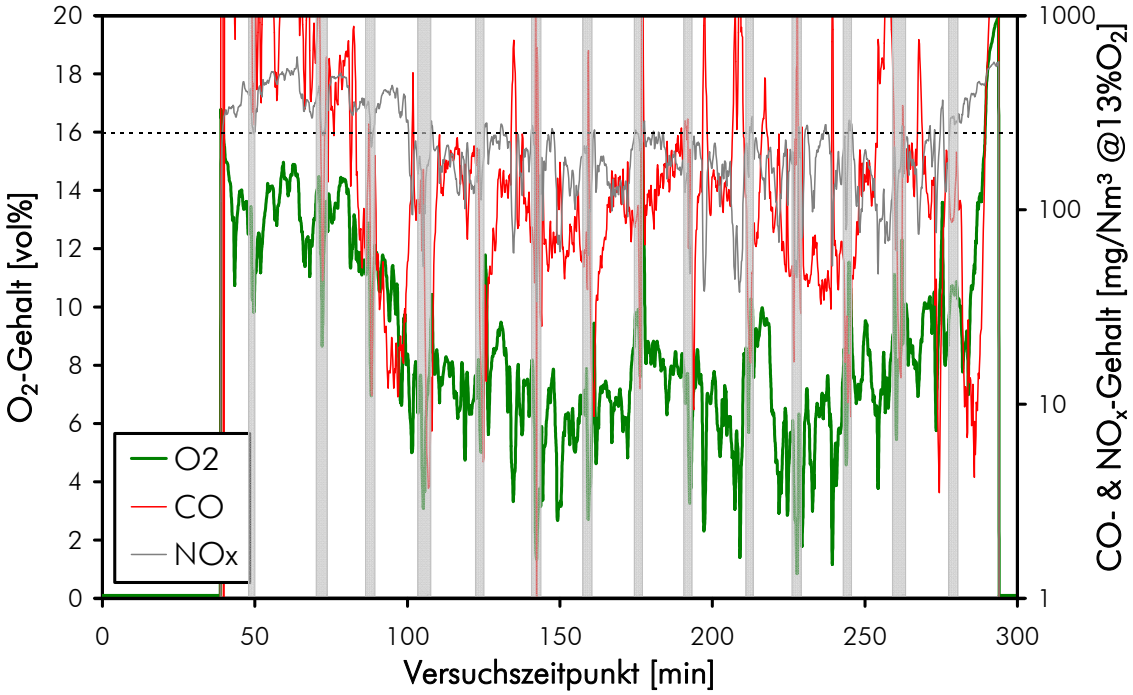


Abbildung 4-9: Verläufe der Gehalte an O2, CO und NOx während der repräsentativen Versuchsfahrt SI_ZF42

Aus den aufgezeichneten Massenströmen für die Aschefraktionen am Bodenaustrag, am Zyklon sowie am Tuchfilter kann unter Verwendung des Ballenmassenstroms und einer mittleren Feuchte ein Sankey-Diagramm für die Massenbilanz der festen Komponenten um die Brennkammer erstellt werden. Dieses Diagramm ist in Abbildung 4-10 dargestellt. Aus dieser Darstellung gehen die relative Bedeutung und die Zusammensetzung der einzelnen Aschefraktionen sehr gut hervor. Unter Annahme eines Heizwertes für die organische Restfraktion in den Ascheströmen kann aus dieser Massenbilanz auch eine Energiebilanz für den Versuchsbetrieb ermittelt werden. Auch die Energiebilanz wurde in Form eines Sankey-Diagramms erstellt und ist Abbildung 4-11 zu entnehmen.

Der Strahlungswärmeverlust konnte nicht experimentell bestimmt werden, sondern wurde nach üblichen Regeln der Technik abgeschätzt (Günther, 1984; Marutzky et al., 1999; Kaltschmitt et al., 2001; Böhmer et al., 2003; Joos, 2006). Die fühlbare Wärme im Rauchgas enthält auch die durch Kondensation der Rauchgasfeuchte rückgewinnbare Wärmemenge. Die relativ hohe Rauchgastemperatur und der hohe Wassergehalt im Gas resultieren in einem thermischen Anlagenwirkungsgrad von 71 %. Die brennbaren Anteile in den Ascheströmen sind zwar durchaus nennenswert, bedeuten aber keinen signifikanten Wirkungsgradverlust.

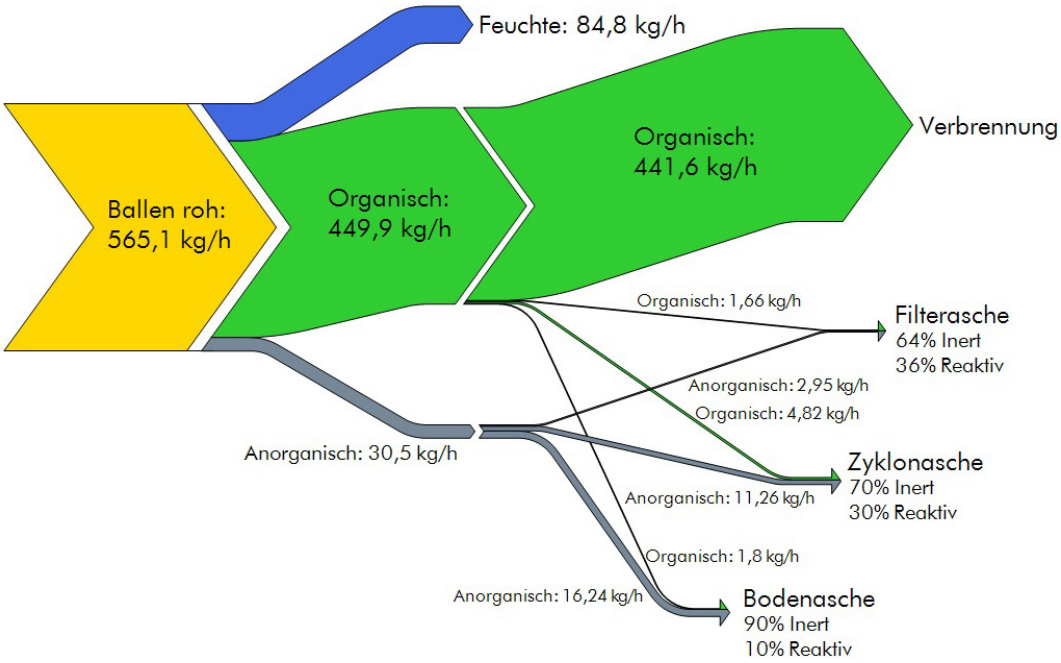


Abbildung 4-10: Experimentell erarbeitete Massenbilanz für die Feststoffphase während einer repräsentativen Versuchsfahrt am Standort Dürnkrut

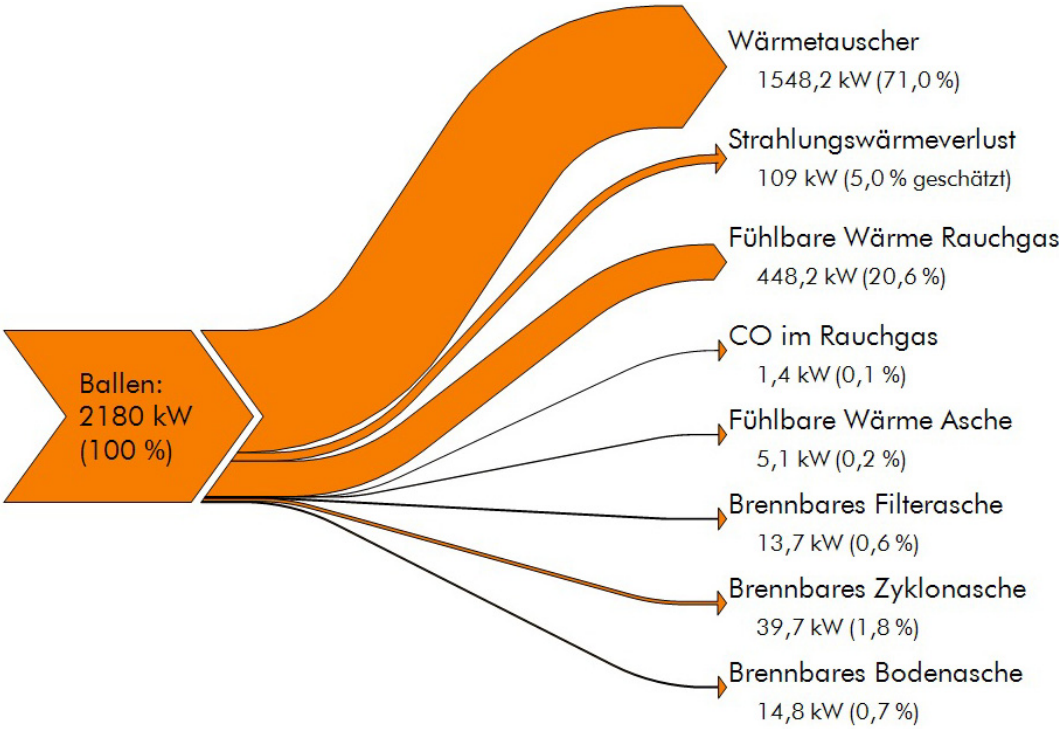


Abbildung 4-11: Energiebilanz für eine repräsentative Versuchsfahrt am Standort Dürnkrut akkumuliert aus experimentellen und theoretischen Daten

Die experimentellen Ergebnisse dieses Kapitels liefern in Summe einerseits die erforderlichen Randbedingungen für die durchzuführenden Simulationen und andererseits eine sehr gute Möglichkeit, die Vorhersagen der verschiedenen implementierten Modellansätze auf ihre physikalische Relevanz zu untersuchen.

5 Verbrennungsrechnung und Globalbilanzierung

Für die verfahrenstechnische Grundauslegung eines Verbrennungsprozesses ist die Globalbilanzierung der wesentlichen Prozessströme unter Anwendung einer mehr oder weniger detaillierten Verbrennungsrechnung von wesentlicher Bedeutung. Darüber hinaus ist die Anwendung von numerischer Strömungssimulation nur unter Verwendung sinnvoller Randbedingungen möglich. Diese Randbedingungen können mit wesentlich geringerem Rechenaufwand mit den Methoden der Prozesssimulation bereitgestellt werden. Die Parametervariation zur Erarbeitung der optimalen Betriebsparameter der Gesamtanlage kann nur mit der Globalbilanzierung mit sinnvollem Aufwand durchgeführt werden. Zur Minimierung des rechentechnischen Aufwandes sollte die numerische Strömungssimulation nur für einen bereits vorab eingegrenzten Bereich möglicher Betriebspunkte eingesetzt werden. Damit bildet die Prozesssimulation der Gesamtanlage unter Anwendung von Globalbilanzierung und Verbrennungsrechnung den ersten wesentlichen Schritt bei der Auslegung jeder verbrennungstechnischen Anlage.

In diesem Kapitel werden die in der vorliegenden Arbeit entwickelten und eingesetzten Modelle und Modellimplementierungen dargestellt, die für die Prozesssimulation des Gesamtverbrennungskreislaufes erforderlich sind. Der wichtigste Prozessschritt ist im konkreten Fall die Verbrennung selbst, welche mit ausreichender Genauigkeit modelliert werden muss. Es wird hier ein zweistufiger Modellierungsansatz präsentiert, der für das verfahrenstechnische Basic Engineering von Biomasseverbrennungsanlagen eingesetzt werden kann. Im ersten Schritt wird die Verbrennungskammer als Black Box betrachtet und vollständige Verbrennung vorausgesetzt. Damit kann die Gesamtanlage mit relativ geringem Aufwand bilanziert, die wesentlichen Prozessströme charakterisiert sowie die genannten Randbedingungen für die numerische Strömungssimulation zur Verfügung gestellt werden. Im zweiten Schritt wird dann die Brennkammer in drei Verbrennungszonen aufgeteilt, die dann auch, wie im dargestellten Verbrennungskonzept gefordert, zum Teil unterstöchiometrisch betrieben werden können. Dadurch werden weitere wesentliche (theoretische) Betriebsparameter innerhalb der Brennkammer zugänglich und können für das Anlagendesign verwendet werden. Die Ergebnisse der Simulation mit dem in diesem Kapitel dargestellten Modellkomplex werden in der Folge dann für die verfahrenstechnische Grundauslegung der Verbrennungsanlage herangezogen, wobei nicht nur der optimale Betriebspunkt gefunden werden soll, sondern auch noch wertvolle Informationen für das Automatisierungssystem der realen Anlage im Falle der Schwankung wesentlicher Betriebsparameter erstellt werden sollen.

5.1 Verbrennung - Einzonenmodell

Bei der Verbrennung von fester Biomasse entstehen aus den Brennstoffbestandteilen und der Verbrennungsluft unter Freisetzung von thermischer Energie Verbrennungsgase und feste Rückstände. Um eine Brennkammer thermodynamisch beschreiben zu können, werden daher die elementare Zusammensetzung und der Heizwert des Brennstoffes sowie die Kenntnis der formelmäßigen Zusammenhänge zwischen Eingangs- und Ausgangszuständen benötigt. Diese Zusammenhänge werden im Folgenden dargestellt, wobei die Brennkammer als verfahrenstechnische Grundeinheit betrachtet wird, welche um die in Abbildung 5-1 dargestellte Bilanzgrenze bilanziert wird.

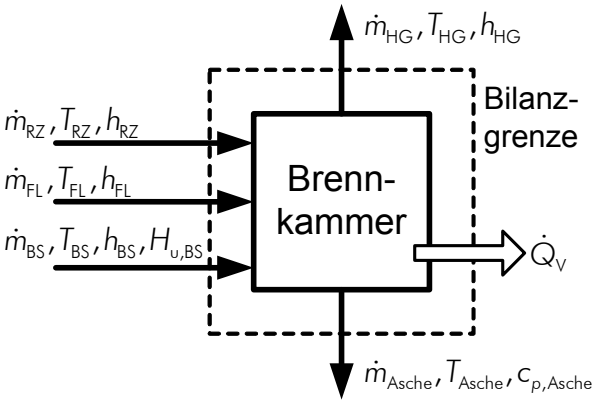


Abbildung 5-1: Brennkammer als verfahrenstechnische Grundeinheit zur Bilanzierung

In der vorliegenden Arbeit wird für die Globalbilanzierung des Verbrennungsapparates im Rahmen des Einzonenmodells davon ausgegangen, dass die Verbrennung vollständig abläuft, das heißt kein CO entsteht und auch die abgeführte Asche keine brennbaren Bestandteile mehr enthält. Die Bildung von NO_x in der Brennkammer wird im Zuge der Globalbilanzierung mit einem sehr vereinfachten Modell abgeschätzt (Kerschbaum et al., 2004). Die Summe aller vorhandenen Stickstoffoxide wird in der vorliegenden Arbeit als NO_2 angegeben. Weiters wird angenommen, dass der gesamte Schwefelanteil des Brennstoffes als Schwefeldioxid mit dem Heißgas die Brennkammer verlässt und kein Schwefel in die Asche eingebunden wird (worst-case-scenario). Die durch diese Annahmen in die thermodynamische Betrachtung des Verbrennungsvorganges eingeschleppte Ungenauigkeit hat auf die Ergebnisse in diesem Teil aber vernachlässigbaren Einfluss. Unter diesen Voraussetzungen lässt sich die Verbrennung mit den folgenden Globalreaktionen beschreiben:

$$C + O_2 \rightarrow CO_2 \tag{5.1}$$

$$H + \frac{1}{4}O_2 \rightarrow \frac{1}{2}H_2O \tag{5.2}$$

$$N + K_{NO_2,Konversion}O_2 \rightarrow K_{NO_2,Konversion}\,NO_2 + \frac{1}{2}\left(1 - K_{NO_2,Konversion}\right)N_2 \tag{5.3}$$

$$S + O_2 \rightarrow SO_2 \tag{5.4}$$

Neben der Gesamtmassenbilanz (Gleichung 5.5) gelten auch die Massenbilanzen der einzelnen beteiligten Spezies (Gleichung 5.6 bis 5.12) jeweils bezogen auf die definierte Bilanzgrenze:

$$\dot{m}_{BS} + \dot{m}_{FL} + \dot{m}_{RZ} - \dot{m}_{Asche} - \dot{m}_{HG} = 0 \tag{5.5}$$

$$\dot{m}_{BS} w_{C,BS} M_{CO_2} / M_C + \dot{m}_{RZ} w_{CO_2,RZ} - \dot{m}_{HG} w_{CO_2,HG} = 0 \tag{5.6}$$

$$\dot{m}_{BS} w_{H_2O,BS} + \frac{1}{2} \dot{m}_{BS} w_{H,BS} M_{H_2O} / M_H + \dot{m}_{RZ} w_{H_2O,RZ} - \dot{m}_{HG} w_{H_2O,HG} = 0 \tag{5.7}$$

$$\begin{aligned} &\dot{m}_{BS} w_{N,BS} + \dot{m}_{FL} w_{N_2,FL} M_N / M_{N_2} + \dot{m}_{RZ} \left(w_{N_2,RZ} M_N / M_{N_2} + w_{NO_2,RZ} M_N / M_{NO_2} \right) \\ &- \dot{m}_{HG} \left(w_{N_2,HG} M_N / M_{N_2} + w_{NO_2,HG} M_N / M_{NO_2} \right) = 0 \end{aligned} \tag{5.8}$$

$$\dot{m}_{NO_2,Konversion} + \dot{m}_{RZ} w_{NO_2,RZ} - \dot{m}_{HG} w_{NO_2,HG} = 0 \tag{5.9}$$

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \dot{m}_{BS} w_{O,BS} M_{O_2} / M_O + \dot{m}_{FL} w_{O_2,FL} + \dot{m}_{RZ} w_{O_2,RZ} - \dot{m}_{BS} w_{C,BS} M_{O_2} / M_C \\ &- \frac{1}{4} \dot{m}_{BS} w_{H,BS} M_{O_2} / M_H - \dot{m}_{NO_2,Konversion} M_{O_2} / M_{NO_2} \\ &- \dot{m}_{BS} w_{S,BS} M_{O_2} / M_S - \dot{m}_{HG} w_{O_2,HG} = 0 \end{aligned} \tag{5.10}$$

$$\dot{m}_{BS} w_{S,BS} M_{SO_2} / M_S + \dot{m}_{RZ} w_{SO_2,RZ} - \dot{m}_{HG} w_{SO_2,HG} = 0 \tag{5.11}$$

$$\dot{m}_{BS} w_{Asche,BS} - \dot{m}_{Asche} = 0 \tag{5.12}$$

Für die Zusammensetzung aller gasförmigen Ströme gilt, dass die Summe der Massenbrüche aller enthaltenen Komponenten gleich 1 sein muss:

$$w_{CO_2} + w_{H_2O} + w_{N_2} + w_{NO_2} + w_{O_2} + w_{SO_2} = 1 \tag{5.13}$$

Für die Zusammensetzung des eingangsseitigen Brennstoffstromes gilt analog, dass die Summe der Massenbrüche aller enthaltenen Komponenten gleich 1 sein muss (Gleichung 5.14). Hier ist allerdings zu berücksichtigen, dass Immediat- und Elementaranalysen üblicherweise auf den trockenen Brennstoff bezogen werden und deshalb die dort angegebenen Gehalte der Komponenten zur Verwendung in den Massenbilanzen in der hier dargestellten Variante um den Brennstoffwassergehalt korrigiert werden müssen.

$$w_{C,BS} + w_{H,BS} + w_{O,BS} + w_{N,BS} + w_{S,BS} + w_{Asche,BS} + w_{H_2O,BS} = 1 \tag{5.14}$$

Die Berechnung des aus dem Brennstoff-Stickstoff entstehenden NO_x erfolgt hierbei wie bereits erwähnt nach dem vereinfachten Modell von Kerschbaum et al. (Kerschbaum et al., 2004). Wie von Salzmann et al. (Salzmann et al., 2001) und Winter et al. (Winter et al., 1999) gezeigt, ist die Konversionsrate von Brennstoffstickstoff zu NO_x umgekehrt proportional zum Stickstoffgehalt des Brennstoffes. Der theoretisch maximal mögliche NO_x-Massenstrom aus dem Brennstoff ist also mit einem brennstoffabhängigen Konversionsfaktor abzumindern. Mit dem Stickstoffgehalt des verwendeten Brennstoffes von 1,05 wt% lässt sich

aus den genannten Arbeiten ein brennstoffbezogener Konversionsfaktor von 0,15 abschätzen. Zu einer weiteren Reduktion des NO_x-Gehaltes im Verbrennungsgas führt die Anwendung der Luftstufung, weshalb ein betriebsabhängiger Konversionsfaktor einzuführen ist. Dieser Faktor wurde von Kerschbaum et al. (Kerschbaum et al., 2004) basierend auf Feuerungsversuchen experimentell erarbeitet und validiert und ist als Funktion der globalen Luftverhältniszahl (oft auch: Luftüberschusszahl) der Verbrennungsanlage angegeben (Gleichung 5.17).

$$\dot{m}_{NO_2,\text{Konversion}} = \dot{m}_{BS} w_{N,BS} M_{NO_2} / M_N K_{NO_2,\text{Konversion}} \tag{5.15}$$

$$\dot{m}_{N_2,\text{Konversion}} = \dot{m}_{BS} w_{N,BS} M_{N_2} / M_N \left(1 - K_{NO_2,\text{Konversion}}\right) \tag{5.16}$$

$$\begin{aligned} K_{NO_2,\text{Konversion}} &= K_{NO_2,\text{Konversion,Brennstoff}} K_{NO_2,\text{Konversion,Luftstufung}} \\ &= 0{,}15\left(0{,}4845\lambda_G - 0{,}38\right) \end{aligned} \tag{5.17}$$

Wie bereits erwähnt ist zur Einstellung der Verbrennungskammertemperaturen die Rezirkulation von abgekühltem Rauchgas notwendig, wobei die Rezirkulationsrate als Verhältnis aus Rezirkulationsgasmengenstrom und Frischluftmengenstrom definiert ist. Da die Zusammensetzung beider Gasströme nicht gleich ist, sind auch deren Normdichten unterschiedlich, sodass zwischen volumetrischem (Gleichung 5.18) und massenbezogenem (Gleichung 5.19) Rezirkulationsverhältnis unterschieden werden muss.

$$R_v = \frac{\dot{V}_{RZ,STP}}{\dot{V}_{FL,STP}} \tag{5.18}$$

$$R_m = \frac{\dot{m}_{RZ}}{\dot{m}_{FL}} \tag{5.19}$$

Nun lässt sich der für die Verbrennung minimal erforderliche Sauerstoffmassenstrom (stöchiometrische Sauerstoffmenge) bezogen auf den eingesetzten Brennstoffmassenstrom in Anlehnung an Günther (Günther, 1984) und Joos (Joos, 2006) wie folgt darstellen:

$$\frac{\dot{m}_{O_2,\min}}{\dot{m}_{BS}} = M_{O_2}\left(\frac{w_{C,BS}}{M_C} + \frac{1}{4}\frac{w_{H,BS}}{M_H} + \frac{w_{N,BS}}{M_N} K_{NO_2,\text{Konversion}} + \frac{w_{S,BS}}{M_S} - \frac{w_{O,BS}}{M_O}\right) \tag{5.20}$$

Vereinfacht wird üblicherweise mit einem Luftsauerstoffgehalt von 21 vol% gerechnet (entspricht etwa 23,24 wt%), wodurch sich der minimale Luftbedarf der Verbrennung für den eingesetzten Brennstoff wie folgt ergibt:

$$\dot{m}_{FL,\min} = \frac{\dot{m}_{O_2,\min}}{0{,}2324} \tag{5.21}$$

Bei der vorliegenden Biomasseverbrennung wird dem Verbrennungsraum der Sauerstoff einerseits mittels Verbrennungsluft zugeführt (Regelfall in der Verbrennungstechnik), aber zusätzlich auch mit dem rezirkulierten Rauchgas. Beide Gasströme sind bei der Bilanzierung der Brennkammer zu berücksichtigen. Um eine möglichst vollständige Verbrennung zu erzie-

len, muss in der Verbrennungstechnik erfahrungsgemäß der Sauerstoff überstöchiometrisch, das heißt im Überschuss zur Verfügung gestellt werden. Dieser Überschuss wird durch die Luftverhältniszahl λ beschrieben. Je nach Definition der Bilanzgrenze für die Ermittlung der Luftverhältniszahl ergeben sich unterschiedliche Bestimmungsgleichungen. Wird die Bilanzgrenze wie in Abbildung 5-2 dargestellt gelegt, so ist der Rezirkulationsgasstrom nicht bilanzwirksam und man erhält eine globale Luftverhältniszahl für die gesamte Verbrennungsanlage.

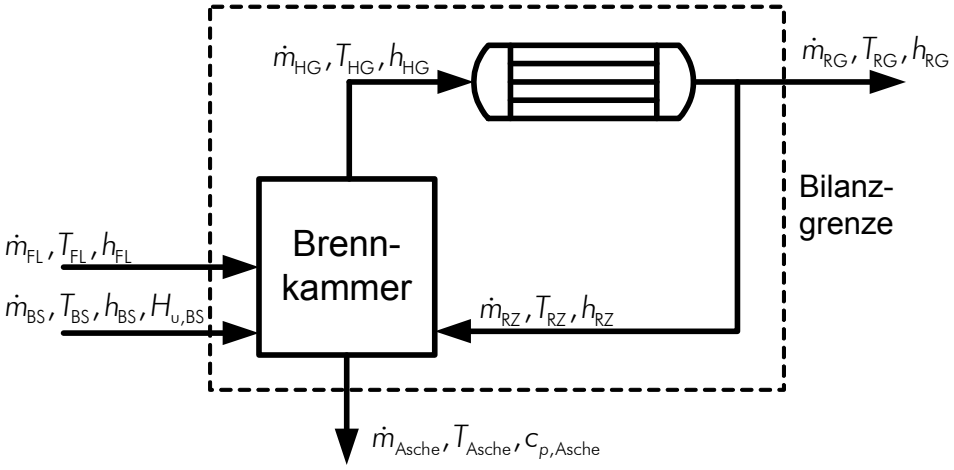


Abbildung 5-2: Definition der Bilanzgrenze zur Ermittlung der globalen Luftverhältniszahl

Wird die Bilanzgrenze allerdings wie in Abbildung 5-3 gelegt, so ist der Rezirkulationsgasstrom bilanztechnisch relevant und muss in der Berechnung der Luftverhältniszahl berücksichtigt werden. In diesem Fall erhält man eine lokale Luftverhältniszahl, die für den Extremfall der stöchiometrischen Verbrennung gleich ist der globalen Luftverhältniszahl (und gemeinsam mit dieser den Wert 1 annimmt), sich im Regelfall aber von dieser unterscheidet.

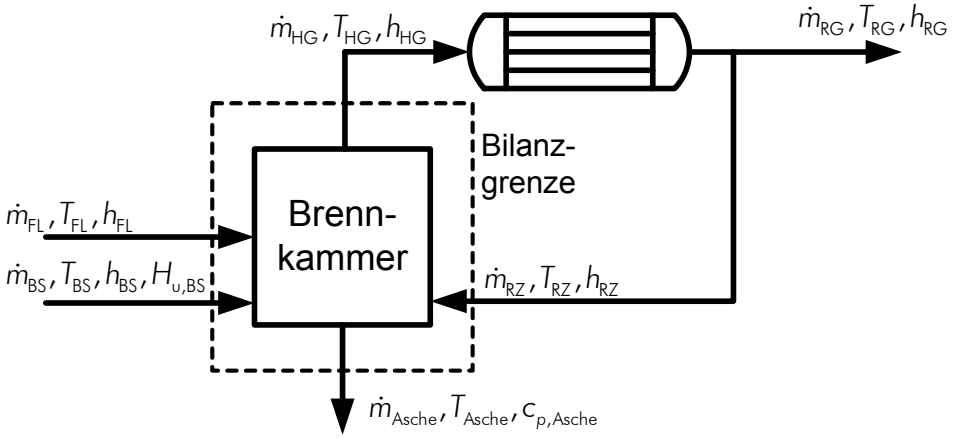


Abbildung 5-3: Definition der Bilanzgrenze zur Ermittlung der lokalen Luftverhältniszahl

Die globale Luftverhältniszahl errechnet sich nach Gleichung 5.22 (Günther, 1984; Joos, 2006). Dabei können die Luftmengenströme sowohl als Massenströme als auch als Normvolumenströme berücksichtigt werden.

$$\lambda_G = \frac{\dot{m}_{FL}}{\dot{m}_{FL,min}} = \frac{\dot{V}_{FL,STP}}{\dot{V}_{FL,min,STP}} \tag{5.22}$$

Die Berechnung der lokalen Luftverhältniszahl unter Berücksichtigung der Rauchgasrezirkulation erfolgt nach Gleichung 5.23. Da in der vorliegenden Arbeit davon ausgegangen wird, dass sich alle Gasbestandteile wie Idealgase verhalten, kann in dieser Gleichung der Volumenbruch durch den Molenbruch ersetzt werden.

$$\begin{aligned}\lambda_L &= \frac{\dot{m}_{FL} + \frac{\dot{m}_{RZ} w_{O_2,RZ}}{0{,}2324}}{\dot{m}_{FL,min}} = \frac{\dot{m}_{FL}\left(1 + \frac{R_m w_{O_2,RZ}}{0{,}2324}\right)}{\dot{m}_{FL,min}} \\ &= \frac{\dot{V}_{FL,STP} + \frac{\dot{V}_{RZ,STP} x_{O_2,RZ}}{0{,}21}}{\dot{V}_{FL,min,STP}} = \frac{\dot{V}_{FL,STP}\left(1 + \frac{R_v x_{O_2,RZ}}{0{,}21}\right)}{\dot{V}_{FL,min,STP}}\end{aligned} \tag{5.23}$$

Die Berechnung des Heißgasmassenstroms unter Berücksichtigung des betrieblichen Luftüberschusses und der rezirkulierten Rauchgasmenge wird nach folgender Gleichung durchgeführt:

$$\begin{aligned}\dot{m}_{HG} = \dot{m}_{BS}\Bigg(& w_{C,BS}\frac{M_{CO_2}}{M_C} + \frac{1}{2} w_{H,BS}\frac{M_{H_2O}}{M_H} + w_{H_2O,BS} + w_{N,BS}\frac{M_{NO_2}}{M_N} K_{NO_2,Konversion} \\ & + w_{N,BS}\frac{M_{N_2}}{M_N}\left(1 - K_{NO_2,Konversion}\right) + w_{S,BS}\frac{M_{SO_2}}{M_S}\Bigg) + \dot{m}_{FL} + \dot{m}_{RZ} - \dot{m}_{O_2,min}\end{aligned} \tag{5.24}$$

Die Zusammensetzung des austretenden Heißgasstromes (bezogen auf den feuchten Gasstrom) kann nach den Gleichungen 5.25 bis 5.30 ermittelt werden.

$$w_{CO_2,HG} = \frac{1}{\dot{m}_{HG}}\left[\dot{m}_{BS} w_{C,BS}\frac{M_{CO_2}}{M_C} + \dot{m}_{RZ} w_{CO_2,RZ}\right] \tag{5.25}$$

$$w_{H_2O,HG} = \frac{1}{\dot{m}_{HG}}\left[\dot{m}_{BS}\left(w_{H,BS}\frac{M_{H_2O}}{M_H}\frac{1}{2} + w_{H_2O,BS}\right) + \dot{m}_{RZ} w_{CO_2,RZ}\right] \tag{5.26}$$

$$w_{N_2,HG} = \frac{1}{\dot{m}_{HG}}\left[\dot{m}_{BS} w_{N,BS}\frac{M_{N_2}}{M_N}\left(1 - K_{NO_2,Konversion}\right) + \dot{m}_{FL} w_{N_2,FL} + \dot{m}_{RZ} w_{N_2,RZ}\right] \tag{5.27}$$

$$w_{NO,HG} = \frac{1}{\dot{m}_{HG}}\left(\dot{m}_{BS} w_{N,BS}\frac{M_{NO_2}}{M_N} K_{NO_2,Konversion} + \dot{m}_{RZ} w_{NO_2,RZ}\right) \tag{5.28}$$

$$w_{O_2,HG} = \frac{1}{\dot{m}_{HG}}\left(\dot{m}_{FL} w_{O_2,FL} + \dot{m}_{RZ} w_{O_2,RZ} - \dot{m}_{O_2,min}\right) \tag{5.29}$$

$$w_{SO_2,HG} = \frac{1}{\dot{m}_{HG}} \left(\dot{m}_{BS} w_{S,BS} \frac{M_{SO_2}}{M_S} + \dot{m}_{RZ} w_{SO_2,RZ} \right) \tag{5.30}$$

Zur Ermittlung der Temperatur des Heißgasstromes wird eine Energiebilanz um den Verbrennungsapparat erstellt, wobei die Bilanzgrenze wie in Abbildung 5-1 dargestellt verwendet wird. Diese Energiebilanz (Gleichung 5.31) beinhaltet neben den Energieinhalten der Ein- und Ausgangsströme auch die bei der Verbrennung freiwerdende chemisch gebundene Energie des Brennstoffes in Form des unteren Heizwertes sowie die Energieverluste des Ofens (Joos, 2006). Die spezifischen Enthalpien sowie der Heizwert sind dabei auf eine Referenztemperatur von 0 °C (273,15 K) bezogen.

$$\dot{m}_{BS}\left(H_{u,BS} + h_{BS}\right) + \dot{m}_{FL} h_{FL} + \dot{m}_{RZ} h_{RZ} - \dot{m}_{Asche} h_{Asche} - \dot{m}_{HG} h_{HG} - \dot{Q}_V = 0 \tag{5.31}$$

Die spezifischen Enthalpien, die in dieser Gleichung vorkommen, lassen sich nach den Gleichungen 5.32 bis 5.36 ermitteln. Der Verlustwärmestrom muss in dieser Gleichung extern vorgegeben und kann aus Literaturangaben (Joos, 2006; VDI, 2006) grob abgeschätzt werden.

$$h_{BS} = c_{p,m,BS}\left(T_{BS} - T_{Ref}\right) \tag{5.32}$$

$$h_{FL} = \sum_i w_{i,FL} c_{p,m,i}\left(T_{FL} - T_{Ref}\right) \quad \text{mit } i \in CO_2, H_2O, N_2, NO, O_2, SO_2 \tag{5.33}$$

$$h_{RZ} = \sum_i w_{i,RZ} c_{p,m,i}\left(T_{RZ} - T_{Ref}\right) \quad \text{mit } i \in CO_2, H_2O, N_2, NO, O_2, SO_2 \tag{5.34}$$

$$h_{Asche} = c_{p,m,Asche}\left(T_{Asche} - T_{Ref}\right) \tag{5.35}$$

$$h_{HG} = \sum_i w_{i,HG} c_{p,m,i}\left(T_{HG} - T_{Ref}\right) \quad \text{mit } i \in CO_2, H_2O, N_2, NO, O_2, SO_2 \tag{5.36}$$

Die Ermittlung der mittleren isobaren Wärmekapazität ist speziell bei den Gasströmen aufgrund der großen Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität von wesentlicher Bedeutung. In der vorliegenden Arbeit wird die mittlere isobare Wärmekapazität vereinfacht als linearer Mittelwert zwischen dem Wert der isobaren Wärmekapazität bei der jeweiligen Mediumstemperatur und dem Wert bei der Referenztemperatur gebildet (siehe Gleichung 5.37).

$$c_{p,m,i} = \frac{c_{p,i}\left(T_{Gas}\right) + c_{p,i}\left(T_{Ref}\right)}{2} \tag{5.37}$$

Die hier verwendete Berechnung der spezifischen Enthalpien ist eine Näherung, die wie erwähnt speziell bei den Gasströmen gewisse Ungenauigkeiten mit sich bringt. Für eine genaue Ermittlung der Enthalpien ist die Temperaturfunktion der isobaren Wärmekapazität zu integrieren und an den Integrationsrändern auszuwerten (nach Joos, 2006):

$$h_{Gas} = \sum_i w_{i,Gas} \int_{T_{Ref}}^{T_{Gas}} c_{p,i}(T)\,\mathrm{d}T \quad \text{mit } i \in CO_2, H_2O, N_2, NO, O_2, SO_2 \tag{5.38}$$

Die Arbeiten von Kerschbaum et al. (Kerschbaum et al., 2004) haben gezeigt, dass die Ungenauigkeiten aufgrund dieser Vereinfachung bei der Bilanzierung von Verbrennungsprozessen im Wesentlichen nur untergeordneten Einfluss auf das Ergebnis haben.

5.2 Verbrennung – Dreizonenmodell

Nach der Berechnung von Temperatur, Zusammensetzung und Massenstrom der in Abbildung 5-1 dargestellten Stoffströme mit dem in Kapitel 5.1 erläuterten Einzonenmodell kann die Brennkammer zur Erhöhung des Detailgrades der Simulation in die konstruktiv ausgeführten drei Verbrennungszonen unterteilt und diese mathematisch beschrieben werden (zonales Ofenmodell). Ein Teil des Brennstoffes wird in der primären Verbrennungszone verbrannt, der restliche Teil verbrennt in der Feststoffnachverbrennungszone, welche im konkreten Fall als Rostfeuerung ausgeführt ist. In der Primärzone werden vorwiegend (aber nicht nur und auch nicht ausschließlich) die flüchtigen Brennstoffkomponenten verwertet, in der Rostzone vorwiegend die nichtflüchtigen Komponenten (Tiegelkoks). Werden eine oder beide Zonen unterstöchiometrisch betrieben, so werden die entstehenden brennbaren Gasbestandteile in der sekundären Verbrennungszone (Gasnachverbrennung) unter Anwendung des Prinzips der Luftstufung vollständig nachverbrannt. Alle drei Zonen können getrennt von einander mit Frischluft und mit Rezirkulationsgas versorgt werden.

In diesem Abschnitt wird gezeigt werden, dass zur Ermittlung der im Dreizonenmodell gewünschten Ergebnisse, vereinfachte Methoden der numerischen Strömungssimulation (CFD) angewandt und mit den Methoden der Prozesssimulation gekoppelt werden müssen. Somit nimmt dieses Modell eine interessante Zwischenposition zwischen den genannten Methoden ein. Die Implementierung vereinfachter CFD-Codes in Prozesssimulationsstrukturen, so wie sie in dieser Arbeit gezeigt wird, bringt bei moderatem Berechnungsaufwand einen erhöhten Detaillierungsgrad der Modellierung.

Zum Zwecke der Modellierung dieses Verbrennungsvorganges wird zunächst als wichtigster Schritt der rohe Brennstoff für den Verbrennungsapparat in zwei Pseudoströme unterteilt, ein Brennstoffstrom verbrennt in der Primärzone, der zweite in der Rostzone. Die Zusammensetzung und der Heizwert der beiden Ströme haben wesentlichen Einfluss auf die Simulationsresultate dieses Modells und sind entsprechend sorgfältig zu bestimmen. Dennoch bleibt dieser Punkt die wichtigste Quelle für Unsicherheiten der Simulationsergebnisse mit dem zonalen Ofenmodell. Ein Schema der Stoffströme und Bilanzgrenzen, welche im Dreizonenmodell zu berücksichtigen sind, ist in Abbildung 5-4 gegeben. Es bleibt anzumerken, dass diese strikte Trennung der Brennkammer in ihre drei Verbrennungszonen im realen Apparat aufgrund der konstruktiven Ausführung sowie der stattfindenden Mischvorgänge nicht in dieser Ausprägung zu beobachten sein wird. Für die Anlagenauslegung und die Bestimmung adäquater Betriebspunkte der Verbrennungsanlage ist die Modellierung und Simulation des dreigeteilten Verbrennungsapparates allerdings unentbehrlich.

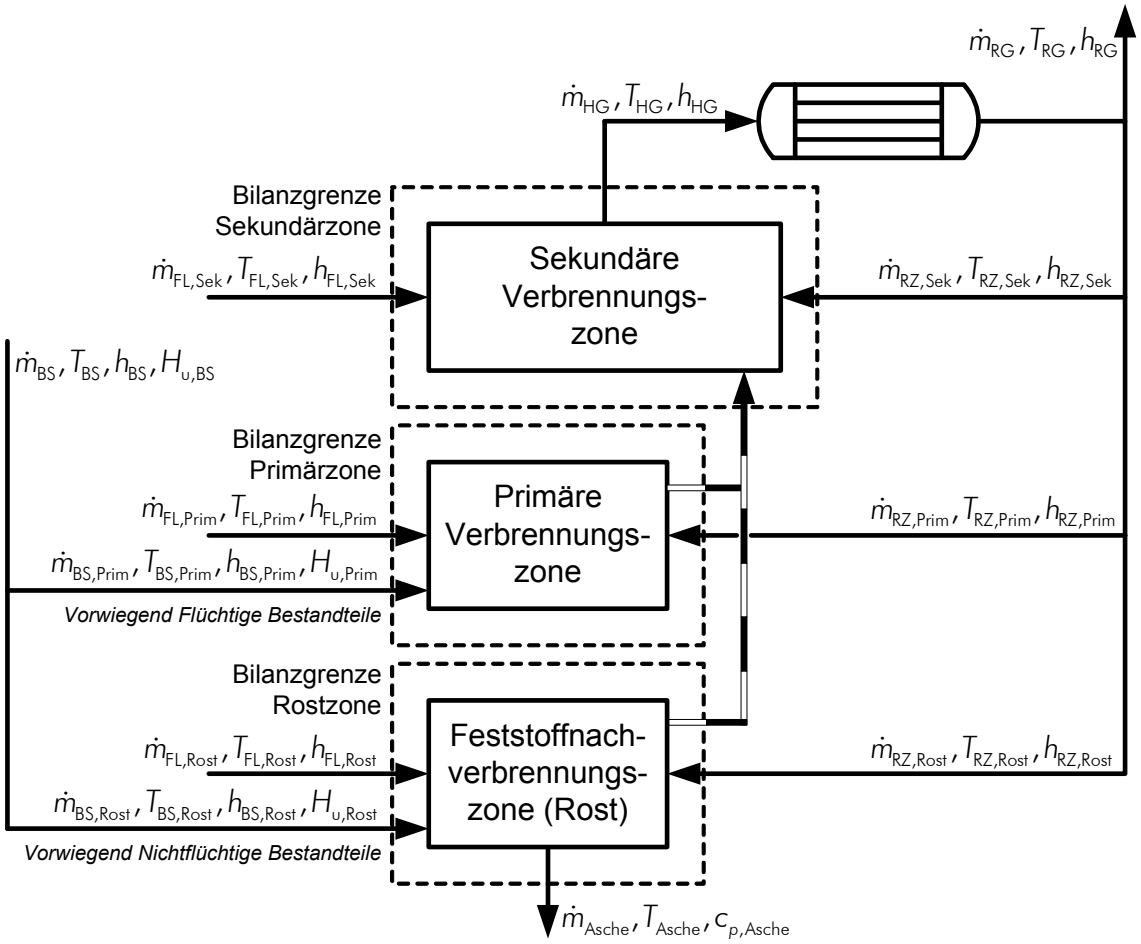


Abbildung 5-4: Bilanzierungsschema des Dreizonenmodells der Brennkammer

Die Berechnung der Zusammensetzung der beiden Pseudobrennstoffströme aus dem eigentlichen biogenen Brennstoff macht die Unterscheidung zwischen Rohbrennstoff (beinhaltet die Brennstofffeuchte) und trockenem Brennstoff (TS = Trockensubstanz) erforderlich. Neben der Feuchte besteht der Brennstoff noch aus flüchtigen und nichtflüchtigen Bestandteilen, letztere werden weiter in reaktive (Koks) und nichtreaktive (Asche) Komponenten unterteilt (siehe Gleichungen 5.39 und 5.40).

$$w_{\text{volatile,BS,roh}} + w_{\text{nonvolatile,BS,roh}} + w_{\text{H}_2\text{O,BS,roh}} = 1 \tag{5.39}$$

$$w_{\text{volatile,BS,TS}} + w_{\text{nonvolatile,BS,TS}} = w_{\text{volatile,BS,TS}} + w_{\text{Koks,BS,TS}} + w_{\text{Asche,BS,TS}} = 1 \tag{5.40}$$

Für die Aufteilung des Brennstoffes in die beiden Teilströme sind die Gesamtmassenbilanz sowie die Massenbilanz der Einzelkomponenten einzuhalten. Vereinfachend und den realen Verhältnissen besser entsprechend wird an dieser Stelle definiert, dass der Wassergehalt des Brennstoffes ausschließlich in der Primärzone und der Aschenanteil ausschließlich in der Rostzone umgesetzt werden.

$$\dot{m}_{\text{BS,TS,Prim}} + \dot{m}_{\text{BS,TS,Rost}} = \dot{m}_{\text{BS,TS}} \tag{5.41}$$

$$\dot{m}_{\text{BS,TS,Prim}} w_{\text{volatile,BS,TS,Prim}} + \dot{m}_{\text{BS,TS,Rost}} w_{\text{volatile,BS,TS,Rost}} = \dot{m}_{\text{BS,TS}} w_{\text{volatile,BS,TS}} \tag{5.42}$$

$$\dot{m}_{BS,TS,Prim} w_{nonvolatile,BS,TS,Prim} + \dot{m}_{BS,TS,Rost} w_{nonvolatile,BS,TS,Rost} = \dot{m}_{BS,TS} w_{nonvolatile,BS,TS} \tag{5.43}$$

$$\dot{m}_{BS,roh,Prim} w_{H_2O,BS,roh,Prim} = \dot{m}_{BS,roh} w_{H_2O,BS,roh} \tag{5.44}$$

$$\dot{m}_{BS,TS,Rost} w_{Asche,BS,TS,Rost} = \dot{m}_{BS,TS} w_{Asche,BS,TS} \tag{5.45}$$

Wie bereits erwähnt findet der größte Teil der Verbrennung der flüchtigen Komponenten in der primären Verbrennungszone statt, ein kleinerer Anteil wird allerdings erst in der Rostzone umgesetzt. Umgekehrt brennt in der Primärzone auch ein Teil der nichtflüchtigen Komponenten ab, der vorwiegende Teil allerdings in der Rostzone. Um diese Effekte modellieren zu können, werden zwei Parameter eingeführt, welche die Verbrennung der Nichtflüchtigen in der Primärzone (Gleichung 5.46) sowie die Verbrennung der Flüchtigen in der Rostzone (Gleichung 5.47) im Verhältnis zu den jeweiligen Mengen im Ausgangsbrennstoff beschreiben. An dieser Stelle sei erwähnt, dass im Rahmen des hier angewandten Detaillierungsgrades der Modellierung das Abbrandverhalten des biogenen Brennstoffes in Abhängigkeit verschiedener Betriebsbedingungen im Verbrennungsapparat nicht bestimmt werden kann. Für die Erfassung der auftretenden Effekte ist hier eine wesentlich genauere Modellbildung erforderlich, die im Rahmen der Globalbilanzierung nicht sinnvoll durchzuführen ist. Um dieses Abbrandverhalten innerhalb gewisser Grenzen gesichert vorhersagen zu können ist die Anwendung einer speziell erweiterten numerischen Strömungssimulation (siehe Kapitel 6) erforderlich. Die beiden Parameter, welche das Abbrandverhalten im Rahmen der Globalbilanzierung beschreiben, müssen sinnvoll abgeschätzt und manuell vorgegeben werden:

$$k_{nonvolatile,Prim} = \frac{\dot{m}_{BS,TS,Prim} w_{nonvolatile,BS,TS,Prim}}{\dot{m}_{BS,TS} w_{nonvolatile,BS,TS}} \tag{5.46}$$

$$k_{volatile,Rost} = \frac{\dot{m}_{BS,TS,Rost} w_{volatile,BS,TS,Rost}}{\dot{m}_{BS,TS} w_{volatile,BS,TS}} \tag{5.47}$$

Mit diesen Grundlagen lässt sich anschließend die Immediatzusammensetzung der beiden Brennstoffströme berechnen. Die Berechnung des Wassergehaltes des Primärzonenbrennstoffes erfolgt nach Umformung gemäß Gleichung 5.44, die des Aschengehaltes des Rostzonenbrennstoffes erfolgt nach Gleichung 5.45.

$$w_{volatile,BS,TS,Prim} = \frac{w_{volatile,BS,TS}\left(1-k_{volatile,Rost}\right)}{w_{volatile,BS,TS}\left(1-k_{volatile,Rost}\right) + w_{nonvolatile,BS,TS} k_{nonvolatile,Prim}} \tag{5.48}$$

$$w_{nonvolatile,BS,TS,Prim} = \frac{w_{volatile,BS,TS} k_{nonvolatile,Prim}}{w_{volatile,BS,TS}\left(1-k_{volatile,Rost}\right) + w_{nonvolatile,BS,TS} k_{nonvolatile,Prim}} \tag{5.49}$$

$$w_{volatile,BS,TS,Rost} = \frac{w_{volatile,BS,TS} k_{volatile,Rost}}{w_{volatile,BS,TS} k_{volatile,Rost} + w_{nonvolatile,BS,TS}\left(1-k_{nonvolatile,Prim}\right)} \tag{5.50}$$

$$w_{nonvolatile,BS,TS,Rost} = \frac{w_{nonvolatile,BS,TS}\left(1-k_{nonvolatile,Prim}\right)}{w_{volatile,BS,TS} k_{volatile,Rost} + w_{nonvolatile,BS,TS}\left(1-k_{nonvolatile,Prim}\right)} \tag{5.51}$$

Im Anschluss an die Ermittlung der Immediatzusammensetzung der Brennstoffströme kann die Berechnung der Elementarzusammensetzung erfolgen. Die Kenntnis der Gehalte an C, H und O ist für die Berechnung des minimalen Sauerstoffbedarfes für die Verbrennung dieser Brennstoffströme und in weiterer Folge für die Ermittlung des Luftüberschusses notwendig. Zur Ermittlung der elementaren Zusammensetzung der Brennstoffströme bei bekannter Immediatzusammensetzung erfolgt nach dem Modell von Parikh et al. (Parikh et al., 2007), siehe Gleichungen 5.52 bis 5.54. Dort wurden umfangreiche Analysen fester lignozellulosischer Materialien durchgeführt und mittels einfacher chemometrischer Methoden eine Korrelation zwischen Immediat- und Elementaranalyse erarbeitet. Die Autoren zeigen weiters, dass die Ungenauigkeiten in der Bestimmung der Elementarzusammensetzung mittels der genannten Korrelation vergleichsweise gering sind. Unter Berücksichtigung der Qualitätsschwankungen des eingesetzten biogenen Brennstoffes sowie der konstruktiv ausgeführten Auftrennung der einzelnen Verbrennungszonen im realen Apparat ist die Vorhersagegenauigkeit mit der verwendeten Korrelation ausreichend.

$$w_{\mathrm{C,BS,TS}} = 0{,}637 w_{\mathrm{Koks,BS,TS}} + 0{,}455 w_{\mathrm{volatile,BS,TS}} \tag{5.52}$$

$$w_{\mathrm{H,BS,TS}} = 0{,}052 w_{\mathrm{Koks,BS,TS}} + 0{,}062 w_{\mathrm{volatile,BS,TS}} \tag{5.53}$$

$$w_{\mathrm{O,BS,TS}} = 0{,}304 w_{\mathrm{Koks,BS,TS}} + 0{,}476 w_{\mathrm{volatile,BS,TS}} \tag{5.54}$$

Die Anwendung dieses Modells auf den verwendeten Rohbrennstoff Maisganzpflanze zur Kontrolle ergibt akzeptable Bereiche für den relativen Fehler der errechneten Elementarzusammensetzung (Kohlenstoff: 1,1 %, Wasserstoff 7,0 % bei kleiner absoluter Abweichung, Sauerstoff: 2,5 %). Vereinfachend werden die Gehalte an Stickstoff und Schwefel im Rostbrennstoff Null gesetzt, diese Elemente werden vollständig dem Primärzonenbrennstoff zugerechnet.

Bei bekannter Elementarzusammensetzung kann in weiterer Folge der minimale Luftbedarf bei der Verbrennung der beiden Pseudobrennstoffströme ermittelt werden. Hierzu werden Gleichung 5.20 und 5.21 auf die Primärverbrennungszone und die Feststoffnachverbrennungszone angewendet. Anschließend erfolgt die Berechnung der lokalen Luftverhältniszahlen der beiden Zonen (Bilanzgrenzen siehe Abbildung 5-4) analog zu Gleichung 5.23. Beide lokalen Luftverhältniszahlen dürfen im verwendeten Modell auch Werte kleiner als eins annehmen.

$$\lambda_{\mathrm{L,Prim}} = \frac{\dot{m}_{\mathrm{FL,Prim}} + \dfrac{\dot{m}_{\mathrm{RZ,Prim}} w_{\mathrm{O_2,RZ,Prim}}}{0{,}2324}}{\dot{m}_{\mathrm{FL,Prim,min}}} \tag{5.55}$$

$$\lambda_{\mathrm{L,Rost}} = \frac{\dot{m}_{\mathrm{FL,Rost}} + \dfrac{\dot{m}_{\mathrm{RZ,Rost}} w_{\mathrm{O_2,RZ,Rost}}}{0{,}2324}}{\dot{m}_{\mathrm{FL,Rost,min}}} \tag{5.56}$$

Weil die sekundäre Verbrennungszone nicht direkt mit Brennstoff versorgt wird, sondern nur die unverbrannten Brennstoffbestandteile der beiden vorgelagerten Verbrennungszonen erhält, muss die lokale Luftverhältniszahl für diese Zone indirekt berechnet werden. Der mi-

nimal notwendige Luftbedarf dieser Zone errechnet sich demnach aus der Summe der, auf den stöchiometrischen Umsatz fehlenden Luftmengen der beiden vorgelagerten Verbrennungszonen. Die der Sekundärzone tatsächlich zugeführte Luftmenge wird auf diese Summe bezogen und so die lokale Luftverhältniszahl errechnet (siehe Gleichung 5.57).

$$\lambda_{\mathrm{L,Sek}} = \frac{\dot{m}_{\mathrm{FL,Sek}} + \dfrac{\dot{m}_{\mathrm{RZ,Sek}} w_{\mathrm{O_2,RZ,Sek}}}{0{,}2324}}{\dot{m}_{\mathrm{FL,Prim,min}}\left(1-\lambda_{\mathrm{L,Prim}}\right) + \dot{m}_{\mathrm{FL,Rost,min}}\left(1-\lambda_{\mathrm{L,Rost}}\right)} \tag{5.57}$$

Mit dieser Gleichung werden nur dann sinnvolle Werte für die Luftverhältniszahl in der Sekundärzone errechnet, wenn der Nenner des Bruches positiv ist. Wird der Nenner negativ, so gelangen in die Sekundärzone keine brennbaren Gasbestandteile mehr, da in den vorgelagerten Verbrennungszonen bereits ausreichend Sauerstoff für eine vollständige Verbrennung zugeführt wurde. In diesem Fall muss der Sekundärzone kein Sauerstoff mehr zugeführt werden, jeder zugeführte Sauerstoffstrom führt dann theoretisch zu einem unendlich großen Luftüberschuss für diese Zone.

Der nächste wesentliche Schritt bei der Modellierung des Dreizonenmodells ist die Charakterisierung der beiden Pseudobrennstoffströme hinsichtlich ihres Heizwertes. Es bieten sich hier eine Reihe von Modellierungsansätzen an, welche auf Basis der Elementar- oder der Immediatanalyse des vorliegenden Brennstoffes den zu erwartenden Heizwert, meistens den oberen Heizwert der Trockensubstanz, berechnen können. In dieser Arbeit wird ein gemischter Ansatz verwendet, bei dem der Heizwert des Primärzonen- sowie des Rostzonenbrennstoffes jeweils als Mittelwert der Ergebnisse zweier unterschiedlicher Modellansätze gebildet wird (siehe Gleichung 5.58). Das Modell nach Parikh et al. (Parikh et al., 2005) berechnet den oberen Heizwert des rohen Biomassebrennstoffes mit hoher Genauigkeit, bei der Erstellung der Berechnungsgleichung wurde aber nur eine vergleichsweise geringe Zahl koksartiger Materialien berücksichtigt. Das Modell nach Cordero et al. (Cordero et al., 2001) zeigt bei der Validierung am eingesetzten Rohbrennstoff zwar größere Abweichungen, wurde aber gegen eine größere Anzahl koksartiger Materialien validiert.

$$\begin{aligned} H_{\mathrm{o,BS,TS}} = \frac{1}{2}\big(&356{,}7 w_{\mathrm{Koks,BS,TS}} + 155{,}9 w_{\mathrm{volatile,BS,TS}} - 7{,}8 w_{\mathrm{Asche,BS,TS}} \\ &+ 354{,}3 w_{\mathrm{Koks,BS,TS}} + 170{,}8 w_{\mathrm{volatile,BS,TS}}\big) \end{aligned} \tag{5.58}$$

Die anderen untersuchten Modelle zur Berechnung des oberen Heizwertes brachten entweder eine hohe Ungenauigkeit bereits bei der Berechnung des Rohbrennstoffes mit sich (Demirbas, 1997) oder bildeten die Steigerung des Heizwertes mit sinkendem Gehalt an flüchtigen Brennstoffbestandteilen nur unzureichend ab (Channiwala et al., 2002). Aus dem oberen Heizwert kann dann durch Subtraktion der Kondensationswärme des im Verbrennungsgas vorhandenen Wasseranteils der in den Gleichungen benötigte untere Heizwert berechnet werden. Damit ist die Charakterisierung der Pseudobrennstoffströme für das zonale Ofenmodell der Globalbilanzierung abgeschlossen. Die im Rahmen der Simulationen in dieser Arbeit verwendeten Daten sind Kapitel 14.1.2.4 zu entnehmen.

Bei bekanntem Heizwert der beiden Pseudobrennstoffströme fehlt für die Ermittlung der beiden Temperaturen in der Primär- sowie der Rostzone nun noch die Kenntnis der genauen Zusammensetzung der Verbrennungsgase bei Verlassen der jeweiligen Zone. Nachdem bei-

de Zonen auch unterstöchiometrisch betrieben werden können und damit aufgrund der unvollständigen Verbrennung noch brennbare Bestandteile in unbekannter Gewichtung enthalten sind, gestaltet sich die Berechnung dieser Zusammensetzungen relativ schwierig. Der gewählte Modellierungsansatz geht davon aus, dass der Primärzonenbrennstoff vollständig in die Gasphase übergeht (kein nichtreaktiver Ascheanteil) und die gasförmigen Komponenten dann mit der bereitgestellten Mischung aus Frischluft und Rezirkulationsgas teilweise verbrennt. Für den Rostzonenbrennstoff gilt ähnliches, wobei hier der inerte Ascheanteil die Zone in fester Form verlässt.

Deshalb ist zunächst basierend auf der Zusammensetzung der beiden Pseudobrennstoffströme die Zusammensetzung der jeweils entstehenden Ausgasungsprodukte (Flüchtige, *volatiles*) zu bestimmen. Nachdem die Gaszusammensetzung jedoch stark abhängig von verschiedenen Betriebsparametern ist, welche an dieser Stelle aus Gründen der Detaillierungstiefe nicht berücksichtigt werden sollen, wird hier für jede Zone eine fixe Gaszusammensetzung angenommen, die aus Literaturangaben abgeschätzt werden kann. Vereinfachend werden als Gaskomponenten nur N_2, O_2, H_2O, CO, CO_2, H_2 sowie eine Summenkohlenwasserstoffkomponente C_xH_y berücksichtigt; Stickstoff- und Schwefelkomponenten aus dem Brennstoff werden vernachlässigt. Die Summenkomponente C_xH_y steht hier stellvertretend für Methan und höhere Kohlenwasserstoffe, welche intermediär bei Verbrennung, Vergasung und Pyrolyse von Biomassebrennstoffen entstehen, oft auch als VOC (*volatile organic compounds*) bezeichnet.

Die Gehalte der genannten Komponenten in den jeweiligen Ausgasungsprodukten wurden aufbauend auf den Arbeiten von Adanez et al., Bassilakis et al., Ergüdenler et al. und vor allem Thunman et al. angenommen (Thunman et al.; Ergüdenler et al., 1992; Ergüdenler et al., 1994; Adanez et al., 2001; Bassilakis et al., 2001; Thunman et al., 2001; Adanez et al., 2003; Thunman et al., 2003) und zum Zwecke der Verwendung in dieser Simulation adaptiert (siehe hierzu auch Kapitel 6.7.2.2). Diese Adaption wurde basierend auf einem unveränderten Sauerstoffbedarf bei der Verbrennung der entstehenden Ausgasungsprodukte im Vergleich zur Verbrennung der jeweiligen Pseudobrennstoffe durchgeführt. Diese exakte Übereinstimmung ist Voraussetzung für die korrekte Bestimmung der Luftverhältniszahl der einzelnen Verbrennungszonen. Darüber hinaus wurde die Zusammensetzung der Ausgasungsprodukte noch basierend auf einer Minimierung des Fehlers in der Massenerhaltung der Einzelelemente C, H und O adaptiert. Eine genaue Einhaltung der Massenbilanzen aller Einzelelemente bei gleichzeitig konstantem Sauerstoffbedarf ist nicht möglich, durch geeignete Optimierungsschritte konnte der Fehler innerhalb dieser Einzelelement-Massenbilanzen allerdings auf unter 1% gebracht werden. In Zonen mit verstärkter Verbrennung von Koksbestandteilen ist in diesem Zusammenhang zu berücksichtigen, dass die Verbrennung von festem Kohlenstoff die Zufuhr von Sauerstoff aus der Gasphase voraussetzt und in der Folge ein Gemisch aus CO und CO_2 vom Feststoff an die Gasphase abgegeben wird (Zhou et al., 2005). Das Verhältnis von CO zu CO_2 während der Koksverbrennung (r_C) ist nach Zhou et al. (Zhou et al., 2005) prinzipiell von der Feststofftemperatur abhängig. Es wird an dieser Stelle jedoch vereinfachend angenommen, dass CO und CO_2 jeweils in gleichem molarem Verhältnis entstehen. Damit kann auch der Bedarf an O_2 für diesen Vorgang bestimmt und in der Massenbilanzierung der Einzelelemente berücksichtigt werden. Eine genauere mathematische Formulierung des Vorganges der heterogenen Koksverbrennung ist in Kapitel 6.7.2.3 dargestellt.

Für den in dieser Arbeit verwendeten Brennstoff kann die Summenformel der Komponente C_xH_y aus den genannten Arbeiten mit $C_{1,8}H_5$ approximiert werden. Als Molekulargewicht ergibt sich in der Folge ein Wert von 26,66 g/mol. Stoffdaten wie Dichte, spezifische Wärmekapazität oder Wärmeleitfähigkeit der Summenkomponente C_xH_y werden aus den Einzelkomponenten (im Wesentlichen Methan, Ethan, Propan) zusammengesetzt. Für den Massenstrom der produzierten Gasströme gilt die Massenerhaltung.

Anschließend werden die entstandenen Ausgasungsprodukte rechnerisch mit den jeweiligen Frischluft- und Rezirkulationsgasströmen gemischt und die Konzentrationen der Einzelkomponenten in der Gasmischung berechnet. Nun wird die Oxidation der brennbaren Bestandteile CO, H_2 und C_xH_y unter Berücksichtigung der jeweiligen Reaktionskinetik (siehe Kapitel 6.7.1) mit Sauerstoff mathematisch nachvollzogen. Hierbei kann der Sauerstoff entweder überstöchiometrisch vorliegen, sodass die Reaktion stoppt, sobald die brennbaren Bestandteile vollständig verbraucht sind, oder der Sauerstoff liegt unterstöchiometrisch vor, sodass die Reaktion stoppt, sobald der Sauerstoff erschöpft ist. Durch die Berücksichtigung der unterschiedlichen Reaktionskinetiken für die einzelnen Komponenten kann am Ende der Berechnung quantifiziert werden, welche der Reaktionen in der Konkurrenz um limitierten Sauerstoff schneller ablaufen und welche langsamer, d.h. es kann ermittelt werden, in welchem Ausmaß die einzelnen brennbaren Bestandteile bis zur Sauerstofferschöpfung oxidiert werden können. Die im Dreizonen-Verbrennungsmodell berücksichtigten Oxidationsreaktionen sowie die Ansätze zur Formulierung der jeweiligen Reaktionsgeschwindigkeiten sind in Tabelle 6-2 in Kapitel 6.7.1 dargestellt. Eine genaue Beschreibung der jeweiligen Ansätze und deren Herkunft sowie die zu erwartende Reaktionswärme pro umgesetztem mol Edukt finden sich ebenfalls in diesem Kapitel.

Für eine beliebige chemische Reaktion zweier Edukte zu zwei Produkten kann die Reaktionsgleichung normalisiert auf 1mol des Eduktes A wie folgt formuliert werden:

$$\mathrm{A} + b\mathrm{B} \rightarrow c\mathrm{C} + d\mathrm{D} \tag{5.59}$$

Für die Formulierung der Reaktionsgeschwindigkeit wird der Einfluss der Zusammensetzung des Reaktionsgemisches über ein Potenzgesetz beschrieben. In der allgemeinen Form sind sowohl die Konzentrationen der Edukte als auch die der Produkte für die Beschreibung der Reaktionsgeschwindigkeit zu berücksichtigen. Der Einfluss der Reaktionstemperatur auf die Reaktionsgeschwindigkeit wird mit dem Ansatz nach Arrhenius berücksichtigt.

$$r_\mathrm{A} = \frac{\partial c_\mathrm{A}}{\partial t} = -k(T)\, c_A^{\mathrm{p1}}(t)\, c_B^{\mathrm{p2}}(t)\, c_C^{\mathrm{p3}}(t)\, c_D^{\mathrm{p4}}(t) \tag{5.60}$$

$$r_\mathrm{B} = \frac{\partial c_\mathrm{B}}{\partial t} = -b\, k(T)\, c_A^{\mathrm{p1}}(t)\, c_B^{\mathrm{p2}}(t)\, c_C^{\mathrm{p3}}(t)\, c_D^{\mathrm{p4}}(t) \tag{5.61}$$

$$r_\mathrm{C} = \frac{\partial c_\mathrm{C}}{\partial t} = c\, k(T)\, c_A^{\mathrm{p1}}(t)\, c_B^{\mathrm{p2}}(t)\, c_C^{\mathrm{p3}}(t)\, c_D^{\mathrm{p4}}(t) \tag{5.62}$$

$$r_\mathrm{D} = \frac{\partial c_\mathrm{D}}{\partial t} = d\, k(T)\, c_A^{\mathrm{p1}}(t)\, c_B^{\mathrm{p2}}(t)\, c_C^{\mathrm{p3}}(t)\, c_D^{\mathrm{p4}}(t) \tag{5.63}$$

Selbst unter der Annahme einer konstanten Reaktionstemperatur wird das Problem der Konzentrationsverläufe von Edukten und Produkten in Abhängigkeit von der Reaktionszeit damit durch ein autonomes System nichtlinearer Differentialgleichungen erster Ordnung beschrieben. Die direkte analytische Lösung dieses Problems ist nicht möglich, ein aufwändiger Lösungsweg wurde von Steeb et al. (Steeb et al., 1980) vorgeschlagen. An dieser Stelle soll aber ein einfacher, stabiler und vor allem automatisierbarer Lösungsweg verwendet werden, weshalb das Gleichungssystem numerisch gelöst wird.

Zum Zwecke der numerischen Lösung wird zunächst bei der allgemeinen Formulierung der Reaktionsrate einer beliebigen Gaskomponente *i* (Gleichung 5.64) der Differentialquotient unter Anwendung eines finiten Zeitschrittes in guter Näherung in einen Differenzenquotient umgewandelt (Gleichung 5.65).

$$r_i = \frac{\partial c_i}{\partial t} = k_i \prod_{m=1}^{n} c_m^{pm} \tag{5.64}$$

$$\frac{\Delta c_i}{\Delta t} = \tilde{r}_i = k_i \prod_{m=1}^{n} c_m^{pm} \tag{5.65}$$

Durch Multiplikation der rechten Seite von Gleichung 5.65 mit dem finiten Zeitschritt kann die Konzentrationsänderung (Gleichung 5.66) und in weiterer Folge die Konzentration der Gaskomponente i nach diesem Zeitschritt (Gleichung 5.67) ermittelt werden.

$$\Delta c_i = \tilde{r}_i \Delta t = k_i \prod_{m=1}^{n} c_m^{pm} \Delta t \tag{5.66}$$

$$c_{i,2} - c_{i,1} = r_i \Delta t_{1\to 2} = k_{i,1} \prod_{m=1}^{n} c_{m,1}^{pm} \Delta t_{1\to 2} \tag{5.67}$$

Die Konzentrationsänderungen werden nun solange schrittweise gebildet und aufsummiert, bis entweder die brennbaren Komponenten oder der Sauerstoff für die Oxidation verbraucht ist. Da nach dem verwendeten Potenzgesetz aber die Reaktion mit sinkender Konzentration der Edukte immer langsamer wird und sich die Edukte theoretisch erst nach unendlich langer Reaktionsdauer auf Null verbrauchen, wird hierfür eine Cut-Off-Untergrenze eingeführt. Fällt die Konzentration einer Komponente unter diese Grenze, so wird die Konzentration nullgesetzt. Am Ende dieses Berechnungsschrittes sind die Gaszusammensetzungen der Austrittsströme der Primär- sowie der Rostzone bekannt.

Simulationstheoretisch betrachtet entspricht diese Vorgangsweise einer numerischen Strömungssimulation (CFD) im engeren Sinne. Es wird im vorgestellten Algorithmus die Kontinuitätsgleichung in Form der Gesamtmassenbilanz und der Massenbilanz aller beteiligten Gasspezies auf numerischem Wege gelöst. Hierbei werden bezüglich des Stofftransportes lediglich die konvektiven Terme sowie die Quellen (chemische Reaktion) berücksichtigt und die diffusiven Terme vernachlässigt. Da näherungsweise isotherm gerechnet wird, ist die Energiegleichung nicht zu berücksichtigen. Aufgrund dieser Vereinfachungen ist keine Koppelung von Bilanzgrößen zu berücksichtigen und das auftretende Gleichungssystem wäre nichtiterativ lösbar. Hierzu wird die Methode der Finiten Volumina in eindimensionaler Form angewendet. Die Diskretisierung der genannten Bilanzgleichungen erfolgt nach dem Up-

wind-Verfahren erster Ordnung zur Ermittlung der Lösungsfunktion an den Zellgrenzen. Der eindimensionale Lösungsraum stellt im hier verwendeten Ansatz die Zeit (Reaktionszeit) und nicht den geometrischen Raum dar, was in der CFD unüblich ist. Aber unter Berücksichtigung eines eindimensionalen konvektiven Transportes nach dem Prinzip des Rohrreaktors steht die örtliche Ausdehnung (Reaktionsraum) in linearem Zusammenhang mit der Reaktionszeit und ist somit gleichbedeutend. Die Diskretisierung des Lösungsraumes wurde sodann nicht äquidistant sondern mit adaptiver Schrittweite gewählt um die Genauigkeit der Lösung zu erhöhen. Diese adaptive Schrittweite erfordert schließlich die Anwendung eines iterativen Lösungsalgorithmus. Durch Variation der beschriebenen Cut-Off-Untergrenze lässt sich die Gitterdichte variieren, sodass der Einfluss der zeitlichen Auflösung auf das Simulationsergebnis analysieren lässt (*Gitterkonvergenz*). Es ist anzumerken, dass die hier getroffene Voraussetzung einer idealen Pfropfenströmung für diesen Reaktor eine starke Vereinfachung darstellt. In einer genaueren Abbildung müsste das nichtideale Verhalten der Brennkammer mit Rückvermischung, Kurzschlussströmen und Strömungstotzonen berücksichtigt werden. In sinnvoller Art und Weise kann dies jedoch nur durch eine vollständige, klassische CFD-Simulation erfolgen. Für die vorliegende Arbeit wurde daher entschieden, diese Nichtidealitäten in der Prozesssimulation zu vernachlässigen und ausschließlich im CFD-Teil abzudecken. Die genannten, in der CFD gebräuchlichen, Bezeichnungen und Methoden werden gemeinsam mit Hinweisen auf weiterführende Literatur im Kapitel 6 ausführlich erläutert.

Abschließend erfolgt die Ermittlung der Temperaturen der jeweiligen Austrittsströme der Verbrennungszonen in Anlehnung an das Einzonen-Verbrennungsmodell, wobei aber lediglich die bereits genannten Komponenten berücksichtigt werden, Schwefelkomponenten und NO_x werden vernachlässigt. Zunächst muss allerdings ermittelt werden, welcher Anteil des Heizwertes des eingebrachten Pseudobrennstoffes aufgrund eventueller unvollständiger Verbrennung nicht freiwerden kann. Dies wird im vorliegenden Ansatz durch Skalierung des oberen Heizwertes des jeweiligen Pseudobrennstoffes (ermittelt nach Gleichung 5.58) mit der unvollständig freigewordenen Reaktionswärme der drei verwendeten Oxidationsreaktionen angenähert. An dieser Stelle wird nur das Gleichungssystem für die Primärzone gezeigt, für die Rostzone gilt die analoge Berechnung.

$$k_{H_o,\mathrm{Prim}} = \frac{w_{\mathrm{H_2,RG,Prim}}\Delta H_{\mathrm{r,H_2-Ox}} + w_{\mathrm{C_xH_y,RG,Prim}}\Delta H_{\mathrm{r,C_xH_y-Ox}} + w_{\mathrm{CO,RG,Prim}}\Delta H_{\mathrm{r,CO-Ox}}}{w_{\mathrm{H_2,VOL,Prim}}\Delta H_{\mathrm{r,H_2-Ox}} + w_{\mathrm{C_xH_y,VOL,Prim}}\Delta H_{\mathrm{r,C_xH_y-Ox}} + w_{\mathrm{CO,VOL,Prim}}\Delta H_{\mathrm{r,CO-Ox}}} \tag{5.68}$$

$$H_{\mathrm{o,BS,TS,Prim,skaliert}} = \left(1 - k_{H_o,\mathrm{Prim}}\right) H_{\mathrm{o,BS,TS,Prim}} \tag{5.69}$$

Aus dem skalierten oberen Heizwert wird unter Berücksichtigung des Wassergehaltes des Brennstoffes und des Verbrennungsgases der untere Heizwert des rohen Pseudobrennstoffstromes ermittelt, welcher in weiterer Folge in die Energiebilanz einzusetzen ist:

$$\begin{aligned} &\dot{m}_{\mathrm{BS,Prim}}\left(H_{\mathrm{u,BS,Prim,skaliert}} + h_{\mathrm{BS,Prim}}\right) + \dot{m}_{\mathrm{FL,Prim}} h_{\mathrm{FL}} + \dot{m}_{\mathrm{RZ,Prim}} h_{\mathrm{RZ}} - \dot{m}_{\mathrm{Asche,Prim}} h_{\mathrm{Asche,Prim}} \\ &- \dot{m}_{\mathrm{RG,Prim}} h_{\mathrm{RG,Prim}} - \dot{Q}_{\mathrm{V,Prim}} = 0 \end{aligned} \tag{5.70}$$

Die noch unbekannten Terme in dieser Gleichung werden ähnlich wie im Einzonen-Verbrennungsmodell berechnet (siehe Gleichungen 5.32 bis 5.36). Mit diesem Gleichungssystem lassen sich die Temperaturen der Rauchgasströme am Austritt der Primärverbrennungszone sowie der Rostzone ermitteln. Es wird nun angenommen, dass die Temperatur

des Gasstromes am Austritt jeweils der Durchschnittstemperatur der gesamten Verbrennungszone entspricht (Konzept des idealen Rührkessels). Deshalb kann für die Temperatur, welche im Arrhenius-Ansatz der Reaktionsgeschwindigkeitsformulierung im vorherigen Berechnungsschritt einzusetzen ist, vereinfachend die Temperatur des Austrittsstromes der jeweiligen Zone verwendet werden. Die Temperaturberechnung erfolgt deshalb an dieser Stelle auf iterativem Wege.

Zuletzt sei noch erwähnt, dass die Temperaturberechnung der beiden (teilverbrannten) Rauchgasströme der Primär- sowie der Rostzone konzeptbedingt mit einigen Ungenauigkeiten behaftet ist. Die größte Unsicherheit wird durch die Annahme der Zusammensetzung der Ausgasungsprodukte aus den beiden Pseudobrennstoffströmen in die Berechnung eingeschleppt. Eine weitere Quelle von Fehlern ist die Ermittlung der Zusammensetzung der Pseudobrennstoffe selbst, sowie in geringerem Maße auch die numerische Erfassung der Oxidationsreaktionen. Aus diesem Grund ist speziell die Berechnung der Zusammensetzung der Rauchgasströme ungenau. Aufgrund größenordnungsmäßig vergleichbarer Wärmekapazitäten der einzelnen Gaskomponenten (Ausnahme C_xH_y und H_2O, Wasserstoff hat aufgrund niedriger Konzentrationen nur geringen Einfluss) setzt sich diese Ungenauigkeit aber nur abgeschwächt auf die Temperaturberechnung fort.

5.3 Modellierung peripherer Anlagenteile

In diesem Kapitel soll kurz auf die Modellierung der, neben der Verbrennung als Haupt-Prozessschritt, weiteren für die Simulation der Gesamtverbrennungsanlage essentiellen Anlagenteile eingegangen werden. Im Wesentlichen handelt es sich hierbei um den Heißgas-Wärmetauscher zur Nutzung der bei der Verbrennung freiwerdenden Reaktionswärme sowie um Mischpunkte bei der Mischung verschiedener Gasströme (Rezirkulationsgas und Frischluft).

5.3.1 Wärmetauscher

Die Modellierung des Heißgas-Wärmetauschers gestaltet sich aufgrund der Rahmenbedingungen sehr einfach. Im Wesentlichen soll das Modell bei bekannter Zusammensetzung und Temperatur des eintretenden Heißgasstromes unter Verwendung einer vorgegebenen Temperatur des austretenden Kaltgasstromes den an die Sekundärseite des Wärmetauschers übertragbaren Nutzwärmestrom errechnen. Die Zusammensetzung des primärseitigen Gasstromes bleibt unverändert. Die zu berücksichtigenden Massen- und Wärmeströme sowie die verwendete Bilanzgrenze sind in Abbildung 5-5 dargestellt.

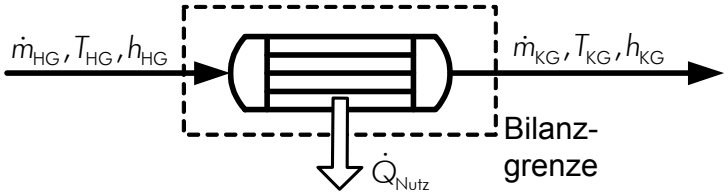


Abbildung 5-5: Heißgas-Wärmetauscher mit verwendeter Bilanzgrenze

Die Energiebilanz an der definierten Bilanzgrenze ist in Gleichung 5.71 dargestellt. Die spezifische Enthalpie des Heißgasstromes errechnet sich nach Gleichung 5.36, jene des Kaltgasstromes nach Gleichung 5.72. Die Temperatur des Kaltgasstromes ist ein Parameter, der extern vorzugeben ist.

$$\dot{m}_{HG} h_{HG} - \dot{m}_{KG} h_{KG} - \dot{Q}_{Nutz} = 0 \tag{5.71}$$

$$h_{KG} = \sum_i w_{i,KG} c_{p,m,i} \left(T_{KG} - T_{Ref} \right) \quad \text{mit } i \in CO_2, H_2O, N_2, NO, O_2, SO_2 \tag{5.72}$$

Eine eigene Variable für den Verlustwärmestrom des Wärmetauschers ist in diesem Modell nicht vorgesehen, ein etwaiger Wärmeverlust kann direkt vom Nutzwärmestrom abgezogen werden. Mit den bisher eingeführten Variablen lässt sich nun der thermische Anlagenwirkungsgrad gemäß Gleichung 5.73 definieren.

$$\eta_{th} = \frac{\dot{Q}_{Nutz}}{\dot{m}_{BS} \left(H_{u,BS} + h_{BS} \right) + \dot{m}_{FL} h_{FL}} \tag{5.73}$$

5.3.2 Mischer

Das Simulationsmodell der Verbrennungsanlage beinhaltet an drei Stellen die Mischung zweier Gasströme, genauer eines Frischluft- und eines Rezirkulationsgasstromes. Der abgehende Summenstrom wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit als „Wind" bezeichnet. Abbildung 5-6 stellt die Mischung dieser Gasströme und die zur Berechnung notwendigen Parameter schematisch dar.

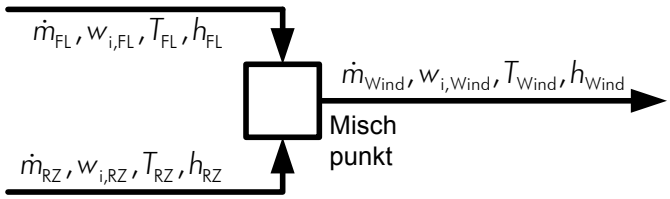


Abbildung 5-6: Mischpunkt zweier Gasströme zur Bilanzierung

Die Berechnung der Zusammensetzung und des thermodynamischen Zustandes des austretenden Gasstromes erfolgt unter Einhaltung der Gesamtmassenbilanz, der Massenbilanz der Einzelkomponenten sowie der Energiebilanz um den Mischpunkt:

$$\dot{m}_{FL} + \dot{m}_{RZ} - \dot{m}_{Wind} = 0 \tag{5.74}$$

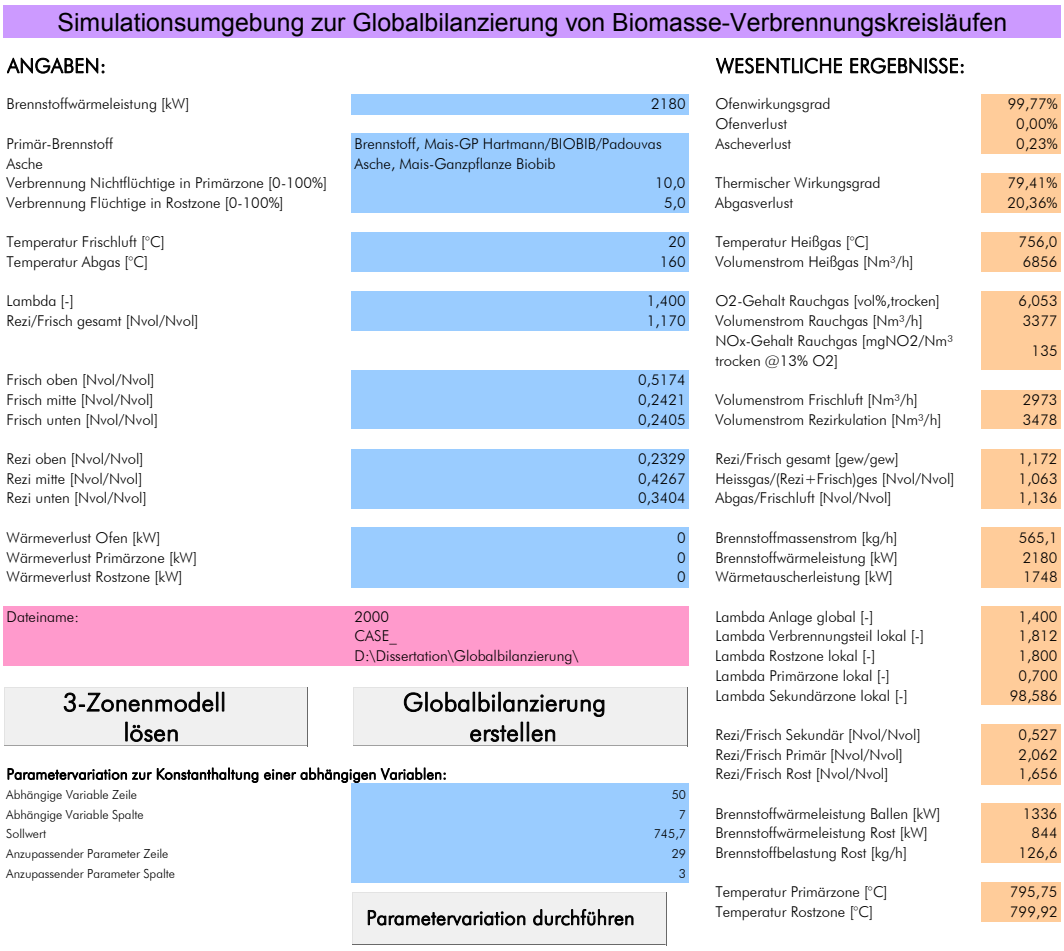
$$\dot{m}_{FL} w_{i,FL} + \dot{m}_{RZ} w_{i,RZ} - \dot{m}_{Wind} w_{i,Wind} = 0 \quad \text{für } i \in CO_2, H_2O, N_2, NO, O_2, SO_2 \tag{5.75}$$

$$\dot{m}_{FL} h_{FL} + \dot{m}_{RZ} h_{RZ} - \dot{m}_{Wind} h_{Wind} = 0 \tag{5.76}$$

Die spezifischen Enthalpien der jeweiligen Gasströme berechnen sich nach den Gleichungen, die in Kapitel 5.1 angegeben wurden.

5.4 Modellimplementierung und Problemlösung

Die beschriebenen Modelle für die Globalbilanzierung der Biomasseverbrennungsanlage wurden in einer kommerziellen Spreadsheet-Tabellenkalulationsumgebung (Microsoft© Office Excel© 2003 11.8328.8329 SP3) implementiert. Über eine grafische Eingabemaske sind die Randbedingungen der Simulation einzugeben und auch die wesentlichsten Simulationsergebnisse ersichtlich. Die Lösung des Gleichungsapparates erfolgt mittels eigens entworfener Problemlöser innerhalb der Tabellenkalkulationsumgebung (Makrofunktionen). Ein Screenshot der entwickelten Simulationsumgebung ist Abbildung 5-7 zu entnehmen.



Simulationsumgebung zur Globalbilanzierung von Biomasse-Verbrennungskreisläufen

ANGABEN:

Brennstoffwärmeleistung [kW]	2180
Primär-Brennstoff	Brennstoff, Mais-GP Hartmann/BIOBIB/Padouvas
Asche	Asche, Mais-Ganzpflanze Biobib
Verbrennung Nichtflüchtige in Primärzone [0-100%]	10,0
Verbrennung Flüchtige in Rostzone [0-100%]	5,0
Temperatur Frischluft [°C]	20
Temperatur Abgas [°C]	160
Lambda [-]	1,400
Rezi/Frisch gesamt [Nvol/Nvol]	1,170
Frisch oben [Nvol/Nvol]	0,5174
Frisch mitte [Nvol/Nvol]	0,2421
Frisch unten [Nvol/Nvol]	0,2405
Rezi oben [Nvol/Nvol]	0,2329
Rezi mitte [Nvol/Nvol]	0,4267
Rezi unten [Nvol/Nvol]	0,3404
Wärmeverlust Ofen [kW]	0
Wärmeverlust Primärzone [kW]	0
Wärmeverlust Rostzone [kW]	0
Dateiname:	2000 CASE_ D:\Dissertation\Globalbilanzierung\

3-Zonenmodell lösen

Globalbilanzierung erstellen

Parametervariation zur Konstanthaltung einer abhängigen Variablen:

Abhängige Variable Zeile	50
Abhängige Variable Spalte	7
Sollwert	745,7
Anzupassender Parameter Zeile	29
Anzupassender Parameter Spalte	3

Parametervariation durchführen

WESENTLICHE ERGEBNISSE:

Ofenwirkungsgrad	99,77%
Ofenverlust	0,00%
Ascheverlust	0,23%
Thermischer Wirkungsgrad	79,41%
Abgasverlust	20,36%
Temperatur Heißgas [°C]	756,0
Volumenstrom Heißgas [Nm³/h]	6856
O2-Gehalt Rauchgas [vol%,trocken]	6,053
Volumenstrom Rauchgas [Nm³/h]	3377
NOx-Gehalt Rauchgas [mgNO2/Nm³ trocken @13% O2]	135
Volumenstrom Frischluft [Nm³/h]	2973
Volumenstrom Rezirkulation [Nm³/h]	3478
Rezi/Frisch gesamt [gew/gew]	1,172
Heissgas/(Rezi+Frisch)ges [Nvol/Nvol]	1,063
Abgas/Frischluft [Nvol/Nvol]	1,136
Brennstoffmassenstrom [kg/h]	565,1
Brennstoffwärmeleistung [kW]	2180
Wärmetauscherleistung [kW]	1748
Lambda Anlage global [-]	1,400
Lambda Verbrennungsteil lokal [-]	1,812
Lambda Rostzone lokal [-]	1,800
Lambda Primärzone lokal [-]	0,700
Lambda Sekundärzone lokal [-]	98,586
Rezi/Frisch Sekundär [Nvol/Nvol]	0,527
Rezi/Frisch Primär [Nvol/Nvol]	2,062
Rezi/Frisch Rost [Nvol/Nvol]	1,656
Brennstoffwärmeleistung Ballen [kW]	1336
Brennstoffwärmeleistung Rost [kW]	844
Brennstoffbelastung Rost [kg/h]	126,6
Temperatur Primärzone [°C]	795,75
Temperatur Rostzone [°C]	799,92

Abbildung 5-7: Screenshot der entwickelten Simulationsumgebung zur Globalbilanzierung von Biomasse-Verbrennungskreisläufen

Der erste Schritt in der Globalbilanzierung ist die Simulation der Gesamtanlage unter Anwendung des Einzonenverbrennungsmodells. Die Lösungsprozedur bei dieser Simulation ist schematisch in Abbildung 5-8 dargestellt. Die gezeigte Lösungsprozedur beinhaltet eine automatisierte Parametervariation zur Einstellung eines gewünschten Wertes für eine beliebige abhängige Variable unter Variation einer beliebigen unabhängigen Variablen. Diese Parametervariation ist über die äußerste Iterationsschleife implementiert, innerhalb der die unabhängige Variable mittels eines Newton-Raphson-Solvers solange angepasst wird, bis die abhängige Variable den geforderten Wert erreicht (Abweichung kleiner als 0,01). Durch diese Funktion ist die Anwendbarkeit des Modells für in der Prozesssimulation übliche Varia-

tionsrechnungen deutlich gesteigert. Drei weitere Iterationsschleifen sind implementiert, wobei zwei jeweils zur Ermittlung von Gastemperaturen unter Verwendung der temperaturabhängigen spezifischen Wärmekapazitäten der Gasbestandteile durchlaufen werden (Abbruchkriterium für die Iteration ist die Abweichung von Soll- und Istwert von kleiner als 0,00001°C). Die dritte Iterationsschleife ist aufgrund der Rückkopplungsschleife durch das Rezirkulationsgas notwendig und verwendet das gleiche Iterationsabbruchkriterium wie die Iterationen der spezifischen Wärmekapazitäten. Diese drei Iterationsschleifen zeigen sehr rasches Konvergenzverhalten, als Eingangswert für den Iterationsschritt $(n+1)$ kann einfach das Ergebnis des Iterationsschrittes n gesetzt werden, die Anwendung eines speziellen Lösungsalgorithmus ist nicht erforderlich.

Eine Simulation mit dem Einzonenmodell ohne Parametervariation dauert auf dem Referenzrechner (Intel®Core™2 Quad CPU Q6600 2,4 GHz, 4 GB RAM) inklusive Speicherung der Ergebnisse etwa 7 Sekunden. Die Simulation unter Anwendung der Parametervariation zur Einstellung einer abhängigen Variablen dauert je nach Typ von abhängiger und unabhängiger Variable zwischen 35 und 55 Sekunden.

Am Ende der Simulation mit dem Einzonenmodell sind sowohl die Massenströme, die Zusammensetzung sowie die thermodynamischen Zustände von Heißgas, Kaltgas, den drei Rezirkulationsgasströmen und den drei Windgasströmen bekannt. Darüber hinaus stehen auch bereits der Ofenwirkungsgrad sowie die sekundärseitige thermische Leistung des Heißgaswärmetauschers, der Abgasverlust sowie der Stickstoffoxidgehalt des Rauchgases zur Verfügung.

Aufbauend auf den Ergebnissen der Simulation mit dem Einzonenverbrennungsmodell erfolgt im zweiten Schritt dann die Simulation mit dem Dreizonenmodell. Die Lösungsprozedur für dieses Modell ist schematisch in Abbildung 5-9 dargestellt. Auch in diesem Modell sind an zwei Stellen Iterationsschleifen für den Lösungsprozess erforderlich. Eine Iterationsschleife wird wiederum zur Berechnung von Gastemperaturen unter Verwendung von temperaturabhängigen spezifischen Wärmekapazitäten mit dem bereits genannten Iterationsabbruchkriterium verwendet. Die zweite Iterationsschleife ist aufgrund der starken Temperaturabhängigkeit der chemischen Reaktionskinetik im Zuge der Berechnung der Rauchgaszusammensetzungen von Primär- und Rostverbrennungszone notwendig. Aus diesem Grund ist die aufwändige Berechnung der Reaktionskinetiken innerhalb der Iterationsschleife mehrmals zu durchlaufen, wodurch die Simulation mit dem Dreizonenmodell relativ zeitaufwändig ist. Deshalb wird das Iterationsabbruchkriterium wesentlich weniger rigoros gesetzt als bei den anderen Iterationsschleifen. Unterschreitet die Abweichung der für die Kinetik verwendeten Temperatur von der berechneten Rauchgastemperatur einen Wert von 1 %, so wird die Iteration abgebrochen. Beide erwähnten Iterationsschleifen konvergieren rasch, sodass auch hier als Eingangswert für den Iterationsschritt $(n+1)$ einfach das Ergebnis des Iterationsschrittes n gesetzt werden kann und kein spezieller Solver angewendet werden muss.

Der wichtigste Schritt im Rahmen der Simulation mit dem Dreizonenverbrennungsmodell ist wie bereits erwähnt die reaktionskinetische Berechnung mit dem Ziel der Ermittlung der Rauchgaszusammensetzung am Ende der Primär- sowie der Rostzone. Der Lösungsvorgang für diesen Teilschritt ist in Abbildung 5-10 illustriert. Hier wird wie bereits in Kapitel 5.2 beschrieben die Konzentrationsänderung der Edukte und Produkte innerhalb eins kurzen finiten Zeitintervalls ermittelt. Nach n Schritten unterschreitet die Konzentration des Sauerstoffs oder der brennbaren Komponenten im Reaktionsgemisch eine vorgegebene Cut-Off-Schwelle (in

dieser Arbeit wurde ein Wert von 10^{-8} mol/l verwendet), womit die Reaktion endet und die Gaszusammensetzung bei Verlassen der Reaktionszone angegeben werden kann. Voraussetzung hierfür ist wie bereits erwähnt eine ideale Durchmischung des Reaktors ohne Sauerstoffschlupf.

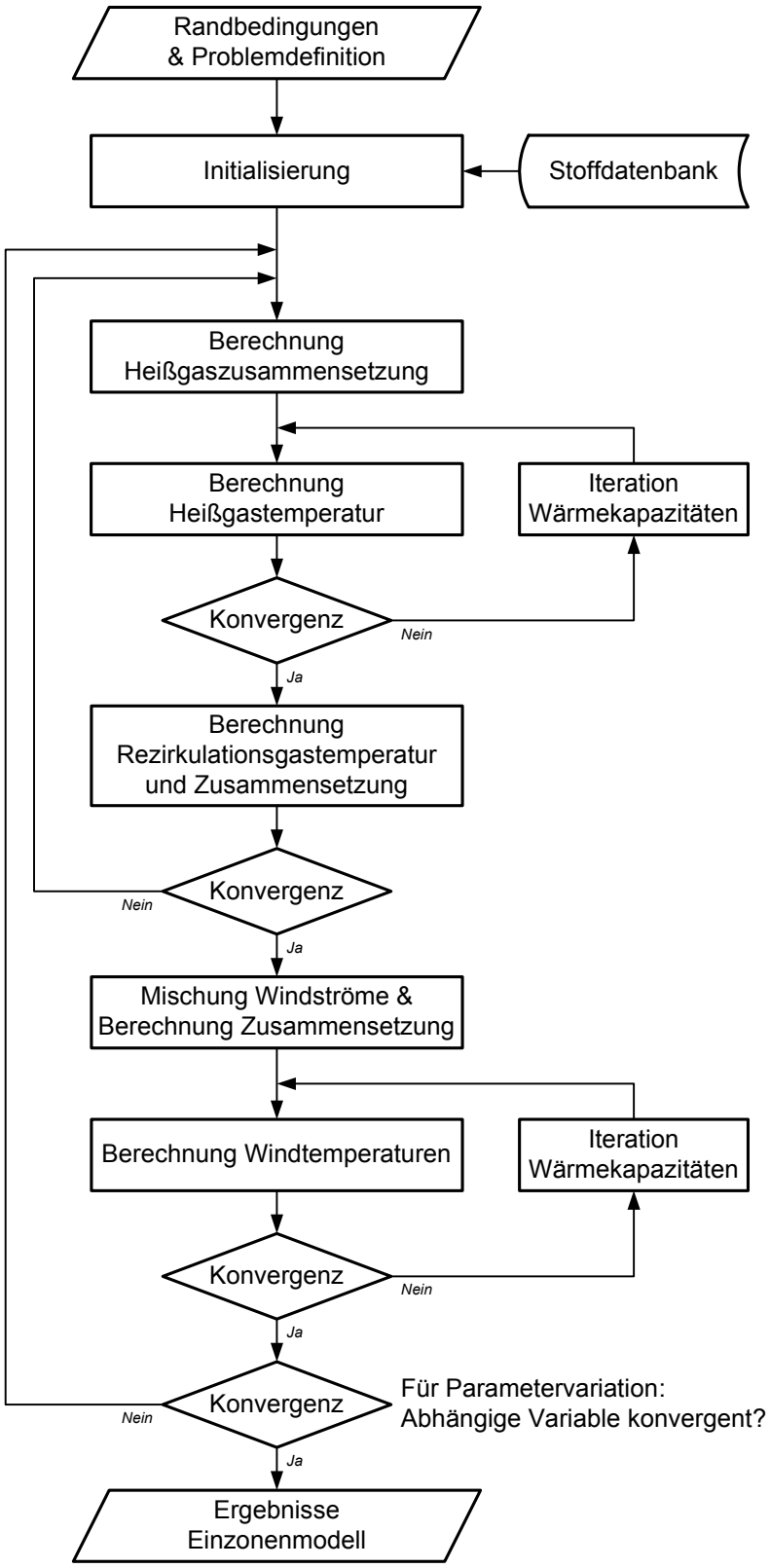


Abbildung 5-8: Lösungsprozedur Einzonenverbrennungsmodell

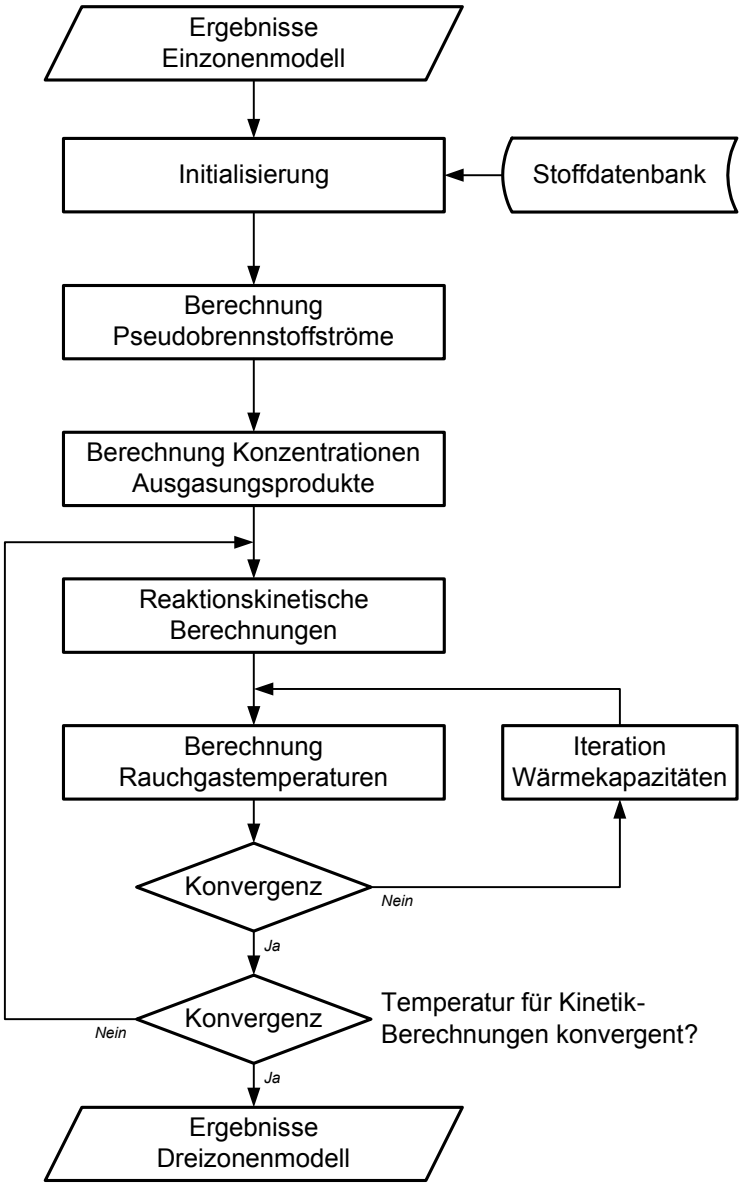


Abbildung 5-9: Lösungsprozedur Dreizonenverbrennungsmodell

Der wesentlichste Parameter bei der numerischen Simulation der chemischen Reaktionskinetik ist die Diskretisierung, in diesem Fall die zeitliche Diskretisierung des Reaktionsvorganges (Zeitschritt in Gleichung 5.67). Eine grobe Diskretisierung führt zwar zu sehr hohen Rechengeschwindigkeiten, allerdings auch zu teilweise groben Ungenauigkeiten innerhalb der Berechnung. Die Größe der verwendeten Zeitschritte hat aber nur indirekten Einfluss auf die Genauigkeit der Berechnung, der wesentliche Faktor ist die Änderung der Konzentrationen der Edukte innerhalb der jeweiligen Zeitschritte. Deshalb wird in dieser Arbeit eine adaptive Schrittweite eingeführt, bei der die Länge des jeweiligen Zeitschritts so gewählt wird, dass die maximale Konzentrationsänderung aller beteiligten Reaktanten innerhalb des Zeitschritts kleiner als ein festzulegendes Limit bleibt. Die Intervalldauer, welche zur Einhaltung dieses Limits erforderlich ist, wird innerhalb jedes einzelnen Schritts mittels Newton-Raphson-Solver ermittelt.

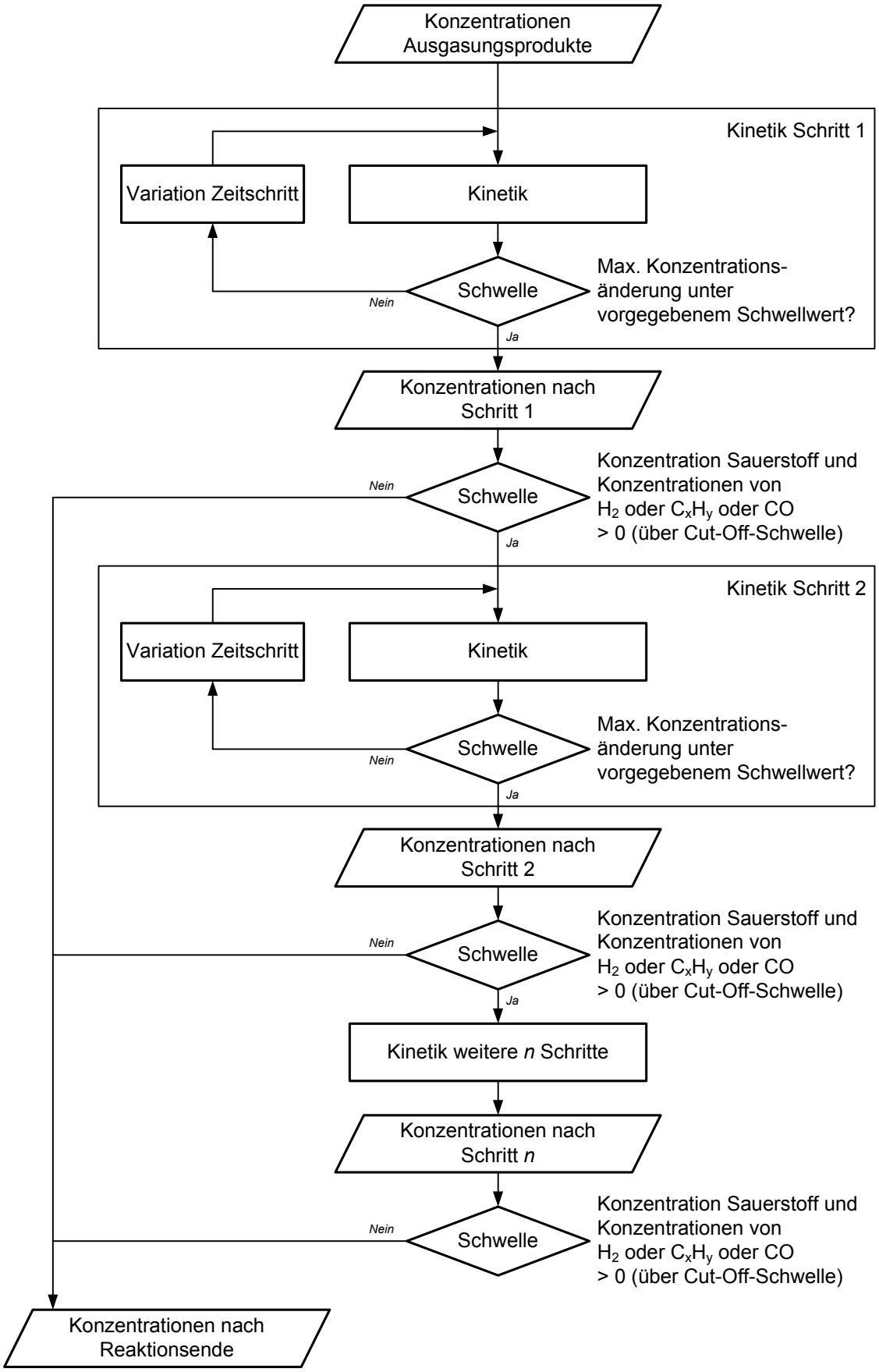


Abbildung 5-10: Lösungsprozedur der reaktionskinetischen Berechnungen im Dreizonen-verbrennungsmodell

Der Einfluss, den die Wahl des Konzentrationsänderungs-Limits auf den Konzentrationsverlauf der Gasbestandteile hat, ist in Abbildung 5-11 dargestellt. Hier sind die Konzentrationsverläufe für einen exemplarischen Satz von Reaktionsrandbedingungen (Anfangskonzentrationen aller Gaskomponenten sowie Reaktionstemperatur) unter Verwendung mehr oder weniger feiner zeitlicher Diskretisierung aufgetragen. Es sind Verläufe für ein Konzentrationsänderungs-Limit von 40 %, 25 %, 10 %, 1 % und 0,1 % gegeben. Die Kurven für die Limits 1 % und 0,1 % sind in der Darstellung kaum mehr zu unterscheiden.

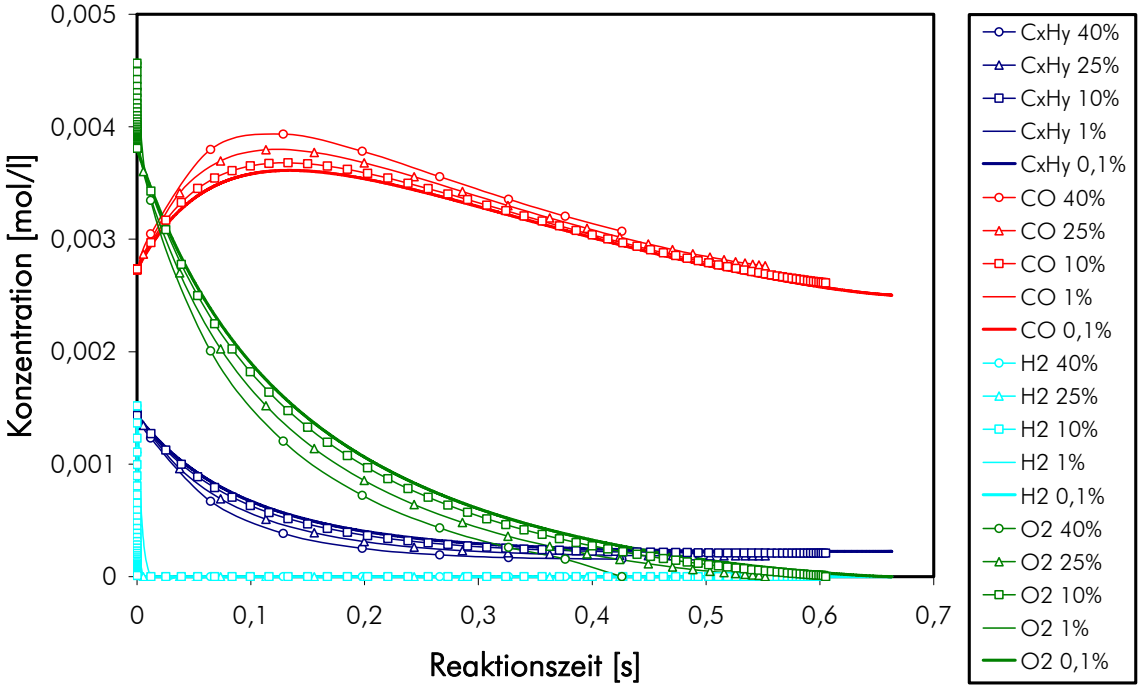


Abbildung 5-11: Konzentrationsverläufe der reaktionsbestimmenden Gaskomponenten im Dreizonenverbrennungsmodell für verschiedene zeitliche Diskretisierungen

Das Diagramm zeigt, dass sich die Kurven mit feiner werdender Auflösung immer mehr aber auch immer langsamer einem „wahren" Konzentrationsverlauf nähern, der mit infinitesimal feiner Auflösung zu ermitteln ist. Bei grober Auflösung, sprich hoher erlaubter Konzentrationsänderung in jedem Zeitintervall, weichen sowohl der Konzentrationsverlauf als auch die erreichten Konzentrationen zum Reaktionsende zum Teil stark von den „wahren" Werten ab. Tabelle 5-1 zeigt die Gaszusammensetzung bei Reaktionsende, welche mit dem Dreizonenmodell unter Anwendung verschiedener Werte für das Konzentrationsänderungs-Limit und die Cut-Off-Schwelle für den gleichen exemplarischen Satz von Reaktionsrandbedingungen errechnet wird.

Um einen leistungsfähigen Kompromiss aus Genauigkeit und Rechendauer zu erhalten, wird ein Konzentrationsänderungs-Limit von 10 % empfohlen, um ausreichende Gitterkonvergenz sicherstellen zu können. In dieser Arbeit wird zur Erhöhung der Genauigkeit allerdings ein Limit von 1 % verwendet. Unter Verwendung dieses Limits sind für durchschnittliche Feuerungsbedingungen zwischen 2000 und 2500 diskrete Zeitschritte bis zum Erreichen des Endes der chemischen Reaktion erforderlich. Die Simulation mit dem Dreizonenverbrennungsmodell dauert auf dem Referenzrechner für ein Limit von 10 % etwa 28 Sekunden und für ein Limit von 1 % etwa 104 Sekunden sofern nur ein Iterationsschritt aufgrund konvergenter Reaktionstemperatur notwendig ist. Muss die korrekte Reaktionstemperatur allerdings wie

oben beschrieben erst iterativ ermittelt werden, so sind je nach Startwert zwischen 2 und 6 Iterationen notwendig, wodurch sich die Rechendauer für das Dreizonenmodell mit einem Konzentrationsänderungs-Limit von 1 % auf 3,5 bis 9 Minuten verlängert.

Tabelle 5-1: Gaszusammensetzung bei Reaktionsende errechnet mit dem Dreizonenverbrennungsmodell für unterschiedliche Einstellungen der numerischen Diskretisierung

	$\Delta c_{max} = 40\%$ $c_{cutoff} = 10^{-4}$	$\Delta c_{max} = 25\%$ $c_{cutoff} = 10^{-5}$	$\Delta c_{max} = 10\%$ $c_{cutoff} = 10^{-5}$	$\Delta c_{max} = 1{,}0\%$ $c_{cutoff} = 10^{-7}$	$\Delta c_{max} = 0{,}1\%$ $c_{cutoff} = 10^{-8}$
CO	7,14	6,41	6,06	5,83	5,81
CO_2	14,40	15,32	15,70	15,98	16,00
C_xH_y	0,34	0,41	0,46	0,49	0,49
H_2	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
H_2O	14,61	14,48	14,38	14,33	14,32
O_2	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
N_2	63,51	63,39	63,39	63,38	63,38

Am Ende der Simulation mit dem Dreizonenverbrennungsmodell stehen als zusätzliche Ergebnisse nun auch noch die lokalen Luftverhältniszahlen und die zu erwartenden Gastemperaturen der einzelnen Verbrennungszonen zur Verfügung. Darüber hinaus liegen auch die Verteilung der Brennstoffwärmeleistung und des Brennstoffmassenstromes zwischen Primärzone und Rostzone vor, womit die erste Dimensionierung des Nachverbrennungsrostes möglich ist.

6 Numerische Strömungssimulation

Numerische Strömungssimulation, kurz auch CFD (*Computational Fluid Dynamics*), bezeichnet im Wesentlichen die Beschreibung fluiddynamischer Phänomene, also in Bewegung befindlicher Fluide, mit den Methoden der Strömungsmechanik und der numerischen Problemlösung (Tu et al., 2008). Mit der laufend steigenden Leistung moderner Computersysteme entwickelte sich die CFD von anfänglich rein akademischen Anwendungen zu einem heute sehr weit verbreiteten und hoch geschätzten Werkzeug des Ingenieurswesens (Paschedag, 2004). Einfache Strömungsphänomene können oft noch analytisch beschrieben werden, die meisten Vorgänge von praktischem Interesse sind aufgrund ihrer Komplexität aber nicht mehr direkt, sondern nur mehr numerisch zu lösen. Hierzu wird leistungsfähige Computerhardware und Software benötigt. Neben dem Wissen über die mathematische Beschreibung der physikalischen Vorgänge ist auch detailliertes Wissen zur numerischen Lösung komplexer nichtlinearer Gleichungssysteme erforderlich. Dadurch ergibt sich eine intensive Verflechtung der Strömungsmechanik mit den Fachbereichen Mathematik, Numerik und Computerwissenschaften, wodurch CFD zum komplexen interdisziplinären Instrument wird. Aufgrund der verstärkten Anwendung der Methode in der Industrie ist heute aber eine Reihe kommerzieller Programme auf dem Markt, mithilfe derer auch der in der Strömungsmechanik weniger versierte Ingenieur sinnvolle CFD-Simulationen durchführen kann. Die Software-Pakete werden auch laufend weiter entwickelt und damit die Anwendbarkeit auf Probleme in der verfahrenstechnischen Praxis mehr und mehr verbessert (Paschedag, 2004).

Gerade die Tatsache, dass CFD-Resultate heute mit relativ wenig Hintergrundwissen produziert werden können, birgt auch die größte Gefahr bei der Anwendung der Methode. Die eingesetzten Modelle zur Beschreibung der physikalischen Effekte haben konkrete Anwendungsbereiche, außerhalb derer sie ungültig oder ungenau sind. Die bis heute unvollständig verstandene Turbulenz bringt Stochastik und Unsicherheit in die Simulation. Die numerische Herangehensweise verursacht Ungenauigkeiten oder Fehlerquellen aufgrund der räumlichen Auflösung und der Diskretisierung der Bilanzgleichungen. Und schließlich hängt die Qualität eines Simulationsergebnisses nicht unwesentlich von der Art und Qualität der angesetzten Randbedingungen ab (Anderson et al., 1992). Alles in allem ist die CFD damit kein Allheilmittel, in das blind vertraut werden darf. Bei kritischer Ergebnisinterpretation durch den erfahrenen Ingenieur unter Kenntnis der möglichen Fehlerquellen und Ungenauigkeiten ist die CFD jedoch ein hervorragendes Werkzeug bei der Untersuchung von Vorgängen, bei denen Strömungen eine relevante Rolle spielen (Paschedag, 2004). Sie ermöglicht Einblicke, die zum tieferen Verständnis eines Systems beitragen können, sie liefert Ergebnisse, die experimentell kaum oder nur schwer erfassbar sind, sie bietet die Möglichkeit der Entwicklung und Optimierung von Systemen in deutlich kürzeren Zeiträumen. Die momentane Entwicklung

von Rechnerkapazität für die Simulation und die Degression der Kosten für die Infrastruktur sowie die vielen wissenschaftlichen Arbeiten zur Verbesserung der Modellierung und die Bereitstellung verbesserter experimenteller Daten zur Parametrierung und Validierung tragen dazu bei, dass CFD künftig noch intensiver, mit höherer Genauigkeit und höherem Detaillierungsgrad angewendet werden wird (Anderson et al., 1992; Anderson, 1995; Paschedag, 2004; Thevenin et al., 2008; Tu et al., 2008).

CFD in der Verfahrenstechnik ist meist ein komplexes Gebiet, da nicht nur das Strömungsfeld beschrieben werden muss, was im Falle von Mehrphasenproblemen schon schwierig genug ist, sondern auch der Umsatz in chemischen Reaktionen, Stoff- und Energietransport. Reaktionsgeschwindigkeiten schneller chemischer Reaktionen, wie es Verbrennungsreaktionen meistens sind, sind experimentell oft schwierig zu erfassen (Temperaturen, Ofenatmosphäre) und von der Mischungskinetik oftmals schwierig zu entkoppeln. Meistens gelangt man hier relativ rasch an die Grenzen der Bereitstellung physikalisch korrekter Parameter für die Modellierung aber auch an die Grenzen der Rechnerleistung. Aus diesem Grund haben CFD-Ergebnisse in der Verfahrenstechnik oft Näherungscharakter und die Qualität der Ergebnisse ist oft nicht einfach abzuschätzen (Paschedag, 2004). Deshalb ist es dem erfahrenen Ingenieur überlassen, CFD-Ergebnisse zu interpretieren und die wesentlichen Schlussfolgerungen dort zu ziehen, wo es die Genauigkeit von Modellierung und Simulation zulassen. Mit Bedacht eingesetzt liefert CFD damit auch in der Verfahrenstechnik einen wesentlichen Beitrag sowohl zur detaillierten Analyse eines Reaktors und auch zur Erlangung eines grundlegenden Verständnisses über die ablaufenden Prozesse. Immerhin ist CFD heute das einzige Werkzeug, welches mit vertretbarem Aufwand die zeitlich und örtlich aufgelösten Verhältnisse in sonst nur schwer zugänglichen Reaktorsystemen abbilden kann (Paschedag, 2004). Darüber hinaus ist die Untersuchung des Strömungsfeldes ohne Beeinflussung durch ein Messgerät möglich (Wandeffekte).

Die Liste erfolgreicher Anwendungen der numerischen Strömungssimulation bei verfahrenstechnischen Fragestellungen in der publizierten Literatur ist lang und es können an dieser Stelle nur ausgewählte Arbeiten erwähnt werden. Bereits in der Dissertation von Zinser aus dem Jahr 1985 (Zinser, 1985) wird die heterogene Verbrennung technischer Brennstoffe (Steinkohle-Staubfeuerung) mittels CFD beschrieben. Es werden Strömung, Turbulenz, Reaktion und Strahlung mit Modellen beschrieben, die teilweise auch heute noch in Verwendung sind. Die Übereinstimmung der relevanten Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten ist hervorragend. Die Optimierung kohlegefeuerter Verbrennungsapparate speziell mit dem Ziel der Minimierung von Stickstoffoxidemissionen sind Inhalt der Arbeiten von Zarnescu et al. (Zarnescu et al., 2002) und Stopford (Stopford, 2002), beide aus dem Jahr 2002. Trotz der komplexen Modellierung der NO_x-Entstehung zeigen beide Arbeiten das große Potential der Methode für die Prozess- und Apparateoptimierung. Ein weiteres gutes Beispiel wissenschaftlicher Anwendung von CFD ist die Dissertation von Scharler aus dem Jahr 2001 (Scharler, 2001). Hier wird der kommerzielle Solver FLUENT© für die Beschreibung der Verbrennung von Biomasse in Rostfeuerungen verwendet und führt zu einem tieferen Verständnis der auftretenden physikalischen Effekte. Die Arbeit von Dixon et al. aus dem Jahr 2005 (Dixon et al., 2005) zeigt die Anwendung von CFD bei der Entwicklung einer innovativen Methode der Bagasse-Verbrennung und stellt mehrere erfolgreiche Optimierungsschritte auf Basis der erzielten Simulationsergebnisse vor. Eine weitere hervorragende Arbeit stellt die Dissertation von Klason von 2006 dar (Klason, 2006.), in der ähnlich wie bei Scharler die Biomasse-Rostfeuerung modelliert und untersucht wird. Sehr detailliert werden dort die ver-

wendeten Methoden beschrieben und die entwickelten Modelle an einfachen Testfällen validiert. Eine Zusammenfassung von Methoden, die heute zur modellmäßigen Beschreibung befeuerter Kraftwerke zur Verfügung stehen, wird beispielsweise im Standardwerk von Epple et al. (Epple et al., 2009) gegeben.

Der folgende Abschnitt beleuchtet alle wesentlichen Aspekte der CFD für die vorliegende Arbeit in relativ hoher Detaillierung. Während der Recherche für die vorliegende Arbeit wurde deutlich, dass zwar alle relevanten Informationen für den Anwender und Entwickler verfügbar, jedoch über eine Vielzahl von Publikationen verteilt sind. Aus diesem Grund erscheint es dem Verfasser hilfreich, diese Informationen in einem ausführlichen Kapitel zu bündeln.

6.1 Grundlagen der Numerischen Strömungssimulation (CFD)

Betrachtet man die Grundlagen der CFD genauer, so wird deutlich, dass diese auf drei Standbeinen ruht. Ohne eine Reihung darzustellen, lauten diese wie folgt:

- Verwendete Modelle zur Beschreibung der physikalischen Effekte
- Diskretisierung des Lösungsraumes
- Randbedingungen

Klar ist, dass die Strömungssimulation nur so gut sein kann, wie die eingesetzten Modelle zur Beschreibung der Wirklichkeit. Neben den Erhaltungsgleichungen zur Beschreibung des Impuls- und Energietransports sind bei verfahrenstechnischen Fragestellungen speziell auch die Modellierung des Stoffumsatzes und des Stofftransportes, der Turbulenz der Strömung, des Energieaustauschs durch Wärmestrahlung sowie die Beschreibung heterogener oder mehrphasiger Bereiche von großer Bedeutung. Auf die Modellierung wird in der vorliegenden Arbeit intensiv eingegangen; hier sind bereits viele Modelle standardmäßig verfügbar, einige mussten aber erst selbst entwickelt oder erweitert werden. Beide Ansätze verlangen in einer wissenschaftlichen Arbeit eine adäquate Validierung.

Da die CFD ein numerisches Werkzeug ist, ist auch die Diskretisierung von großer Bedeutung. Hierzu zählt die räumliche Diskretisierung, die in Quantität (werden Modelle auf 1000 oder 1Million Zellen angewandt; beides kann in der jeweiligen Situation sinnvoll sein) und auch in Qualität (nicht alle Diskretisierungsschemata erlauben gleiche numerische Qualität der Ergebnisse) zu berücksichtigen ist. Dazu gehören aber auch die Diskretisierung der Modellgleichungen sowie die Algorithmen zur Generierung einer numerischen Lösung. Eine gute Diskretisierung ist Voraussetzung für gute Ergebnisse (numerische Diffusion).

Das dritte wesentliche Kriterium sind die verwendeten Randbedingungen, sprich die Zustände und Stoffströme an den Eintritts- und Austrittsstellen der Simulationsdomäne. Selbst das höchstentwickelte CFD-Modell ist zum Scheitern verurteilt, wenn kein geschlossenes System an Randbedingungen aufgestellt werden kann. Für die vorliegende Arbeit werden die Ergebnisse der Globalbilanzierung in verwendbare CFD-Randbedingungen umformuliert. Aufgrund des Rechenaufwandes ist klar, dass nicht alle möglichen Szenarios mit CFD simu-

liert werden können; hier muss auf Basis der Globalbilanzierung eine fundierte Vorauswahl getroffen werden. Wird allen drei Standbeinen ausreichende Aufmerksamkeit gewidmet, so können aussagekräftige CFD-Resultate erwartet werden.

Zur Beschreibung der physikalischen Vorgänge innerhalb der Simulationsdomäne werden Bilanz- und Modellgleichungen hergeleitet und entwickelt, die in den meisten Fällen gekoppelte partielle Differentialgleichungen darstellen. Darunter fallen Erhaltungsgleichungen für Masse (Kontinuitätsgleichung), Spezies, Impuls (z. B. Navier-Stokes-Gleichung) und Energie, sowie Modellgleichungen zur Beschreibung von Turbulenzeffekten, des Stoffüberganges und chemischer Reaktionen sowie des Strahlungswärmeaustausches. Eine analytische Lösung ist nur in den wenigsten Fällen möglich (Paschedag, 2004), sodass in der Regel eine numerische Lösung des Gleichungssystems erforderlich wird. Hierzu werden die partiellen Differentialgleichungen des kontinuierlichen Strömungsgebietes in ein algebraisches Gleichungssystem auf einem diskretisierten Strömungsgebiet umgewandelt. Die Festlegung der diskreten Punkte im Raum, auf die die Gleichungen angewandt werden, wird als Diskretisierung oder Vernetzung des Modellgebiets bezeichnet. Die Herleitung des algebraischen Gleichungssystems wird als Diskretisierung der Gleichungen bezeichnet. Das so entstandene Gleichungssystem ist sodann mithilfe von Computern lösbar (Paschedag, 2004).

Zur Lösung des genannten Gleichungssystems wurde eine Reihe verschiedenster Methoden entwickelt, die sich im Wesentlichen wie folgt unterteilen lassen (Paschedag, 2004):

- Finite-Differenzen-Methode (FDM)
- Finite-Volumina-Methode (FVM)
- Finite-Elemente-Methode (FEM)
- Lattice-Boltzmann-Methode (LBM)

Die im Bereich der klassischen CFD momentan am häufigsten zum Einsatz gelangende, und auch in der vorliegenden Arbeit verwendete, Methode ist die Methode der Finiten Volumina, auf die in den folgenden Kapiteln näher eingegangen werden soll.

Das erste unmittelbare Ziel der durchgeführten CFD-Simulationen ist die Ermittlung ortsaufgelöster Lösungsfelder für Gasgeschwindigkeit, Gaszusammensetzung und Temperatur. Hierfür ist die Bilanzierung von Impuls, Masse und Energie für alle finiten Volumenelemente der Simulationsdomäne erforderlich. Diese wird verkörpert durch die Impulsbilanz/Navier-Stokes-Gleichung, die Kontinuitätsgleichung, die Speziesbilanzen sowie die Energiebilanz. Der Einfluss von Turbulenz auf die Strömung und auf chemische Reaktionen (Impuls, turbulente Diffusion) wird modelliert. Die Kinetik chemischer Reaktionen wird ebenfalls modelliert. Homogene Gasphasenreaktionen sind dabei im Wesentlichen Sand der Technik; heterogene Reaktionsschritte während des Abbrandes des festen Brennstoffes werden aber durch einen in der vorliegenden Arbeit selbst entwickelten Modellansatz erfasst. Auch das fluiddynamische Verhalten des Brennstoffs (Widerstand gegen Durchströmung) ist zu modellieren. Diese Modelle werden gemeinsam mit den Bilanzgleichungen für jede finite Volumenzelle angesetzt. Durch Aufprägung von Randbedingungen (Stoffströme und Zustandsparameter an Ein- und Ausgängen der Simulationsdomäne) wird das erhaltene Gesamtmodell zum mathematisch lösbaren Problem. Die Lösung des Problems erfolgt auf numerischem Weg, wobei in der vorliegenden Arbeit die Gasphase und die feste Brennstoffphase zunächst getrennt voneinander gelöst und anschließend zusammengeführt werden.

Die wiederholte (iterative) Lösung beider Phasen führt in der Folge zur Lösung des Gesamtproblems.

Für eine tiefergehende Einführung in die CFD sei auf die sehr umfangreiche Literatur verwiesen. Ein sehr anwendungsorientierter Zugang zur die CFD findet sich beispielsweise bei Tu et al. (Tu et al., 2008). Eine Sammlung von Beispielen, bei denen CFD erfolgreich zur Problemlösung und Optimierung eingesetzt werden konnte, ist Thevenin et al. (Thevenin et al., 2008) zu entnehmen.

Abschließend sei an dieser Stelle angemerkt, dass in der vorliegenden Arbeit ausschließlich stationäre Strömungssimulation betrieben wird. Instationäre CFD ist heute durchaus bei einfachen Problemen bereits zum Stand der Technik geworden, ist für komplexere Anwendungen allerdings extrem rechenaufwändig. Je nach relevanter kritischer Zeitskala ist das gesamte Lösungsfeld innerhalb mehr oder weniger kurzer Zeitschritte wiederholt zu lösen (*time-stepping*); die Simulation der physikalischen Effekte während einer Realminute kann bei komplexeren Problemstellungen auch auf leistungsfähigen Rechnern durchaus mehrere Wochen umfassen. Es ist davon auszugehen, dass für die vorliegende Arbeit der mögliche Wissenszuwachs einer instationären Simulation nicht im Verhältnis zum zusätzlichen Aufwand steht.

6.2 Diskretisierung des Lösungsraumes und Gittergenerierung

Wie bereits erwähnt ist zur Lösung des aufgestellten Gleichungssystems eine Diskretisierung des Lösungsraumes durchzuführen. In dieser Arbeit erfolgt die Lösungsermittlung mit der Methode der Finiten Volumina (FVM). Im Zuge dieser Diskretisierung wird der gesamte interessierende Strömungsraum (Simulationsdomäne) in eine endliche Zahl von Kontrollvolumen mit bestimmtem Rauminhalt (ungleich Null) unterteilt. Wichtig dabei ist, dass jede Methode der CFD dabei von der Kontinuumstheorie ausgeht, das Fluid also als kontinuierlich betrachtet wird und keine Einzelmoleküle aufgelöst werden. In der CFD-Community ist seit langem bekannt, dass die Qualität des Ergebnisses einer CFD-Analyse nicht nur von den eingesetzten Modellen, sondern auch sehr wesentlich vom verwendeten Gitter abhängt (Hölling et al., 2004). Die numerisch besten Ergebnisse werden erhalten, wenn dass räumliche Gitter eine Strukturierung aufweist (strukturiertes Gitter), die Methode ist allerdings auch auf blockstrukturierte oder unstrukturierte Gitter anwendbar (Paschedag, 2004). Die Lösung wird bei der FVM nicht für die einzelnen Gitterpunkte ermittelt, sondern als repräsentativer Wert für die durch das Gitter erzeugten Zellen. Die Diskretisierung der Differentialgleichungen erfolgt hier also durch Integration über jede einzelne diskrete Volumenzelle; zur Bilanzierung der Bilanzgrößen werden deren Flüsse über die einzelnen Zellgrenzen integriert. Paschedag (Paschedag, 2004) beschreibt die Methode zwar als weniger übersichtlich als andere, hebt dafür aber die physiknahe Vorgangsweise und die anschauliche Fehlerabschätzung als wesentliche Vorteile hervor. Bereits die ältesten CFD-Codes verwenden FVM zur Problemlösung und auch in den heute meistverbreiteten kommerziellen Produkten wird diese Methode herangezogen.

Im folgenden Abschnitt werden zunächst die Grundlagen der Gittergenerierung für numerische Zwecke erörtert und anschließend wird auf einen speziellen Aspekt der Diskretisierung in dieser Arbeit, den Mehrgitter-Ansatz, eingegangen. Abschließend wird das Gitter der in der vorliegenden Arbeit untersuchten Ofengeometrie in detaillierter Form dargestellt.

6.2.1 Grundlagen der Gittergenerierung

Die Diskretisierung des dreidimensionalen Simulationsraumes beginnt üblicherweise mit der zweidimensionalen Diskretisierung von Flächen (dies können reale Wände oder auch interne Hilfsflächen sein), aus denen im Anschluss wiederum über verschiedene Algorithmen das Volumengitter aufgebaut werden kann. Bei dieser Vorgangsweise bleiben dem Gitterentwickler die meisten Möglichkeiten zur Anpassung des Gitters an die jeweils zu diskretisierende Geometrie. Oberflächengitter können sich in der Regel aus Dreieckszellen oder/und Viereckszellen zusammensetzen; einige andere CFD-Solver erlauben auch höhere Polygone. Die daraus abzuleitenden Volumengitter bestehen dann aus Tetraedern, Pentaedern wie Keilen (*wedges*) oder Pyramiden sowie aus Hexaedern (Quader, Würfel). Alle Oberflächengitter, die in der vorliegenden Arbeit verwendet wurden, bestehen aus Viereckszellen und sind möglichst strukturiert oder blockstrukturiert ausgeführt; in vielen Teilbereichen konnte auf ein unstrukturiertes Gitter aber nicht verzichtet werden. Zur Erstellung der Geometrien der in dieser Arbeit untersuchten Apparate sowie zur Erstellung der Gitter für die Simulation wurde die kommerzielle CFD-Preprozessor-Software GAMBIT© in den Versionen 2.0 bis 2.4 des Unternehmens ANSYS, Inc. verwendet.

Die Veranschaulichung der unterschiedlichen Diskretisierungsschemata soll im Folgenden anhand einiger einfacher Beispiele durchgeführt werden. Abbildung 6-1 zeigt verschiedene Oberflächengitter auf einer quadratischen Fläche. Es sind sowohl dreieckige (durchwegs unstrukturiert) als auch viereckige Zellen (strukturiert sowie zur Anpassung der räumlichen Auflösung auch unstrukturiert) dargestellt. Der Algorithmus zur Erstellung eines strukturierten Gitters wird im Preprozessor als *map* bezeichnet, jener für unstrukturierte Gitter wird als *pave* bezeichnet. Die Abbildung macht auch klar, welche Vorgangsweise zu wählen ist, wenn in speziellen Bereichen der Geometrie zur Erhöhung der räumlichen Auflösung (und verbesserten Abbildung geometrischer Details) das Gitter verfeinert werden muss. In Abbildung 6-2 sind die möglichen Diskretisierungsschemata für eine Dreiecksfläche bildhaft dargestellt, wobei eine solche im besten Fall blockstrukturiert, ansonsten lediglich unstrukturiert diskretisiert werden kann. In Abbildung 6-3 sind schließlich mögliche Gitterstrukturen für eine kreisförmige Fläche (strukturiert, blockstrukturiert und unstrukturiert) dargestellt.

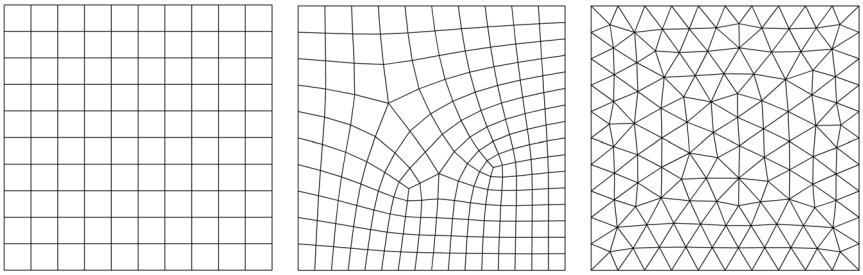


Abbildung 6-1: Strukturiertes und unstrukturiertes Gitter mit Viereckszellen sowie unstrukturiertes Gitter mit Dreieckszellen am Beispiel des Oberflächengitters auf einem Quadrat

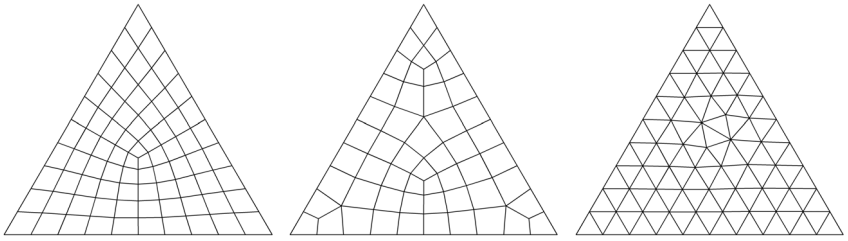


Abbildung 6-2: Blockstrukturiertes und unstrukturiertes Gitter mit Viereckszellen sowie unstrukturiertes Gitter mit Dreieckszellen am Beispiel des Oberflächengitters auf einem gleichseitigen Dreieck

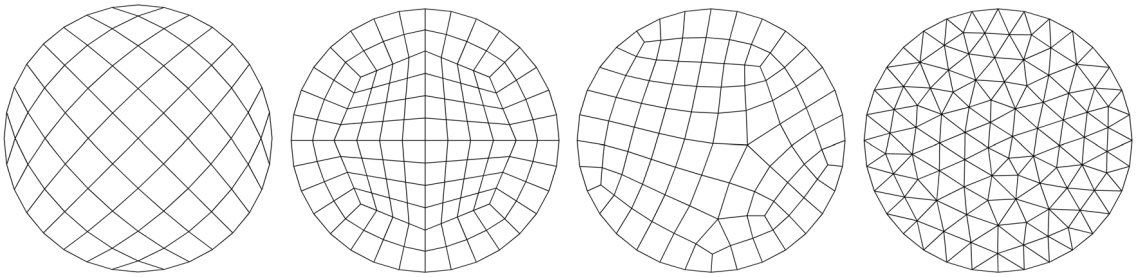


Abbildung 6-3: Strukturiertes, blockstrukturiertes und unstrukturiertes Gitter mit Viereckszellen sowie unstrukturiertes Gitter mit Dreieckszellen am Beispiel des Oberflächengitters auf einem Kreis

Aus den Oberflächengittern kann durch Projektion entlang einer Projektionslinie das entsprechende Volumengitter aufgebaut werden. Diese Projektionslinie muss weder zwingend eine Gerade sein, noch eine Flächennormale auf die Quellenfläche darstellen; Quell- und Deckfläche müssen nicht parallel sein. Sofern der geometrische Körper topologisch korrekt definiert ist, kann der verwendete Diskretisierungsalgorithmus das Volumengitter in den meisten Fällen auch korrekt erstellen. Der Algorithmus, der diese räumliche Diskretisierung durch Projektion durchführt, wird im verwendeten Geometrie-Preprozessor als *cooper*-Algorithmus bezeichnet. Entlang der Projektionslinie darf das Gitter nur strukturiert sein (die Seitenflächen des topologischen Quaders können also nur mit *map* diskretisiert werden, während die Quelle durchaus auch *pave* sein darf), es ist aber dennoch auch ein nicht-äquidistantes Gitter zur lokalen Erhöhung der räumlichen Auflösung zugelassen.

Wie bereits erwähnt, unterstützt in den kommerziellen Produkten eine Reihe von Algorithmen den Entwickler bei der Gittergenerierung. Einen sehr detaillierten Einblick zu Aufbau und Erzeugung strukturierter Gitter gibt die Arbeit von Farrashkhalvat et al. (Farrashkhalvat et al., 2003). Auch unstrukturierte Gitter werden dort kurz angesprochen. Eine Einführung in das Thema der Gittergenerierung wird auch bei Cebeci (Cebeci et al., 2005) gegeben, während Details zu Methoden der Gittergenerierung bei Chung (Chung, 2002), Löhner (Löhner, 2001) und Date (Date, 2005) angesprochen werden.

Alle Volumengitter in dieser Arbeit verwenden ausschließlich Hexaeder zur Diskretisierung. Durch diese Auflage wird zwar die Gittergenerierung speziell bei unregelmäßigen und komplexen Geometrien schwierig und sehr aufwändig, in der Literatur wird aber bestätigt (Anderson, 1995; Löhner, 2001; Chung, 2002; Farrashkhalvat et al., 2003; Lomax et al., 2003; Leveque, 2004; Paschedag, 2004; Cebeci et al., 2005; Date, 2005; Tu et al., 2008), dass rein hexaedrische Gitter eine Simulation von höherer Qualität erlauben (vorwie-

gend unter den Aspekten der numerischen Diffusion, Konvergenzverhalten und der Lösungsstabilität). Das Handbuch des verwendeten CFD-Solvers FLUENT© merkt darüber hinaus an (FLUENT, 2005), dass die Einsparung von Volumenzellen durch Streckung der einzelnen Kontrollvolumina in eine Raumrichtung bei hexaedrischen Zellen effektiver durchgeführt werden kann, da solche Zellen ein höheres Längen-zu-Breiten-Verhältnis tolerieren. Dieser Parameter ist zur Bestimmung der Qualität eines Gitters von großer Wichtigkeit, da damit die räumliche Verzerrung der Zellen, nach Paschedag (Paschedag, 2004) die Entartung vom regulären geometrischen Körper, und damit deren Tendenz zur Verursachung numerischer Instabilitäten und numerischer Diffusion quantifiziert wird. Je nach Quelle spricht man hier vom Längenverhältnis, *aspect ratio*, *scewness factor* oder *equi-angle-scew*. Vorwiegend der letztgenannte Parameter wird im kommerziellen Produktpaket FLUENT©/GAMBIT© verwendet und soll für die schlechteste Zelle im Gitter einen Wert von 0,98 (besser 0,96) nicht überschreiten, um das Konvergenzverhalten und die numerische Diffusion nicht negativ zu beeinflussen (FLUENT, 2005). Zusätzlich bestimmt auch ganz allgemein die räumliche Auflösung eines Gitters die Qualität der durchzuführenden Simulation. Feinere Gitter erlauben generell die bessere Auflösung von Details der auftretenden Strömung und weisen parallel dazu auch geringere numerische Diffusion und allgemein genauere Ergebnisse auf (Paschedag, 2004; FLUENT, 2005). Deshalb sind Bereiche mit feinen Details in der Apparategeometrie sowie Bereiche mit hohen Gradienten der Bilanzgrößen besonders hoch aufzulösen. Da auf der anderen Seite aber aus Gründen des rechentechnischen Aufwandes die Gesamtzahl der Kontrollvolumina auf ein Minimum zu beschränken ist, muss das zu erstellende Gitter lokale Verfeinerungen sowie Bereiche stärkerer Zellausdünnung aufweisen.

Neben der Tatsache, dass in dieser Arbeit ausschließlich hexaedrische Volumenzellen verwendet wurde, wurde auch darauf Wert gelegt, das Gitter möglichst entlang der zu erwartenden Hauptströmungsrichtung auszurichten (zumindest in Bereichen, wo dies möglich ist), um der numerischen Diffusion entgegenzuwirken (FLUENT, 2005). Ein weiterer wesentlicher Einflussfaktor für die Qualität eines Gitters sind geringe räumliche Gradienten in der Zellgröße. Speziell sind große Sprünge der Abmessungen von einer Volumenszelle auf die Nachbarzelle zu vermeiden, will man ein Gitter mit vernünftigem Konvergenzverhalten produzieren. Liegt das Verhältnis der Kantenlängen zweier benachbarter Zellen in einer Raumrichtung nämlich über etwa 2, so ist häufig mit Lösungsoszillationen oder unphysikalischen Sprüngen von Bilanzgrößen zu rechnen (Paschedag, 2004). Soll also zur Erhöhung der Auflösung geometrischer Details in verschiedenen Zonen des untersuchten Apparates lokal die Zellzahl erhöht werden, so hat dies vorsichtig und gleichmäßig zu erfolgen. Abbildung 6-4 zeigt die Möglichkeiten der lokalen Gitterverfeinerung auf einem strukturierten sowie einem unstrukturierten Gitter. Bei einem strukturierten Gitter kann die Anzahl der Knoten auf einander gegenüberliegenden Kanten nicht einseitig erhöht werden, weshalb hier Gitterverfeinerungen problematisch sind. Der Übergang zu feineren Gittern ist deshalb mit unstrukturierten Gittern wesentlich besser handhabbar (siehe Abbildung 6-4 rechts). Speziell bei den Gittern der untersuchten Verbrennungsapparate wurde zur lokalen Gitterverfeinerung (beziehungsweise umgekehrt bei der Ausdünnung des Gitters in Bereichen niedrigerer Gradienten der Bilanzgrößen) dieser Ansatz des abschnittsweise unstrukturierten Netzes verfolgt. Speziell die Bereiche mit feinen geometrischen Details sowie Bereiche, in denen größere Gradienten im Geschwindigkeits- oder Temperaturfeld zu erwarten waren, wurden mit der genannten Methode lokal höher aufgelöst.

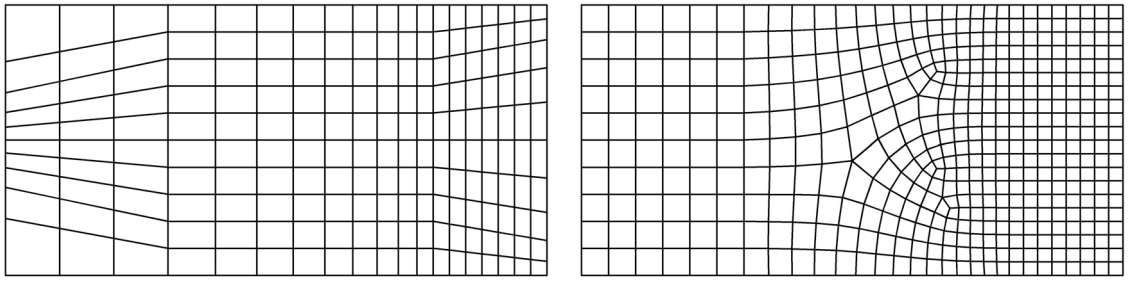


Abbildung 6-4: Lokale eindimensionale Gitterverfeinerung auf einem strukturierten Oberflächengitter (links) sowie zweidimensionale Gitterverfeinerung auf einem unstrukturierten Oberflächengitter (rechts)

Ein wesentlicher Punkt bei der Lösung des erhaltenen Gleichungssystems auf der diskretisierten Lösungsdomäne ist die Überprüfung auf Gitterunabhängigkeit beziehungsweise Gitterkonvergenz. Mit diesen beiden Untersuchungen kann abgeschätzt werden, ob die erzielte Lösung, unter Berücksichtigung der Genauigkeit der restlichen Simulation, von der Art und Feinheit der räumlichen Auflösung als unabhängig erachtet werden kann. Üblicherweise spricht man von Gitterunabhängigkeit, wenn sich die Lösung auch bei Anwendung eines anders strukturierten Gitters bei etwa gleicher Auflösung innerhalb gewisser Toleranzgrenzen nicht ändert. Gitterkonvergenz als zusätzlicher Parameter sagt aus, dass sich die Lösung auch bei einem feineren Gitter innerhalb dieser Fehlergrenzen nicht mehr ändert (Wilcox, 1994). Zumindest eine Bestätigung, dass die erzielte Lösung in ihren wesentlichen Punkten von der Gitterauflösung unabhängig ist, sollte jeder CFD-Untersuchung beigefügt werden. Eine einfache Methode der Prüfung auf Gitterkonvergenz (und durch Abwandlung auch zur Prüfung auf Gitterunabhängigkeit) ist die Extrapolation nach Richardson, die beispielsweise der Arbeit von Wilcox (Wilcox, 1994) entnommen werden kann. Hier wird die Simulation auf einem Gitter mit doppelter Auflösung wiederholt und die Ergebnisse mit dem ursprünglichen Gitter verglichen. Aus der Differenz beider Ergebnisse kann der Diskretisierungsfehler abgeschätzt werden (für Details siehe Wilcox, 1994). Diese Vorgangsweise bietet sich auch für Ergebnisse auf unterschiedlich strukturierten Gittern an. In der vorliegenden Arbeit wurde diese Vorgangsweise zur Prüfung auf Gitterkonvergenz (und in den wichtigen Teilbereichen der Apparategeometrie auch zur Prüfung auf Gitterunabhängigkeit) herangezogen, wobei für den Vergleich jeweils Strömungsgeschwindigkeitskomponenten, Turbulenzparameter, Gastemperatur und die führenden Gaskomponenten auf ausgewählten Raumpunkten ausgewertet wurden.

Nach der Erzeugung der Geometrie und des Gitters im CFD-Preprozessor GAMBIT© erfolgt der Export in den verwendeten CFD-Solver FLUENT©, wo die weitere Problemdefinition durchgeführt wird. Hier werden die geometrischen Ränder der Simulationsdomäne sowie die Zu- und Abläufe definiert (siehe Kapitel 6.9). Flächen, die lediglich zur Unterstützung der Gittergenerierung in die Geometrie inkludiert wurden und keine physische Relevanz haben, werden als *interior* definiert und sind somit für Strömung, Diffusion und Strahlung vollständig durchlässig. Auch einzelne Volumenbereiche können getrennt voneinander definiert werden. So sind beispielsweise Fluiddomänen und Festkörperdomänen (nur Wärmeleitung) implementierbar.

6.2.2 Mehrgitter-Ansatz

Der Grundgedanke des Mehrgitter-Ansatzes ist die Anwendung der Modell- und Erhaltungsgleichungen für meist (aber nicht notwendigerweise) zwei unterschiedliche Phasen auf unterschiedliche numerische Gitter, die jedoch den selben physikalischen Raum bedecken (Paschedag, 2004). Da meist nur zwei unterschiedliche Gitter Verwendung finden, spricht man hier fachsprachlich häufig von *Dual-Grid-Verfahren*. Für beide Gitter sind die jeweiligen Modellansätze zu implementieren und die entsprechenden Erhaltungsgleichungen (Bilanzgleichungen) zu lösen. Um ein physikalisch korrektes Gesamtmodell zu erhalten, sind die Bilanzgrößen der beteiligten Gitter über Austauschterme miteinander zu verknüpfen. Zur Ermittlung dieser Austauschterme sind Übergangsmodelle für Masse, Spezies, Energie, Impuls und dergleichen anzusetzen. Die Austauschterme werden volumenspezifisch gehalten, sodass bei den zwangsläufig auftretenden unterschiedlichen Zellgrößen der beiden Gitter eine ortsaufgelöste Gitterinterpolation durchzuführen ist. Eine schematische Darstellung des Mehrgitter-Ansatzes wird in Abbildung 6-5 gegeben. Nicht zu verwechseln ist dieser Ansatz mit der Mehrgitter-Methode zur Beschleunigung des Konvergenzverhaltens numerischer Problemstellungen, bei der Iterationen auf unterschiedlich feinen Gittern durchgeführt werden (Paschedag, 2004), meist zunächst grobe und danach feinere Gitter. Hier wird die physikalische Domäne jeweils ausschließlich durch ein einzelnes Gitter repräsentiert und folglich auch nur ein Satz von Modellgleichungen gelöst.

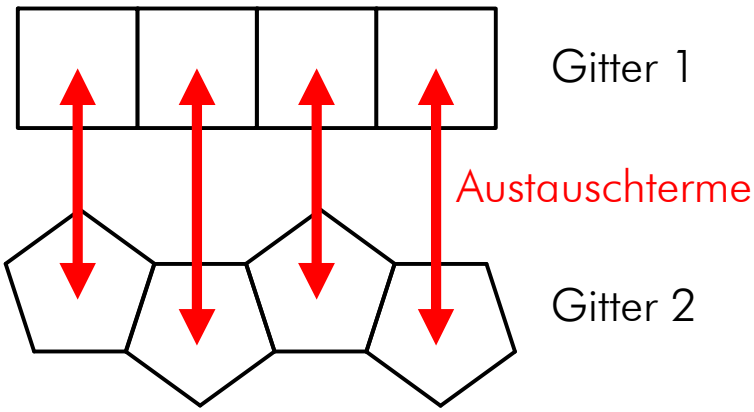


Abbildung 6-5: Grundgedanke des Mehrgitter-Ansatzes

In der vorliegenden Arbeit kann für die Fluiddomäne ein nahezu beliebiges Gitter implementiert werden, die Simulation der Feststoff-Phase geschieht jedenfalls auf einem zweiten Gitter, welches voll strukturiert und aus hexaedrischen Zellen aufgebaut ist. Die Austauschterme zwischen beiden Gittern umfassen den Gesamtmassenstrom, die Massenströme von n gasförmigen Komponenten sowie den Wärmestrom. Weiters werden eine Reihe von Stoffeigenschaften (Dichte, Wärmeleitfähigkeit, Prandtl-Zahl des Gases) sowie Betriebsbedingungen innerhalb der jeweiligen Phasen (Gasgeschwindigkeit, Sauerstoffpartialdruck) untereinander ausgetauscht. Der große Mehrwert dieses Ansatzes liegt darin, das Simulationsgitter der jeweiligen Anwendung genau anpassen zu können. Während für die Fluidphase Massen-, Spezies- und Energiebilanzen dreidimensional betrachtet und gelöst werden müssen, kann durch ein eigenes Gitter für die Festphase die Aufgabenstellung deutlich vereinfacht werden. So müssen Massen- und Speziesbilanzen nur noch eindimensional aufgelöst werden, wodurch eine deutliche Beschleunigung der Lösungsfindung zu erreichen ist (die Energiebilanz bleibt dreidimensional). Außerdem können die Modelle auf beiden Gittern unabhängig von-

einander entwickelt und die Simulationen unabhängig voneinander durchgeführt werden. Dadurch sind eine Steigerung der Übersichtlichkeit und eine Verbesserung der Modellvalidierung zu erreichen. Die Vorteile der Methode rechtfertigen für die vorliegende Arbeit den erforderlichen Mehraufwand deutlich, sodass die Implementierung zweckmäßig ist.

6.2.3 Untersuchte Geometrie des Verbrennungsapparates und deren Diskretisierung

Die Untersuchung der verschiedenen Konstruktionen des dargestellten Verbrennungsapparates mit den in der vorliegenden Arbeit dargestellten Modellansätzen wurde im Wesentlichen mit drei verschiedenen Ofengeometrien durchgeführt. Diese Grundgeometrien entsprechen in etwa den auch experimentell untersuchten Brennkammer-Generationen. Alle Geometrien enthielten konstruktive Details, die zum Zwecke der Designoptimierung ein- oder ausgeschaltet werden konnten.

Da sich die vorliegende Arbeit auf die Entwicklung und Validierung von Simulationsmodellen fokussiert, werden lediglich Ergebnisse einer einzelnen Brennkammergeometrie dargestellt und die beiden anderen Geometrien an dieser Stelle weitgehend vernachlässigt. Um eine Einordnung der in der vorliegenden Arbeit genauer dargestellten Geometrie zu ermöglichen, werden jedoch einige Parameter aller untersuchten Geometrien einander gegenübergestellt.

Numerisch untersucht wurden demnach die Brennkammern der ersten Generation (Geometrie V1) sowie der zweiten Generation mit unterschiedlicher Detailtiefe (Geometrien V2a und V2b). Während der Diskretisierung der genannten Geometrien wurde besonderer Wert auf ausreichend hohe Auflösung in den strömungstechnisch relevanten Bereichen sowie auf hohe Qualität des erzeugten Gitters gelegt. Zur Erlangung dieser Gitterqualität wurden weitestgehend hexaedrische Zellen verwendet (tetraedrische Zellen wurden nur dort eingesetzt, wo eine andere Vernetzung nicht möglich war) und auf eine möglichst geringe Zellverzerrung geachtet (die einzelnen Zellen weichen möglichst wenig vom gleichmäßigen geometrischen Grundkörper ab). Die wesentlichsten beschreibenden Kenngrößen der verwendeten numerischen Gitter sind in Tabelle 6-1 gegenübergestellt.

Tabelle 6-1: Charakteristische Kenngrößen der verwendeten Gitter der untersuchten Ofengeometrien

Parameter	V1	V2a	V2b
Zellzahl	1.304.367	3.925.562	638.454
Anteil Tetraederzellen	93,8 %	20,2 %	0
Gitterqualität (Verteilung *scewness factor*)			
0,0 bis 0,2	13,8 %	45,5 %	54,1 %
0,2 bis 0,4	54,3 %	32,6 %	25,7 %
0,4 bis 0,6	29,6 %	17,7 %	16,3 %
0,6 bis 0,8	2,3 %	4,1 %	4,0 %
0,8 bis 0,99	0,01 %	0,1 %	0
Anzahl Zellflächen	2.758.147	11.046.955	1.961.289

Die Geometrie V1enthält vorwiegend tetraedrische Volumenzellen und nur im Bereich zwischen Primärluftdüsen und Ballenoberflächen sowie in der Rohrleitungen hexaedrische Zellen. Dies war die erste Geometrie, die zügig und ohne großen Aufwand diskretisiert werden musste, um möglichst früh mit den ersten Simulationen beginnen zu können. In der Geometrie V2a wurden die ersten Verbesserungsmaßnahmen implementiert und ein wesentlich höher aufgelöstes Gitter generiert. Der Tetraederanteil wurde auf 20 % reduziert und diese Zellen finden sich vorwiegend im Bereich des oberen und unteren Kegelstumpfs der Brennkammerseele, im Bereich der Primärluftdüsen, an der Ballenstirnfläche sowie im Bereich der Primär- und Sekundärlufteintritte in den Ofenmantel. Mit knapp vier Millionen Zellen liegt eine sehr speicher- und rechenintensive Geometrie vor, die aber andererseits aufgrund der Auflösung sehr detaillierte Aussagen zulässt. Die Geometrie V2b wurde hinsichtlich geometrischer Details und Auflösung deutlich einfacher gestaltet und speziell für die effiziente Simulation mit dem Gesamtmodell der heterogenen Verbrennung ausgelegt. Diese Geometrie kommt gänzlich ohne Tetraederzellen aus. Die Gitterqualität aller hier präsentierten Geometrien reicht aus um ein gutmütiges Konvergenzverhalten während der numerischen Simulation zu ermöglichen. Die Entwicklung des komplexen heterogenen Verbrennungsmodells wurde aufgrund des einfachen und effizienten Gitters fast ausschliesslich anhand der Geometrie V2b durchgeführt. Deshalb wurde entschieden, in dieser Arbeit lediglich Ergebnisse von dieser Geometrie darzustellen.

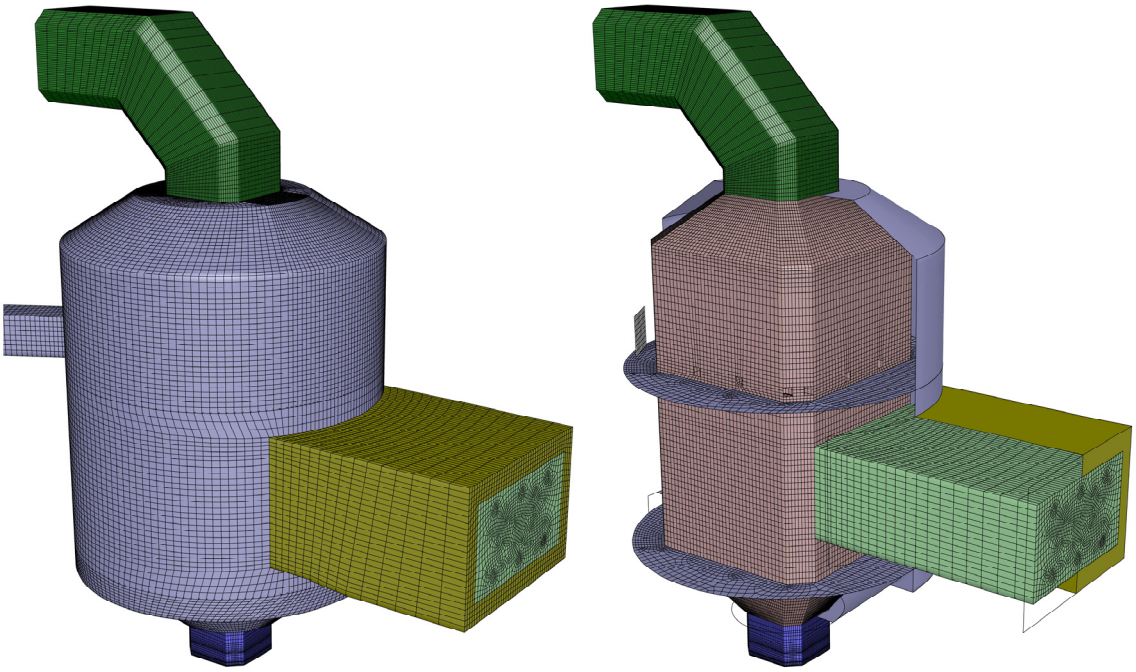


Abbildung 6-6: Gitter der Geometrie V2b (links: Mantel- und Außenflächen; rechts: Brennkammerseele und Balleneinschub)

Abbildung 6-6 und Abbildung 6-7 enthalten unterschiedliche Schnittdarstellungen dieser Geometrie sowie Detailansichten der Primärluftdüsen und des Nachverbrennungsrostes. Rund um die Primärluftdüsen und im Nachverbrennungsrost weist das Gitter auch eine etwas erhöhte Auflösung auf, um in gewissem Umfang die relavanten Vorgänge in diesen Bereichen abbilden zu können. Bei der Gasnachverbrennungszone fällt auf, dass im erstellten Gitter für die beiden Düsenebenen bereits Düsen sowohl für Links- als auch für Rechtsdrall

vorgesehen sind. Durch einfaches Ein- und Ausschalten fester Wände kann damit im Solver direkt und in ein und demselben Gitter eine Geometrievariation durchgeführt werden.

Ziel dieser Geometrie ist eine gute Wiedergabe der globalen Phänomene, die für die Beschreibung der heterogenen Verbrennung relevant sind; auf feine Strömungsdetails wurde kein Wert gelegt. Durch die geringe Zellzahl und die hohe Gitterqualität ist eine schnelle Konvergenz der Lösung der Gasströmung zu erwarten, sodass der Simulation der Festphase mehr Aufmerksamkeit geschenkt werden kann. Die Brennkammer wurde effizient und mit wenigen Details abgebildet; etliche Charakteristika wurden dahingehend modifiziert, dass ein rein hexaedrisches Gitter für die Vernetzung verwendet werden konnte. Statt runden Querschnitten wurden häufig achteckige Querschnitte realisiert (Nachverbrennungsrost, Heißgasleitung). Die Primärdüsen wurden zwar rund aber ebenfalls sehr einfach gehalten. Die in Geometrie V2a voll aufgelösten Drallapparate wurden hier der Einfachheit halber nicht implementiert. Auch die Luftzuführung zur Primärzone wurde deutlich vereinfacht.

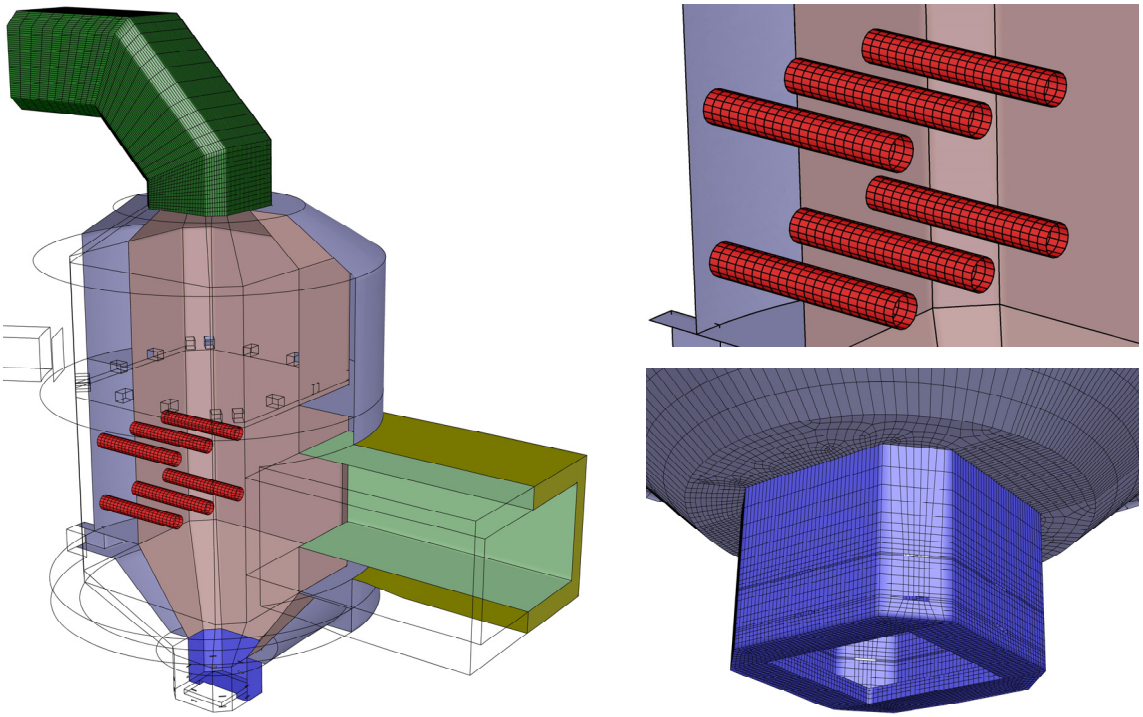


Abbildung 6-7: Gitter der Geometrie V2b (links: Schnittdarstellung; rechts oben: Detailansicht Primärdüsen; rechts unten: Detailansicht Nachverbrennungsrost)

Für alle verwendeten Gitter der vorliegenden Arbeit (homogene Gasphase als auch Feststoffzonen) wird das folgende Koordinatensystem verwendet: die x-Richtung verläuft horizontal mit positivem Vorzeichen parallel zur Balleneinschubrichtung, die z-Richtung verläuft vertikal mit positivem Vorzeichen nach oben; die y-Richtung stellt die zweite horizontale Achse dar mit positivem Vorzeichen entsprechend der „Rechten-Hand-Regel“. Der Koordinaten-Ursprung liegt für die x- und die y-Achse auf der Symmetrielinie der Brennkammer, der Nullpunkt der Hochachse liegt auf halber Höhe zwischen den beiden Primärdüsenebenen (entsprechend auch auf halber Höhe des Brennstoffballens).

Die beiden Regionen der Brennkammer, die festen Brennstoff enthalten (Ballen und Nachverbrennungsrost) werden im Dual-Grid-Verfahren behandelt und sind entsprechend für die Gasphase und die Feststoffphase unterschiedlich diskretisiert. Für die vorliegende Arbeit

wird angenommen, dass der Feststoff-Massenstrom in der Ballenregion nur exakt in einer Richtung verläuft (in x-Richtung im kartesischen Koordinatensystem), sodass ein räumlich ausgerichtetes und orthogonales Gitter verwendet wird. Da aufgrund des Impaktes der Primärluftdüsen auf die Ballenoberfläche örtliche Unterschiede des Abbrandbildes zu erwarten sind, wird der Ballen dreidimensional aufgelöst. Dabei verläuft die x-Richtung parallel zur Einschubrichtung und die Ballenoberfläche wird durch eine y-z-Ebene gebildet (y horizontal, z vertikal). Es wird ausschließlich vollstrukturiertes hexaedrisches Gitter verwendet. Damit werden für die spätere Simulation im externen Feststoff-Solver optimale geometrische Voraussetzungen geschaffen.

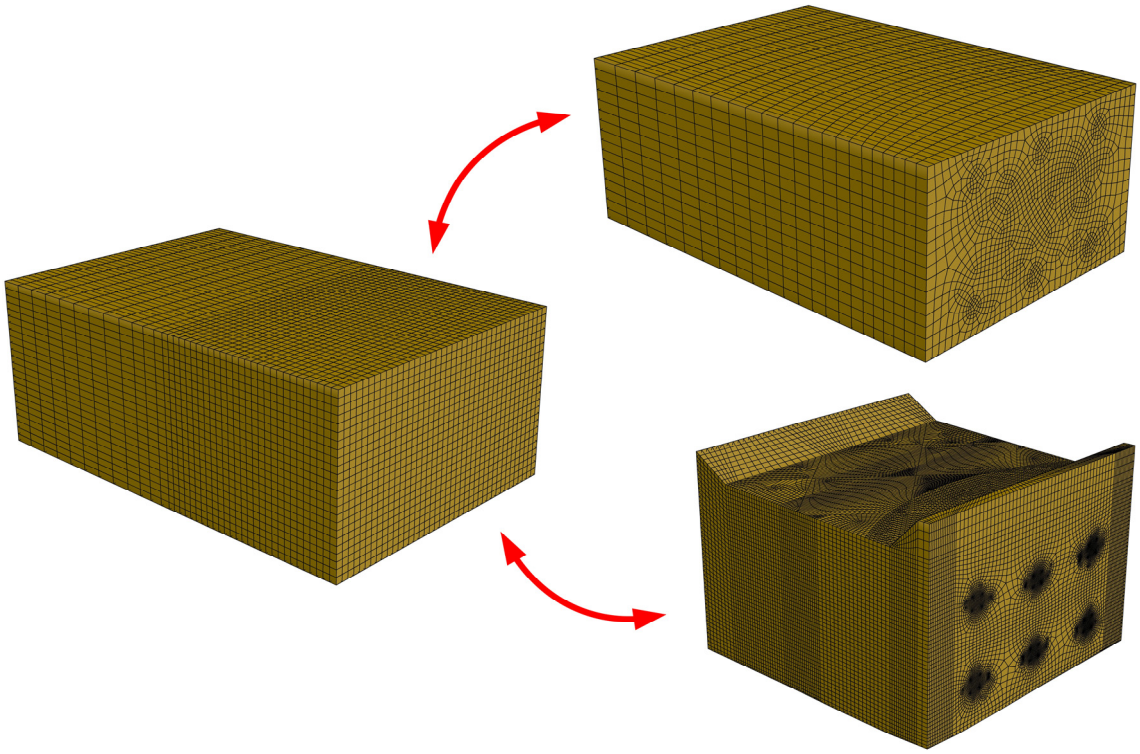


Abbildung 6-8: Verwendete Gitter in der Ballenregion (links: Feststoffgitter; rechts oben: Gasphasengitter in der Geometrie V2b; rechts unten: Gasphasengitter in der Geometrie V2a)

Hinsichtlich der Auflösung im Ballenvolumen ist ein Kompromiss zu finden. Wird eine hohe Auflösung gewählt, so müssen die Inhomogenitäten des Feststoffes berücksichtigt werden (Kolben, Blätter, Stängel). Da der Ballen eingeschoben wird, ändern sich die Inhomogenitäten auf dem Gitter aber mit der Zeit, sodass eine instationäre Simulation des Verbrennungsapparates durchzuführen wäre. Trotz aller vereinfachten Modelle, die in den nachfolgenden Abschnitten beschrieben werden, liegt eine instationäre Simulation klar nicht im Fokus der vorliegenden Arbeit. Deshalb wurde eine räumliche Auflösung gewählt, die grob genug ist, den Feststoff ohne Einschränkung als homogen annehmen zu können und andererseits fein genug ist, um alle wesentlichen Details des Einflusses des Strömungsfeldes auf die Verbrennung abbilden zu können (z.B. Brennflecken aufgrund der Primärdüsen). In y-Richtung wurden 40 Zellen und in z-Richtung 24 Zellen realisiert (Ortsauflösung entsprechend 0,03 m). Für die x-Richtung wurde eine Diskretisierung gewählt, die am Eintritt eine Auflösung von 0,09 m und an der Ballenoberfläche eine Auflösung von 0,03 m erlaubt. Die eindimensionale Verfeinerung des Gitters erfolgt zur Vermeidung zu hoher Gittergradienten in mehreren

kleinen Schritten. Die Zellzahl in x-Richtung beträgt ebenfalls 40. Das gesamte dreidimensionale Gitter des Ballens besteht dementsprechend aus 38.400 hexaedrischen Zellen. Aufgrund der Tatsache, dass bei der vorliegenden Implementierung Modellbeschreibung und Simulationsergebnisse in einem einzigen Datenfile vereint sind, ergeben sich zwangsläufig relativ große Dateien (etwa 585 MB). Damit ist die hier dargestellte Diskretisierung mit 38.400 Zellen als oberes Limit für eine praktikable Simulation mit dem vorliegenden System anzusehen. Das verwendete Gitter für den Feststoff in der Ballenregion ist gemeinsam mit den Gittern für die Gasphase in dieser Region der Geometrien V2a und V2b in Abbildung 6-8 dargestellt. Während das Gasphasengitter der Geometrie V2b denselben physikalischen Raum abdeckt wie das Feststoffgitter, wird in der komplexeren Geometrie V2a nur ein Teil des Ballens auch gasphasenseitig aufgelöst. Außerdem ist der Ballen nicht mehr exakt quaderförmig, sondern durch die „Ballendüse" eingeschnürt. Der Datenaustausch zwischen beiden Gittern durch Gitterinterpolation gestaltet sich deshalb etwas schwieriger und bleibt bis zu einem gewissen Grad approximativ.

Im Brennstoffbett auf dem Nachverbrennungsrost ist im Gegensatz zum Ballen aufgrund der fluiddynamischen Strömungsverhältnisse nicht zu erwarten, dass eine dreidimensionale Auflösung zu einem nennenswerten Wissensgewinn führen kann. Es wird angenommen, dass das Bett lateral keine Gradienten aufweist sondern nur entlang der Betthöhe entsprechend des Abbrand-Fortschrittes. Aus diesem Grund wird auch für Simulationen mit der komplexen Brennkammergeometrie lediglich ein eindimensional aufgelöstes Rostbett mit 20 Zellen (Diskretisierung 0,025 m) verwendet.

6.3 Bilanzgleichungen

Bilanzgleichungen sind das Herzstück der numerischen Strömungssimulation und der Startpunkt der Modellierung. Bilanzgleichungen sind Erhaltungssätze für die extensiven Bilanzgrößen im betrachteten System, also im Wesentlichen Masse, Impuls und Energie. Bei der Ableitung der differentiellen Bilanzgleichungen werden die Bilanzgrößen in Abhängigkeit von intensiven Transportgrößen wie Geschwindigkeit, Temperatur oder Konzentration ausgedrückt. Diese werden entsprechend der bilanzierten Flüsse durch das betrachtete Strömungsgebiet transportiert und durch positive oder negative Quellen (Senken) verändert. Transportgrößen sind in der Regel abhängige Variablen; als unabhängige Variablen sind im Wesentlichen die drei Ortskoordinaten und die Zeit zu betrachten. Bilanzgleichungen stellen damit unter Berücksichtigung der jeweiligen Erhaltung jeweils eine Berechnungsgleichung für eine Transportgröße zur Verfügung, wobei aufgrund des konvektiven Transportterms immer auch der Strömungsgeschwindigkeitsvektor sowie als Proportionalitätsfaktoren die physikalischen Stoffwerte zu berücksichtigen sind (adaptiert von Anderson et al., 1992; Anderson, 1995; Paschedag, 2004). Die im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendeten Stoffwerte und deren Approximationsfunktionen sind in Kapitel 14.1.1 zusammengefasst.

Bilanzgleichungen sind aufgrund ihres Charakters präzise und wie bereits erwähnt differentiellen Charakters. Erst wenn verschiedene physikalische Effekte abgebildet werden müssen, ist eine Modellbildung unter Anwendung phänomenologischer Gleichungen (beispielsweise thermodynamische oder kinetische Beziehungen, Turbulenzmodellierung) erforderlich,

wodurch die Bilanzgleichungen nicht mehr präzise, sondern mit einer gewissen Ungenauigkeit und Unsicherheit behaftet sind. Diese sind in der Regel in ihrer Größenordnung abschätzbar.

Im Folgenden wird näher auf die einzelnen auftretenden Bilanzgleichungen eingegangen, diese aber nur soweit beschrieben, als dies für die vorliegende Arbeit relevant ist. Zum vertiefenden Studium sei auf weiterführende Literatur verwiesen (Anderson, 1995; Paschedag, 2004; Blazek, 2007; Tu et al., 2008).

6.3.1 Kontinuitätsgleichung

Eine sehr wesentliche Erhaltungsgröße ist die Masse, deren Erhaltung durch die Kontinuitätsgleichung beschrieben wird. Da im Rahmen der CFD nur nichtrelativistische Systeme betrachtet werden, kann im System Masse weder erzeugt noch vernichtet werden, die Erhaltung ist also quellfrei (Paschedag, 2004). Davon unberührt ist allerdings die Tatsache dass aufgrund chemischer Umwandlungen und Reaktionen eine Veränderung der Massenanteile einzelnen Spezies auftreten kann. Dies betrifft weiters auch den Massenaustausch zwischen fester Phase und homogener Gasphase, welche, wie später noch ausführlich erläutert werden soll, auf unterschiedlichen räumlichen Gittern beschrieben werden. Die Gesamtmassenbilanz in differentieller Form wird als Kontinuitätsgleichung bezeichnet und ist in vektorieller Schreibweise in Gleichung 6.1 dargestellt (Paschedag, 2004; FLUENT, 2005).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla(\rho \mathbf{v}) \tag{6.1}$$

Die linke Seite dieser Gleichung entspricht dem Speicherterm, die rechte Seite entspricht dem konvektiven Term; die Gleichung enthält keinen diffusiven Teil und wie erwähnt auch keinen Quellterm. Die Kontinuitätsgleichung enthält lediglich Ableitungen erster Ordnung und ist deshalb mathematisch einfacher als die anderen Bilanzgleichungen.

6.3.2 Speziesbilanzen

Die Kontinuitätsgleichung stellt eine Gesamtmassenbilanz dar und wenn ein Mehrstoffsystem betrachtet wird, bei dem die Verteilung der einzelnen Gasspezies von Interesse sind, die darüber hinaus auch noch chemische Reaktionen miteinander eingehen, so ist eine getrennte Bilanzierung der einzelnen Spezies erforderlich. Da mit der Gesamtmassenbilanz und der Bilanzen aller beteiligten Spezies zu viele Bestimmungsgleichungen vorhanden sind, werden üblicherweise alle Spezies bis auf eine (aus Gründen der Genauigkeit meist die Überschusskomponente) sowie die Gesamtmassenbilanz gelöst. Da chemische Reaktionen neben der Temperatur auch von den lokalen Konzentrationen der beteiligten Komponenten abhängen, wird die massenbezogene Bilanzierung zur Vereinfachung in den meisten Fällen in eine stoffbezogene Bilanzierung umformuliert. Für die Komponente i ist die vektorielle Speziesbilanz (Konzentrationsbilanz) in Gleichung 6.2 dargestellt (Paschedag, 2004).

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\mathbf{v}\nabla c_i + \nabla(D_i \nabla c_i) + S_c \tag{6.2}$$

Die linke Seite der Gleichung bezeichnet wieder den Speicherterm. Die rechte Seite der Gleichung beinhaltet den konvektiven Transport, den diffusiven Transport sowie einen allgemeinen Quellterm (positiv oder negativ). Der in dieser Gleichung vorkommende molekulare Diffusionskoeffizient ist hier jeweils für die Komponente i in der komplexen Gasmischung anzugeben. Da in der Literatur aber üblicherweise lediglich binäre Diffusionskoeffizienten zu finden sind, ist hier eine Mittelung erforderlich. Der verwendete CFD-Solver mittelt den Diffusionskoeffizient in der komplexen Mischung dabei aus den eingegebenen binären Diffusionskoeffizienten (FLUENT, 2005). Da in der vorliegenden Arbeit aber über das gesamte Strömungsgebiet hochturbulente Strömungen behandelt werden und die hierbei auftretenden turbulenten Stoffaustauchterme um Größenordnungen über den molekular-diffusiven Stoffaustauschtermen liegen, ist der dabei gemachte Fehler vernachlässigbar (Paschedag, 2004).

Der Quellterm in Gleichung 6.2 ist vom CFD-Solver als universelle Schnittstelle für benutzerspezifische Modellierung vorgesehen. Standardmäßig beschreibt dieser Quellterm die Stoffumwandlung durch homogene Gasreaktionen. Wie diese Stoffumwandlung modelliert ist, wird in Kapitel 6.7 beschrieben. Andererseits wurde dieser Quellterm in der vorliegenden Arbeit auch für die Modellierung des Stoffaustausches zwischen fester Phase (Brennstoff) und Gasphase herangezogen.

6.3.3 Impulsbilanz

Zur Ermittlung des Geschwindigkeitsfeldes in bewegten Fluiden ist die Impulsbilanz aufzustellen und zu lösen. Der Impuls eines strömenden Fluidelements ist hierbei definitionsgemäß das Produkt aus Masse und Geschwindigkeit (Siekmann et al., 2007). Hier wird der Impulstransport durch Konvektion, die molekulare Reibung (Schub- und Normalspannungen im Fluid) sowie von außen auf das System wirkende Kräfte (hier im Wesentlichen Druck und Gravitation) bilanziert. In vektorieller Schreibweise ist eine solche Impulsbilanz allgemeiner Form in Gleichung 6.3 dargestellt (Paschedag, 2004; FLUENT, 2005).

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla(\rho \mathbf{v}\mathbf{v}) - \nabla \boldsymbol{\tau} - \nabla p + \rho \mathbf{g} + S_p \tag{6.3}$$

Auch hier bildet der linke Teil der Gleichung den Speicherterm ab, während die rechte Seite den konvektiven Impulstransport, die molekulare Reibung (diffusiver Term), den Einfluss der äußeren Kräfte Druck und Gravitation sowie einen sehr allgemeinen Quellterm (positiv oder negativ) darstellt. Durch diesen Quellterm kann beispielsweise der Impulsaustausch bei Durchströmen eines porösen Mediums implementiert werden, welcher sich makroskopisch durch einen Strömungsdruckverlust äußert.

Der Spannungstensor, der den molekularen Impulsaustausch beschreibt, ist eine Funktion der Geschwindigkeit und von Stoffwerten. Dieser Zusammenhang wird über die Rheologie und hier im Wesentlichen über die (molekulare) Viskosität des Fluids beschrieben (Spurk et al., 2006). In der vorliegenden Arbeit wird die Strömung von Gasen beschrieben, die als newtonsche Fluide (zur Beschreibung siehe Sigloch, 2009) betrachtet werden können (Viskosität hängt nicht von der Scherspannung ab). Da keine großen polyatomaren Gasmoleküle sondern einatomige und kleine mehratomige Gase beschrieben werden, kann der Dilatationskoeffizient nach Paschedag (Paschedag, 2004) mit guter Näherung vernachlässigt wer-

den, sodass der in Gleichung 6.3 enthaltene Spannungstensor durch den vereinfachten newtonschen Schubspannungsansatz beschrieben werden kann:

$$\boldsymbol{\tau}_{\text{Newton}} = \eta\left[\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^{\mathsf{T}}\right] - \frac{2}{3}\eta(\nabla\cdot\mathbf{v})\boldsymbol{\delta} \tag{6.4}$$

Das hochgestellte T bedeutet, dass der entsprechende Vektor zu transponieren ist, $\boldsymbol{\delta}$ stellt den Einheitstensor dar. Bewegungsgleichungen für rheologisch komplexere Fluide sind beispielsweise in Spurk et al. (Spurk et al., 2006) dargestellt.

Zur Schließung des Gleichungssystems aus Kontinuitätsgleichung (Gleichung 6.1) und Impulsbilanz (Gleichung 6.3) und damit zur Ermittlung des dreidimensionalen Geschwindigkeitsfeldes fehlt lediglich der Druck (Paschedag, 2004). Dieser ist aber zunächst unbekannt und Teil der Lösung. Um eine Bestimmungsgleichung für den Druck zu erhalten ist bei der Simulation kompressibler Strömungen eine Zustandsgleichung für das betrachtete Fluid anzuwenden. In der vorliegenden Arbeit treten lediglich niedermolekulare Gase ab, für die als Zustandsgleichung in sehr guter Näherung die ideale Gasgleichung verwendet werden kann. Da im konkreten Anwendungsfall das Konvergenzverhalten des kompressiblen Ansatzes besser war als das des inkompressiblen Ansatzes, wurde ein Großteil der hier dargestellten Simulationen mit diesem Ansatz beschrieben. Unter der Annahme konstanter Dichte (und damit auch Inkompressibilität) und konstanter Viskosität vereinfachen sich die anzuwendenden Gleichungen signifikant (vereinfachte Kontinuitätsgleichung siehe Gleichung 6.5, vereinfachte Impulsbilanz siehe Gleichung 6.6).

$$\nabla\mathbf{v} = 0 \tag{6.5}$$

$$\frac{\partial\rho\mathbf{v}}{\partial t} = -\rho\mathbf{v}\nabla\mathbf{v} + \eta\nabla^2\mathbf{v} - \nabla p + \rho\mathbf{g} + S_p \tag{6.6}$$

Die vereinfachte Impulsbilanz wird in dieser Form als Navier-Stokes-Gleichung bezeichnet. Im Gegensatz zum vollen Gleichungssatz für kompressible Systeme ist hier keine Zusatzbeziehung für die Berechnung des Druckes erforderlich (Anderson et al., 1992; Paschedag, 2004). Das Gleichungssystem ist allerdings nur eingeschränkt gültig, da sowohl Änderungen der Temperatur als auch Änderungen in der stofflichen Zusammensetzung des Fluids zu Veränderungen der Dichte und der Viskosität des realen Fluids führen. Für die Anwendung in Verbrennungsprozessen ist daher von der Verwendung des vereinfachten Gleichungssystems abzuraten. In der vorliegenden Arbeit wurde der vereinfachte Ansatz lediglich zur schnellen Ermittlung erster Ergebnisse sowie zur Berechnung eines Strömungsfeldes für die Initialisierung komplexerer Simulationen verwendet.

6.3.4 Energiebilanz

Die Energieformen, die in natürlichen Systemen (und speziell auch in Verbrennungsapparaten) auftreten können, sind sehr vielfältig, weshalb deren Bilanzierung aufwändiger ist als die Bilanzierung von Masse oder Impuls. Üblicherweise wird für Bilanzierung zunächst die innere Energie betrachtet, die mit Ausnahme der kinetischen und der potentiellen Energie alle Energieformen eines Systems beinhaltet (Paschedag, 2004). Wird dann die Gesamtenergie als Summe aus innerer, kinetischer und potentieller Energie bilanziert, so gilt grundsätzlich der

Energieerhaltungssatz und die Bilanz für das Gesamtsystem muss quellfrei sein. Diese Energiebilanz ist in ihrer dreidimensionalen Darstellung in Gleichung 6.7 dargestellt (Paschedag, 2004; FLUENT, 2005; Spurk et al., 2006).

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\rho \mathbf{v}^2 + \rho u\right) = -\nabla\left(\frac{1}{2}\rho \mathbf{v}^2 + \rho u\right)\mathbf{v} + \lambda \nabla^2 T - \nabla p \mathbf{v} - \nabla(\boldsymbol{\tau}\cdot\mathbf{v}) + \rho(\mathbf{v}\cdot\mathbf{g}) + \sum_i h_i \mathbf{J}_i + S_u \tag{6.7}$$

Auch hier beschreibt die linke Seite der Gleichung den Speicherterm für die Energie als Summe von innerer und kinetischer Energie. Die rechte Seite enthält die Terme für den konvektiven Energietransport, für den Energietransport durch Wärmeleitung (diffusiver Term), für die Arbeit durch Druckkräfte, für die Arbeit durch viskose Reibung, für die Arbeit durch Gravitation, für den Energietransport durch Massendiffusion der Komponente *i* sowie einen allgemeinen Quellterm. Dieser Quellterm ermöglicht die Berücksichtigung nicht direkt betrachteter Energieformen wie Reaktionswärme aus chemisch gebundener Energie (homogene sowie heterogene Reaktionsschritte), Wärme der Phasenumwandlung, Strahlungswärme und ähnliche. Jedoch gilt für das Gesamtsystem in jedem Fall der Energieerhaltungssatz.

Der Wärmeleitungsterm ist im betrachteten Fall für die Vereinfachung einer isotropen Wärmeleitfähigkeit formuliert; eine Vereinfachung, die für das betrachtete System sehr gut erfüllt ist.

Für die Beschreibung laminarer oder stagnanter Strömungen kann die Energiebilanz um den Wärmetransport durch molekulare Diffusion erweitert werden (siehe FLUENT, 2005). Für den vorliegenden hochturbulenten Strömungsbereich ist dieser Term jedoch vernachlässigbar. Üblicherweise werden in verfahrenstechnischen Anwendungen bei der Simulation inkompressibler Strömungen auch die kinetische Energie sowie die Arbeit durch Druckkräfte vernachlässigt (FLUENT, 2005).

6.4 Turbulenzmodellierung

Die Beschreibung der Turbulenz in strömenden Fluiden stellt nach Ansicht der meisten Experten eines der größten ungelösten wissenschaftlichen Probleme unserer Zeit dar (Wilcox, 1994; Du Sautoy, 2011). Selbst eine exakte Definition des Effektes ist schwierig, weshalb Turbulenz üblicherweise durch charakteristische Eigenschaften erfasst wird. Im Gegensatz zur laminaren Strömung weist turbulente Strömung einen irregulären oder chaotischen Verlauf auf. Turbulenz ist gekennzeichnet durch die Ausbildung von Wirbelstrukturen, die kontinuierlich über einen extrem breiten Bereich von Längenskalen auftreten. Turbulenz ist aufgrund der auftretenden Wirbelstreckung immer dreidimensional; zweidimensionale Approximationen können Turbulenz nicht in ausreichendem Maße beschreiben. Turbulenz ist immer auch zeitabhängig, wobei hier die Zeit mehr ist als eine zusätzliche Dimension, da Turbulenz durch zufällige und/oder chaotische Fluktuationen charakterisiert ist. Aus diesem Grund ist die Turbulenz nicht mit deterministischen, sondern nur mit statistischen Methoden zu erfassen. Turbulenz ist weiterhin ein Phänomen der Kontinuumsmechanik. Selbst die kleinsten

Wirbelstrukturen sind signifikant größer als molekulare Längenskalen. Turbulente Wirbelstrukturen zeigen kaskadische Effekte. Die größte turbulente kinetische Energie wohnt den größten Turbulenzballen inne. Diese zerfallen in immer kleinere Wirbel (kleinere Längenskalen) und geben die turbulente kinetische Energie an diese weiter (Austausch mechanischer Energie). Wird mit der Wirbelgröße als charakteristischer Länge eine Reynoldszahl ermittelt, so wird deutlich, dass diese bei kleineren Wirbeln immer kleiner und der Einfluss der molekularen Viskosität immer größer wird. Bei den kleinsten turbulenten Wirbeln ist der Einfluss der molekularen Viskosität des Fluids so hoch (Reynoldszahl in der Größenordnung 1), dass hier die turbulente kinetische Energie irreversibel in Wärme dissipiert wird. Weiters weist eine turbulente Strömung stark erhöhte Diffusivität auf. Durch die turbulenten Bewegungen wird der Austausch von Masse, Impuls und Energie signifikant verstärkt und liegt um Größenordnungen über dem Transport in laminaren Strömungen. Abschließend entsteht Turbulenz aus der nichtlinearen Interaktion zwischen Trägheitskräften und molekularen Reibungskräften (Viskosität) wie sie in der Navier-Stokes-Gleichung beschrieben wird und sie tritt nur bei hohen Reynoldszahlen (Verhältnis aus Trägheits- und Viskositätskräften) auf (adaptiert aus Wilcox, 1994).

Bei den meisten ingenieurstechnischen Anwendungen treten heute turbulente Strömungen auf, so auch in der vorliegenden Arbeit. Meist ist dies auch aufgrund des erhöhten Stoff- und Energieaustausches erwünscht. Die Berücksichtigung der Turbulenz bei der mathematischen Beschreibung der physikalischen Vorgänge in diesen Anwendungen ist damit unumgänglich und bringt eine nicht zu vernachlässigende Steigerung der Komplexität mit sich.

Grundsätzlich können zwei verschiedene Ansätze bei der Berücksichtigung von Turbulenz im Zuge numerischer Strömungssimulation unterschieden werden: direkte numerische Simulation der turbulenten Strömung sowie Modellierung der turbulenten Effekte. Darüber hinaus sind heute auch Mittelwege zwischen diesen beiden Extrema üblich, bei denen große Wirbel direkt simuliert und kleine Wirbel modelliert werden. Ein kurzer Überblick über die Möglichkeiten der Beschreibung der Turbulenz im Rahmen von CFD-Simulationen ist bei Persson (Persson, 2001) gegeben.

Das vorgestellte Gleichungssystem, insbesondere auch die Navier-Stokes-Gleichung sind in ihrer dreidimensionalen und zeitabhängigen Form prinzipiell dazu in der Lage, auch turbulente Strömungen zu beschreiben. Hierzu ist lediglich eine räumliche Diskretisierung erforderlich, die auch die kleinsten Wirbelstrukturen, dort wo die turbulente kinetische Energie dissipiert wird, in ausreichendem Maße auflösen kann. Da in diesem Fall keine zusätzliche Modellierung erforderlich ist, nennt man diesen Ansatz Direkte Numerische Simulation (*DNS*). Da in diesem Fall keine zusätzliche Modellierung erforderlich ist, nennt man diesen Ansatz Direkte Numerische Simulation (*DNS*). Nachdem Turbulenz wie bereits erwähnt ein irreguläres und chaotisches Verhalten zeigt, ist zur Ermittlung eines relevanten makroskopischen Strömungsbildes lediglich eine statistische Mittelung durchzuführen. Zur Abschätzung erforderlichen der räumlichen und zeitlichen Auflösung wird das Kolmogoroff-Mikrolängenmaß (beschreibt die Größenordnung der kleinsten turbulenten Wirbel) sowie das Kolmogoroff-Mikrozeitmaß (beschreibt die Größenordnung der Dauer des Wirbelzerfalls der kleinsten turbulenten Wirbel) herangezogen. Die Definitionen für diese Längen- und Zeitmaße sind in den Gleichungen 6.8 und 6.9 angeführt (Wilcox, 1994).

$$\eta_{Kolmogoroff} = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4} \tag{6.8}$$

$$\tau_{Kolmogoroff} = \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2} \tag{6.9}$$

Eine Abschätzung von Wilcox (Wilcox, 1994) auf Basis dieser Größen ergibt zur Beschreibung einer einfachen, voll ausgebildeten turbulenten Kanalströmung einen direkten Zusammenhang zwischen der Reynoldszahl der untersuchten Strömung und der erforderlichen Stützstellenzahl für die *DNS* (siehe Gleichung 6.10).

$$N_{DNS} \approx (3Re)^{9/4} \tag{6.10}$$

Bei dieser Abschätzung ist zu beachten, dass zur Einsparung von Stützstellen bereits eine „Ausdünnung" in Regionen mit größeren Kolmogoroff-Skalen implementiert ist. Wilcox (Wilcox, 1994) berechnet hieraus eine erforderliche Anzahl räumlicher Stützstellen von über 2 Milliarden für eine Strömung bei einer für praktische Anwendungen interessanten Reynoldszahl von 230.000. Weiters wird abgeschätzt, dass zur Erreichung einer statistisch aussagekräftigen Lösung auf diesem numerischen Gitter etwa 114.000 Zeitschritte berechnet werden müssen. Gleichung 6.10 zeigt, dass Strömungen mit niedrigen Reynoldszahlen aufgrund der geringeren Zahl an erforderlichen räumlichen Stützstellen tendenziell mit *DNS* einfacher zu erfassen sind. Die große Mehrzahl technischer Strömungen findet aber im voll turbulenten Bereich bei sehr hohen Reynoldszahlen statt (Wilcox, 1994; Paschedag, 2004). Aus diesen Fakten wird deutlich, dass ingenieurstechnisch interessante Strömungen in komplexeren verfahrenstechnischen Apparaten mit heute verfügbaren Rechnerleistungen mit *DNS* nicht erfassbar sind. Experten schätzen, dass sich diese Situation auch in absehbarer Zukunft nicht wesentlich verbessern wird (Wilcox, 1994; Anderson, 1995; Ferziger et al., 2002; Lomax et al., 2003; Paschedag, 2004; Blazek, 2007; Tu et al., 2008).

In der Literatur sind heute bereits zahlreiche Beispiele der erfolgreichen Anwendung direkter numerischer Simulation auf spezielle und meist isoliert betrachtete turbulente Strömungsformen dokumentiert (Freistrahl bei niedriger Reynoldszahl: Yuu et al., 1996; *Backward facing step* bei niedriger und mittlerer Reynoldszahl: Yee et al., 1999; Kopplung von Verbrennung und turbulenter Strömung: Veynante et al., 2002). Für die in dieser Arbeit betrachtete Problemstellung mit verschiedenartigen hochturbulenten Strömungsformen, intensiver Koppelung mit chemischen Reaktionen, Strahlungswärmeaustausch sowie Berücksichtigung des biogenen Festbrennstoffes kommt *DNS* nicht in Frage.

Der zweite, grundlegend unterschiedliche, Ansatz zur Berücksichtigung der Turbulenz bei Strömungssimulationen ist die Mittelwertbildung. Unter der Annahme, dass sich die Zeitskalen der Hauptströmung und die der Turbulenz stark unterscheiden, können alle turbulenten Schwankungsgrößen über die Zeit gemittelt werden. Dieser Ansatz wird als Reynolds-Mittelung (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*, *RANS*) bezeichnet und ist heute bei ingenieurstechnischen Anwendungen die Standardmethode der Turbulenzimplementierung. Grundsätzliche Vorgangsweise bei dieser Methode ist die Berechnung der die Hauptströmung charakterisierenden Mittelwerte unter Berücksichtigung des Einflusses der turbulenten Schwankungen (Wilcox, 1994; Paschedag, 2004). Bei der Mittelung der Grundgleichungen treten Ter-

me auf, die a priori unbekannt sind und deshalb modelliert werden müssen (Schließungsproblem der Turbulenzmodellierung). Hierfür werden die klassischen Turbulenzmodelle verwendet. Nachdem diese Methode in der vorliegenden Arbeit intensiv angewendet wurde, wird sie auch ausführlicher dargestellt. Der generelle Ansatz der Reynolds-Mittelwertbildung, die Modellierung der Turbulenzphänomene im Rahmen von RANS, die Beschreibung der Turbulenzverhältnisse in Wandnähe sowie der Rückschluss vom turbulenten Impulstransport zum turbulenten Transport von Masse und Wärme ist dem Kapitel 14.2 im Anhang zu entnehmen.

Aufgrund der stetig steigenden Rechnerleistung, die für numerische Strömungssimulationen zur Verfügung steht, entwickelt sich heute die CFD relativ stark in Richtung detaillierterer Beschreibung turbulenter Strömungen. Ein vielversprechender Ansatz hierbei ist die *Large-Eddy-Simulation* (*LES*). Bei diesem Konzept werden große Wirbelstrukturen auf dem verwendeten Gitter aufgelöst und direkt simuliert, während kleinskalige Wirbel modelliert werden. Die Abgrenzung, welche Wirbel direkt simuliert (*resolvable scale*) und welche modelliert werden (*subgrid scale*), wird durch die Vorgabe einer entsprechenden Filterfunktion getroffen. Im Gegensatz zu *RANS* ist diese Filterung also räumlich und nicht zeitlich zu verstehen. Wilcox schätzt in seiner grundlegenden Arbeit zur Turbulenzbeschreibung (Wilcox, 1994), dass die Anzahl erforderlicher Gitterstützstellen für eine hochwertige *LES* etwa eine Größenordnung unter jener für eine *DNS* anzusetzen ist. Die Grundlagen sowie einige Anwendungen dieser Methode sind sehr ausführlich bei Lesieur et al. (Lesieur et al., 2005) dargestellt. Ein Vergleich zwischen *LES* und *RANS* bei der Simulation chemischer Reaktionen ist beispielsweise bei Novozhilov (Novozhilov, 2001) dargestellt. Eine Anwendung von *LES* auf turbulente thermische Freistrahlen ist Ma et al. (Ma et al., 2007) zu entnehmen, während Jahnke et al. (Jahnke et al., 2004) die Mischeigenschaften eines Freistrahles im Coflow untersucht. Thibaut et al. (Thibaut et al., 1998) zeigt eine Anwendung in der Verbrennungstechnik und Ibsen et al (Ibsen et al., 2004) präsentiert *LES* im Zusammenhang mit diskreten Partikeln. Noch vor der *DNS* finden im Bereich der Turbulenzbeschreibung mittels *Large Eddy Simulation* heute die meisten wissenschaftlichen Arbeiten statt.

Eine Abwägung des rechentechnischen Aufwandes sowie des Konvergenzverhaltens gegen die zu erzielende Genauigkeit, speziell im Zusammenspiel mit Modellansätzen für chemische Reaktion, Wärmestrahlung oder heterogene Verbrennung, favorisiert sehr klar die Verwendung von RANS-Modellen für die Beschreibung der Turbulenz in den durchzuführenden komplexen Gesamtsimulationen des Verbrennungsapparats. Heute sind zahlreiche Formen dieser klassischen Modelle verfügbar und für die vorliegende Arbeit war die qualifiziere Auswahl des geeignetsten Modells von grundlegender Bedeutung. Folgende Turbulenzmodelle sind für diese Arbeit von Relevanz und wurden in einer genaueren Untersuchung evaluiert:

- Spalart-Allmaras
- Standard-k-ε
- RNG-k-ε
- Realizable k-ε
- Standard-k-ω
- SST- k-ω
- Reynolds-Stress-Modell

Die Ergebnisse der genannten Evaluierung sowie die Auswahl des geeignetsten Turbulenzmodells für die Gesamtsimulation des Verbrennungsapparates sind in den Kapiteln 7.1 und 14.4 ausgeführt.

6.5 Modellierung von Mehrphasenströmungen

Bei der Modellierung von Feststoffverbrennungsprozessen ist prinzipiell davon auszugehen, dass eine zumindest zweiphasige Strömung vorliegt. Einerseits können Partikel festen Brennstoffs durch die Gasströmung aufgewirbelt und transportiert werden, andererseits kann auch durch die Verbrennung selbst partikulärer Staub entstehen. Es ist also das fluiddynamische Regime einer partikelbeladenen Gasphasenströmung zu betrachten (FLUENT, 2005). Dabei ist die Gasphase als kontinuierliche und die partikuläre Phase als disperse Phase aufzufassen (Paschedag, 2004; FLUENT, 2005). Für die Simulation solcher disperser Systeme werden heute im Wesentlichen zwei verschiedene Methoden eingesetzt: das *Euler-Lagrange-Verfahren* sowie das *Euler-Euler-Verfahren*.

Beim Euler-Lagrange-Verfahren wird nur die kontinuierliche Phase durch Kontinuitätsgleichung und Impulsbilanz beschrieben, für die Dispersphase werden lediglich Partikelbahnen einer größeren Anzahl von Partikeln durch das Strömungsfeld der Fluidphase ermittelt (Paschedag, 2004; FLUENT, 2005). Dabei kann der Einfluss der einzelnen Phasen aufeinander (Phaseninteraktion) durch Wechselwirkungsterme modelliert werden. Für partikelbeladene Gasströmungen, bei denen die disperse Phase maximal 10 % des Gesamtvolumens einnimmt, wird der Euler-Lagrange-Ansatz empfohlen (FLUENT, 2005). Beim Euler-Euler-Verfahren werden dagegen beide Phasen als kontinuierlich und sich gegenseitig durchdringend aufgefasst. Für beide Phasen werden Kontinuitätsgleichung und Impulsbilanz aufgestellt, die aufgrund der Einführung eines Volumenanteils für jede der beteiligten Phasen geringfügig adaptiert werden müssen (Paschedag, 2004; FLUENT, 2005). Das Verfahren ist mathematisch und rechentechnisch aufwändiger, vermag aber deutlich höhere Dispersphasenanteile (oft bis zur dichtest möglichen Packung) als das Euler-Lagrange-Verfahren zu bewältigen (Paschedag, 2004).

Der experimentelle Betrieb der Verbrennungs-Versuchsanlage zeigte durch visuelle Begutachtung der Verbrennungsvorgänge im Inneren der Brennkammer sehr deutlich, dass der Phasenanteil der Dispersphase Staub weit unterhalb der Grenze von 10 % zu erwarten ist. Aus diesem Grund kann postuliert werden, dass für eine gute und effiziente Beschreibung der Mehrphasenströmung in dieser Arbeit das Euler-Lagrange-Verfahren (oft auch *Lagrangian Tracking* oder *Particle Tracking*) heranzuziehen ist. Eine deutliche Vereinfachung in der Modellierung für die vorliegende Arbeit wurde dadurch erzielt, dass der Staub einerseits als inert angenommen wurde (keine Verbrennung und kein Stoffaustausch) und andererseits keine Phaseninteraktion (kein Einfluss auf Impuls- und Energiebilanz) berücksichtigt wurde. Die Lösungsprozedur wird dadurch dahingehend vereinfacht, dass zunächst das einphasige Gasströmungsfeld gelöst wird und im Anschluss die Partikelbahnen der partikulären Phase berechnet werden können (*post-calulation, post-processing*), da ja kein Einfluss der Partikelströmung auf die Gasströmung zu berücksichtigen ist. Eine signifikante Reduktion des erforderlichen Rechenaufwandes bei gleichzeitiger Erhöhung der Stabilität des Lösungsvorganges

sind die Folgen dieser Vereinfachung. Auf der anderen Seite sind aufgrund dieser Vereinfachung die Oxidation brennbarer Staubpartikel sowie deren Ausbrand und die Bildung von Russ nicht erfassbar. Dennoch sind grundlegende Aussagen zum Verhalten des Staubes im Ofen möglich: Verweilzeiten und Verweilzeitverteilungen, Verteilung des Staubes in der Brennkammer, Akkumulation und Anbackungen an Brennkammerwänden, Strömungstotzonen und strömungsinduzierte Staubablagerungen in der Brennkammer. Darüber hinaus ist in gewissem Umfang auch die Partikeltemperatur sowie deren Verlauf während des Transports durch die Brennkammer abschätzbar, wenn davon ausgegangen wird, dass die Reaktionswärme aufgrund des geringen Volumens und der großen spezifischen Oberfläche des Staubs gegenüber dem Wärmetransport zwischen Fluid und Partikel vernachlässigbar ist. Damit ist die Tendenz zum Aufschmelzen der Staubpartikel und zur Verschlackung der Brennkammer quantifizierbar.

Ein Spezialfall des Lagrangian-Tracking wird in der vorliegenden Arbeit zur weiterführenden Analyse des Strömungsfelds angewandt. Durch die Anwendung des Euler-Lagrange-Verfahrens auf masselose Partikel, die der Fluidströmung perfekt folgen, können die mittlere Verweilzeit und die Verweilzeitverteilung für die Gasströmung ermittelt werden (bei Verwendung einer statistisch ausreichenden Anzahl von verfolgten Partikeln). Diese Daten liefern wertvolle Aussagen zur strömungsdynamischen Qualität des Verbrennungsapparates, zur Abschätzung des Vorkommens von Strömungstotzonen, Strömungskurzschlüssen und Rückströmbereichen. Die Verweilzeit des Gases liefert weiters Hinweise auf den möglichen Ausbrand brennbarer Gase (die 3 Ts der Verbrennungstechnik: *time*, *temperature*, *turbulence*).

Weiterführende Informationen über die genannten Verfahren zur Beschreibung von Mehrphasenströmungen sind der einschlägigen Literatur zu entnehmen. Paschedag (Paschedag, 2004) liefert einen grundlegenden Einstieg in die Materie mit zusätzlicher Berücksichtigung des Konzepts der Populationsbilanzen. Sommerfeld sowie Crowe et al. (Sommerfeld, 1996; Crowe et al., 1998) beschäftigen sich sehr intensiv mit der Entwicklung und Anwendung des Euler-Lagrange-Verfahrens, während bei Hill sowie bei van Wachem et al. (Hill, 1998; van Wachem et al., 2001) sehr ausführlich das Euler-Euler-Verfahren dargestellt und die verschiedenen Implementierungen verglichen werden.

Die Erweiterung der bereits implementierten Mehrphasenmodellierung hinsichtlich eines Verbrennungsmodells für die partikuläre Staubfraktion würde einen signifikanten Wissensgewinn bedeuten und steht deshalb auf der Liste zukünftiger Arbeiten sehr weit oben. Hierzu könnten prinzipiell dieselben Strukturen und Modellansätze verwendet werden, wie sie bereits für die Verbrennung des festen Brennstoffs in den immobilen Volumina des Ballens und des Rostbetts entwickelt wurden (siehe Kapitel 6.7.2). Es ist allerdings davon auszugehen, dass für die Anwendung dieses Modellkomplexes auf den Ausbrand der Staubfraktion eine direktere Kopplung zwischen der Lösungsprozedur der fluiden und der festen Phase gefunden werden muss. Im Idealfall müsste also das Feststoffverbrennungsmodell direkt im kommerziellen CFD-Solver implementiert und gelöst werden (im Gegensatz zur Implementierung in einem externen Solver, sequentieller Problemlösung und anschließenden Datenaustauschs). Zwei gute Beispiele für die Applikation von Feststoffverbrennungsmodellen in partikelbeladenen Gasströmungen und die Implementierung dieser Modelle in gängige CFD-Codes liefern die Arbeiten von Syred et al. sowie von Lu et al. (Syred et al., 2007; Lu et al., 2008). Lu et al. beispielsweise wenden in ihrer Arbeit ein sehr ähnliches Verbrennungsmodell auf die Par-

tikelverbrennung an, wie es auch in der vorliegenden Arbeit entwickelt und implementiert wurde. Sie erzielen mit den entwickelten Modellen sehr gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen eigener experimenteller Untersuchungen (Lu et al., 2008). Syred et al. zeigen in ihrer Arbeit, dass die im kommerziellen CFD-Solver FLUENT© bereits implementierten Modelle für die heterogene Verbrennung für viele Anwendungsfälle nur unzureichende Ergebnisse liefern können (Syred et al., 2007). Im Anschluss zeigen die Autoren, wie verbesserte Modellansätze mit dem kommerziellen Solver kombiniert werden können, um die Vorhersagequalität zu verbessern, räumen aber gleichzeitig ein, dass auf diesem Gebiet noch erheblicher Forschungsbedarf besteht.

Weitere interessante und erwähnenswerte Forschungsbemühungen wurden in den Arbeiten von Kær et al. (Kær et al., 2003; Kær et al., 2004) dokumentiert. Die Autoren erweitern den CFD-Solver FLUENT© um einen Modellkomplex, der das Verhalten von Flugasche und Staub in strohgefeuerten Rostverbrennungssystemen in sehr guter Qualität beschreiben kann. Damit kann die Ablagerung von Asche durch Impaktierung sowie Aufschmelzung an den Brennkammerwänden, sowie die Tendenz zur Verschlackung sehr gut abgebildet werden. In ihren Arbeiten vernachlässigen die Autoren zwar die Verbrennungsvorgänge in der partikulären Phase, die Qualität der Ergebnisse bleibt davon aber offensichtlich unbeeinflusst. In weiterer Folge müsste der Transport der Staubfraktion durch die Gasströmung untersucht werden, wobei speziell die nichtsphärische Struktur des Staubes zu berücksichtigen ist. Yin et al., ebenfalls in der Forschergruppe um Søren Kær, entwickelten beispielsweise ein Modell zur Beschreibung zylindrischer Staubpartikel innerhalb einer mit Weizenstroh befeuerten Verbrennungsanlage (Yin et al., 2003; Yin et al., 2004) und erzielen damit gute Ergebnisse. Die Anwendung solcher Modelle für die vorliegende Simulationsarbeit würde ebenfalls einen deutlichen Wissenszuwachs liefern.

6.6 Strahlungsmodellierung

Da der Strahlungswärmeaustausch nach dem Stefan-Boltzmann-Gesetz mit der vierten Potenz der Temperatur zunimmt, ist die Berücksichtigung dieses Wärmetransportmechanismus in Verbrennungsapparaten unumgänglich (Keramida et al., 2000). Die Strahlungsmodellierung ist dabei ein relativ komplexes Thema, das sehr gut in der Literatur dargestellt ist (Mishra et al., 1998; Viskanta, 2008). Die im eingesetzten CFD-Solver verfügbare Modellierung ist für die betrachtete Problemstellung sehr gut geeignet (Knaus et al., 1997; FLUENT, 2005), weshalb hier kein zusätzlicher Modellieraufwand erforderlich ist. Aus diesem Grund wird an dieser Stelle nur ein kurzer Einblick in die verwendete Modellierung gegeben.

Zur Modellierung des Strahlungswärmeaustausches wird zunächst die Erhaltungsgleichung der Gesamtstrahldichte unter Berücksichtigung eines am Strahlungsaustausch teilnehmenden Mediums angesetzt. Die Gesamtstrahldichte eines Strahlers gibt an, welche Strahlungsleistung der Körper auf allen Frequenzen in eine gegebene Richtung pro Flächeneinheit und pro Raumwinkeleinheit aussendet. Die hierbei getroffene Vereinfachung, dass die Strahlungsintensität keine spektrale Abhängigkeit aufweist, ermöglicht lediglich die Simulation von grauer Strahlung, was im vorliegenden Fall keine wesentliche Einschränkung darstellt (FLUENT, 2005). Soll nichtgraue Strahlung mitberücksichtigt werden, so ist überdies noch

über den gesamten Frequenzbereich zu integrieren. Die Erhaltungsgleichung der Gesamtstrahldichte ist damit die Grundgleichung des Strahlungswärmeaustausches und ist in Gleichung 6.11 dargestellt (FLUENT, 2005; Bordbar et al., 2008).

$$\frac{dI(\mathbf{r},\mathbf{s})}{ds} + (a+\sigma_s)I(\mathbf{r},\mathbf{s}) = an^2\frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi}\int_0^{4\pi} I(\mathbf{r},\mathbf{s}')\Phi(\mathbf{s}\cdot\mathbf{s}')d\Omega' \tag{6.11}$$

Die Gleichung beschreibt den Transport der Gesamtstrahldichte entlang des Richtungsvektors **s** und berücksichtigt dabei die Absorption, Emission und Streuung durch ein am Strahlungsaustausch teilnehmendes Medium. Im Vergleich zu konvektivem oder diffusivem Transport ist der Transport von Strahlungsenergie nicht an ein Medium gebunden (elektromagnetische Strahlung), kann aber sehr wohl mit Materie interagieren. Für die Anwendung in der Finiten-Volumen-Methode bedeutet dies, dass eine Rechenzelle nicht nur mit ihren direkten Nachbarzellen, sondern mit allen sichtbaren Zellen der Domäne interagiert (Klason et al., 2008). Aus diesem Grund ist eine analytische Lösung des Strahlungswärmetransports für technische Anwendungen im Augenblick nicht zweckmäßig durchführbar (Knaus et al., 1997; Mishra et al., 1998; Viskanta, 2008). Aus diesem Grund sind eine Reihe von Modellierungsansätzen mit entsprechenden vereinfachenden Annahmen entwickelt worden, von denen viele Eingang in kommerzielle CFD-Solver gefunden haben. Einen Überblick über diese Ansätze liefert die einschlägige Literatur (Knaus et al., 1997; Mishra et al., 1998; Bordbar et al., 2008; Viskanta, 2008).

Die aktuelle Version des in dieser Arbeit verwendeten CFD-Solvers FLUENT bietet eine Reihe von Standardmodellen zur Verwendung an, die jeweils für spezielle Anwendungen geeignet sind: das DTRM-Modell (Sazhin et al., 1996a; Keramida et al., 2000; Wen et al., 2000; Xue et al., 2001; Stephenson, 2003), das P1-Modell (Sazhin et al., 1996b), das Rosseland-Modell (FLUENT, 2005), das *Surface-to-surface*-Modell (FLUENT, 2005) sowie das *Discrete-Ordinates*-Modell (Knaus et al., 1997; Mishra et al., 1998; FLUENT, 2005; Paul, 2008; Viskanta, 2008).

Aufgrund der Fähigkeit des *Discrete-Ordinates*-Modells (DO-Modell) zur verlässlichen Beschreibung spezieller Verhältnisse, die im vorliegenden Fall eines Biomasseverbrennungsapparates anzutreffen sind, wurde dieses Modell für alles Simulationen in der vorliegenden Arbeit verwendet. Diese Verhältnisse umfassen die optische Dichte des Strahlungsproblems (mit einer optischen Dichte der Größenordnung 1 berechnet nach FLUENT (FLUENT, 2005) und Günther (Günther, 1984) ist das hier behandelte Problem als optisch dünn und damit simulationstechnisch aufwändiger anzusehen), die Anwesenheit von Gaskomponenten, die intensiv am Strahlungswärmeaustausch teilnehmen (CO_2 und H_2O), die Streuungseffekte durch eine partikuläre Dispersphase, das Auftreten nichtgrauer Strahlung (obwohl in dieser Arbeit nicht berücksichtigt) sowie das Auftreten sehr lokaler Wärmestrahlungsquellen (FLUENT, 2005). Die erfolgreiche Anwendung des DO-Modells auf Probleme in der Verbrennungstechnik wird in der Literatur vielfach beschrieben (Knaus et al., 1997; Scharler et al., 2000a; Huttunen et al., 2004; Sheng et al., 2004; Mueller et al., 2005; Hajek et al., 2006; Bordbar et al., 2008; Heikkinen et al., 2008; Klason et al., 2008; Viskanta, 2008; Yin et al., 2008). Zur schnellen Ermittlung erster Ergebnisse sowie für die Initialisierung komplexerer Simulationen wurde neben dem DO-Modell auch das einfachere DTRM-Modell verwendet. Da in der vorliegenden Arbeit aber lediglich Ergebnisse des DO-Modells präsen-

tiert werden, sei das DTRM-Modell an dieser Stelle nicht weiter erläutert, sondern auf die Literatur verwiesen.

Bei Anwendung des DO-Modells wird die Erhaltungsgleichung der Gesamtstrahldichte (*radiative transfer equation, RTE*, siehe Gleichung 6.12) als Transportgleichung formuliert (siehe Gleichung 6.12) und für eine einstellbare endliche Zahl von Raumrichtungen (angegeben durch den Richtungsvektor **s**) gelöst. Jede Raumrichtung **s** entspricht daher einer Transportgleichung für die Gesamtstrahldichte (Mishra et al., 1998; FLUENT, 2005; Viskanta, 2008).

$$\nabla\left(I(\mathbf{r},\mathbf{s})\mathbf{s}\right)+\left(a+\sigma_s\right)I(\mathbf{r},\mathbf{s})=an^2\frac{\sigma T^4}{\pi}+\frac{\sigma_s}{4\pi}\int_0^{4\pi}I(\mathbf{r},\mathbf{s}')\Phi(\mathbf{s}\cdot\mathbf{s}')d\Omega' \tag{6.12}$$

Durch die Formulierung der Gesamtstrahldichte als Transportgröße ist die Beschreibung des Strahlungsenergieaustausches mathematisch ident mit der Beschreibung des konvektiven oder diffusiven Stoff- und Energieaustauschs, weshalb auch dieselben Lösungsstrategien verwendet werden können. Ein umfangreicher Überblick über moderne Implementierungen des DO-Modells sowie Strategien zur Lösung der Gleichungssysteme ist in einer Arbeit von Balsara (Balsara, 2001) gegeben. Eine genaue Beschreibung des DO-Modells, speziell in Hinblick auf die räumliche Modellierung, findet sich in FLUENT (FLUENT, 2005).

Neben den festen Oberflächen des Verbrennungsapparates nimmt auch die Gasatmosphäre, und hier aufgrund ihrer Molekülstruktur speziell die beiden Komponenten CO_2 und H_2O, am Strahlungsenergieaustausch teil (Çelik et al., 1996). Zur Berücksichtigung des Absorptions- und Emissionsverhaltens dieser Gaskomponenten, die speziell in der Simulation von technischen Verbrennungsprozessen relevant sind, wird an dieser Stelle das *Weighted-Sum-of-Grey-Gases*-Modell (WSGGM) verwendet. Dieses Modell stellt einen idealen Kompromiss aus Genauigkeit und rechentechnischem Aufwand dar (FLUENT, 2005). Vereinfachend wird hier Absorptions- und Emissionskoeffizient für das Gas gleichgesetzt und deren Wert in Abhängigkeit der Gehalte an Kohlendioxid und Wasserdampf berechnet. Für Temperaturbereiche, die für Biomasseverbrennungen üblich sind, ist das Modell gut geeignet (FLUENT, 2005). Eine genaue Modellformulierung sowie die erforderlichen Modellparameter für das WSGGM sind der Literatur zu entnehmen (siehe Sazhin et al., 1996a; Kim et al., 2000). Ein ausgewähltes Beispiel für die erfolgreiche Anwendung des Modells in der Verbrennungssimulation findet sich bei Saario (Saario et al., 2005).

6.7 Verbrennungsmodellierung

Verbrennung (Oxidation) ist eine chemische Reaktion, deren Verlauf im Wesentlichen vom Reaktionsgleichgewicht sowie von der Reaktionsgeschwindigkeit (Kinetik) bestimmt wird. In technischen Verbrennungsapparaten ist die Kinetik von entscheidender Bedeutung, da hier der Reaktion nur eine begrenzte Zeit für ihren Ablauf zur Verfügung gestellt wird. Danach verlässt das Gas den Verbrennungsapparat und wird im nachfolgenden Wärmetauscher abgekühlt, womit die Reaktion faktisch beendet wird. Die Reaktionsgeschwindigkeit ist damit direkt für den Ausbrandgrad verantwortlich. Chemische Reaktionsgeschwindigkeiten sind wie

folgt definiert (Stoff- oder Massenabnahme pro Zeiteinheit bezogen auf das Reaktionsvolumen):

$$r_i = \frac{1}{V} \times \frac{\partial n_i}{\partial t} \tag{6.13}$$

$$r_i = \frac{1}{V} \times \frac{\partial m_i}{\partial t} \tag{6.14}$$

Um die Kinetik einer Reaktion zu modellieren, ist in der Reaktionstechnik eine Superposition aus einem konzentrationsabhängigen Term (Potenzgesetz) und einem temperaturabhängigen Term (Arrhenius-Gesetz) üblich (siehe Gleichung 6.15).

$$r_i = f_1(T_{\mathrm{GAS}}) \times f_2(c_i) \tag{6.15}$$

Wie die Reaktionskinetik einer beliebigen Reaktion in Abhängigkeit von Temperatur und Zusammensetzung mathematisch beschrieben werden kann, wurde bereits in Kapitel 5.2 bei der Entwicklung des Dreizonenmodells für die Globalbilanzierung ausgeführt. Die mathematischen Zusammenhänge sowie die erforderlichen Parameter zur Beschreibung des konkreten Stoffsystems sind den Gleichungen 5.59 bis 5.63 zu entnehmen.

Diese Ausführungen gelten im Wesentlichen für homogene chemische Reaktionen, in diesem Fall Gasphasenreaktionen, bei denen die Reaktanten ideal durchmischt vorliegen. Bei der Verbrennung von Feststoffen liegt eine heterogene Verbrennung vor, bei der eine Reihe zusätzlicher Reaktionsschritte zu berücksichtigen ist. Diese Schritte umfassen im Wesentlichen den Stoffübergang der Reaktanten zwischen der festen und der gasförmigen Phase (Adsorption und Desorption). Auch diese Schritte sind sehr stark von der lokalen Durchmischung der benachbarten Gasphase, also vom konvektiven und diffusiven Stofftransport abhängig. Eine schematische Darstellung des Verbrennungsmodells, welches für die komplexe Gesamtsimulation des Verbrennungsapparates verwendet wurde, ist in Abbildung 6-9 dargestellt. Die Abbildung ist zur Erhöhung der Übersichtlichkeit aschefrei dargestellt, da im entwickelten Modell die Aschefraktion chemisch unverändert bleibt und lediglich Temperaturveränderungen erfährt. Ein ähnliches Grundkonzept der Modellierung heterogener Verbrennungsvorgänge von Strohbiomasse wurde beispielsweise bei Zhou et al. (Zhou et al., 2005) vorgestellt.

Das Verbrennungsmodell beinhaltet 10 Leitkomponenten in der homogenen Gasphase, von denen drei zur Beschreibung der brennbaren Gasbestandteile (C_xH_y, CO, H_2) und weitere drei zur Beschreibung der Stickstoffoxidemissionen aus dem Brennstoff-Stickstoff (NH_3, HCN, NO) verwendet werden. Die restlichen vier Komponenten sind Verbrennungsluftbestandteile (O_2, N_2) oder Verbrennungsprodukte (CO_2, H_2O). Die heterogenen Reaktionsschritte (Trocknung oder Wasserverdampfung, Ausgasung oder Volatilisierung, Koksabbrand) machen sich für die homogene Gasphase dadurch bemerkbar, dass sie eine Quelle (oder Senke) von Gaskomponenten und Energie darstellen, welche von einer Vielzahl von Parametern der Gasphase und der festen Brennstoffphase abhängen. Im Gleichklang damit ändert sich auch die Zusammensetzung und Beschaffenheit der festen Phase. Die weiteren Reaktanten für die homogenen Gasphasenreaktionen werden dem Verbrennungsapparat

über die zonalen Eintritte von Verbrennungsluft und Rezirkulationsgas zugeführt, am Austritt verlässt die Gasmischung nach erfolgter Reaktion den Apparat (und die CFD-Domäne).

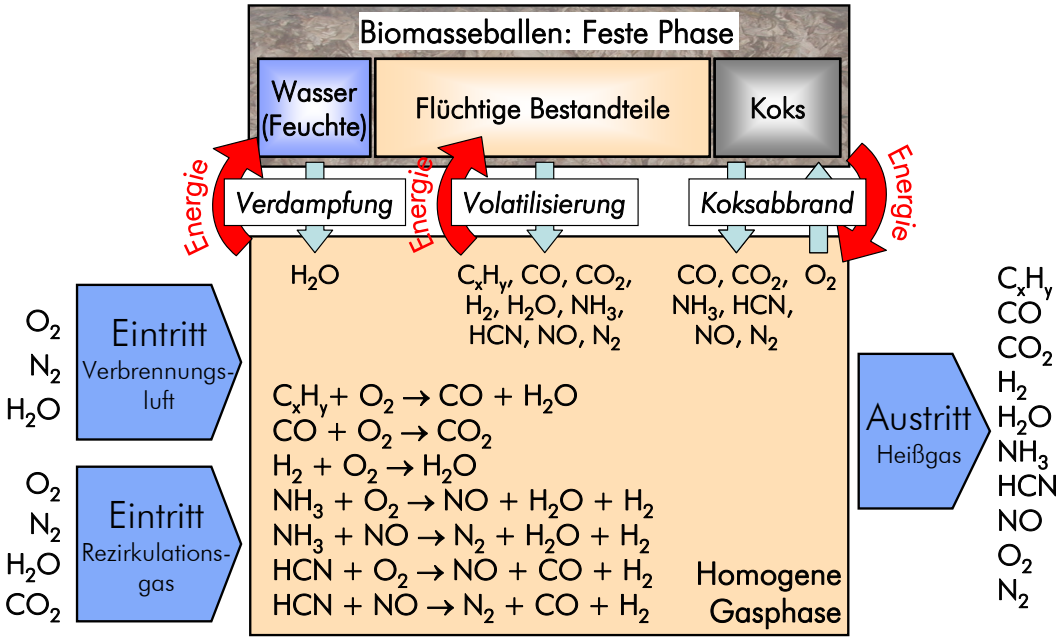


Abbildung 6-9: Schematische Darstellung des implementierten Verbrennungsmodells (Asche im Brennstoff ist der Einfachheit halber nicht dargestellt)

Im folgenden Abschnitt werden zunächst die homogenen Gasphasenreaktionen beschrieben, welche im kommerziellen CFD-Solver bereits in ausreichendem Maße zur Verfügung gestellt werden. Der Aspekt der Durchmischung der Reaktionspartner ist aber selbst bei homogener Gasphasenreaktion von großer Bedeutung, da bei schnellen Reaktionen dies der geschwindigkeitsbestimmende Schritt sein kann. Es ist also die Vermischung von Gaskomponenten durch konvektiven Transport, molekulare Diffusion und turbulente Diffusion gemeinsam mit der reinen chemischen Reaktionsrate zu berücksichtigen. Das entstehende Modellsystem ist relativ komplex und die Lösung (des meist sehr steifen Gleichungssystems) ist nicht trivial. Die Literatur und der kommerzielle CFD-Solver stellen für diese Kopplung von Turbulenz und Kinetik aber eine Vielzahl von Modellen und die zugehörigen Informationen bereit.

Im Anschluss an die Behandlung der homogenen Gasphasenreaktionen wird ein Algorithmus für die Behandlung der heterogenen Reaktionsschritte entwickelt, welcher Aspekte abbildet, die im kommerziellen CFD-Solver noch nicht verfügbar sind. Basierend auf einer umfangreichen Literaturstudie wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit ein entsprechendes Modell entwickelt und in einer weitverbreiteten Simulationsumgebung implementiert, wo nun durch Einsatz gängiger Lösungsalgorithmen ein zuvor definiertes Problem-Setup gelöst werden kann. Dieses externe Modell zur Abbildung der heterogenen Verbrennung tauscht extensiv Daten mit dem kommerziellen CFD-Solver aus, und ergibt in Summe einen Simulationsapparat zur adäquaten Gesamtbeschreibung des Verbrennungsapparates.

Eine hervorragende Einführung in die mathematische Beschreibung und Simulation der Verbrennungstechnik sowohl bei gasförmigen als auch festen Brennstoffen liefert Keating in seiner Arbeit (Keating, 2007). Eine kurze Einführung in die Erfassung von Verbrennungsprozessen mit CFD-Methoden wird auch bei Westbrook et al. (Westbrook et al., 2004) gegeben. Die verschiedenen Ansätze zur Beschreibung turbulenter Verbrennungsprozesse mittels

CFD, die heute Stand des Wissens sind, werden beispielsweise bei Peters (Peters, 2004) erörtert. Bei Jäger et al. (Jäger et al., 2007) findet sich eine hervorragende Einführung in die Theorie und Modellierung reaktiver turbulenter Strömungen. Die Entwicklung von Modellen zur Beschreibung der Verbrennung und der Entstehung von Luftschadstoffen (NO_x, Russ, flüchtige Kohlenwasserstoffe) für fossile Kohlen sowie für verschiedene Biomassen wird in einem Überblicksbeitrag von Williams et al. (Williams et al., 2001) erläutert.

6.7.1 Beschreibung der homogenen Gasphasenreaktionen

Die Theorie homogener Gasphasenreaktionen ist seit langem gut bekannt und in der Literatur vielfach ausführlich dokumentiert (Glassman, 1996; Baerns et al., 1999; Veynante et al., 2002; Hänel, 2004; Emig et al., 2005; Glassman, 2008). Selbst komplexe Reaktionsmechanismen mathematisch hochwertig zu modellieren ist damit heute Stand der Technik. Die Schwierigkeiten bei der Beschreibung chemischer Reaktionen und chemischer Reaktionskinetik liegen in der Charakterisierung der beteiligten Komponenten (Spezies).

Oxidationsreaktionen von Kohlenwasserstoffen, wie sie in letzter Instanz auch die Verbrennung von Biomasse darstellen, sind häufig durch sehr komplexe Reaktionsmechanismen mit einer großen Zahl beteiligter Spezies. Oftmals verläuft die Oxidation in mehreren Stufen unter Bildung einer Reihe von Zwischenprodukten; radikalische Moleküle sind meistens zu berücksichtigen. Die Struktur vieler dieser Oxidationsreaktionsmechanismen ist heute ebenfalls relativ gut erforscht, doch die große Anzahl an Reaktionen und Reaktionspartnern ist problematisch. Für viele Reaktionen kann durchaus angenommen werden, dass sie irreversibel ablaufen und sich kein Reaktionsgleichgewicht einstellt. Dies gilt aber nicht immer, sodass experimentell (oder mittels *ab-initio*-Methoden auch rechnerisch) Gleichgewichtsparameter zur Beschreibung des Stoffsystems ermittelt werden müssen. Noch schwieriger gestaltet sich die Situation, wenn die Reaktionskinetik quantitativ erfasst werden muss. Hier sind für alle Reaktionen und alle Reaktionspartner die beschreibenden Parameter (Arrheniusparameter, Potenzen im Potenzgesetz = Reaktionsordnung) zu bestimmen, wobei die hohe Parallelität durch ablaufende Konkurrenzreaktionen sowie die oft sehr hohe Reaktionsgeschwindigkeit die messtechnische Erfassung solcher Systeme signifikant erschwert. Daraus folgt, dass die Datenlage hinsichtlich der Reaktionskinetik für viele Fälle in der wissenschaftlich zugänglichen Literatur relativ dünn ist; oft ist ihre Gültigkeit nur innerhalb gewisser Grenzen von Betriebsparametern garantiert.

Aufgrund der Aufgabenstellung für die vorliegende Arbeit wurde zur Beschreibung der Verbrennungsvorgänge im Apparat ein Modell gewählt, welches auf der Definition und der Bilanzierung (Stofftransport) von Gaskomponenten beruht. Da bei Durchführung numerischer Strömungssimulation jede zusätzliche Gaskomponente eine zusätzlich zu lösende Bilanzgleichung verursacht (siehe Kapitel 6.3.2), sind bei einem Stoffsystem mit N Komponenten als neben der Kontinuitätsgleichung noch $N-1$ Speziesbilanzen zu lösen (die Überschusskomponente ergibt sich aus der Gesamtbilanz). Um die numerische Stabilität des Gesamtmechanismus und das Konvergenzverhalten des numerischen Modells zu verbessern, sollte also der Gasphasenreaktionsmechanismus so einfach wie möglich gehalten werden (Zhou et al., 2005). Aus diesem Grund und aufgrund der Datenlage hinsichtlich der Reaktionskinetik muss sich der Entwickler bei der Modellierung der chemischen Vorgänge im Rahmen einer CFD-Simulation auf eine beschränkte Anzahl von Leitkomponenten und äquivalent auf eine

beschränkte Anzahl von charakteristischen Summenreaktionsgleichungen festlegen. Diese erste Tätigkeit im Rahmen der Modellierung des chemischen Systems beeinflusst die spätere Aussagekräftigkeit der erzielten Ergebnisse maßgeblich. Nachdem die vorliegende Arbeit ingenieurwissenschaftlichen Hintergrund hat, wurde diese Auswahl unter dem Gesichtspunkt getroffen, messtechnisch zugängliche Parameter und Effekte am realen Verbrennungsapparat bei den wesentlichen Betriebszuständen möglichst effizient abzubilden. Dabei handelt es sich beispielsweise um die Rauchgaszusammensetzung am Austritt, Gas- und Oberflächentemperaturen an bestimmten Stellen, die beobachtete gestufte Verbrennung bei bestimmten Betriebsbedingungen und dergleichen.

Als Leitspezies für brennbare Gasbestandteile wurden CO, H_2 sowie eine näher zu definierende Summenkomponente C_xHy festgelegt. Zur Beschreibung der Bildung von Stickstoffoxiden aus dem im Brennstoff enthaltenen Stickstoff wurden die Komponenten NH_3, HCN und NO implementiert (Details in Kapitel 6.7.2.4). Schließlich wurden noch die Luftbestandteile O_2 und N_2 sowie CO_2 und H_2O als Verbrennungsprodukte in das System der Leitspezies der homogenen Gasphase aufgenommen. Diese 10 Spezies sind Reaktionsteilnehmer an einem System aus 7 chemischen Reaktionen der homogenen Gasphase, die ebenfalls so ausgewählt wurden, dass sie das System möglichst effizient beschreiben können und dennoch in der Lage sind, alle wesentlichen Effekte der Biomasseverbrennung in ausreichendem Maße zu beschreiben. Auch hier ist zu postulieren, dass jede zusätzliche Reaktionsgleichung das Gleichungssystem des Gesamt-CFD-Modells aufgrund der mathematischen Steifheit um ein Vielfaches komplexer und damit schwieriger zu lösen (Konvergenzverhalten) und weniger lösungsstabil macht. Bereits im Jahr 2000 haben Hill et al. in ihrer Arbeit beschrieben (Hill et al., 2000), dass die Berücksichtigung der großen Anzahl der, für Verbrennungsprozesse relevanten, NO_x-Reaktionen und Reaktionsmechanismen (die Autoren sprechen von mehreren hundert Reaktionsgleichungen) in einem komplexen CFD-Gesamtmodell rechentechnisch und mathematisch viel zu aufwändig ist. Stattdessen wird empfohlen, wenige Reaktionsgleichungen mit Globalcharakter zu verwenden, die in der Lage sind, das reale Verhalten abzubilden. Obwohl mathematisch und vor allem computertechnisch mittlerweile radikale Fortschritte gelungen sind, ist die Kombination mehrerer hundert Reaktionsgleichungen mit turbulenter Strömung in einem komplexen Verbrennungsapparat auch heute noch nicht Stand der Technik. Aus diesem Grund wurde der von Hill et al. (Hill et al., 2000) vorgeschlagene Zugang auch in der vorliegenden Arbeit verfolgt. Die berücksichtigten Reaktionsgleichungen der homogenen Gasphase sind in Abbildung 6-9 dargestellt. Sehr ähnliche Gasspezies und Gasphasenreaktionen wurden auch in den wissenschaftlichen Arbeiten von Torbern Klason verwendet, der sehr erfolgreich die Verbrennung von Holzbiomasse in Rostfeuerungssystemen mit Mitteln der numerischen Strömungssimulation untersucht hat (Klason, 2006; Klason et al., 2007).

Die Summenkomponente für brennbare Kohlenwasserstoffe C_xHy setzt sich im Wesentlichen aus CH_4, C_2H_4 und C_3H_8 zusammen, die der Einfachheit halber zu einer Pseudokomponente zusammengefasst wurden. Im Fachjargon der Verbrennungstechniker kann diese Komponente auch als *VOC* (*volatile organic carbon*) oder flüchtiger organischer Kohlenstoff aufgefasst werden. In dieser Arbeit wird die Zusammensetzung der entstehenden gasförmigen Komponenten während des Volatilisierungsschrittes als konstant angenommen und damit bleibt auch das Verhältnis von Kohlenstoff und Wasserstoff in der Summenkomponente fixiert. Dieses Verhältnis beträgt 1,8 zu 5,0 (auf molarer Basis), die vereinfachte Summenformel von C_xHy lautet also $C_{1,8}H_{5,0}$. Das Molekulargewicht beträgt damit 26,66 g/mol, die

molare Standardbildungsenthalpie ΔH_f^0 beträgt -365,613 kJ/mol und die Reaktionsenthalpie der Oxidation mit O_2 zu CO und H_2O ΔH_r beträgt -16.426,0 kJ/kg. Wie diese Daten genau ermittelt wurden, wird in Kapitel 6.7.2.2 bei der Beschreibung des heterogenen Reaktionsschrittes der Volatilisierung hergeleitet.

Tabelle 6-2: Berücksichtigte chemische Reaktionen und Modellierung der Reaktionskinetik für die homogene Gasphase (Verbrennungsreaktionen)

	Reaktionsgleichung	Reaktionsgeschwindigkeitsansatz	Quelle
1:	$C_xH_y + 2{,}15\,O_2 \rightarrow 1{,}8\,CO + 2{,}5H_2O$ $\Delta H_r = -437{,}91\,\text{kJ/mol}$	$r_{C_xH_y,1} = 1{,}0729 \cdot 10^{10} \exp\left(-\frac{15.312}{T_{GAS}}\right) \cdot c_{C_xH_y}^{0,27686} \cdot c_{O_2}^{1,36316}$	aus dieser Arbeit
2:	$CO + 0{,}5\,O_2 \rightarrow CO_2$ $\Delta H_r = -282{,}98\,\text{kJ/mol}$	$r_{CO,2} = 2{,}239 \cdot 10^{12} \exp\left(-\frac{20.446}{T_{GAS}}\right) \cdot c_{CO} \cdot c_{O_2}^{0,25} \cdot c_{H_2O}^{0,5}$	FLUENT, 2005
3:	$H_2 + 0{,}5\,O_2 \rightarrow H_2O$ $\Delta H_r = -241{,}83\,\text{kJ/mol}$	$r_{H_2,3} = 9{,}87 \cdot 10^{8} \exp\left(-\frac{3.728}{T_{GAS}}\right) \cdot c_{H_2} \cdot c_{O_2}$	FLUENT, 2005

Tabelle 6-3: Zusätzlich berücksichtigte chemische Reaktionen und Modellierung der Reaktionskinetik für die homogene Gasphase (Modell zur Bildung von Stickstoffoxid)

	Reaktionsgleichung	Reaktionsgeschwindigkeitsansatz	Quelle
4:	$NH_3 + O_2 \rightarrow NO + H_2O + 0{,}5\,H_2$ $\Delta H_r = -225{,}52\,\text{kJ/mol}$	$r_{NH_3,4} = 1{,}21 \cdot 10^{5} \exp\left(-\frac{8.000}{T_{GAS}}\right) \cdot c_{O_2}^{0,5} \cdot c_{H_2}^{0,5} \cdot c_{NH_3} \cdot T_{GAS}^{2}$	Brink et al., 2001
5:	$NH_3 + NO \rightarrow N_2 + H_2O + 0{,}5\,H_2$ $\Delta H_r = -578{,}99\,\text{kJ/mol}$	$r_{NH_3,5} = 8{,}73 \cdot 10^{14} \exp\left(-\frac{2.667}{T_{GAS}}\right) \cdot c_{NO} \cdot c_{NH_3} \cdot T_{GAS}^{-1}$	Brink et al., 2001
6:	$HCN + O_2 \rightarrow NO + CO + 0{,}5\,H_2$ $\Delta H_r = -275{,}31\,\text{kJ/mol}$	$r_{HCN,6} = 1{,}0 \cdot 10^{13} \exp\left(-\frac{11.238}{T_{GAS}}\right) \cdot c_{O_2} \cdot c_{HCN}$	Hill et al., 2000
7:	$HCN + NO \rightarrow N_2 + CO + 0{,}5\,H_2$ $\Delta H_r = -503{,}50\,\text{kJ/mol}$	$r_{HCN,7} = 3{,}0 \cdot 10^{15} \exp\left(-\frac{10.063}{T_{GAS}}\right) \cdot c_{NO} \cdot c_{HCN}$	Hill et al., 2000

Die Reaktionsgleichungen, welche für die Modellierung der homogenen Gasphasenreaktionen im Rahmen der in dieser Arbeit durchgeführten CFD-Simulationen berücksichtigt wurden, sind in Tabelle 6-2 zusammengefasst. Diese Tabelle enthält jene drei Reaktionen, die stellvertretend für alle Verbrennungsreaktionen abgebildet wurden. Die Oxidation von Wasserstoff und Kohlenmonoxid wird einstufig modelliert, die Oxidation der Kohlenwasserstoff erfolgt zweistufig mit Kohlenmonoxid als intermediärem Reaktionsprodukt (z. B. auch bei Adanez et al., 2003 oder Williams et al., 2001). Vier weitere Gasphasenreaktionen wurden berücksichtigt, die für das Modell der Beschreibung der Stickstoffoxid-Bildung aus dem im Brennstoff vorhandenen Stickstoff benötigt werden. Diese Reaktionsgleichungen sind in Tabelle 6-3 gegeben. Die Beschreibung des Stickstoffoxid-Modells selbst ist Kapitel 6.7.2.4

zu entnehmen. Beide Tabellen enthalten neben der Summenreaktionsgleichung und der Reaktionsstöchiometrie auch den verwendeten Ansatz zur Beschreibung der Reaktionskinetik. Hier ist die Superposition aus dem temperaturabhängigen Exponentialterm nach Arrhenius und dem Potenzgesetz für den Einfluss der Reaktantkonzentrationen zu berücksichtigen. Zwei der Reaktionsgleichungen aus dem Stickstoffoxid-Modell (jene für NH_3) berücksichtigen einen zusätzlichen Potenzterm für die Reaktionstemperatur. Weiters sind auch noch die Reaktionsenthalpien angegeben, welche jeweils aus den Standardbildungsenthalpien der Reaktionsteilnehmer (Lide, 2004) ermittelt wurden. Die Literaturquellen, aus welchen die Globalreaktionsmechanismen sowie die Ansätze zur Reaktionsgeschwindigkeit bezogen wurden, sind in den beiden Tabellen ebenfalls verzeichnet. Wie bereits in Kapitel 5.2 erläutert, wurden für die Entwicklung des Dreizonen-Verbrennungsmodells im Rahmen der Globalbilanzierung ebenfalls die drei Verbrennungsreaktionen in Tabelle 6-2 verwendet.

In den meisten Fällen sind für die verwendeten Gaskomponenten mehrere globale Reaktionspfade und vor allem mehrere Parametersätze für die Kinetik publiziert, sodass auf Basis der jeweiligen Gültigkeitsbereiche (Verbrennungstemperatur, Konzentrationsbereiche) und der vorhandenen Betriebsparameter der Verbrennungsanlage eine Auswahl getroffen werden musste. Die Oxidation von CO wird in dieser Arbeit als sehr wesentlich eingestuft, weshalb dieser Schritt auch genauer untersucht wurde. Hierzu wurden die kinetischen Ansätze mehrerer Literaturquellen (Fenimore et al., 1957; Howard et al., 1973; Leuckel et al., 1979; Mueller et al., 1999; Shin et al., 2000; Costa et al., 2003; FLUENT, 2005) in einer Parameterstudie anhand des Rohrreaktor-Modells untersucht und der Einfluss wesentlicher Betriebsparameter auf den Reaktionsverlauf untersucht. Basierend auf den Ergebnissen dieser Untersuchungen wurde in dieser Arbeit der kinetische Ansatz des FLUENT-Handbuchs (FLUENT, 2005) verwendet. Die Parameter dort werden im Übrigen gleich von mehreren unabhängigen Literaturstellen bestätigt. Saastamoinen et al. haben in einer Arbeit (Saastamoinen et al., 2000) eine komplexere Formulierung für die Umsatzkinetik der CO-Oxidation erarbeitet, die nach ihrer Darstellung in einem breiteren Temperaturbereich die experimentellen Ergebnisse abbilden kann. Im verwendeten CFD-Solver kann diese Formulierung aufgrund ihrer Struktur aber nicht ohne weiteres übernommen werden. Da die Programmierung weiterer benutzerdefinierter Subroutinen vermieden werden sollte, blieb dieser Ansatz unberücksichtigt. Die Oxidationskinetik der Summenkomponente C_xH_y wurde aus den Kinetiken der drei leichten Kohlenwasserstoffe, aus denen die Pseudokomponente im Wesentlichen besteht, abgeschätzt. Hierzu wurden die drei parallelen Oxidationsreaktionen für die angenommene Zusammensetzung (siehe Kapitel 6.7.2.2) bei verschiedenen typischen Betriebsbedingungen des Verbrennungsapparates angesetzt und die Abnahme der Gesamtmolzahl an Edukten über der Reaktionszeit aufgezeichnet. Die Reaktionskinetiken für die drei Einzelkomponenten konnten der FLUENT-internen Datenbank (FLUENT, 2005) entnommen werden. Diese Abnahme wurde anschließend mit einer neuen Oxidationskinetik (Arrhenius und Potenzgesetz) approximiert.

Auch für die Oxidationsreaktion von NH_3 wurden mehrere Literaturstellen analysiert (Fenimore et al., 1961; Mitchell et al., 1982; Brink et al., 2001) und schließlich die Daten von Brink, Kilpinen und Hupa (Brink et al., 2001) implementiert. Der dortige Mechanismus stellt eine, für Verbrennungsprozesse nachgewiesenermaßen zulässige, Vereinfachung des deutlich komplexeren Mechanismus von Kilpinen et al. (Kilpinen et al., 1999; Coda Zabetta et al., 2001) dar. Die Kinetiken der HCN-Reaktionen aus der Überblicksarbeit von Hill (Hill et al., 2000) entstammen dem relativ bekannten DeSoete-Mechanismus. Dieser Mechanis-

mus wurde von Norstrom et al. (Norstrom et al., 2000) relativ ausgiebig gemeinsam mit anderen Mechanismen untersucht und hinsichtlich seiner Eignung bei der CFD-Simulation zur Ermittlung der Stickstoffoxid-Entstehung bei der Biomasseverbrennung bewertet. Ein guter Überblick über die genauen Reaktionsmechanismen der NO_x-Vorläuferspezies NH_3 und HCN wird in der sehr detaillierten Arbeit von Dagaut et al. (Dagaut et al., 2008) gegeben. In realen Verbrennungsatmosphären laufen erwartungsgemäß deutlich mehr Reaktionen mit Stickstoffkomponenten ab als die hier berücksichtigten direkten Oxidations- und Reduktionsreaktionen von NH_3 und HCN. Wie beispielsweise zwei Arbeiten des Forscherteams um Franz Winter (Wargadalam et al., 2000; Loeffler et al., 2002) zu entnehmen ist, tragen speziell die in vielen Verbrennungssystemen relevanten Radikale und radikalischen Zwischenprodukte der Kohlenwasserstoffoxidation intensiv zum reaktionstechnischen Umsatz (vorwiegend zur Oxidation) der NO_x-Vorläufersubstanzen bei. Die verwendeten Reaktionsgeschwindigkeitsansätze wurden allesamt in technischen Verbrennungsatmosphären ermittelt, berücksichtigen diese Nebenreaktionen also bereits in einem globalen Ansatz. Damit ist aber auch klar, dass die verwendeten Parameter von der Gaszusammensetzung der Verbrennungsatmosphäre abhängig und keineswegs als allgemeingültig zu betrachten sind. In Summe sind die Reaktionen der Stickstoff-Komponenten deutlich langsamer als die übrigen Verbrennungsreaktionen und eine genaue Modellierung der chemischen Umsetzung unter Berücksichtigung der chemischen Kinetik ist für die Vorhersage der zu erwartenden NO_x-Emissionen unerlässlich (Hill et al., 2000).

Aus den Reaktionsraten kann direkt die Quelle/Senke für die jeweilige Speziesbilanz in Massen- oder Molform ausgedrückt werden. Aus der Reaktionsenthalpie kann über den molaren Umsatz im Anschluss die Wärmetönung der Einzelreaktion ermittelt werden, welche als Wärmequelle/Senke in die Energiebilanz einfließt.

Wie bereits eingangs erwähnt, ist bei der detaillierten Betrachtung chemischer Reaktionen in turbulenten Strömungen die Koppelung der Mischung der Reaktanten durch Konvektion sowie laminare und turbulente Diffusion mit der chemischen Reaktionsrate selbst zu berücksichtigen. Der konvektive Stofftransport wird gemeinsam mit dem Strömungsfeld ermittelt. Die Berücksichtigung der laminaren Diffusion erfolgt unter Anwendung des Fick´schen Gesetzes und der Angabe von Diffusionskoeffizienten (FLUENT, 2005). Hierfür können entweder die Diffusionskoeffizienten der einzelnen Komponenten in der komplexen Gasmischung verwendet werden, Gruppen binärer Diffusionskoeffizienten oder Ansätze aus der kinetischen Gastheorie (FLUENT, 2005). Da die laminare Diffusion bei turbulenten Strömungen wie in der vorliegenden Anwendung aber um mehrere Größenordnungen kleiner ist als die turbulente Diffusion, reicht an dieser Stelle die Verwendung eines konstanten Diffusionskoeffizienten für alle Gaskomponenten aus. Dieser Wert wird aus Literaturdaten für unendlich verdünnte Mischungen ermittelt (FLUENT, 2005).

Neben dem konvektiven Stofftransport ist also die turbulente Diffusion der Haupteinflussfaktor für die Durchmischung der Reaktionsteilnehmer. Die Koppelung zwischen turbulenter Mischung und Reaktionskinetik ist in den meisten Fällen relativ komplex und mathematisch sowie rechentechnisch aufwändig. Es gibt natürlich eine Reihe vereinfachter Ansätze, bei denen jeweils einer dieser Faktoren als dominierend und damit geschwindigkeitsbestimmend angenommen wird. Der jeweils andere physikalische Effekt wird vernachlässigt (beispielsweise die mischungsdominierten Modelle *eddy-breakup-model* und *mixed-is-burned-model* oder das kinetikdominierte Modell *laminar-finite-rate*). Es sind eine ganze Reihe von Arbeiten pub-

liziert, bei denen solche einfacheren (und mathematisch wesentlich weniger aufwändigen) Modelle erfolgreich eingesetzt werden konnten (z.B. Manickam et al., 1998; Wen et al., 2000; Novozhilov, 2001; Xue et al., 2001).

Die Oxidationsreaktion von CO sowie speziell die berücksichtigten Reaktionen im Stickstoffoxid-Modell sind allerdings vergleichsweise langsam ablaufende Reaktionen, sodass sowohl die turbulente Durchmischung auf kleinskaliger Ebene als auch die chemische Reaktionsrate gesamtgeschwindigkeitsbestimmend sind. Infolgedessen sind beide Effekte in einem Modell zur Beschreibung der Verbrennung zu berücksichtigen, was in der vorliegenden Arbeit durch die Anwendung des *Eddy-Dissipation-Concept*-Modells (EDC) geschah. Dieses Modell geht auf frühe Arbeiten von Hjertager und Magnussen (Magnussen et al., 1977; Magnussen et al., 1979; Magnussen, 1981) zurück und wurde seither mehrfach erweitert und verfeinert (Magnussen, 1989; Golovitchev et al., 2002; Magnussen, 2005). Das Modell ist im verwendeten CFD-Solver fertig implementiert (*species transport approach*) und bedarf keiner weiteren Parametrisierung. Da eine wechselweise Beeinflussung von Strömungsfeld/Turbulenzfeld und Verbrennungsreaktion vorliegt, sind beide Submodelle gekoppelt und zeitgleich zu lösen. Der Einfluss des Turbulenzfeldes auf die chemische Reaktion ist größer als der Einfluss in umgekehrter Richtung; außerdem ist die Berechnung komplexer chemischer Reaktionen in der Simulationsdomäne mit dem EDC-Modell rechnerisch aufwändig. Aus diesem Grund bietet der verwendete CFD-Solver die Möglichkeit, nicht bei jedem Iterationsschritt zur Lösung des Geschwindigkeits- und Turbulenzfeldes auch die chemische Reaktion und damit die Änderung der örtlich aufgelösten Gaszusammensetzung zu ermitteln. Für komplexe Simulationen wurde etwa in dieser Arbeit nur bei jedem zehnten Iterationsschritt auch das homogene Verbrennungsmodell gelöst. Dadurch kann bessere Konvergenz und eine stabilere Lösung erreicht werden. Die Ergebnisse für die homogenen Gasphasenreaktionen sind generell vielversprechend und werden im Kapitel 7.2 näher beleuchtet.

Das EDC-Modell baut inhaltlich auf der Kaskadierung der Turbulenz hinsichtlich der Wirbelskalen und der turbulenten kinetischen Energie auf (siehe hierzu Kapitel 6.4). Die großen Wirbel in der turbulenten Strömung sind für die Produktion turbulenter kinetischer Energie verantwortlich und tauschen diese mechanische Energie untereinander (auch in Richtung kleinerer Skalen) sowie in Richtung der Hauptströmung aus (Magnussen et al., 1977; Magnussen, 2005). Die Dissipation der turbulenten kinetischen Energie findet dagegen vorwiegend in den kleinsten Wirbelstrukturen aufgrund der molekular wirkenden Kräfte statt. Magnussen (Magnussen et al., 1977) errechnet, dass etwa 75 % der Dissipation auf dieser Ebene stattfinden. Die Bereiche der turbulenten Feinstruktur werden als lokal isolierte Regionen aufgefasst, die nur einen kleinen Bruchteil des Volumens des gesamten Strömungsraumes einnehmen (Magnussen et al., 1977).

Diese turbulente Feinstruktur bildet nun den Reaktionsraum für die stattfindenden chemischen Reaktionen, da im EDC-Modell postuliert wird, dass die (für die chemische Reaktion erforderliche) molekulare Mischung der Reaktanten ausschließlich und vollständig in den feinskaligen Wirbeln vollzogen wird (Magnussen et al., 1977). Der Volumenanteil der Strömungsdomäne, der von den kleinskaligen turbulenten Wirbeln ausgefüllt wird, wird infolgedessen als ideal durchmischter, homogener Reaktor modelliert. Dass dieser Ansatz physikalisch vertretbar ist, leitet Magnussen in seiner Arbeit (Magnussen, 2005) gut nachvollziehbar ab. Hier können beliebig komplexe Reaktionen und deren chemische Kinetik angesetzt werden (Magnussen, 1989). Neben der innigen Durchmischung der Reaktionspartner ist auch

noch eine ausreichende Temperatur für die chemische Reaktion ausschlaggebend, sodass der Bruchteil des möglichen Reaktionsraumes ermittelt werden muss, der auch tatsächlich für eine chemische Reaktion zur Verfügung steht (Magnussen et al., 1977). Unter Berücksichtigung der lokalen Bedingungen in diesem feinskaligen Wirbelreaktor kann die chemische Reaktion über das kinetische Modell sowie eine Bilanzierung von Masse, Stoff und Energie erfasst werden (Magnussen, 2005). Alle Ebenen größerskaliger Wirbel sind lediglich für den Stofftransport der Reaktanten in diesen Reaktionsraum zuständig. Wenn nun das tatsächlich zur Verfügung stehende Reaktionsvolumen sowie der Stofftransport in dieses Reaktionsvolumen mathematisch ermittelt werden können, kann gemeinsam mit der chemischen Reaktionskinetik ein vollständiges Modell entwickelt werden, welches die turbulente Durchmischung mit der chemischen Reaktionsrate koppelt.

Unter der Voraussetzung annähernd isotroper Turbulenz (Magnussen et al., 1977) leitet Magnussen in seinem EDC-Modell einen Gleichungsapparat her, mit dem aus den Turbulenzparametern der Strömung (ermittelt mit dem jeweiligen Turbulenzmodell) auf das Reaktionsvolumen und den Stofftransport geschlossen werden kann. Damit sind bereits aus der Turbulenzsimulation alle Parameter zur Berücksichtigung der turbulenten Durchmischung der Reaktionspartner bekannt und keine zusätzlichen Approximationen sind erforderlich. Aus diesem Grund ist speziell für eine hochqualitative Simulation von Verbrennungsvorgängen auch die präzise Erfassung der Turbulenzkenngrößen des strömenden Mediums von entscheidender Bedeutung. Ungenaue Turbulenzmodellierung trägt bereits nicht unwesentliche Fehlerquellen in die Verbrennungsrechnung hinein. Der komplexe Gleichungsapparat des EDC-Modells ist in den Arbeiten von Magnussen selbst (Magnussen et al., 1977; Magnussen et al., 1979; Magnussen, 1981; Magnussen, 1989; Magnussen, 2005) sowie in der Übersichtsarbeit von Ertesvag et al. (Ertesvag et al., 2000) ausführlich dokumentiert. Diese Arbeiten beinhalten außerdem bereits Anwendungen des Modells zur Beschreibung sehr schneller chemischer Reaktionen (mischungsdominiert), sowie langsamer, kinetikdominierter Reaktionen. Der Einfluss der Reaktionsgeschwindigkeit der reinen chemischen Reaktion auf Simulationsergebnisse des EDC-Modells wird in begrenztem Umfang in einer Arbeit von Gran et al. (Gran et al., 1997) beleuchtet. Kurze überblicksartige Einführungen zum Thema EDC-Modell finden sich auch bei Schmidt et al. (Schmidt et al., 2003; Schmidt et al., 2004) sowie im Handbuch des verwendeten CFD-Solvers (FLUENT, 2005). Letztgenannte Stelle liefert darüber hinaus noch Kriterien zur Auswahl von Modellen zur Beschreibung chemischer Reaktionen.

Von der erfolgreichen Anwendung des EDC-Modells bei der Beschreibung von Verbrennungsprozessen wird in der Literatur vielfach berichtet. Die Verbrennung in einer Gasturbine wird beispielsweise bei Gran et al. (Gran et al., 1994) beschrieben, während Micklow et al. (Micklow et al., 2002) die Vorgänge im Dieselmotor mit speziellem Fokus auf die Russbildung betrachten. Eine erfolgreiche Anwendung bei der CFD-Simulation von Gasbrennern wird unter anderem auch bei Fleck et al. (Fleck et al., 2003) beschrieben. Vergleiche von Simulationsergebnissen mit experimentellen Daten im Bereich der Kohlenwasserstoff-Oxidation sowie der Stickstoffoxid-Reduzierung mittels Methan-Reburning liefern Magel et al. in ihren Arbeiten (Magel et al., 1996a; Magel et al., 1996b; Magel et al., 1996c). Auch Anwendungen des Modells bei der Simulation komplexerer, technisch interessanter Prozesse sind dokumentiert: Verbrennung unter Anwesenheit turbulenter Freistrahlen bei Wen et al. (Wen et al., 2000), Gasphasenreaktionen unter typischen Betriebsbedingungen der Vergasung bei Rehm et al. (Rehm et al., 2009), Beschreibung der Co-Verbrennung von Kohle und

Stroh in einem großen industriellen Kessel bei Kær et al. (Kær et al., 1998), Behandlung der Gasphasenreaktionen im Rahmen der Biomasseverbrennung bei Scharler und Obernberger (Scharler et al., 2000a; Scharler et al., 2000b; Obernberger, 2003). Die Anwendung bei der Beschreibung homogener Flüssigphasenreaktionen wurde in den Arbeiten von Hjertager et al. (Hjertager et al., 2000; Hjertager et al., 2002) bewertet, wobei auch ein Vergleich zu anderen Methoden (*propability density function – pdf*) durchgeführt wurde. Eine zusammenfassende Beschreibung des EDC-Modells und seiner Erweiterungen gemeinsam mit einer ganzen Reihe verschiedener Anwendungen wird schließlich in einer Arbeit von Golovitchev et al. (Golovitchev et al., 2002) präsentiert.

6.7.2 Beschreibung der heterogenen Reaktionsschritte während der Verbrennung fester Biomasse

Wenn qualifizierte Voraussagen über das Verhalten des festen Brennstoffes während der Verbrennung gemacht werden sollen, bzw. auch zur Erhöhung der Detaillierung der fluiddynamischen Verhältnisse, ist eine Modellierung des Feststoffes zumindest bis zu einem gewissen Grad erforderlich. Dabei ist darauf Acht zu legen, dass eine De-tailtiefe gewählt wird, die gerade ausreichend ist, um aufgrund der erzielbaren Ergebnisse die erwünschten Aussagen treffen zu können und das Gesamtmodell dennoch überschaubar und robust bleibt. Hierbei sind die Vereinfachungen, die eine stationäre Strömungssimulation bereits mit sich bringen, zu berücksichtigen; dies macht sich insbesondere dadurch bemerkbar, dass sinnvollerweise ein homogener (und zeitlich unveränderbarer) Brennstoff angenommen wird. Die exzessive Modellierung von Details ist (heute noch) nicht sinnvoll, es muss darauf geachtet werden, dass die Gesamtsimulation stabil bleibt und innerhalb einer vernünftigen Zeitspanne ein aussagekräftiges Ergebnis liefern kann.

Im vorliegenden Ansatz werden die heterogenen Verbrennungsschritte wie folgt unterschieden: Trocknung (Verdampfung/Verdunstung der Brennstoff-Feuchte), Ausgasung der flüchtigen Brennstoffkomponenten (Volatilisierung, Pyrolyse, Thermolyse), Ausbrand der residuellen Feststoffkomponenten (Koksabbrand). Wesentlich bei diesem Ansatz ist dabei, dass Trocknung/Volatilisierung und Koksabbrand als aufeinanderfolgende Reaktionsschritte aufgefasst werden. Im Zuge des Austreibens der flüchtigen Komponenten wird der Koks also erst nach und nach gebildet. In der Literatur sind auch Arbeiten bekannt (z. B. Várhegyi et al., 2011b), wo der Gesamtprozess aus parallel ablaufenden Reaktionen aufgefasst wird, also gedanklich in der rohen Biomasse bereits ein Koksanteil vorhanden ist, der bei höheren Temperaturen und unter Anwesenheit von Sauerstoff oxidiert werden kann. In der genannten Arbeit wird aber gezeigt, dass die erzielbaren Ergebnisse mit beiden Modellansätzen zumindest für Weizenstroh nahezu vollständig gleich sind, die Vorgänge Volatilisierung und Koksabbrand thermisch also weit genug separiert sind. Generell ist zu sagen, dass der Ansatz von Folgereaktionen aufgrund der größeren physikalischen Nähe gegenüber jenem von Parallelreaktionen vorzuziehen ist.

Hinsichtlich der heterogenen Reaktionsschritte wurden verschiedene Formulierungen aus der Literatur analysiert und verifiziert und ein Submodell für die Behandlung des Festbrennstoffes erstellt. Dieses Modell simuliert den Feststoff auf einem eigenen Rechengitter, welches als solches geometrisch komplett unabhängig vom Gitter des CFD-Solvers (*Dual Grid approach*) angesetzt wurde. Zwischen beiden Gittern findet sehr intensiver Datenaustausch statt

um die Teilergebnisse des eines Solvers als Eingangsgrößen im anderen Solver verwenden zu können. Das heterogene Verbrennungsmodell ermittelt für die übergeordnete Strömungssimulation die ortsaufgelöste Freisetzung der verschiedenen Gaskomponenten (im Falle des Sauerstoffs ist eine Senke zur Erfassung des Sauerstoffverbrauches im Zuge der Koksverbrennung implementiert) sowie die Quellen bzw. Senken volumetrischer Wärme zur Modellierung der Wärmetönung der Verbrennungsschritte (es wird zu zeigen sein, dass die reine Volatilisierung ein endothermer Vorgang ist, bei dem Energie zugeführt werden muss). Um diesen Zweck zu erfüllen, ist das Aufstellen und Lösen der Massenbilanz, verschiedener Speziesbilanzen für alle beteiligten Komponenten und Elemente sowie der Energiebilanz erforderlich. Werden Gravitation, kinetische Energie und Änderungen im Druck vernachlässigt, so ist die Lösung einer eigenen Impulsbilanz nicht notwendig (Thunman et al., 2003). Im Zusammenhang mit der Freisetzung von Gaskomponenten wird auch ein Modell zur Vorhersage der Bildung von Stickstoffoxiden aus dem Brennstoff-Stickstoff (Hauptquelle von Stickstoffoxiden für diese Arbeit) angewendet. Dieses Modell wurde ebenfalls aus der Literatur übernommen und adaptiert. Es umfasst die heterogene Freisetzung sogenannter NO_x-Precursor-Spezies und die nachfolgende Weiterreaktion dieser Spezies in der homogenen Gasphase zu NO sowie N_2. Weiters wird über die Abschätzung der Oberflächentemperatur des Feststoffes der Strahlungswärme-Austausch mit der Verbrennungskammer (Gasatmosphäre und feste Oberflächen) abgebildet. Schließlich werden die fluiddynamischen Eigenschaften des Brennstoffvolumens, sprich die wesentlichen Parameter zur Ermittlung des Druckverlustes bei Durchströmung, ermittelt.

Weil die Implementierung dieses Submodells „Festbrennstoff" eine Neuentwicklung darstellt und damit ein erhöhter Bedarf an Monitoring und Überprüfung von Teilergebnissen gegeben ist, wurde dieses Modell in einem sehr übersichtlichen externen Solver implementiert. Außerdem sind die Möglichkeiten, die der kommerzielle CFD-Solver FLUENT© hinsichtlich der Behandlung von Festphasen bietet, relativ begrenzt und für die Beschreibung komplexer heterogener Verbrennungsschritte ist eine eigenständige Modellierung (*user-defined functions*, *user-defined subroutines*) erforderlich. Andererseits ist für diese duale Implementierung die teilweise doppelte Modellierung und Lösung von Grundgleichungen wie Massenbilanz und Energiebilanz erforderlich. Da diese Grundgleichungen dann aber speziell für die jeweilige Phase aufgestellt werden können, ergibt sich eine etwas einfachere Beschreibung mit geringerer Komplexität. Die Lösung der fluiddynamischen Domäne im kommerziellen CFD-Solver und die Lösung der Vorgänge in der festen Phase mit dem selbst programmierten Solver erfolgen also getrennt voneinander in separaten Schritten. An den Schnittstellen erfolgt jeweils nach Erreichen eines konvergenten Ergebnisses im jeweiligen Rechengitter ein Datentransfer zwischen den beiden Modellimplementierungen (den beiden Rechengittern) zur Aktualisierung der jeweiligen Randbedingungen und die Simulation der beiden Teildomänen wird neuerlich durchgeführt. Dieser Datentransfer spiegelt im Wesentlichen den Massen- und Energietransport zwischen den beiden Phasen wider (darüber hinaus auch noch die Beschreibung des fluiddynamischen Verhaltens des Feststoffes). Dieser Vorgang wird solange wiederholt, bis die Lösung in sich konvergent ist, das heißt die beiden Teilmodelle konvergent sind und die Austausch-Matrix sich nicht mehr wesentlich ändert. Bevor die einzelnen Schritte der heterogenen Verbrennungsmodellierung im Folgenden genauer beschrieben werden, soll an dieser Stelle ein kurzer Querschnitt über relevante Literaturarbeiten gegeben werden.

Frühe Arbeiten zur pyrolytischen Zersetzung von Holz und holzartiger Biomasse können bei Roberts (Roberts, 1970) und Murty Kanury (Murty Kanury, 1972) gefunden werden. Die Autoren beschreiben, wie auf Basis von TGA-Untersuchungen die Kinetik der Volatilisierung ermittelt werden kann. Sie schlagen bereits den Arrhenius-Ansatz für die Temperaturabhängigkeit und Reaktionen erster Ordnung hinsichtlich der Reaktantmasse vor. Anhand eigener Untersuchungen oder Daten aus der Literatur werden Kinetikansätze erarbeitet. Auch Nunn (Nunn et al., 1985a; Nunn et al., 1985b) modelliert mit diesem Ansatz die Volatilisierung von Holz und Lignin aus Holz und untersucht darüber hinaus noch die Zusammensetzung der Produkte (gasförmige Komponenten, Teer und Koks) sowie die Abhängigkeit dieser Zusammensetzung von der Pyrolysetemperatur. Arbeiten zur Aufklärung der molekularen Zusammensetzung von Produkten der Holzpyrolyse finden sich beispielsweise in den Arbeiten von Evans et al. (Evans et al., 1987a; Evans et al., 1987b), für Mais und Stroh sind Analysenergebnisse bei Koóš et al. (Koóš et al., 1983) zu finden. Eine weitere grundlegende Arbeit zur Holzpyrolyse, in der bereits neben der Kinetik der Umsetzung auch der Wärmeübergang berücksichtigt wird, findet sich bei Pyle et al. (Pyle et al., 1984). Die Autoren führen eigene experimentelle Untersuchungen durch und modellieren die pyrolytische Umsetzung unter Berücksichtigung verschiedener Prozessregime.

Der nächste Schritt nach der Betrachtung der Biomasse als Einkomponentensystem in der Literatur ist die Modellierung der komplexen Biomasse als Mehrkomponentensystem. Sehr gute Überblicksarbeiten hinsichtlich verschiedener Pyrolyse-Mechanismen und Modellierungsansätze vorwiegend für reine Zellulose, aber auch für Mischungen aus Zellulose, Hemizellulose und Lignin, sowie für Holz oder biogene Abfallstoffe liefert die Forschergruppe um Colomba Di Blasi (Di Blasi, 1993; Di Blasi, 1998). Die Autoren erwähnen Schwierigkeiten in der Festlegung der Reaktionsordnung der Pyrolyse zumindest für einen Teil der konstituierenden Komponenten (nullter Ordnung, erster Ordnung, auch gebrochene Ordnungen wurden veröffentlicht). Die verschiedenen Mechanismen werden komparativ untersucht und deren Resultate dargestellt; ein quantitativer Vergleich mit experimentellen Ergebnissen wird nicht gezogen. Eine weitere Gruppe von Forschern um Várhegyi beginnt in den späten 1980er Jahren mit strukturierten und technisch hervorragenden Arbeiten zur Kinetikaufklärung der Pyrolyse verschiedener biogener Materialien. Zu Beginn (Várhegyi et al., 1989a) werden auch hier die Reinstoffe Zellulose und Hemizellulose untersucht und die Pyrolyse mit verschiedenen Modellen beschrieben (einstufige Reaktion, Serie von Folgereaktionen, Parallel- und Konkurrenzreaktionen). Die späteren Arbeiten umfassen komplexere Biomassen und vor allem neue Modellierungsansätze, auf die später eingegangen werden soll. Für die Pyrolyse von Reinzellulose wurde mit dem Broido-Shafizadeh-Mechanismus (z. B. bei Várhegyi et al., 1994) ein komplexer Modellapparat entwickelt, der die Vorgänge sehr gut und in allgemeingültiger Form abbilden kann und bis heute seine Gültigkeit hat. Weitere Ergänzungen zur Modellierung der Zellulosepyrolyse wurden in der Folge beispielsweise von Demirbas (Demirbas, 2000) oder Li et al. (Li et al., 2001) vorgeschlagen. Im Gegensatz zur Pyrolyse von Zellulose oder Hemizellulose ist jene von Lignin ein sehr komplexer und weniger erforschter Prozess. Eine sehr gute Arbeit zur Aufklärung des Mechanismus der Thermolyse von Lignin kann aber beispielsweise bei Klein et al. (Klein et al., 2008) gefunden werden. Gute Überblicksarbeiten zum Stand des Wissens bei der Pyrolyse von Biomasse sowie deren Komponenten finden sich bei Peters et al. (Peters et al., 2003a; Peters et al., 2003b) sowie bei Basu et al. (Basu et al., 2009).

Ein relativ frühes und bereits sehr leistungsfähiges Modell zur Beschreibung der Pyrolyse komplexerer Biomassen wurde von Koufopanos et al. (Koufopanos et al., 1991) vorgestellt. Auch dieses Modell unterscheidet die Komponenten Zellulose, Hemizellulose und Lignin. Vom Umwandlungsschema her wird der Biomassebrennstoff zunächst in einem ersten Schritt „aktiviert", meist erklärt durch Depolimerisationsschritte und Kettenverkürzung und anschließend in zwei Konkurrenzreaktionen zu Teer und Gas sowie zu Koks umgewandelt. Dieses Modell wird auch von Srivastava und seinen Koautoren (Srivastava et al., 1996; Jalan et al., 1999) bei der Modellierung der Pyrolyse verschiedener lignozellulosehaltiger Biomassen verwendet. Ein zweistufiges Modell der Volatilisierung verwendet auch Babu in seinen Arbeiten (Babu et al., 2003b; Babu et al., 2003a; Babu et al., 2004a; Babu et al., 2004b; Babu et al., 2006) und erzielt damit gute Übereinstimmungen. Das Modell wurde im Laufe der Jahre um weitere physikalische Effekte erweitert (Wärmetransport, Wärmeübergang) und erlaubt auch die Beschreibung des Koksabbrandes. Liu et al.(Liu et al., 2002b) entwickelten ein Modell, welches im Wesentlichen einstufig ist und zwei Pseudokomponenten zur Beschreibung des thermischen Degradationsprozesses verwendet, die zwar keine direkte physikalisch-chemische Entsprechung im Brennstoff haben, aber dennoch die Kinetik der untersuchten Biomassen sehr gut abbilden können.

Prinzipiell kann davon ausgegangen werden, dass eine höhere Zahl von Komponenten die beobachtete TGA-Kinetik besser approximieren kann, die Entsprechung der verwendeten Pseudokomponenten mit im Brennstoff tatsächlich enthaltenen Komponenten erhöhen aber die Universalität. Steigert man die Anzahl der Komponenten gedanklich, so erhält man schließlich Modelle mit verteilter Aktivierungsenergie (*distributed activation energy model DAEM*). Hier wird zwar nur eine einzige Globalreaktion verwendet (nur Biomasse als Komponente), aber durch Verteilung der Aktivierungsenergie (Gauss-Verteilung) kann die Anwesenheit verschiedener Volatilisierungskinetiken simuliert werden. Dieser Ansatz ist zwar mathematisch aufwändiger in der Implementierung, erzielt aber bei einer geringeren Anzahl anzupassender Modellparameter eine bessere Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen. Die erfolgreiche Anwendung der DAEM-Methode für die Pyrolyse von Holzbiomassen wird in den Arbeiten von Adanez und de Diego (de Diego et al., 2002; Adanez et al., 2003; de Diego et al., 2003) demonstriert. Besonders geprägt wird der DAEM-Ansatz aber von der bereits erwähnten Forschergruppe um Gábor Várhegyi, die in zahlreichen Arbeiten (Várhegyi et al., 2002; Várhegyi et al., 2006; Becidan et al., 2007b; Várhegyi et al., 2009; Várhegyi et al., 2010; Várhegyi et al., 2011a; Trninić et al., 2012) das Modell für unterschiedlichste Biomassen erfolgreich anwendet. Ebendort sowie bei den Arbeiten von Sonobe et al. und Wang et al. (Sonobe et al., 2008; Wang et al., 2008) finden sich auch Analysen und Modellierungen für Weizenstroh und Maiskolben. In allen Arbeiten wird eine sehr gute Übereinstimmung mit den Experimenten erzielt. Aufgrund der Komplexität ist die DAEM-Methode relativ selten in Kombination mit CFD ganzer Verbrennungsapparate zu finden. Die Arbeit von Rostami et al. (Rostami et al., 2004) ist eine von wenigen Ausnahmen, bei denen die DAEM speziell für CFD-Zwecke adaptiert wird, meistens werden herkömmliche einstufige chemische Reaktionen erster Ordnung für ein bis drei Komponenten verwendet. In den Arbeiten von Grammelis et al. (Grammelis et al., 2005) und Becidan et al. (Becidan et al., 2007b) werden die verschiedenen Pyrolysemechanismen untersucht und verglichen (DAEM, global einstufiges Modell mit Potenzgesetz 1. Ordnung, 4-Komponenten-Modell mit Potenzgesetz n-ter Ordnung, mehrstufige Mechanismen mit Folgereaktionen). Die Autoren empfehlen für die praktische Anwendung Mehrkomponenten-Ansätze mit zumindest drei Komponenten sowie das DAEM-Modell.

Für die Entwicklung der Struktur des Gesamtverbrennungsmodells der vorliegenden Arbeit waren speziell vier Arbeiten aus der Literatur von großer Bedeutung, welche mehr oder weniger komplexe Modelle für die Verwendung in der Simulation eines technischen Verbrennungsapparates adaptiert haben. Thunman und Leckner (Thunman et al., 2003) entwickelten ein allgemeingültiges eindimensionales Modell für die Verbrennung von Biomasse in Festbetten, aus dem einige Anleihen bezüglich der Bilanzierung der festen und gasförmigen Phase entnommen werden konnten. Das Modell beinhaltet weiters die Beschreibung von Massen- und Stoffaustausch, Diffusion in der Gasphase im Lückenraum des Betts, Dispersion des Feststoffs, Wärmeaustausch und Strahlung im Bett. Die Struktur des Modells floss direkt in die Modellentwicklung der vorliegenden Arbeit ein, da die Autoren jedoch kaum Werte relevanter Modellparameter veröffentlichen, ist kein direkter Vergleich möglich. Zhou und seine Koautoren veröffentlichen in einer Arbeit (Zhou et al., 2005) ein hervorragendes Modell für die heterogene Verbrennung von Stroh im Festbett, dessen Ergebnisse gegen experimentelle Resultate validiert und dessen Parameter in einer ausgedehnten Sensitivitätsanalyse untersucht wurden. Das dort dargestellte Modell ist eine Weiterentwicklung des schon bei van der Lans et al. (van der Lans et al., 2000) entwickelten Algorithmus. Das Modell liefert für den genannten Anwendungsfall sehr gute Resultate und ist mathematisch sehr übersichtlich strukturiert. Das Modell von Zhou et al. wurde deshalb als Grundlage für das Verbrennungsmodell der vorliegenden Arbeit gewählt. Durch die Verwendung eines kommerziellen CFD-Solvers in der vorliegenden Arbeit konnten einige Aspekte der Arbeit von Zhou ausgeklammert und der bereits verfügbaren Implementierung überlassen werden. Stoffsystemrelevante Parameter mussten in Anlehnung an die Werte bei Zhou allerdings eigens entwickelt werden. An einigen Stellen erfolgte darüber hinaus eine zusätzliche Detaillierung des Modells. Abschließend sei das Modell von Wurzenberger et al. genannt (Wurzenberger et al., 2002), welches ebenfalls alle Aspekte der heterogenen Verbrennung von Biomasse abdeckt und sehr detailliert ist (Trocknung, Pyrolyse, Koksabbrand, homogene Gasphasenreaktionen). Neben der Beschreibung des Festbrennstoffbettes wurde auch noch ein verbrennendes Einzelpartikel modelliert.

Zu Beginn der Modellierung der heterogenen Verbrennungsvorgänge (inklusive des Wärme- und Stoffaustausches) muss die Entscheidung getroffen werden, ob Transportvorgänge im festen Brennstoffpartikel von Relevanz sind (und deshalb mitmodelliert werden müssen) oder nicht. DiBlasi (Di Blasi, 1997; Di Blasi et al., 2001b) führt hier die Unterscheidung eines thermisch dünnen und eines thermisch dicken Regimes ein. Ein thermisch dünnes Regime liegt demnach vor, wenn der externe Wärmetransport zur Partikeloberfläche wesentlich kleiner ist als der intrapartikuläre Wärmetransport aufgrund der Wärmeleitfähigkeit im Partikel. Dies tritt beispielsweise bei hinreichend kleinen Partikeln, bei hohen Wärmeleitfähigkeiten und geringen Wärmekapazitäten im Partikel sowie bei niedrigen Aufheizraten auf (Di Blasi, 1997; Di Blasi et al., 2001b). In einem solchen Fall kann dann eine uniforme Verteilung aller Bilanzgrößen und Parameter im Partikel angenommen werden, Sekundärreaktionen im Partikel (z.B. sekundäre Spaltung von Teeren und höheren Kohlenwasserstoffen) können aufgrund der kurzen Verweilzeiten vernachlässigt werden und es ist von einem geringeren Einfluss der physikalischen Brennstoffparameter (Partikelgröße, Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität, Feststoffpermeabilität) auf das Abbrandverhalten auszugehen (Di Blasi, 1997; Di Blasi et al., 1999c). Dem sehr starken Einfluss der Partikelgröße auf das Verbrennungsregime widmeten sich Galgano et al. in ihrer Arbeit (Galgano et al., 2004). Die Annahme eines homogenen Partikels während des gesamten Verbrennungsvorganges führt zu einer signifikanten Vereinfachung während der Modellbildung. Im Gegensatz zum thermisch

dünnen Regime treten im thermisch dicken Regime aber ausgeprägte Gradienten im Partikel auf, speziell hinsichtlich Temperatur und Zusammensetzung. In einem solchen Fall ist auch das Innere der thermisch dicken Partikel zu modellieren und gekoppelt mit der Gasphase zu lösen. Hierfür sind in der Literatur sehr viele Beschreibungsansätze, beispielsweise nach dem *shrinking-core*-Konzept, verfügbar (Miyanami et al., 1977; Mousquès et al., 2001; Thunman et al., 2002; Galgano et al., 2003; Bharadwaj et al., 2004; Galgano et al., 2004; Migliavacca et al., 2005).

Zur Abschätzung, ob der Wärmetransport am Feststoffpartikel (und damit der gesamte Volatilisierungs- und Abbrandvorgang) mit einem thermisch dünnen oder thermisch dicken Regime beschrieben werden kann, wird in der Literatur (Di Blasi et al., 2001b; Hagge et al., 2002; Galgano et al., 2004) die Verwendung der Biot-Zahl *Bi* empfohlen. Diese dimensionslose Kennzahl setzt den Wärmetransport von der Umgebung zur Partikeloberfläche ins Verhältnis zum intrapartikulären Wärmetransport durch Wärmeleitung. Im in dieser Arbeit vorliegenden Fall der Festbettverbrennung am Ballen und am Rostbett erfolgt der extrapartikuläre Wärmetransport durch Konvektion und abschnittsweise verstärkt auch durch Strahlung. Zur vereinfachten Abschätzung wird an dieser Stelle lediglich der konvektive Wärmeübergang vom Gas auf den festen Brennstoff berücksichtigt und die Biot-Zahl kann durch Gleichung 6.16 ermittelt werden (Galgano et al., 2004). Die Beschreibung des konvektiven Wärmeüberganges zur Partikeloberfläche erfolgt mit einer Nusselt-Korrelation für die laminare Parallelanströmung einer ebenen Platte (siehe Gleichung 6.17), die ebenfalls von der Literatur (Galgano et al., 2004; VDI, 2006) empfohlen wird.

$$Bi = \frac{\alpha l_P}{2\lambda_P} \tag{6.16}$$

$$Nu = 0{,}332 Pr^{1/3} Re^{1/2} \qquad \text{mit } Nu = \frac{\alpha l_P}{\lambda_g} \quad \text{und} \quad Re = \frac{\frac{v_g}{\varepsilon_{Bett}} l_P}{\upsilon_g} \tag{6.17}$$

Berechnet man nun die Biot-Zahl für einen stellvertretenden Basisfall im Brennstoffballen, so werden unter Annahme eines ausschließlich konvektiven Wärmetransportes zur Partikeloberfläche Werte zwischen 0 und 1,6 erhalten (zwischen 0,8 und 1,5 für das Rostbett). Eine ortsaufgelöste Darstellung der Biot-Zahl im Ballen für einen solchen Fall findet sich in Abbildung 14-1. Die Regionen mit verstärkter Gasentwicklung (Trocknung, Volatilisierung und beginnender Koksabbrand) sind als ausgeprägte Maxima der Biot-Zahl zu erkennen. Die Bereiche der Biot-Zahlen über 1 fallen mit Gebieten mit hohem Strahlungswärmeaustausch zusammen, wodurch der externe Wärmetransport signifikant erhöht und die Biot-Zahl reduziert wird. Unter Anwendung der Abschätzung der Biot-Zahl für Strahlungswärmeaustausch, die von DiBlasi et al. und von Galgano et al. publiziert wurden (Di Blasi et al., 2001b; Galgano et al., 2004), kann davon ausgegangen werden, dass alle Teile des heterogenen Brennstoffes (Ballen und Rostbett) Biot-Zahlen von unter 1 aufweisen, der extrapartikuläre Wärmeübergang also den Vorgang dominiert. Damit ist die Annahme, dass der Wärmeaustausch im vorliegenden Fall in einem thermisch dünnen Regime verläuft, durchaus gerechtfertigt (Di Blasi et al., 2001b; Galgano et al., 2004). Dennoch sollte an dieser Stelle verzeichnet werden, dass dieser Ansatz eine Vereinfachung darstellt; für spätere Arbeiten kann eine Erweiterung des heterogenen Verbrennungsmodells in Richtung der Beschreibung

thermisch dicker Partikel unter Anwendung des *shrinking-core*-Ansatzes zur Steigerung der Universalität und der Modellgenauigkeit empfohlen werden.

Viele Biomassen erfahren während der Thermolyse eine Veränderung der Partikelgröße. Diese ist neben der Art der Biomasse, deren Feuchte und dem Ausgasungsverhalten vor allem auch abhängig von den Betriebsbedingungen, unter denen die thermische Zersetzung stattfindet. Für verschiedenen Holzarten wurde dieses Verhalten beispielsweise von DiBlasi et al. (Di Blasi et al., 2001b) untersucht. Bei Holz kann bei niedrigen Aufheizraten ein Schwinden (*shrinking* – Partikelgrößenreduktion) und bei höheren Aufheizraten ein Schwellen (Erhöhung der Partikelgröße) beobachtet werden. Sowohl Schwinden als auch Schwellen können zu durchaus ausgeprägten Partikelgrößenänderungen im Bereich von 15 % führen. Darüber hinaus wird bei hohen Ausgasungsraten auch von der Möglichkeit des strukturellen Bruches und der Rissbildung im Biomassepartikel berichtet (Di Blasi et al., 2001b). Eine Untersuchung des Schwindens und eine Modellierung des Einflusses auf die Pyrolyse von Holz wurde in einer Arbeit von Hagge und Bryden (Hagge et al., 2002) durchgeführt. Die Autoren stellen aufgrund der Ergebnisse fest, dass der Einfluss des Schwindens auf die Pyrolyse im thermisch dünnen und im thermisch dicken Regime (bei kleinen sowie bei mittleren Biot-Zahlen) vernachlässigbar ist. Lediglich bei sehr hohen Biot-Zahlen über 10 (*thermal wave pyrolysis regime*) ist ein nennenswerter Einfluss festzustellen. Da in der vorliegenden Arbeit eine aussagekräftige Untersuchung zum Verhalten des verwendeten Brennstoffes nicht durchgeführt werden konnte, wird das Schwinden und Schwellen nicht im entwickelten Modell berücksichtigt. Die Struktur des heterogenen Verbrennungsmodells erlaubt aber eine spätere Erweiterung durch Hinzufügen orts- oder betriebsparameterabhängiger Feststoffparameter wie der Partikelgröße.

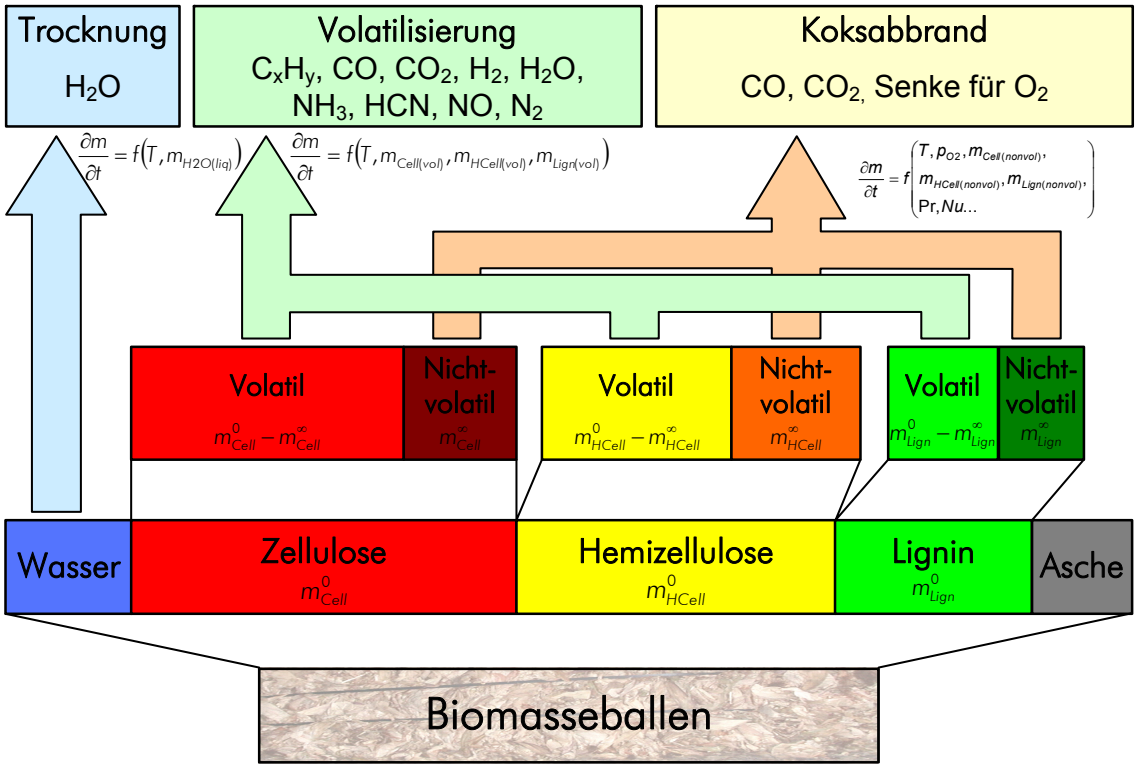


Abbildung 6-10: Schematische Darstellung des implementierten Modells der heterogenen Verbrennung von Biomasse

Das entwickelte Modell der heterogenen Verbrennungsvorgänge beinhaltet die Trocknung des Brennstoffes (Freisetzung von Wasserdampf und Senke für Energie in Form der Verdampfungsenthalpie), die Ausgasung bzw. Pyrolyse (Freisetzung des flüchtigen Brennstoffanteils in Form eines brennbaren Gasgemisches) unter Berücksichtigung der drei konstituierenden Biomassekomponenten Zellulose, Hemizellulose und Lignin, sowie Verbrennung des während der Pyrolyse entstehenden Koks (unter Freisetzung von Energie, Konsumation von Sauerstoff und Entstehung eines gasförmigen CO/CO_2-Gemisches). Eine schematische Darstellung der Modellierung dieser Schritte ist Abbildung 6-10 zu entnehmen. Die Trocknung und die Volatilisierung werden als rein kinetikdominiert approximiert, während für den Koksabbrand aufgrund der erforderlichen Diffusion des Eduktes Sauerstoff zur Reaktionsstelle auf der Feststoffoberfläche zusätzlich zur kinetischen Umsetzung auch der Stoffübergang zu berücksichtigen ist. Die Berechnung der Feststofftemperatur geschieht durch gleichzeitiges Lösen der Massen- und Energiebilanz und berücksichtigt einen Feststoff, der durch chemische Umwandlung (Volatilisierung, Koksabbrand) eine Wärmetönung erfährt und gleichzeitig durch Konvektion, Wärmeleitung und Strahlung mit seiner Umgebung im Wärmeaustausch steht (z. B. auch bei Adanez et al., 2003). Zusätzlich wurde ein einfaches Modell zur Abschätzung der Entstehung von Stickstoffoxiden aus dem im Brennstoff enthaltenen Stickstoff implementiert. Im Folgenden werden alle Details des heterogenen Verbrennungsmodells und seine Koppelung mit dem kommerziellen CFD-Solver erläutert.

6.7.2.1 Trocknung des Feststoffes – Wasserverdampfung

Biomasse enthält üblicherweise nennenswerte Gehalte an Feuchte. Dieses Wasser ist entweder durch Kapillarkräfte in den Poren der Biomasse gespeichert oder wird durch intramolekulare Kräfte an die Mikrostruktur der Biomasse gebunden. Diese Feuchtigkeit verdunstet aufgrund der erhöhten Temperaturen vor oder während dem eigentlichen Verbrennungsprozess. Wie sich die Phasen der Brennstofftrocknung mit jener der Volatilisierung in Abhängigkeit verschiedener Prozessparameter überlagern oder separieren können, wird in der Literatur (Saastamoinen et al., 1996; Galgano et al., 2004; Thunman et al., 2004) beschrieben. Für die Modellierung in der vorliegenden Arbeit werden beide Phasen unabhängig voneinander betrachtet, können also je nach Betriebsbedingungen sowohl separiert als auch simultan ablaufen.

Wenn der Brennstoff in feuchter Form vorliegt, muss dem Trocknungsvorgang im Zuge der heterogenen Verbrennung auch in der Modellbildung Rechnung getragen werden. Verschiedene Arbeiten (Saastamoinen et al., 1996; Galgano et al., 2004) haben gezeigt, dass durch die Trocknung eines Brennstoffes auch dessen globales Pyrolyse- und Verbrennungsverhalten beeinflusst wird (Zündzeitpunkt, Zündenergie, Ausgasungsrate, Zusammensetzung und Heizwert der flüchtigen Komponenten, Abbrandrate der residuellen Koksbestandteile). Außerdem ist durch die endotherme Verdampfung der Brennstofffeuchte bei Aufheizprofilen mit konstanter Rate ein Temperaturplateau im Bereich des Normalsiedepunktes von Wasser zu beobachten (Galgano et al., 2004). Als Verdampfungsenthalpie von Wasser ΔH_{vap} wurden dabei in der vorliegenden Arbeit 2.500,9 kJ/kg (bei 0 °C) und 2256,5 kJ/kg (bei 100 °C) verwendet. Diese Werte und die dahinterliegende Temperaturfunktion wurden dem VDI-Wärmeatlas entnommen (VDI, 2006) und im Modell implementiert, wodurch auch die temperaturabhängige Wärmesenke bei niedrigeren Temperaturen als dem Normalsiedepunkt erfasst ist. In der Literatur (Galgano et al., 2004) sind darüber hinaus auch Formelzu-

sammenhänge zur Berücksichtigung des Einflusses der Brennstofffeuchte auf die Verdampfungsenthalpie dokumentiert. Die Gültigkeitsbereiche und die Qualität dieser Formelzusammenhänge sind allerdings unklar, speziell weil der Gleichungsapparat eine ausgeprägte Sprungstelle bei einer Brennstofffeuchte von 30 % aufweist. Da der vorliegenden Arbeit relativ niedrige Wassergehalte zugrunde liegen (8 % bis maximal 15 %) und weil die vorhandenen Approximationsfunktionen lediglich für Holz, nicht aber für Stroh oder Maisganzpflanze vorliegen, wird ein solcher Einfluss der Brennstofffeuchte auf die Verdampfungsenthalpie nicht berücksichtigt.

In der vorliegenden Arbeit wurde zur Beschreibung des Überganges von brennstoffgebundenem Wasser zu gasförmigem Wasser ein kinetischer Ansatz gewählt. Dabei beschreibt ein modifizierter Arrhenius-Ansatz die Temperaturabhängigkeit und ein Potenzgesetz erster Ordnung die Abhängigkeit vom Restwassergehalt im Brennstoff. Die Reaktionsgleichung, die den formalen Übergang von brennstoffgebundenem Wasser zu dampfförmigem Wasser beschreibt, ist in Gleichung 6.18dargestellt, die Bestimmmungsgleichung für den Stoffumsatz ist in Gleichung 6.19 gegeben. Die relevanten Modellparameter des Brennstofftrocknungsmodells sind in Tabelle 6-4 zusammengefasst. Die Modellparameter des Trocknungsschrittes wurden gemeinsam mit den Modellparametern des Volatilisierungsschrittes ermittelt, die genaue Vorgangsweise der Parameteroptimierung und Kurvenregression wird deshalb in Kapitel 6.7.2.2 erläutert.

$$H_2O_{(BS)} \rightarrow H_2O_{(GAS)} \tag{6.18}$$

$$\frac{\partial \dot{m}_{H2O,BS}}{\partial t} = -\frac{\partial \dot{m}_{H2O,GAS}}{\partial t} = -A_{H2O} \cdot \left| T_{BS} - T_{H2O}^{grenz} \right|^{b} \cdot \exp\left(-\frac{E_{A,H2O}}{RT_{BS}} \right) \cdot \dot{m}_{H2O,BS} \tag{6.19}$$

Tabelle 6-4: Verwendete Parameter des Trocknungsmodells

Parameter		Einheit	Wert
Präexponentieller Faktor	A_{H2O}	1/s	$2{,}291 \cdot 10^{-4}$
Aktivierungsenergie	$E_{A,H2O}$	J/mol	84.767
Grenztemperatur Brennstofftrocknung	T_{H2O}^{grenz}	K	470
Potenz Brennstofftrocknung	b	-	7

Die Startwerte zur Parameteroptimierung des Präexponentiellen Faktors und der Aktivierungsenergie in dieser Formulierung konnten der Arbeit von Bryden et al. (Bryden et al., 2003) entnommen werden. Zur Anpassung des Modells an die Ergebnisse der TGA des hier zum Einsatz gelangenden Brennstoffes musste aber eine temperaturabhängige Erweiterung eingeführt werden. Diese Erweiterung wurde in Form eines Potenzgesetzes entwickelt, wodurch auch der Präexponentielle Faktor signifikant geändert werden musste. Zur Ermittlung der Parameter der Bestimmungsgleichung des Stoffumsatzes wurden TGA-Ergebnisse herangezogen, die mit unterschiedlichen Aufheizraten (10, 20 und 40 °C/min), sowie mit unterschiedlichen Inertgasvolumenströmen und unterschiedlichen TGA-Einwaagen gewonnen wurden. Der Vorgang der Kurvenregression ist dabei analog zu jenem, der für den Volatilisierungsvorgang verwendet wurde, eine genaue Beschreibung ist deshalb in Kapitel 6.7.2.2 zu finden. Die gesammelten Modellparameter für alle untersuchten TGA-Experimente sind in Tabelle 14-12 zusammengestellt. Es stellt sich heraus, dass diese regressierten Parameter für

alle untersuchten Kurven innerhalb sehr enger Bereiche liegen (Aktivierungsenergien von 83.399 bis 85.510 J/mol, Schwankung um etwa 2,5 %). Innerhalb der erforderlichen Genauigkeit kann also ein Modell entwickelt werden, welches von der Aufheizrate und vom Stoffübergang als unabhängig betrachtet werden kann. Die arithmetischen Mittelwerte aller regressierten Parameter wurden deshalb in die Modellbestimmungsgleichung eingesetzt (z. B. Aktivierungsenergie 84.767 J/mol).

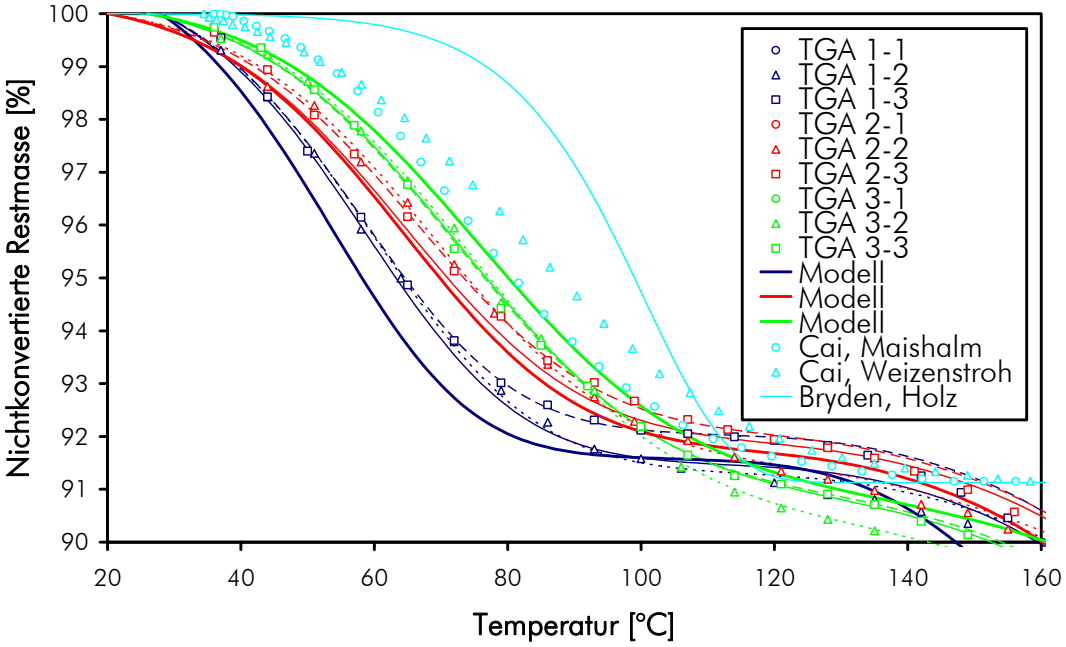


Abbildung 6-11: TGA-Auswertung des Trocknungsschrittes des Maisganzpflanzenbrennstoffs verglichen mit Ergebnissen des eigenen Trocknungsmodells und mit Messungen von Cai (Cai et al., 2007) und dem Modell von Bryden (Bryden et al., 2003) – nichtkonvertierte Restmasse in Abhängigkeit von der Temperatur

In Abbildung 6-11 sind die Ergebnisse der thermogravimetrischen Untersuchungen am Maisganzpflanzen-Brennstoff bei unterschiedlichen Aufheizraten, Inertgasströmen und TGA-Einwaagen für den Trocknungsschritt (nichtkonvertierte Restmasse als Funktion der Temperatur) dargestellt (die Betriebsbedingungen der einzelnen Experimente ist Tabelle 3-6 zu entnehmen). Die experimentellen Daten sowie deren Regressionen werden durch die Ergebnisse des oben erläuterten eigenen Trocknungsmodells ergänzt. Zusätzlich werden die Ergebnisse mit den experimentellen Resultaten von Cai et al. (Cai et al., 2007) verglichen, die in ihrer Arbeit die Trocknung von Weizenstroh sowie von Maishalmen untersucht (Aufheizrate 30 °C/min) und mittels Weibull-Ansatz modelliert haben. Außerdem werden noch Ergebnisse des Trocknungsmodells von Bryden et al. (Bryden et al., 2003), welches für nicht näher spezifiziertes Holz unter ähnlichen Aufheizraten entwickelt wurde, gegenübergestellt. Die Summe aller durchgeführten TGA-Analysen ergibt einen mittleren Brennstoffwassergehalt der untersuchten Proben von 8,9 wt%, welcher sehr genau mit den 8,65 wt% nach den externen Brennstoffanalysen aus Tabelle 3-3 übereinstimmt. Zur besseren Vergleichbarkeit wurden die Literaturdaten, welche allesamt bei unterschiedlichen Wassergehalten ermittelt wurden, linear auf einen Wassergehalt von 8,9 wt% skaliert. Da alle Arbeiten in der Literatur von Umwandlungsreaktionen erster Ordnung ausgehen, ist dieser Ansatz legitim. Abbildung 6-11 zeigt auch, dass die Trennung zwischen Trocknungs- und Ausgasungsphase nicht stark ausgeprägt ist, da bereits vor Erreichen eines vollständig getrockneten Brennstoffes die Volatilisation

beginnt. Diese Phase ist am neuerlichen Abfall der nichtkonvertierten Restmasse bei Temperaturen über 125 °C zu erkennen, welcher direkt an ein schwach ausgeprägtes Plateau anschließt. Dieses Plateau ist bei niedrigeren Heizraten stärker ausgeprägt als bei höheren Raten. Die Überschneidung von Trocknung und Volatilisation steigt also mit zunehmender Heizrate, was in dieser Form auch der Literatur (Saastamoinen et al., 1996; Galgano et al., 2004; Thunman et al., 2004) zu entnehmen ist. Eine ähnliche Diagrammdarstellung der nichtkonvertierten Restmasse in Abhängigkeit von der Zeit findet sich in Abbildung 14-2.

Es zeigt sich, dass die Abbildung des realen Trocknungsverlaufes durch das eingesetzte Trocknungsmodell sehr gut ist und speziell die temperaturabhängige Erweiterung im Vergleich zum Modell von Bryden et al. (Bryden et al., 2003) eine signifikante Verbesserung für den hier eingesetzten Brennstoff bringt. Auf der anderen Seite ist genau dieser Anteil dafür verantwortlich, dass die vollständige Trocknung des Brennstoffes erst bei relativ hohen Temperaturen vorhergesagt wird (bei 200 °C verbleibt immer noch ein theoretischer Restwassergehalt von 0,14 wt%). Dieses Faktum ist für die weitere Modellbildung und Simulation aber ohne Relevanz. Das unveränderte Modell nach Bryden et al. kann aufgrund der beobachteten großen Abweichungen bei mittleren Trocknungstemperaturen aber für den hier verwendeten Brennstoff nicht angewandt werden. Die sehr gute Übereinstimmung der eigenen Untersuchungen mit der Arbeit von Cai et al. (Cai et al., 2007) bestätigen die Qualität und Eignung der eingesetzten Untersuchungsmethode. Da bei Cai et al. die Simulation mit dem Weibull-Modell die experimentellen Resultate nahezu perfekt wiedergibt, ist davon auszugehen, dass das Weibull-Modell auch für die vorliegende Arbeit anwendbar wäre.

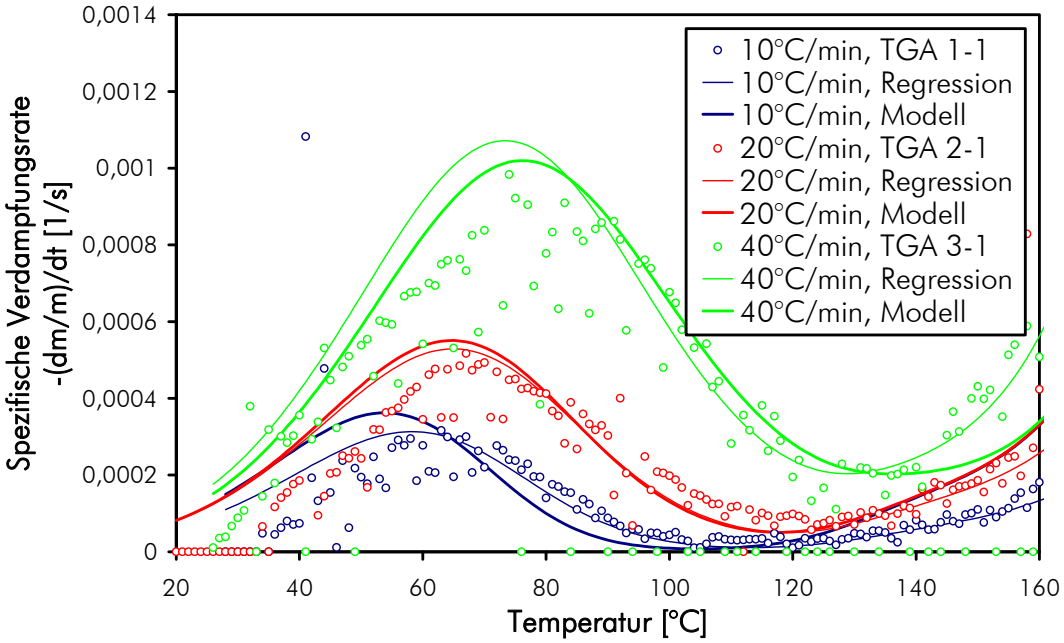


Abbildung 6-12: TGA-DTG-Auswertung des Trocknungsschrittes des Maisganzpflanzenbrennstoffs bei verschiedenen Aufheizraten verglichen mit den Ergebnissen des verwendeten Trocknungsmodells - spezifische Verdampfungsrate in Abhängigkeit von der Temperatur

Zusätzlich zur Abbildung des Trocknungsverlaufes in Form der nichtkonvertierten Restmasse zeigt Abbildung 6-12 die spezifische Verdampfungsrate der Brennstofffeuchte als Funktion der Temperatur. Hier werden zur besseren Übersichtlichkeit nur drei der insgesamt neun untersuchten TGA-Experimente dargestellt. Diese experimentellen Resultate werden mit den

Einzelregressionen sowie mit dem oben angeführten Trocknungsmodell verglichen. Wie bei TGA-DTG-Kurven üblich, decken Kurven, die eine nach der Zeit abgeleitete Größe darstellen, selbst die kleinsten Diskrepanzen zwischen Experiment und Simulation auf. Entsprechend ist die Übereinstimmung der experimentellen und theoretischen Trocknungsraten etwas schlechter als dies bei der nichtkonvertierten Restmasse der Fall war. Dennoch ist die Übereinstimmung zwischen Messung und Modell bemerkenswert gut. Die Maxima der Verdampfungsrate werden bei allen Temperaturrampen bei etwas zu niedrigen Temperaturen vorhergesagt, die Absolutwerte der Verdampfungsraten werden geringfügig überschätzt. Berücksichtigt man die Detaillierung des gesamten Modells der heterogenen Verbrennung sowie die Auflösung der anzuwendenden räumlichen Gitter in der Simulation, ist die Vorhersage des Trocknungsverlaufes und der Verdampfungsrate mit dem eingesetzten Modell von sehr hoher Qualität.

Abbildung 6-11 und Abbildung 6-12 zeigen weiters, dass mit steigender Aufheizrate die Maxima der Verdampfungsrate (sowie der gesamte Trocknungsverlauf selbst) in Richtung höherer Temperaturen wandern, was durch das erarbeitete Modell ebenfalls sehr gut wiedergegeben wird. Es sei angemerkt, dass diese Verschiebung in Richtung höherer Temperaturen nicht durch eine Limitierung der Trocknungskinetik durch den Wärmetransport und Wärmeübergang, sondern lediglich durch die höhere Aufheizrate und damit verbunden die niedrigere Verweilzeit in den einzelnen Temperaturintervallen hervorgerufen wird.

Neben einer kinetischen Modellierung der Brennstofftrocknung, welche hier vorgestellt wird, sind in der Literatur auch noch weitere Methoden dokumentiert. Relativ häufig wird ein temperaturabhängiges Gleichgewichtsmodell zur Beschreibung der Trocknung verwendet (z. B. Larfeldt et al., 2000a; Shin et al., 2000; van der Lans et al., 2000; Wurzenberger et al., 2002; Zhou et al., 2005). Dabei wird postuliert, dass sich der Wasserdampf im Gleichgewicht mit der Brennstofffeuchte befindet, wodurch der Partialdruck an Wasser in der Gasphase durch den temperaturabhängigen Sättigungsdampfdruck limitiert ist. Solche Modelle berücksichtigen üblicherweise neben dem Wärme- auch den Massentransfer am Partikel. Eine weitere Methode wird als Modell konstanter Verdampfung bezeichnet und basiert auf einer thermodynamischen Bilanzierung des verdampfenden Wassers und der hierfür zur Verfügung gestellten Energiemenge. Dieses Modell wird bei Peters et al. (Peters et al., 2003a) vorgestellt. Mueller et al. verwenden in ihrer Arbeit (Mueller et al., 2005) einen etwas anderen Ansatz und ermitteln den Trocknungsverlauf in Abhängigkeit des Wärmeaustausches zwischen Partikel und Umgebung. Der Wärmeaustausch (durch Konvektion und durch Strahlung) wird durch die Autoren modelliert und abgeschätzt. Der Anteil des Wassers, der bereits verdampft ist in Relation zur gesamten Brennstofffeuchte wird sodann dem Verhältnis aus bereits ausgetauschter Wärme und insgesamt erforderlicher Verdampfungswärme gleichgesetzt und kann auf diese Weise ermittelt werden. Gründliches Literaturstudium zeigt aber, dass der kinetische Ansatz von der Mehrheit der Autoren aufgrund seiner Einfachheit und Analogie zur Volatilisierung favorisiert wird. In einer Untersuchung von Jurena et al. (Jurena et al., 2009) wird das in der vorliegenden Arbeit entwickelte Trocknungsmodell bei der Trocknung von Stroh mit anderen Modellen verglichen und gezeigt, dass alle untersuchten Modelle physikalisch sehr sinnvolle und vergleichbare Ergebnisse liefern. Nachdem das eigene Modell damit in einer externen Arbeit unter etwas anderen Betriebsbedingungen getestet wurde, kann von einer guten Anwendbarkeit ausgegangen werden.

Abschließend sei als wesentlichste Voraussetzung der Gültigkeit des kinetischen Ansatzes der Brennstofftrocknung die Unabhängigkeit des Vorganges von den Verhältnissen in der Gasphase genannt. Einerseits muss in der Gasphase der Wasserdampfdruck immer deutlich unterhalb der Sättigung liegen, um keine Verlangsamung der Trocknungskinetik durch die Einstellung eines Gleichgewichtszustandes herbeizuführen. Andererseits muss der Stoffübergang vom Partikel ans Gas sowie der Strofftransport durch die Grenzschicht in das Kernfluid ausreichend schnell sein, um ein diffusionslimitiertes Regime auszuschließen, welches in letzter Instanz wieder dazu führen würde, lokal an der Phasengrenze aufgrund des hohen Dampfdruckes die Einstellung eines Verdampfungsgleichgewichts zu erzwingen. Außerdem müssen auch der Wärmetransport im Partikel und in der Kernströmung sowie der Wärmeübergang zwischen den Phasen ausreichend schnell sein, um eine Limitierung des reinen kinetisch dominierten Vorganges auszuschließen (bzw. so gering wie möglich zu halten). Um aus der TGA hierzu Aussagen zu generieren wurden sowohl Analysen mit unterschiedlichen Inertgas-Spülströmen sowie mit unterschiedlichen Einwaagen durchgeführt. Die Analysen zeigen, dass weder der Inertgasvolumenstrom noch die unterschiedliche Einwaage im untersuchten Bereich einen eindeutigen und nennenswerten Einfluss auf den Trocknungsprozess nehmen. Damit kann im Wesentlichen ein Einfluss von Stoff- und Wärmeübergang ausgeschlossen und weiters angenommen werden, dass mit den TGA-Experimenten tatsächlich die reine Kinetik des Trocknungsvorganges erfasst wurde. Der Schluss auf die Verhältnisse am realen Brennstoff im realen Verbrennungsapparat kann damit aber noch nicht gezogen werden. Hier liefern die Betrachtungen zur Biot-Zahl eingangs dieses Kapitels sowie die Arbeiten mehrerer Autoren (Koufopanos et al., 1991; van der Lans et al., 2000; Di Blasi et al., 2001; Galgano et al., 2004; Zhou et al., 2005) die Erkenntnis, dass die Vereinfachung des Simulationsproblems durch Rückführung der Verhältnisse auf ein thermisch dünnes Regime zulässig und angebracht ist. Die Vernachlässigung von Stoff- und Wärmetransport und die alleinige Berücksichtigung der Umwandlungskinetik ist also zulässig.

6.7.2.2 Ausgasen der flüchtigen Bestandteile – Volatilisierung

Biomassebrennstoffe sind in der Regel durch hohe Gehalte flüchtiger Komponenten charakterisiert die bei erhöhten Temperaturen ohne die Einwirkung weiterer Reaktanten umgesetzt werden. Diese Umsetzung wird in der Literatur häufig auch als Volatilisierung oder *Pyrolyse* bezeichnet und ist chemisch gesehen eine thermolytische Zersetzung. In der Literatur wird überwiegend davon ausgegangen, dass diese Volatilisierung unabhängig vom Vorhandensein eines Oxidationsmittels, also vor allem auch bei Abwesenheit von Sauerstoff abläuft. Um die Volatilisierung also getrennt vom Koksabbrand untersuchen zu können, wird im Regelfall zunächst die Ausgasung isoliert bei verschiedenen Temperaturprogrammen in inerter Atmosphäre untersucht und anschließend unter oxidierenden Bedingungen der Koksabbrand analysiert. Allerdings ist bekannt, dass auch die Volatilisierung durch die Anwesenheit von Sauerstoff beeinflusst wird. Die Arbeiten von Várhegyi et al. (Mészáros et al., 2004; Várhegyi et al., 2011b) zeigen, dass Sauerstoff eine beschleunigende Wirkung auf den Volatilisierungsvorgang hat und charakteristische Punkte in diesem Prozess bereits bei niedrigeren Temperaturen erreicht werden. Der Sauerstoffeinfluss auf die Volatilisierung ist zumindest für Weizenstroh und Weidenholz nicht sonderlich groß (Várhegyi et al., 2011b), muss aber bei der Modellierung berücksichtigt werden, sobald der Prozess im realen Apparat von nennenswerten Gehalten an Sauerstoff begleitet wird. Die Volatilisierung im Verbrennungsapparat, welcher in der vorliegenden Arbeit beschrieben werden soll, verläuft konstruktionsbedingt bei sehr niedrigen Sauerstoffgehalten (sofern der Eintrag von Falschluft über das Ballenzu-

fuhrsystem hintangehalten werden kann), sodass es durchaus vertretbar erscheint, den Einfluss des Sauerstoffs auf den Pyrolyseprozess zu vernachlässigen.

Neben den verfahrenstechnischen Prozessen der Vergasung und Pyrolyse ist der Vorgang auch ein fundamentaler Schritt bei der heterogenen Verbrennung (Di Blasi, 1997). Bei der Volatilisierung entsteht neben einem Gasgemisch auch eine residuelle Kokskomponente (die in weiterer Folge nur unter Anwesenheit eines zusätzlichen Oxidationsmittels umgesetzt werden kann) sowie ein Gemisch flüssiger Komponenten, üblicherweise als Teere bezeichnet. Weiterführende Informationen sind beispielsweise den Arbeiten von Di Blasi (Di Blasi, 1998; Di Blasi et al., 1999b; Di Blasi et al., 1999c; Di Blasi, 2000; Di Blasi et al., 2001a) oder Zhou (Zhou et al., 2005) zu entnehmen. Zahlreiche Arbeiten beschäftigen sich weiters mit dem Einfluss der Betriebsbedingungen der Pyrolyse auf die Verteilung der entstehenden Produkte. Hier seien die frühen Arbeiten von Beaumont (Beaumont et al., 1984), Scott (Scott et al., 1988), Horne (Horne et al., 1996) und Piskorz (Piskorz et al., 1998) erwähnt, die den Einfluss von Temperatur, Verweilzeit, Aufheizrate, Partikelgröße und –feuchte auf den Verlauf und die Produkte der Pyrolyse untersucht haben. Bei der Modellbildung der vorliegenden Arbeit wird davon ausgegangen, dass die flüssigen Pyrolyseprodukte selbst weiterreagieren und zum größten Teil gasförmige Bestandteile bilden. Dieser Vorgang der Sekundärdekomposition wird bereits bei Curtis et al. (Curtis et al., 1988) beschrieben und vereinfacht die eingesetzten Modelle signifikant. Die Teerprodukte werden bei der Volatilisierung gleich den gasförmigen Produkten zugerechnet, von denen entsprechend mehr gebildet werden; übrig bleibt lediglich Koks. Die Betriebsbedingungen in herkömmlichen Verbrennungsanlagen stellen eine Ofenatmosphäre sicher, die durch ausreichend Temperatur und Verweilzeit den weiteren Abbau von Teeren forciert. Auch die Beobachtungen bei den Verbrennungsexperimenten in dieser Arbeit konnten bestätigen, dass bei stationär laufendem Verbrennungsbetrieb flüssige Zwischenprodukte zu vernachlässigen sind.

Umwandlungskinetik der Volatilisierung

Volatilisierung von Biomasse ist reaktionstechnisch ein relativ komplexer Vorgang, der üblicherweise nicht mit einer einzelnen Reaktion beschrieben werden kann. Die beobachteten TGA-Verläufe der Biomasse, welche in inerter Atmosphäre gewonnen werden, können aber mit einem relativ einfachen Modell mit einer bestimmten Anzahl von Parallelreaktionen mit unterschiedlichen Umwandlungskinetiken beschrieben werden (beispielsweise bei Skodras et al., 2006). Genauer gesagt kann für jede konstituierende Biomassekomponente eine eigene Abbaukinetik angesetzt werden und die thermische Degradation der Gesamtbiomasse als die Summe des Abbaus der konstituierenden Einzelkomponenten beschrieben werden (Skodras et al., 2006). Damit wird postuliert, dass die einzelnen Komponenten in der komplexen Biomasse dieselbe Abbaukinetik wie die Reinstoffe (oder Modellsubstanzen) aufweisen; eine Annahme, die in der Literatur weitestgehend akzeptiert ist (Orfão et al., 1999; Williams et al., 2001). Ursprünglich wurde diese Modellierung für die Kohleverbrennung entworfen und später dann für die Biomassepyrolyse adaptiert (Jones et al., 1999; Jones et al., 2000). Viele Autoren haben diese Methode bereits erfolgreich angewandt; Arbeiten finden sich beispielsweise bei Orfão et al., 1999; Larfeldt et al., 2000b; Vamvuka et al., 2003; Gomez et al., 2005; Radmanesh et al., 2006. Der Detaillierungsgrad der Modellierung und damit die Vorhersagegenauigkeit sind relativ einfach über die Zahl der betrachteten Einzelkomponenten steuerbar, der mathematische Aufbau ist einfach. In der Literatur sind zahlreiche Arbeiten mit dieser Modellierung verfügbar beginnend mit einer einzelnen Komponente (z. B. Ghaly et al., 1993; Antal et al., 1995; Liang et al., 2000; Stenseng et al., 2001a; Lu

et al., 2008), zwei Komponenten (z. B. Várhegyi et al., 1989b), drei Komponenten (z. B. Vamvuka et al., 2003; Radmanesh et al., 2006), vier Komponenten (z. B. Vamvuka et al., 2003; Grammelis et al., 2005; Skodras et al., 2006) und sogar fünf Komponenten (z. B. Gronli et al., 2002). Auch Gomez (Gomez et al., 2005) verwendet in seiner Arbeit vier Pseudokomponenten, benennt diese aber nicht explizit. Alle Arbeiten demonstrieren mehr oder weniger genau, wie aus den Ergebnissen der durchgeführten TGA-Experimente allgemeingültige kinetische Modelle entwickelt werden können. Noch bessere Übereinstimmung kinetischer Modelle mit TGA-Ergebnissen ist oft mit der *DAEM*-Methode zu erreichen. Sehr gute Ergebnisse durch Anwendung dieser Methode konnten für ähnliche Biomassen wie hier von Várhegyi und seinen Koautoren erzielt werden; einige dieser Arbeiten sollen an dieser Stelle erwähnt werden (Várhegyi et al., 2006; Várhegyi et al., 2009; Várhegyi et al., 2010; Várhegyi et al., 2011a; Várhegyi et al., 2011b). Eine weitere, mathematisch sehr einfache, Methode der Beschreibung der Volatilisierung von Biomasse geben Yang et al. in ihrer Arbeit (Yang et al., 2006). Dort werden Modellstoffe für die konstituierenden Biomassekomponenten Zellulose, Hemizellulose und Lignin erst einzeln und dann in synthetischen Gemischen thermogravimetrisch untersucht und im Anschluss der zeitliche thermolytische Massenverlust durch Anwendung einer multiplen linearen Regression modelliert.

Der folgende Abschnitt skizziert die in dieser Arbeit verwendete Modellierung des Volatilisierungsprozesses. Aufgrund der Struktur des Modells wird in der Literatur häufig von einem *lumped-parameter*-Modell gesprochen. Die trockene und aschefreie feste Biomasse (waf) wird in drei Pseudokomponenten unterteilt, die zwecks Vereinfachung als Zellulose (*Cell*), Hemizellulose (*Hcell*) und Lignin (*Lign*) bezeichnet werden. An dieser Stelle soll aber festgehalten werden, dass in dieser Arbeit keine Strukturaufklärung der Biomasse durchgeführt wurde und die ermittelten Gehalte der drei Pseudokomponenten im Modell keineswegs der realen Zusammensetzung der Biomasse entsprechen müssen. Die Gehalte der drei verwendeten Pseudokomponenten wurden rechnerisch so ermittelt, dass die beobachteten TGA-Kurven mit dem Modell möglichst genau abgebildet werden konnten, sind also rein theoretische Werte. Vergleicht man die ermittelten Gehalte der Pseudokomponenten mit der tatsächlichen Zusammensetzung ähnlicher Biomassen aus der Literatur, sind aber Ähnlichkeiten erkennbar, die die entsprechende Benennung der Pseudokomponenten durchaus rechtfertigen.

Die drei Pseudokomponenten werden ihrerseits weiter unterteilt in einen volatilen Anteil (*vol*) und in einen nichtvolatilen Anteil (*nonvol*). Die Summe der Masse aller volatilen Anteile ergibt die Masse an Gas, welches beim Prozess der Volatilisierung freigesetzt wird. Die Summe der Masse aller nichtvolatilen Anteile ergibt die reaktive Kokskomponente, die im nachfolgenden Schritt des Koksabbrandes (Ausbrand der residuellen Feststoffkomponenten) mit Sauerstoff oxidiert wird. In der Summe mit der Asche wird diese Komponente schließlich als Tiegelkoks bezeichnet. Diese Aufteilung und die zugehörige heterogene Reaktion ist in Gleichung 6.20 dargestellt. Wie die jeweiligen Massenströme der volatilen und nichtvolatilen Komponenten aus den Modellparametern (Massengehalte) ermittelt werden, ist in den Gleichungen 6.21, 6.22 und 6.23 dargestellt. Zur Modellierung der Massenabnahme der volatilen Anteil der einzelnen Pseudokomponenten wird zunächst davon ausgegangen, dass der Stoffübergang keine Rolle spielt und die Volatilisierungsreaktion rein kinetikdominiert ist. Wie bereits an anderen Stellen dieser Arbeit kommen auch hier ein Arrhenius-Ansatz für die Abhängigkeit von der Partikeltemperatur und ein Potenzansatz für die Abhängigkeit der volatilen Restmasse zum Einsatz. Wie die meisten Autoren vergleichbarer Arbeiten (beispielsweise

Orfão et al., 1999; Larfeldt et al., 2000b; Gronli et al., 2002; Vamvuka et al., 2003; Gomez et al., 2005; Radmanesh et al., 2006) wird auch in dieser Arbeit davon ausgegangen, dass Volatilisierung eine Zerfallsreaktion erster Ordnung ist und ein linearer Zusammenhang zwischen reaktiver Restmasse und Reaktionsrate besteht. Lediglich Srivastava et al. postulieren in ihren Arbeiten (Srivastava et al., 1994; Srivastava et al., 1996), dass bei niedrigen Temperaturen bei der Pyrolyse frischer Biomasse eine Reaktion nullter Ordnung vorliegt, die Umwandlungsgeschwindigkeit also nicht von der Restmasse, sondern ausschließlich von der Temperatur abhängt. Das Modell, das sie für ihre Arbeiten und Schlussfolgerungen verwenden, stammt von Koufopanos et al. (Koufopanos et al., 1991) und enthält neben der kinetischen Umsetzung bereits eine sehr genaue Beschreibung von Wärmeübergangseffekten. Die Bestimmungsgleichungen der Volatilisierungsraten der einzelnen Pseudokomponenten für die Modellierung in der vorliegenden Arbeit sind den Gleichungen 6.24, 6.25 und 6.26 zu entnehmen.

$$\begin{aligned}
&\text{Trockene Biomasse} = \mathrm{Cell}_{(BS)} + \mathrm{Hcell}_{(BS)} + \mathrm{Lign}_{(BS)} + \mathrm{Ash}_{(BS)} = \\
&= \mathrm{Cell}^{vol}_{(BS)} + \mathrm{Cell}^{nonvol}_{(BS)} + \mathrm{Hcell}^{vol}_{(BS)} + \mathrm{Hcell}^{nonvol}_{(BS)} + \mathrm{Lign}^{vol}_{(BS)} + \mathrm{Lign}^{nonvol}_{(BS)} + \mathrm{Ash}_{(BS)} \rightarrow \\
&\rightarrow \mathrm{Gas} + \mathrm{Koks} + \mathrm{Ash}_{(BS)} = \mathrm{Gas} + \mathrm{Cell}^{nonvol}_{(BS)} + \mathrm{Hcell}^{nonvol}_{(BS)} + \mathrm{Lign}^{nonvol}_{(BS)} + \mathrm{Ash}_{(BS)}
\end{aligned} \tag{6.20}$$

$$\begin{aligned}
&\left(\dot{m}_{\mathrm{Cell,BS}}\right)_{\mathrm{IN}} = \left(\dot{m}_{\mathrm{BS}}\right)_{\mathrm{IN}} \cdot \frac{w^{0}_{\mathrm{Cell}}}{100} \qquad \dot{m}^{\mathrm{nonvol}}_{\mathrm{Cell,BS}} = \left(\dot{m}_{\mathrm{Cell,BS}}\right)_{\mathrm{IN}} - \left(\dot{m}^{\mathrm{vol}}_{\mathrm{Cell,BS}}\right)_{\mathrm{IN}} = \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad = \left(\dot{m}_{\mathrm{Cell,BS}}\right)_{\mathrm{IN}} \cdot \frac{w^{\infty}_{\mathrm{Cell}}}{100}
\end{aligned} \tag{6.21}$$

$$\begin{aligned}
&\left(\dot{m}_{\mathrm{Hcell,BS}}\right)_{\mathrm{IN}} = \left(\dot{m}_{\mathrm{BS}}\right)_{\mathrm{IN}} \cdot \frac{w^{0}_{\mathrm{Hcell}}}{100} \qquad \dot{m}^{\mathrm{nonvol}}_{\mathrm{Hcell,BS}} = \left(\dot{m}_{\mathrm{Hcell,BS}}\right)_{\mathrm{IN}} - \left(\dot{m}^{\mathrm{vol}}_{\mathrm{Hcell,BS}}\right)_{\mathrm{IN}} = \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad = \left(\dot{m}_{\mathrm{Hcell,BS}}\right)_{\mathrm{IN}} \cdot \frac{w^{\infty}_{\mathrm{Hcell}}}{100}
\end{aligned} \tag{6.22}$$

$$\begin{aligned}
&\left(\dot{m}_{\mathrm{Lign,BS}}\right)_{\mathrm{IN}} = \left(\dot{m}_{\mathrm{BS}}\right)_{\mathrm{IN}} \cdot \frac{w^{0}_{\mathrm{Lign}}}{100} \qquad \dot{m}^{\mathrm{nonvol}}_{\mathrm{Lign,BS}} = \left(\dot{m}_{\mathrm{Lign,BS}}\right)_{\mathrm{IN}} - \left(\dot{m}^{\mathrm{vol}}_{\mathrm{Lign,BS}}\right)_{\mathrm{IN}} = \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad = \left(\dot{m}_{\mathrm{Lign,BS}}\right)_{\mathrm{IN}} \cdot \frac{w^{\infty}_{\mathrm{Lign}}}{100}
\end{aligned} \tag{6.23}$$

$$\frac{\partial \dot{m}_{\mathrm{Cell,BS}}}{\partial t} = -A_{\mathrm{Cell}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{\mathrm{A,Cell}}}{\mathrm{R}T_{\mathrm{BS}}}\right) \cdot \left(\dot{m}_{\mathrm{Cell,BS}} \cdot \frac{100 - w^{\infty}_{\mathrm{Cell}}}{100}\right) \tag{6.24}$$

$$\frac{\partial \dot{m}_{\mathrm{Hcell,BS}}}{\partial t} = -A_{\mathrm{Hcell}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{\mathrm{A,Hcell}}}{\mathrm{R}T_{\mathrm{BS}}}\right) \cdot \left(\dot{m}_{\mathrm{Hcell,BS}} \cdot \frac{100 - w^{\infty}_{\mathrm{Hcell}}}{100}\right) \tag{6.25}$$

$$\frac{\partial \dot{m}_{\mathrm{Lign,BS}}}{\partial t} = -A_{\mathrm{Lign}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{\mathrm{A,Lign}}}{RT_{\mathrm{BS}}}\right) \cdot \left(\dot{m}_{\mathrm{Lign,BS}} \cdot \frac{100 - w_{\mathrm{Lign}}^{\infty}}{100}\right) \cdot \left(0{,}5 \cdot \mathrm{tanhyp}\left(\frac{T_{BS} - T_{\mathrm{Lign}}^{\mathrm{med}}}{0{,}145 \cdot T_{\mathrm{Lign}}^{\mathrm{wid}}}\right) + 0{,}5\right) \tag{6.26}$$

Für die Pseudokomponente Lignin wird während der Parameteroptimierung ein relativ niedriger Wert für die Aktivierungsenergie ermittelt, um die Ergebnisse der TGA-Experimente speziell bei den höheren Temperaturen abzubilden. Daraus resultiert aber, dass die chemische Umsetzung dieser Komponente bereits bei sehr niedrigen Temperaturen einsetzt. Dieses Verhalten wird zwar auch von anderen Autoren berichtet (z. B. bei Di Blasi et al., 2001b), im hier beobachteten Umfang resultiert dieser Effekt allerdings in einer inakzeptabel überschätzten Massenabnahme im Bereich der Brennstofftrocknung bei 70 bis 150 °C. Zur Kompensation dieses unerwünschten Effektes wird für Lignin eine Dämpfungsfunktion eingeführt, die den Ligninumsatz unterhalb von Temperaturen von 82 °C unterbindet und bis zu einer Temperatur von 182 °C in gleitendem Übergang freigibt. Hierfür wird aufgrund der einfachen und direkten Implementierbarkeit die Funktion *tangens hyperbolicus* verwendet, die einen gut einstellbaren gleitenden Übergang von 0 auf 1 ermöglicht (unter Angabe einer mittleren Temperatur und der Breite des Übergangsgebietes). Der Verlauf dieser Lignindämpfungsfunktion und ihre Auswirkung auf die Qualität der Modellierungsgenauigkeit bei der Beschreibung des Experimentes TGA 1-1 ist in Abbildung 6-13 dargestellt (die Betriebsbedingungen der einzelnen TGA-Experimente ist Tabelle 3-6 zu entnehmen). Der Einsatz dieser Dämpfungsfunktion ist durchaus auch physikalisch zu erklären, da bei noch nicht vollständig abgeschlossener Wasserverdampfung auf Partikelebene die Verdampfungsenthalpie dazu führt, dass die Feststofftemperatur tiefer als die umgebende Gastemperatur liegt, sodass die erforderliche Aktivierungsenergie für den einsetzenden Ligninumsatz noch nicht erreicht werden kann. In der Literatur wird nach dem Wissensstand des Autors von keiner vergleichbaren Dämpfungsfunktion berichtet.

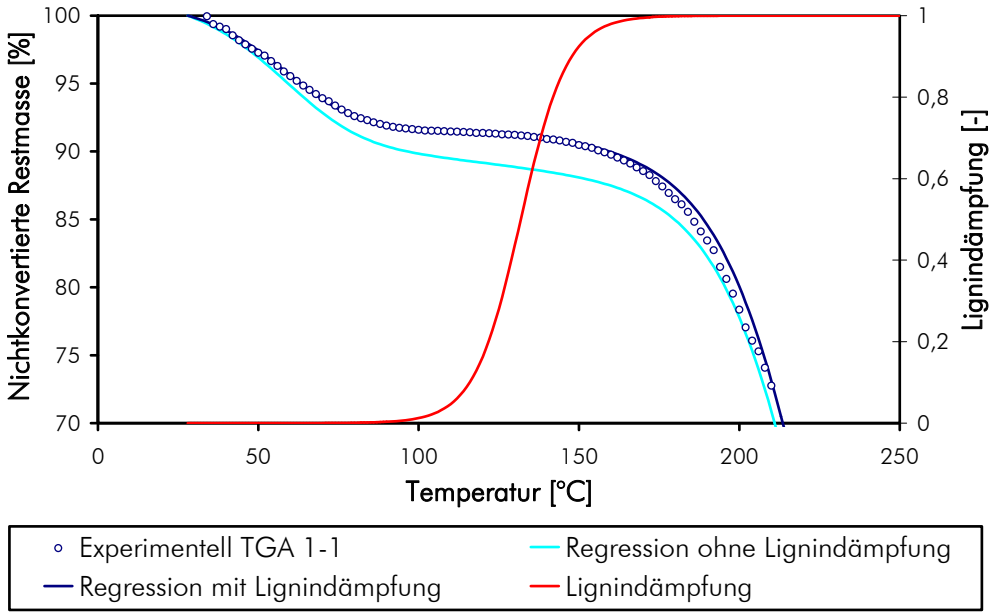


Abbildung 6-13: Auswirkung der Lignindämpfung auf die Regression des Experimentes TGA 1-1 - nichtkonvertierte Restmasse in Abhängigkeit von der Temperatur

Neben den beiden Parametern für die Dämpfungsfunktion von Lignin enthält das Volatilisierungsmodell in Summe 12 Parameter, die an die experimentellen Resultate der thermogravimetrischen Untersuchungen anzupassen sind (für jede Pseudokomponente sind das der Präexponenielle Faktor und die Aktivierungsenergie im Arrhenius-Ansatz sowie der Gehalt der jeweiligen Komponente im trockenen und aschefreien Brennstoff sowie der nichtvolatile Anteil). Für den Brennstoff im Ausgangszustand gilt, dass die Summe aller drei Pseudokomponenten (auf *waf*-Basis) 100 ergeben muss. Weiters muss die Summe aller nichtvolatilen Beiträge dem reaktiven Koksanteil im Tiegelkoks (aus der Immediatanalyse) entsprechen. Es verbleiben also zwei Freiheitsgrade weniger und während der Kurvenregression sind deshalb 10 Parameter anzupassen (die beiden Massenanteile für Lignin werden jeweils aus der Differenz ermittelt). Diese Kurvenregression wurde für jedes TGA-Experiment separat durch Minimierung der Summe der Fehlerquadrate zwischen modellierter und gemessener TG-Kurve (residueller Massenanteil in % über der Versuchszeit) durchgeführt. Als Startwerte für die Optimierung der Parameter wurden Werte für vergleichbare Biomassen aus verschiedenen Literaturarbeiten (Wagenaar et al., 1994; Raveendran et al., 1995; Di Blasi et al., 1999c; Grammelis et al., 2005; Radmanesh et al., 2006; Skodras et al., 2006; Maiti et al., 2007) herangezogen. Für die Minimierung selbst wurde ein herkömmlicher Newton-Raphson-Solver verwendet, welcher in sequentieller Folge alle Parameter optimierte. Durch oftmalige Wiederholung dieses Minimierungsschrittes sowie durch die Auswahl geeigneter Startbedingungen kann sichergestellt werden, nicht nur ein lokales, sondern ein globales Optimum zu erreichen. Die nach dieser Kurvenregression erhaltenen Parameter sind für alle verwendeten TGA-Experimente des Volatilisierungsschrittes in Tabelle 14-13 zusammengefasst. Es ist festzuhalten, dass bereits nach wenigen Iterationsdurchläufen eine sehr gute Kurvenapproximation erreicht wird, das Lösungsgebiet rund um das Optimum dann aber sehr flach, die Konvergenz also sehr langsam wird. Das Konvergenzkriterium (relative Änderung der Fehlerquadratsumme) wurde deshalb relativ strikt gewählt, sodass für die Endoptimierung sehr viele Iterationsdurchläufe erforderlich waren.

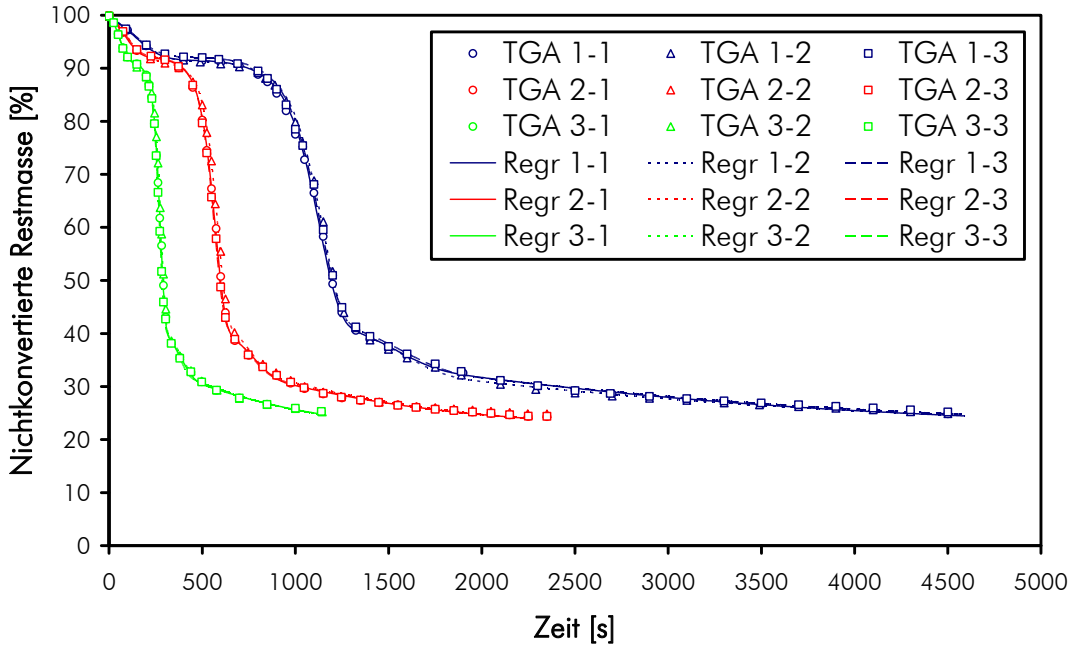


Abbildung 6-14: TGA-Auswertung Maisganzpflanzenbrennstoffs im gesamten Volatilisationsbereich verglichen mit den Regressionen der einzelnen Experimente - nichtkonvertierte Restmasse in Abhängigkeit von der Zeit

Als Zwischenergebnis zeigt Abbildung 6-14 die TGA-Auswertungen aller untersuchten Experimente bei unterschiedlichen Aufheizraten, Inertgasströmen und TGA-Einwaagen und vergleicht diese mit den optimierten Kurvenregressionen für die Einzelexperimente. Die sehr gute Übereinstimmung zwischen Messung und Regression bestätigt die gute Anwendbarkeit des gewählten Modells mit drei Pseudokomponenten und Arrhenius-/Potenzansatz. Ein Diagramm welches auf der Abszisse statt der Zeit die Temperatur verwendet ist in Abbildung 14-3 dargestellt.

Für die Entwicklung eines Modells für die Volatilisierung müssen nun aus den Regressionsparametern für die einzelnen TGA-Kurven möglichst allgemeingültige Parameter abgeleitet werden. Da die Parameter unterschiedlichen Inertgasströme sowie die unterschiedlichen TGA-Einwaagen relativ ähnlich sind und vor allem keine eindeutigen Tendenzen bei der Änderung dieser Einflussgrößen zu erkennen sind, kann vereinfachend davon ausgegangen werden, dass die Volatilisierung (zumindest im TGA-Experiment) nicht durch den Stoffübergang limitiert wird. Damit ist für den Volatilisationsprozess ähnlich wie für den Trocknungsvorgang also von einem stofflich (und thermisch) dünnen Regime auszugehen. Diese Aussage macht Sinn, da wie bereits oben erwähnt, neben der Biomasse für die Umsetzung keine weiteren Reaktanten an die Partikeloberfläche transportiert werden müssen. Auch das Vorhandensein von Umsetzungsprodukten in der Gas- und Feststoffphase hat keinen limitierenden Einfluss. Zur Modellbildung können also die Regressionsparameter aller untersuchten TGA-Experimente arithmetisch gemittelt werden. Hinsichtlich der unterschiedlichen Aufheizraten sind allerdings geringfügige Unterschiede zu erkennen. Während die Parameter für die Rampen 20 °C/min und 40 °C/min relativ ähnlich sind, weichen sie für die Rampe mit 10 °C/min bei Hemizellulose und speziell bei Zellulose stärker ab. Wie bereits in Kapitel 3.2 erwähnt, sind für den realen Verbrennungsvorgang ohnehin nur Aufheizraten zwischen 20 und 40 °C/min interessant, weshalb die Mittelwertbildung zur Ermittlung der Modellparameter nur diese beiden Rampen inkludiert und die Aufheizrate von 10 °C/min unberücksichtigt bleibt. Die solchermaßen ermittelten Modellparameter sind in Tabelle 6-5 zusammengefasst. Abschließend sei angemerkt, dass aufgrund des flachen Lösungsgebietes rund um das Optimum selbst stark unterschiedliche Kurvenparameter oft nur eine schwache Auswirkung auf die Qualität des Kurven-Fits aufweisen, die Vorhersagequalität des Modells durch gemittelte Parameter im relevanten Betriebsbereich also nicht wesentlich eingeschränkt wird.

Die ermittelten Modellparameter ergeben gemeinsam mit den Modellgleichungen (Gleichungen 6.20 bis 6.26) das in dieser Arbeit verwendete Volatilisierungsmodell. Mit diesem Modell kann sowohl die Freisetzung der volatilen gasförmigen Bestandteile, als auch die Bildung der reaktiven Kokskomponente aus der frischen Biomasse beschrieben werden. Auch über die Zusammensetzung des Brennstoffes zu verschiedenen Zeitpunkten des Thermolysevorgangs bzw. an verschiedenen Positionen des in den Verbrennungsapparat eingeschobenen Ballens kann mit diesem Modell eine Aussage getroffen werden. Dies wird in Kapitel 6.7.2.5 weiter ausgeführt.

Das entwickelte Modell und die ermittelten Parameter wurden in der Folge zur Beschreibung der experimentell erhaltenen TGA-Ergebnisse herangezogen. Abbildung 6-15 zeigt als Ergebnis dieser Modellierung die nichtkonvertierte Restmasse aller untersuchten TGA-Experimente in Abhängigkeit von der Versuchszeit und vergleicht diese mit den Vorhersagen des entwickelten Modells. Zusätzlich sind noch die Kurven mit den einzeln regressierten Pa-

rametern eingetragen. Eine ähnliche Darstellung jedoch in Abhängigkeit von der Temperatur findet sich in Abbildung 14-4.

Tabelle 6-5: Verwendete Parameter des Volatilisierungsmodells

Parameter		Einheit	Wert
Präexponentieller Faktor Zellulose	$\log(A_{Cell})$	1/s	11,544
Aktivierungsenergie Zellulose	$E_{A,Cell}$	J/mol	124.158
Startgehalt Zellulose	w^{0}_{Cell}	wt%, waf	54,60
Nichtvolatiler Anteil Zellulose	w^{∞}_{Cell}	wt%	0,535
Präexponentieller Faktor Hemizellulose	$\log(A_{Hcell})$	1/s	5,031
Aktivierungsenergie Hemizellulose	$E_{A,HCell}$	J/mol	74.796
Startgehalt Hemizellulose	w^{0}_{Hcell}	wt%, waf	16,40
Nichtvolatiler Anteil Hemizellulose	w^{∞}_{Hcell}	wt%	42,566
Präexponentieller Faktor Lignin	$\log(A_{Lign})$	1/s	-2,647
Aktivierungsenergie Lignin	$E_{A,Lign}$	J/mol	3.413
Startgehalt Lignin	w^{0}_{Lign}	wt%, waf	29,00
Nichtvolatiler Anteil Lignin	w^{∞}_{Lign}	wt%	41,891
Lignindämpfung Temperaturbreite	T^{wid}_{Lign}	K	100
Lignindämpfung Mediantemperatur	T^{med}_{Lign}	K	405

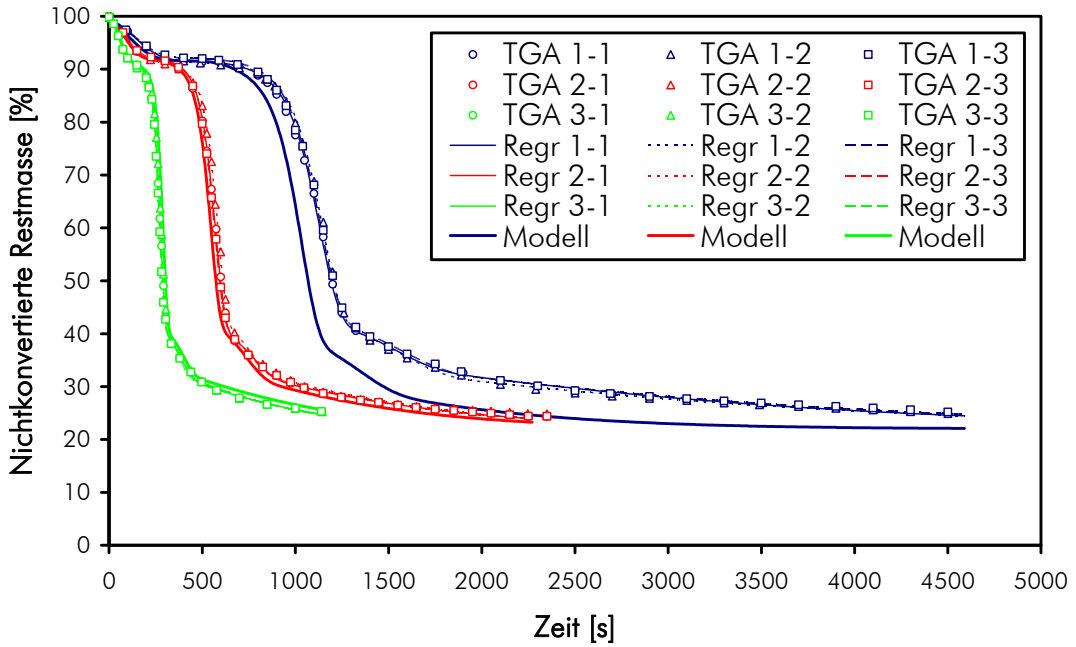


Abbildung 6-15: TGA-Auswertung des Maisganzpflanzenbrennstoffs im gesamten Volatilisationsbereich verglichen mit den Regressionen der einzelnen Experimente sowie den Ergebnissen des verwendeten Volatilisierungsmodells - nichtkonvertierte Restmasse in Abhängigkeit von der Zeit

Beide Abbildungen zeigen, dass die Vorhersage des Masseverlustes des festen Brennstoffes während der Ausgasungsphase für die Aufheizraten 20 °C/min und 40 °C/min hervorragend sind, während die Übereinstimmung für die Rate 10 °C/min relativ bescheiden ausfällt. Hier wird der zeitliche Verlauf des Massenverlusts durch Anwendung des Modells überschätzt und ein zu schneller Ausgasungsprozess vorhergesagt. Es liegt relativ klar auf der Hand, dass dieses Verhalten nicht durch das Vorhandensein einer Limitierung der Umwandlungskinetik durch den Wärme- oder Stoffübergang hervorgerufen werden kann, da in einem solchen Fall die Umsetzungsgeschwindigkeit für kleinere Temperaturgradienten tendenziell unterschätzt werden müsste. Dies ergibt sich aus der Annahme, dass der geringste Einfluss des Wärmeübergangs bei niedrigen Aufheizraten zu erwarten ist; auf den Einfluss des Stoffübergangs kann daraus nur indirekt aufgrund der Analogie des Stoff- und Wärmetransports geschlossen werden. Dass die TGA-Untersuchungen tatsächlich in einem thermisch dünnen, also kinetikdominierten Regime durchgeführt wurden, bestätigen darüber hinaus auch die Versuchsläufe mit unterschiedlichem Inertgasvolumenstrom sowie mit unterschiedlicher Einwaage. Die Parameter der einzeln regressierten Kurven zeigen relativ deutlich, dass diese schlechtere Vorhersagequalität damit zusammenhängt, dass die Versuche mit 10 °C/min einen breiteren Bereich der Umwandlung sowohl für Zellulose als auch für Hemizellulose aufweisen. Dies geht daraus hervor, dass für diese beiden Komponenten im Zuge der Einzelregression niedrigere Aktivierungsenergien gemeinsam mit höheren Präexponentiellen Faktoren ermittelt wurden, wodurch sich die Volatilisierung dieser Komponenten über einen breiteren Zeit- und Temperaturbereich erstreckt. Ohne die Einführung weiterer Modellierungsschritte und zusätzlicher anzupassender Parameter ist dieses Verhalten nicht abbildbar. Da aber gezeigt werden kann, dass in dieser Arbeit lediglich Rampen zwischen 20 und 40 °C/min interessant sind, wird von einer weiteren Detaillierung des Modells abgesehen. Die Vorhersagequalität für den relevanten Bereich ist den Erfordernissen entsprechend sehr gut.

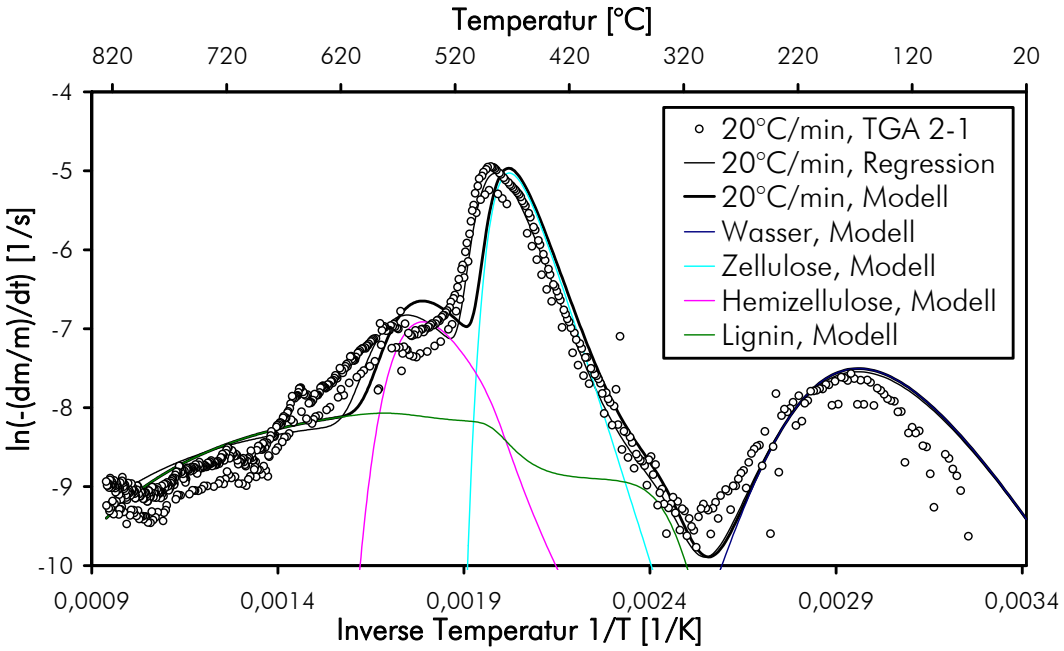


Abbildung 6-16: TGA-DTG-Auswertung des Maisganzpflanzenbrennstoffs im gesamten Volatilisationsbereich für eine Rampe von 20°C/min verglichen mit der Einzelregression, dem Ergebnis des verwendeten Volatilisierungsmodells sowie den Beiträgen der einzelnen Pseudokomponenten – spezifische Volatilisierungsrate in Abhängigkeit von der Temperatur

Eine noch präzisere Darstellung sowohl des experimentellen Verlaufes als auch der Modellierungsqualität erlaubt die zeitliche Differenzierung des Massenverlustes, also die Ausgasungsrate. Da alle Versuchsläufe (und auch der Verlauf, der mit dem Volatilisierungsmodell ermittelt wurde) mit unterschiedlichen Einwaagen durchgeführt wurden, muss für eine einheitliche Darstellung die Änderung der Masse mit der Zeit auf die jeweilige Restmasse bezogen werden; nur so können die unterschiedlichen Experimente miteinander verglichen werden. Abbildung 6-16 zeigt nun eine solche differentielle thermogravimetrische Analyse (*DTG*), die in der Literatur in ähnlicher Form vielfach verwendet wird (Ghaly et al., 1993; Arenillas et al., 2001; Conesa et al., 2001; Stenseng et al., 2001a; Gronli et al., 2002; Gomez et al., 2005; Skodras et al., 2006; Sonobe et al., 2008), für das TGA-Experiment TGA 2-1, welches bei einer Aufheizrate von 20 °C/min, hohem Inertgasstrom und hoher Einwaage durchgeführt wurde. Abbildung 14-5 zeigt die gleiche Darstellung für ein Experiment mit 40 °C/min. Für eine gute Aussagekraft wird in beiden Diagrammen die spezifische Ausgasungsrate über der inversen absoluten Temperatur aufgetragen (die relativ schmalen Umwandlungsbereiche bei niedrigen Temperaturen werden dadurch gedehnt, was die Analysierbarkeit verbessert), die sekundäre Abszisse bildet aber zur besseren Orientierung °C ab. Eine solche Darstellungsform wird in der Literatur fallweise als Arrhenius-Plot bezeichnet (z. B. Ergüdenler et al., 1994; Janse et al., 1998; Russell et al., 1998; Liang et al., 2000; Biagini et al., 2006). Zusätzlich zu den experimentellen Ergebnissen sind die Ergebnisse des Modells sowohl als Summe als auch die Beiträge der einzelnen Pseudokomponenten in den Diagrammen dargestellt.

Die Diagramme zeigen hervorragend die Volatilisierungsvorgänge der einzelnen Pseudokomponenten. Bei niedrigen Temperaturen ist ein relativ breiter Wasser-Peak zu erkennen, auf den unmittelbar ein Tal folgt, in der integrierten Darstellung entspricht dies der Flachstelle nach der Trocknung. Anschließend ist der sehr ausgeprägte und scharfe Peak der Zellulose-Umwandlung zu erkennen, der durch einen kleineren und weniger ausgeprägten Hemizellulose-Peak abgelöst wird. Die Pseudokomponente Lignin ist über einen sehr weiten Temperaturbereich aktiv; die Umwandlung beginnt bei etwa 330 °C und liefert auch noch bei Temperaturen über 800 °C einen Beitrag. Bereits bei Orfão et al. (Orfão et al., 1999) wird festgehalten, dass Zellulosepyrolyse durch einen scharfen Peak, der durch eine einzelne Umwandlungsreaktion ausgelöst wird, hervorragend beschrieben werden kann. Die Autoren erwähnen weiters, dass die Pyrolyse von Hemizellulose (Modellstoff Xylan) und vor allem Lignin aber nicht mehr exakt mit Einzelreaktionen nachgebildet werden können, sondern komplexere Reaktionsschemata erforderlich sind.

Die beiden Diagramme enthüllen, dass die experimentellen Daten nach der Hemizelluloseumwandlung (über einer Temperatur von etwa 550 °C) noch weitere kleine Umwandlungspeaks enthalten, die durch eigene Pseudokomponenten in niedrigen Gehalten abgebildet werden könnten. Abschließend kann gefolgert werden, dass ein Volatilisierungsmodell für Lignin im Idealfall für Temperaturen über 550 °C in dieser Diagrammdarstellung einen linearen Abfall mit sinkender inverser Temperatur vorhersagen sollte. Die reine Superposition eines Arrhenius-Ansatzes mit einem Potenzgesetz erlaubt aber ein solches Verhalten nicht. Hier wäre zu untersuchen, ob in der Literatur geeignete Methoden für eine prinzipiell andere und bessere Modellierung der Ligninumsetzung gefunden werden kann, möglicherweise mit der *DAEM*-Methode, die in den Arbeiten von Várhegyi (Várhegyi et al., 2002; Várhegyi et al., 2009; Várhegyi et al., 2010; Várhegyi et al., 2011a) sehr ausführlich dokumentiert ist. Für die vorliegende Arbeit ist die Vorhersage sowohl des Massenverlustes des Feststoffes als

auch der Ausgasungs- und damit Gasentstehungsrate, welche mit dem entwickelten Modell erzielt werden kann, von ausreichender Qualität. Der einfache und robuste mathematische Aufbau, die gute Konvergenz bei Lösungsprozessen sowie die einfache Implementierbarkeit in komplexere Modellumgebungen gaben den Ausschlag für die Verwendung des Ansatzes in der vorliegenden Arbeit.

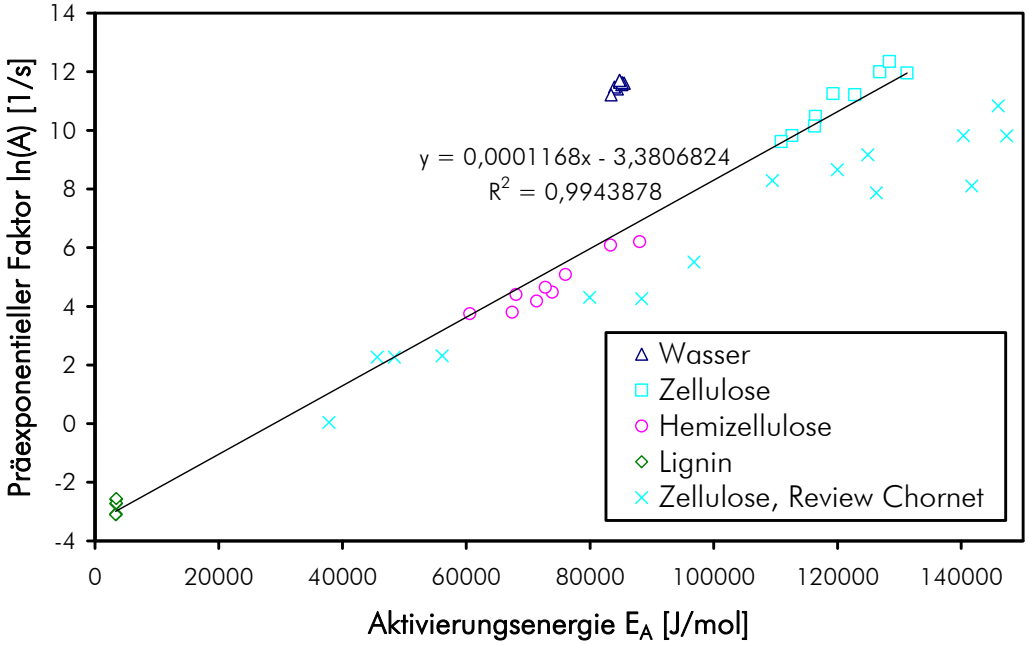


Abbildung 6-17: Korrelation der ermittelten kinetischen Parameter für Trocknung und Volatilisierung (Kompensationseffekt) aller TGA-Experimente des untersuchten Maisganzpflanzenbrennstoffs und Vergleich mit Ergebnissen der Zellulosepyrolyse aus dem Übersichtsbeitrag von Chornet und Roy (Narayan et al., 1996)

Ein interessanter Nebenschauplatz im Zuge der thermogravimetrischen Analyse ergibt sich bei einer näheren Untersuchung der kinetischen Parameter, die für alle durchgeführten TGA-Experimente regressiert wurden. Dabei stellt sich heraus, dass eine Korrelation zwischen Aktivierungsenergie und Präexponentiellem Faktor besteht, der in TGA-spezifischer Literatur als Kompensationseffekt (*compensation effect*) bekannt ist (Ergüdenler et al., 1994; Narayan et al., 1996; Skodras et al., 2006). Der lineare Zusammenhang zwischen dem natürlichen Logarithmus des Präexponentiellen Faktors und der Aktivierungsenergie ist für die Ergebnisse dieser Arbeit in Abbildung 6-17 dargestellt und mit Werten der Zellulosepyrolyse aus einem Übersichtsbeitrag von Chornet und Roy aus dem Jahre 1980 verglichen, welche der Arbeit von Narayan et al. (Narayan et al., 1996) entnommen werden konnten. Auch diese experimentellen Ergebnisse folgen einem linearen Verlauf, allerdings mit kleinerer Steigerung und größerem Offset. Neben der guten Übereinstimmung mit der ermittelten linearen Regressionsfunktion wird aus dieser Abbildung auch deutlich, dass sich die kinetischen Parameter der Brennstofftrocknung relativ deutlich von jenen der Brennstoffvolatilisierung unterscheiden. Die physikalische Grundlage des Kompensationseffektes wird in der Literatur kontroversiell diskutiert, Narayan et al. (Narayan et al., 1996) arbeiten allerdings heraus, dass dieser Kompensationseffekt möglicherweise auf der thermischen Verzögerung (*thermal lag*), also des limitierten Wärmetransportes im Feststoffpartikel und in der Gasphase, sowie auf der thermischen Trägheit der eingesetzten Temperaturmessung beruht. Die Autoren zeigen in ihrer Arbeit, wie diese thermische Verzögerung speziell für hohe Aufheizraten (*rapid pyrolysis*)

sowie für Umwandlungsprozesse mit hoher Wärmetönung von großer Bedeutung ist und bei unvorsichtiger Analyse grob falsche kinetische Parameter ermittelt werden können. Die Arbeit liefert damit eine plausible Erklärung für die großen Unterschiede der kinetischen Parameter, die in der Literatur gefunden werden können (Narayan et al., 1996). Für die vorliegende Arbeit kann der Kompensationseffekt sehr gut als Plausibilitätscheck herangezogen werden.

Vergleicht man die in dieser Arbeit verwendeten Aktivierungsenergien der Reinkomponenten (Zellulose, Hemizellulose und Lignin) mit Werten aus der Literatur, wird die breite Streuung der Parameter deutlich. Neben der breit akzeptieren Aktivierungsenergie für den Reinstoff Zellulose von 238 kJ/mol (Várhegyi et al., 1989a; Várhegyi et al., 1994; Antal et al., 1995) finden sich in der Literatur Werte für Zellulose in der komplexen Biomasse von beispielsweise 101 für Stroh (Skodras et al., 2006), 145 für Baumwolle (Vamvuka et al., 2003; Grammelis et al., 2005), 184 bis 200 für Reisschalen (Font et al., 2001; Radmanesh et al., 2006) sowie Werte von 200 und mehr für holzartige Biomassen (Biagini et al., 2002; Senneca et al., 2002a; Vamvuka et al., 2003; Grammelis et al., 2005; Skodras et al., 2006). Der in dieser Arbeit ermittelte Wert von 124 kJ/mol ordnet sich in diese Reihung unterschiedlicher Biomassen sehr gut ein. Nachdem sich Zellulose und Hemizellulose während der Pyrolyse sehr ähnlich verhalten, gelten diese Aussagen für Hemizellulose mit einer niedrigeren Aktivierungsenergie von etwa 75 kJ/mol (in dieser Arbeit) sinngemäß genauso. Aufgrund der Verhaltensähnlichkeit von Zellulose und Hemizellulose bei der thermolytischen Umsetzung werden diese beiden Komponenten begrifflich häufig zur *Holozellulose* zusammengefasst (Di Blasi et al., 2001a). Eine sehr gute thermogravimetrische Analyse für diese beiden Komponenten im Stängel der Sonnenblume liefern Várhegyi und Koautoren in einer frühen Arbeit (Várhegyi et al., 1989b), die im Gegensatz zu den späteren Arbeiten von Várhegyi noch nicht die *DAEM*-Methode, sondern zwei einstufige Parallelreaktionen verwendet. Für Zellulose werden in dieser Arbeit 172 kJ/mol und für Hemizellulose 89 kJ/mol als Aktivierungsenergie ermittelt. Als Grund für die Abweichung der kinetischen Parameter in der komplexen Biomassematrix von den zu erwartenden Werten der Reinstoffe (vor allem Avicel®-Zellulose) diskutieren die Autoren Inhomogenitäten, Unreinheiten und morphologische Unterschiede die in der Biomasse vorhanden sind. Durch die entstehende unterschiedliche thermische Zugänglichkeit der Zellulosebestandteile in der Biomasse verbreitern sich die Umwandlungspeaks in der DTG-Analyse und die ermittelten kinetischen Parameter nehmen aus mathematischen Gründen kleinere Werte an (Várhegyi et al., 1989b). In einer weiteren Arbeit (Várhegyi et al., 1989a) zeigen Várhegyi und seine Koautoren, dass im Gegensatz zu reiner Zellulose die Thermolyse der Hemizellulose (Modellstoff Xylan) genaugenommen nicht mehr mit einer einzigen Umwandlungsreaktion beschrieben werden kann, sondern zumindest zwei Reaktionsschritte beobachtet werden können (Doppelpeak in der Umwandlungsrate). Für technische Anwendungen ist die genaue Auflösung dieses Verhaltens aber irrelevant.

Lignin verhält sich im Vergleich zu Holozellulose ausgeprägt unterschiedlich. Lignin pyrolysiert nicht wie Zellulose und Hemizellulose in einem engen, sondern in einem sehr breiten Temperaturbereich, dies macht auch Abbildung 6-16 deutlich. Die Ligninumsetzung beginnt bereits bei sehr niedrigen Temperaturen im Bereich der Brennstofftrocknung und ist erst bei sehr hohen Temperaturen und entsprechend langen Umsetzzeiten abgeschlossen. Außerdem ist die pyrolytische Ligninumsetzung exotherm (Di Blasi et al., 2001b). Die in der Literatur berichteten Aktivierungsenergien für Lignin in der jeweils untersuchten Biomasse streuen ebenfalls zum Teil erheblich. Grammelis et al. berichten in ihrer Arbeit (Grammelis et al., 2005) einen Wert von 30 kJ/mol für Olivenkerne, 31 kJ/mol für Baumwolle und 28 kJ/mol

für Holzpellets. Dies deckt sich sehr gut mit den Angaben von Vamvuka et al. (Vamvuka et al., 2003), die für Olivenkerne einen Bereich von 29 bis 42, für Baumwolle etwa 30 und für Abfallholz einen Bereich von 34 bis 42 kJ/mol angeben. Für Reisschalen wurde bei Radmanesh (Radmanesh et al., 2006) ein Wert von 64 kJ/mol ermittelt, Skodras et al. geben in ihrer Arbeit (Skodras et al., 2006) einen Wert von 75 kJ/mol für eine nicht näher spezifizierte Strohart an. Die Angaben zur Aktivierungsenergie des Ligninumsatzes in verschiedenen Holzarten reichen von 18 (Biagini et al., 2002) über 28 (Grammelis et al., 2005) bis zu 87 kJ/mol (Skodras et al., 2006). In der vorliegenden Arbeit wurde zur optimalen Abbildung des ermittelten TGA-Verhaltens des Maisganzpflanzen-Brennstoffs ein Wert von 3,4 kJ/mol für die Aktivierungsenergie von Lignin ermittelt, welcher im Vergleich zu den in der Literatur dokumentierten Werten auffallend klein ist. Auf welcher Biomasseneigenschaft diese niedrige Ligninaktivierungsenergie beruht, ist unklar und es wären weiterführende thermogravimetrische Untersuchungen mit den einzelnen Teilen der Energiepflanze Mais erforderlich, um beispielsweise den Einfluss des relativ hohen Gehaltes an Öl in den Körnern des Kolbens zu erfassen. Solche Untersuchungen wurden im Ansatz bei Raveendran (Raveendran et al., 1995) begonnen, die Ableitung kinetischer Parameter für die einzelnen Pflanzenteile ist aus dieser Arbeit allerdings nicht möglich.

Zahlreiche Arbeiten in der Literatur wählen eine vereinfachte Modellierung und beschreiben die kinetische Umsetzung nur mit einem Satz kinetischer Parameter (eine Pseudokomponente). Dadurch ist die direkte Vergleichbarkeit mit dem in dieser Arbeit eingesetzten Modell natürlich eingeschränkt, bei gedanklicher Mittelwertbildung der Aktivierungsenergien der Einzelkomponenten sind jedoch zumindest eine qualitative Einschätzung und ein Vergleich mit weiteren Literaturarbeiten möglich. Ghaly et al. beschreiben in ihrer Arbeit (Ghaly et al., 1993) einen Bereich von 58 bis 102 kJ/mol für verschiedene Strohsorten und verschiedene Temperaturbereiche. Stenseng et al. (Stenseng et al., 2001a) untersuchten sowohl das Abbauverhalten als auch die Wärmetönung bei der Pyrolyse von Weizenstroh unter Anwendung einer Aufheizrate von 40 °C/min und ermittelten hierfür eine Aktivierungsenergie von 55,6 KJ/mol. Im Vergleich dazu verwenden Jones et al. (Jones et al., 2000) in ihrer Arbeit zur CFD-Simulation eines Fallrohr-Verbrennungsapparates einen vergleichsweise hohen Wert von 239 kJ/mol für Weizenstroh. Lu et al. entwickeln in ihrer Arbeit (Lu et al., 2008) ein sehr gutes partikuläres Modell für die Verbrennung von Sägemehl verschiedener Holzarten und ermitteln hierfür ebenfalls eine einstufige Einkomponentenkinetik. Die Autoren erhalten für die Aktivierungsenergie je nach Holzart Werte zwischen 73 und 177 kJ/mol. Abschließend berichten Liang et al. (Liang et al., 2000) von einer Aktivierungsenergie von 67 kJ/mol für einen lignozellulosischen biogenen Reststoff aus der Papierindustrie für die vereinfachte Modellierung mit einer einzelnen Umwandlungsreaktion.

Hinsichtlich der Zusammensetzung der frischen Biomasse betreffend Zellulose, Hemizellulose und Lignin (fallweise auch noch extrahierbare Bestandteile als vierte Komponente – *extractives*) sind selbst für ähnliche Biomassen stark streuende Werte zu finden. Die Ursache hierfür sind einerseits die unterschiedlichen Bestimmungsmethoden, die für die Strukturaufklärung in der komplexen Biomasse verwendet werden sowie deren Fehlergrenzen. Andererseits wird in vielen Literaturarbeiten ein ähnlicher Weg wie in dieser Arbeit eingeschlagen, dass die konstituierenden Pseudokomponenten der Einfachheit halber lediglich aufgrund der Größenordnung der jeweils ermittelten Aktivierungsenergien benannt werden ohne zusätzliche Strukturinformation oder Analysenergebnisse zu haben (z. B. Orfão et al., 1999). Aus diesen Gründen sei von einem quantitativen Vergleich abgeraten, eine Prüfung der Größen-

ordnungen und der Plausibilität kann aber durchaus sinnvoll sein. Tabelle 6-6 führt einige in der Literatur berichtete Biomassezusammensetzungen an und vergleicht diese mit den Ergebnissen der vorliegenden Arbeit. Einige der Analysen führen dabei neben den drei Hauptkomponenten auch noch die extrahierbaren Bestandteile getrennt an. Um die einzelnen Quellen und Biomassen vergleichen zu können, werden in dieser Zusammenstellung diese extrahierbaren Bestandteile der Komponente Lignin zugeordnet. Bei den Arbeiten, in denen Maiskolben untersucht wurden, ist kein Ölgehalt angegeben, weshalb anzunehmen ist, dass gerebelte Maiskolben ohne Maiskörner untersucht wurden.

Tabelle 6-6: In der Literatur berichtete Zusammensetzungen verschiedener Biomassen im Vergleich zur vorliegenden Arbeit (wo extrahierbare Bestandteile angegeben sind, wurden diese der Komponente Lignin zugeschlagen)

Quelle und Art der Biomasse	Zellulose [wt%, waf]	Hemizellulose [wt%, waf]	Lignin [wt%, waf]
Diese Arbeit (Mais-Ganzpflanze)	54,60	16,40	29,00
Maiskolben			
Raveendran et al., 1995	39,90	28,42	31,68
Demirbas, 2004	52,33	32,12	15,54
Maisstängel			
Raveendran et al., 1995	45,62	25,21	29,17
Weizenstroh			
Wagenaar et al., 1994	41,67	29,17	29,17
Raveendran et al., 1995	34,19	32,40	33,41
Di Blasi et al., 1999c	34,82	34,82	30,36
Demirbas, 2004	33,18	45,39	23,98
Skodras et al., 2006	20,58	65,28	14,14
Reisschalen			
Wagenaar et al., 1994	35,29	29,41	35,29
Raveendran et al., 1995	39,97	31,03	28,99
Di Blasi et al., 1999c	34,27	34,27	31,45
Reisstroh			
Raveendran et al., 1995	42,82	26,27	30,90
Radmanesh et al., 2006	59,60	22,22	18,18
Senfstroh			
Maiti et al., 2007	47,16	28,86	23,98
Baumwollabfälle			
Vamvuka et al., 2003	47,63	16,58	35,78
Grammelis et al., 2005	48,30	17,60	34,10

Hinsichtlich der Koksbildung sind die Literaturangaben relativ einheitlich. Die meisten Autoren (z. B. Raveendran et al., 1996b; Strezov et al., 2004) bestätigen, dass die größten Beiträge zur Formierung der reaktiven Kokskomponenten durch die Volatilisierung von Lignin geliefert werden, während Zellulose und Hemizellulose nur relativ kleine Beiträge liefern. Im vorliegenden Modell liefert tatsächlich Zellulose eine sehr geringe Koksausbeute während Lignin einen großen Anteil zeigt. Auch ein großer Anteil der Hemizellulose wird im vorliegenden Modell in reaktiven Koks umgewandelt, was beispielsweise auch bei Orfão et al. (Orfão et al., 1999) festgehalten wird. Aufgrund des relativ geringen Anteils der Hemizellulose in

der frischen Biomasse ist der Gesamtbeitrag zur Kokskomponente aber trotzdem klein. Vergleicht man die nichtvolatilen Anteile der Biomassekomponenten aus der vorliegenden Arbeit mit jener von Orfão (Orfão et al., 1999), so sind durchaus qualitative Übereinstimmungen festzustellen (Zellulose: 0,5 % vs. 5,1 %, Hemizellulose 42,6 % vs. 20,5 %, Lignin 41,9 % vs. 37,4 %).

Umwandlungsenthalpie der Volatilisierung

Die Umwandlung der flüchtigen Brennstoffbestandteile in gasförmige Komponenten und Koks wird ähnlich wie die Verdampfung von Wasser in Abhängigkeit der jeweiligen Biomasse von einer Phasenumwandlungsenthalpie (Wärmetönung) begleitet. Diese Volatilisierungsenthalpie ΔH_{vol} ist mittels TGA-DSC (*differential scanning calorimetry*) prinzipiell relativ gut experimentell ermittelbar. Für die vorliegende Arbeit war eine entsprechende Versuchsapparatur nicht verfügbar, sodass auf Literaturarbeiten zurückgegriffen werden musste.

Die genaue Ermittlung der Phasenumwandlungsenergie ist selbst bei Anwendung einer modernen Versuchsapparatur relativ schwierig, da eine genau energetische Bilanzierung und die Berücksichtigung der fühlbaren Wärmen des eintretenden Inertgas-Spülstromes sowie des austretenden, heißen Gasstromes erforderlich ist. Möglicherweise auch aus diesem Grund sind die Angaben in der Literatur relativ divergent; alle analysierten Arbeiten deuten jedoch gleichermaßen darauf hin, dass die absolute Größe der Volatilisierungsenthalpie im Vergleich zum Heizwert des Biomassebrennstoffes relativ klein ist (im Bereich zwischen 5 und 10 %). Weiters ist aus den Literaturarbeiten auch keine eindeutige Aussage zu generieren, ob die Volatilisierung als endothermer oder als exothermer Prozess aufgefasst werden kann. Strezov et al. (Strezov et al., 2004) arbeiten relativ gut heraus, dass die Pyrolyse von Zellulose und Hemizellulose ein schwach ausgeprägter endothermer Vorgang sind, die Pyrolyse von Lignin und die anschließende Bildung des reaktiven Kokses allerdings klar exotherm ist. Die Arbeit fokussiert sich auf verschiedene Holzarten und da diese Biomasse relativ große Gehalte an Lignin aufweist, ist folglich die gesamte Volatilisierung exotherm. Die Autoren ermitteln für Pinienholz etwa -40, für Kiefernholz etwa -55 und für Eichenholz etwa -176 kJ/kg bezogen auf die trockene Biomasse (Strezov et al., 2004). Auch Koufopanos et al. (Koufopanos et al., 1991) und Thunman et al. (Thunman et al., 2001) liefern ähnliche Aussagen zu den Einzelkomponenten und ermitteln eine Volatilisierungsenthalpie zwischen -200 und -250 kJ/kg für nicht näher spezifiziertes Holz. Bryden et al. haben in einer frühen Arbeit (Bryden et al., 1996) für Holz vereinfacht angenommen, dass die Umsetzung thermisch neutral ist (Umwandlungsenthalpie Null), in einer späteren Arbeit (Bryden et al., 2002) für diese Biomasse allerdings einen Wert von -420 kJ/kg angegeben. Auf der anderen Seite kommen Galgano et al. (Galgano et al., 2004) zu der Erkenntnis, dass die Pyrolyse von Birkenholz endotherm ist und eine Umwandlungsenthalpie von +430 kJ/kg aufweist. In einer Übersichtsarbeit von Daugaard et al. (Daugaard et al., 2003) schließlich wird die Holzpyrolyse als relativ stark endothermer Prozess dokumentiert mit einer Umwandlungsenthalpie von +1460 für Eichenholz und +1640 kJ/kg für Pinienholz. Die Autoren dieser Arbeit untersuchten auch lignozellulosische Biomassen, die den in dieser Arbeit betrachteten Biomassen relativ nahe kommen und ermittelten für Haferspelzen einen Wert von +780 und für Maisstroh einen Wert von +1350 kJ/kg trockene Biomasse. In der Arbeit von van der Lans et al. (van der Lans et al., 2000), die sich auf die Simulation der Strohverbrennung in realen Verbrennungsapparaten konzentriert, setzen die Autoren aufgrund der relativ dünnen Datenlage ebenfalls vereinfachend an, dass die Umwandlung thermisch neutral verläuft. Aus der Summe dieser Literaturdaten wurde für die vorliegende Arbeit ein Wert für die Volatilisierung-

senthalpie ΔH_{vol} der Mais-Ganzpflanze von +500 kJ/kg trockener Biomasse angenommen. In weiterführenden Arbeiten wäre eine genaue Untersuchung dieses Brennstoffparameters mittels TGA-DSC empfehlenswert. Unter dem Strich ist jedoch aus allen analysierten Literaturarbeiten zu postulieren, dass der Einfluss der Volatilisierungsenthalpie auf das Simulationsergebnis relativ gering ist.

Zusammensetzung des bei der Volatilisierung entstehenden Gases

Wie bereits eingangs erwähnt entstehen während des Volatilisierungsvorganges aus der frischen Biomasse einerseits Gas und andererseits Teere und reaktiver Koks. Die Teere werden in dieser Arbeit als temporäre Zwischenprodukte angenommen, die nach ihrer Entstehung sofort durch Sekundärdekomposition (Bryden et al., 1996; Di Blasi et al., 1999c) in flüchtige Gase aufgespalten werden (und deshalb im Modell keine Berücksichtigung finden). In einer Arbeit von Colomba di Blasi (Di Blasi et al., 1999c) wird sehr gut herausgearbeitet, dass die Pyrolyse agrarischer Reststoffe, und hier besonders von Weizenstroh, Teere mit hoher Reaktivität liefert, die sehr rasch in nichtkondensierbare gasförmige Bestandteile (vorwiegend CO, aber auch C_2H_4 und CH_4) thermolysiert werden. Auch die Ausbeute an Koks ist nach dieser Untersuchung für agrarische Reststoffe vergleichsweise hoch. Die in der vorliegenden Arbeit betrachtete Verbrennungstechnologie weist Betriebsparameter auf (relativ hohe Temperaturen und lange Verweilzeiten des Brennstoffs im Stadium der Pyrolyse), die nach der Arbeit von Di Blasi et al. (Di Blasi et al., 1999c) eine minimale Ausbeute an Koks (entsprechend Immediatanalyse), minimale Ausbeute an Teeren (Sekundärspaltung zu nichtkondensierbaren Gasen) und deshalb maximale Ausbeute an nichtkondensierbaren flüchtigen Bestandteilen ermöglicht.

Während die Zusammensetzung des entstehenden Kokses relativ einfach zu ermitteln ist (neben den inerten Aschebestandteilen im Wesentlichen Kohlenstoff), ist die Zusammensetzung der gasförmigen Produkte relativ schwierig zu erfassen. Grundsätzlich gilt natürlich, dass die Elementarbilanzen für die wesentlichsten Brennstoffbestandteile (Kohlenstoff, Wasserstoff, Sauerstoff, Stickstoff) geschlossen bleiben muss. Bei bekannter Elementarzusammensetzung des Brennstoffs und unter Annahme, dass der reaktive Koks nur aus Kohlenstoff (sowie geringen Mengen an Stickstoffkomponenten, siehe Kapitel 5) besteht, lässt sich die elementare Zusammensetzung der gasförmigen Produkte als Mittel über die gesamte Volatilisierung ermitteln. Aus dieser Elementarzusammensetzung sind im Anschluss die Gehalte aller in der homogenen Gasphase berücksichtigten Gasspezies zu ermitteln (CO, CO_2, H_2, H_2O, Stickstoffspezies), wobei die Summenkomponente C_xH_y einerseits die höheren Kohlenwasserstoffe abbilden soll und andererseits in gewissem Umfang für die Schließung der Elementarbilanz herangezogen werden kann. Eine zusätzliche Komplikation entsteht dadurch, dass die Zusammensetzung der gasförmigen Produkte während des Pyrolysevorganges nicht konstant, sondern zeitlich variabel und von einer ganzen Reihe von Einflussfaktoren abhängig ist (z. B. Zusammensetzung und Struktur des verbleibenden Feststoffes, Temperatur). Einige Arbeiten von Di Blasi und seinen Koautoren (Di Blasi et al., 1999c; Di Blasi et al., 2001b) beschäftigen sich mit diesen Zusammenhängen am Beispiel agrarischer Reststoffe und erörtern den Einfluss von Temperatur und Aufheizrate sowie der Biomassezusammensetzung auf die Verteilung der Pyrolyseprodukte (Gas, Teer, Koks). Der Einfluss der Feststofftemperatur auf die Gaszusammensetzung wurde ebenfalls untersucht und quantifiziert. Dabei zeigt sich, dass sich im untersuchten Temperaturbereich von 400 bis 700 °C die Verhältnisse zwischen CO_2, CH_4 und C2-Kohlenwasserstoffen zur Referenzkomponente CO durchaus um bis zu 50 % verschieben können. Interessant dabei ist, dass die Analyse zeigt (Di Blasi et al., 2001b),

dass bei höheren Feststofftemperaturen auch höhere Gehalte an CO_2, CH_4 und C2-Kohlenwasserstoffen zu erwarten sind. Eine ähnliche Analyse für Olivenkerne kann bei Blanco López et al. (Blanco López et al., 2002) gefunden werden, die ebenfalls bei höheren Pyrolysetemperaturen höhere Kohlenwasserstoffgehalte ermitteln konnten. Im Gegensatz zu Di Blasi sinkt in dieser Arbeit aber der Gehalt von CO_2 bei steigenden Temperaturen. Bei Bassilakis et al. (Bassilakis et al., 2001) ist schließlich für Weizenstroh eine sehr detaillierte Analyse der nichtkondensierbaren flüchtigen Pyrolyseprodukte mit einer großen Zahl organischer Komponenten in Abhängigkeit von der Temperatur gegeben. Die Autoren erhalten auch einen relativ großen Anteil kondensierbarer Produkte (Teere), die sie aber keiner weiteren Elementaranalyse unterziehen. Da in der vorliegenden Arbeit die Teerkomponenten gedanklich aufgrund der Sekundärdekomposition zu nichtkondensierbaren Gasbestandteilen umgesetzt werden, ist zumindest die Elementarzusammensetzung der Teerkomponenten erforderlich, um die Zusammensetzung der nichtkondensierbaren Komponenten zu ermitteln. Aus diesem Grund muss die sonst sehr umfangreiche Literaturstelle für die Modellentwicklung dieser Arbeit unberücksichtigt bleiben.

Für die in dieser Arbeit relevanten Biomassen sind betriebsparameterabhängige Untersuchungen ausständig, weshalb von einer fixen Gaszusammensetzung während der Volatilisierung ausgegangen. Es finden also weder Betriebsbedingungen im Verbrennungsapparat noch die sich ändernde Zusammensetzung und Struktur der nichtkonvertierten festen Biomasse Berücksichtigung bei der Ermittlung der Gaszusammensetzung des flüchtigen Brennstoffanteils. Prinzipiell wäre die Erfassung und Analyse der gasförmigen Pyrolyseprodukte während der thermogravimetrischen Untersuchung möglich; in der Literatur finden sich zahlreiche Arbeiten, in denen (teilweise auch in Abhängigkeit von den Betriebsbedingungen) für verschiedene Biomassen solche Analysen durchgeführt wurden (Di Blasi et al., 1999c; van der Lans et al., 2000; Bassilakis et al., 2001; Di Blasi et al., 2001b; Thunman et al., 2001; Blanco López et al., 2002; Boateng et al., 2006; Radmanesh et al., 2006; Lee et al., 2007). Eine entsprechende experimentelle Apparatur mit einer Kopplung eines TG-Analysators und eines leistungsfähigen Gasanalysensystems stand für die vorliegende Arbeit allerdings nicht zur Verfügung, sodass für die hier betrachteten Brennstoffe keine verlässlichen experimentellen Daten vorliegen. Aus diesem Grund musste auf Basis vorhandener Literaturarbeiten und unter Einhaltung der Elementar- und Energiebilanzen auf theoretischem Wege eine repräsentative Gaszusammensetzung ermittelt werden. Da die kontinuierliche Verbrennung von Biomasse einen Vorgang kontinuierlich fortgesetzter Pyrolyse beinhaltet, macht die Annahme einer zeitlich konstanten Gaszusammensetzung aber durchaus Sinn. Di Blasi und Koautoren zeigen in einer ihrer Arbeiten (Di Blasi et al., 1999c), dass sich die Gaszusammensetzung bei der Pyrolyse von Weizenstroh hinsichtlich der Hauptkomponenten CO und CO_2 für einen relativ breiten untersuchten Temperaturbereich nur unwesentlich ändert, wodurch ein weiters Argument für eine konstante Zusammensetzung geliefert wird.

Das erstellte Modell der Volatilisierung ist strukturell aber dennoch in der Lage, für jede diskrete Zelle auch eine zeitlich veränderliche Gaszusammensetzung zu verarbeiten, sodass bei Vorliegen verlässlicher Daten eine entsprechende Erweiterung relativ einfach durchgeführt werden kann. In diesem Fall ist aber besonderer Wert auf die Einhaltung der Elementarbilanz zu legen. Generell scheint die Modellierung und Simulation der Gaszusammensetzung aber aufgrund der Heterogenität der biogenen Brennstoffe eine große Herausforderung zu sein. Lee et al. präsentieren dennoch in einer ihrer Arbeiten (Lee et al., 2007) eine Reihe

von Simulationswerkzeugen, mit denen eine solche Vorhersage für bestimmte Biomassen innerhalb gewisser Grenzen möglich ist.

Tabelle 6-7: Zusammensetzungen der flüchtigen Pyrolyseprodukte für verschiedene Biomassen, Vergleich der Werte dieser Arbeit mit Werten für verschiedene Holzarten aus der Literatur

Quelle und Art der Biomasse	Elementaranalyse Rohbiomasse [wt%, waf]	Gaszusammensetzung Flüchtige Komponenten [wt%]
Diese Arbeit (Mais-Ganzpflanze)	C: 49,43 H: 6,57 O: 43,80	CO: 32,02 CO_2: 13,46 $CH_{2,78}$: 23,66 H_2: 0,40 H_2O: 30,46
Thunman et al., 2001; Thunman et al., 2003 (Birkenholz)	C: 53,84 H: 5,97 O: 40,20	CO: 42,67 CO_2: 14,85 $CH_{1,96}O_{0,02}$: 25,01 H_2: 0,58 H_2O: 16,89
Thunman et al., 2001 (Fichtenholz)	C: 50,29 H: 6,80 O: 42,91	CO: 39,89 CO_2: 13,76 $CH_{2,26}O_{0,09}$: 24,67 H_2: 0,41 H_2O: 21,26
Bryden et al., 1996 (allgem. Laubholz)	unbekannt	CO: 21,66 CO_2: 13,61 $CH_{1,52}O_{0,0028}$: 29,23 H_2: 5,92 H_2O: 29,59
Adanez et al., 2003 (Pinienholz)	unbekannt	CO: 29,20 CO_2: 1,00 $CH_{3,32}$: 3,80 H_2: 14,00 H_2O: 52,00

Für stroh- oder halmgutartige Biomassen sind hinsichtlich der Zusammensetzung der während der Pyrolyse entstehenden Gase aus der Literatur kaum Informationen extrahierbar. Für Holz sind aber einige Literaturarbeiten bekannt, die mit hoher Qualität und ähnlichen Betriebsbedingungen die durchschnittliche Gaszusammensetzung während der Pyrolyse untersucht haben. In Tabelle 6-7 sind diese Gaszusammensetzungen für verschiedene Holzarten dargestellt und werden mit den Werten aus der vorliegenden Arbeit verglichen. Kondensierbare Teerbestandteile werden, sofern sie ermittelt wurden, der Summenkomponente hö-

herer Kohlenwasserstoffe $C_xH_yO_z$ zugerechnet. Die in der jeweiligen Arbeit verwendete molare Summenformel dieser Summenkomponente ist in der Tabelle ebenfalls angegeben. Als Anhaltspunkt enthält die Tabelle auch noch die Elementaranalyse des rohen Biomassebrennstoffes auf wasser- und aschefreier Basis.

Folgt man Di Blasi et al. (Di Blasi et al., 1999c), so ist die Gaszusammensetzung bei der Pyrolyse von Weizenstroh jener von Holz relativ ähnlich. Aus diesem Grund wurden die Zusammensetzungen von Thunman und Bryden et al. (Bryden et al., 1996; Thunman et al., 2001; Thunman et al., 2003) als Startwert für die vorliegende Arbeit herangezogen und dahingehend abgeändert, dass die Elementarbilanz für Rohbrennstoff, flüchtigem Gas und verbleibendem Koks (ausschließlich Kohlenstoff und in sehr geringem Ausmaß NO_x-Vorläuferkomponenten) geschlossen wird. Die Werte von Adanez et al. (Adanez et al., 2003) wurden in dieser Evaluierung nicht berücksichtigt, da diese sich von den anderen gefundenen Literaturdaten signifikant und unplausibel unterscheiden und Thunman et al. in ihrer Arbeit (Thunman et al.; Thunman et al., 2001; Thunman et al., 2003) durchaus begründete Kritik an der Zusammensetzung und der Umwandlungskinetik üben.

Eine relativ gute Analyse der Zusammensetzung der Pyrolyseprodukte verschiedener Gräser und Energiepflanzen hinsichtlich kondensierbarer und nichtkondensierbarer Komponenten wird bei Boateng et al. (Boateng et al., 2006) gegeben. Ähnlich wie bei Bassilakis et al. (Bassilakis et al., 2001) wird auch hier von sehr großer Teerausbeute berichtet. Da weder eine Elementaranalyse des Teers noch eine Auswertung in Richtung Sekundärkomposition gemacht wurde, können die dortigen Ergebnisse ebenfalls nicht in die vorliegende Arbeit einfließen. Eine kurze Überblicksarbeit zur Gaszusammensetzung bei der Biomassepyrolyse liefern Radmanesh et al. (Radmanesh et al., 2006), wobei ein Vergleich verschiedener weiterer Literaturstellen durchgeführt wird. Die Autoren haben selbst Holzpyrolyse untersucht, Gaszusammensetzungen angegeben sowie ein einfaches Modell zur Abhängigkeit der Entstehung der jeweiligen Gasspezies während der einzelnen Phasen der Pyrolyse (abhängig von der Temperatur) erstellt. Die entstehenden Teere werden gemeinsam mit dem Wasser aus dem Gas herauskondensiert und keiner weiteren Analyse mehr zugeführt.

Die Summenkomponente für Kohlenwasserstoffe C_xH_y repräsentiert in dieser Arbeit die Komponenten CH_4, C_2H_4 und C_3H_8, für die in der Literatur (Adanez et al., 2003) Anhaltswerte gefunden werden konnten. Die Summenkomponente besteht demnach zu 27,1 wt% aus CH_4, zu 31,6 wt% aus C_2H_4 und zu 41,4 wt% aus C_3H_8. Damit ergibt sich eine molare Summenformel von $C_{1,8}H_5$ (oder $CH_{2,78}$), ein Molekulargewicht von 26,66 g/mol sowie die in Kapitel 6.7.1 dargestellte Stöchiometrie der zweistufigen Oxidationsreaktion mit CO als Zwischenprodukt. Die Reaktionsenthalpie für die Oxidationsreaktion wurde so gewählt, dass die Freisetzung thermischer Energie, die mit dem entwickelten Modell errechnet werden kann, genau der Brennstoffenergie entspricht. Werden also vom unteren Heizwert des Brennstoffs die Verdampfungsenthalpie, die Volatilisierungsenthalpie, die beim Koksabbrand freiwerdende Wärmemenge sowie die Reaktionsenthalpien der Oxidationsreaktionen aller anderen entstehenden gasförmigen Komponenten abgezogen, so erhält man direkt die Reaktionsenthalpie der Summenkomponente. Die Oxidationsreaktion ist natürlich exotherm und die Reaktionsenthalpie beträgt für die vorliegende Arbeit -16.426,0 kJ/kg bzw. -437,91 kJ/mol. In weiterer Folge kann daraus die Standardbildungsenthalpie der Summenkomponente ΔH_f^0 ermittelt werden, die für diese Arbeit -365,613 kJ/mol beträgt. In Summe

ist durch diese Vorgangsweise sichergestellt, dass das Modell sowohl seitens der Massen- als auch seitens der Element- und Energiebilanz dem realen Brennstoff entspricht.

6.7.2.3 Ausbrand der residuellen Feststoffkomponenten – Koksabbrand

Es zeigt sich aus den TGA-Ergebnissen sehr klar, dass der Koksabbrand nicht nur von der Kinetik, sondern auch vom Stoffübergang sowie vom Partialdruck des Reaktionseduktes Sauerstoff abhängig ist. Diese Erkenntnis wird von beinahe allen einschlägigen Literaturarbeiten bestätigt. Das bedeutet einen signifikanten Unterschied zur Volatilisierung und zur Brennstofftrocknung, welche wie in den vorstehenden Kapiteln dargestellt, unabhängig vom Stoffübergang und nur kinetiklimitiert sind. Das macht Sinn, da die Trocknung und die Volatilisierung als Zerfallsreaktionen erster Ordnung (bei manchen Autoren in der Literatur auch gebrochene höhere Ordnungen) angesehen werden, bei denen außer dem festen Brennstoff kein weiterer Reaktionsteilnehmer erforderlich ist. Beim Koksabbrand dagegen ist der Stofftransport eines Oxidationsmittels an die Koksoberfläche erforderlich. Die Reaktionsgeschwindigkeit des Koksabbrandes wird also sowohl durch die chemische Kinetik als auch durch die Diffusion gasförmiger Komponenten zur und von der Partikeloberfläche beeinflusst. Soll also das Abbrandverhalten der reaktiven residuellen Koksfraktion der Biomasse fundiert analysiert und simuliert werden, so sind mit chemischer Oxidationskinetik und Stoffübergang des Reaktionspartners Sauerstoff zumindest zwei unterschiedliche Mechanismen zu berücksichtigen (Williams et al., 2001), die gleichberechtigten Einfluss auf die Verbrennung des Kokses ausüben (a priori kann keiner der Mechanismen als klar dominierend angenommen werden). Wissenschaftliche Arbeiten tendieren in diesem Fall dazu, Bedingungen herzustellen, bei dem einer dieser Mechanismen geschwindigkeitmaximiert wird und der jeweils andere die zu untersuchende Limitierung des Umsatzes darstellt. Um die Kinetik des Koksabbrandes möglichst isoliert ermitteln zu können, ist bei der TGA danach zu trachten, den Stoffübergang zu maximieren, um eine Limitierung auszuschließen. Várhegyi sowie Di Blasi empfehlen hierzu (Di Blasi et al., 1999a; Branca et al., 2003; Várhegyi et al., 2006; Becidan et al., 2007b; Várhegyi et al., 2011a; Várhegyi et al., 2011b) die Verwendung sehr kleiner Probemengen, die der Ofenatmosphäre in der TGA eine große Oberfläche bieten, eine weite Verteilung des Probenmaterials auf großer Fläche, dünne Schichtdicken des Probematerials sowie einen hohen Fluss des Reaktivgases. Meist kann aber der Stoffübergang, so wie in der vorliegenden Arbeit auch, nicht völlig ausgeschlossen werden und der Gesamtabbrand ist als Überlagerung von Kinetik und Diffusion zu betrachten. Die durchgeführten TGA-Experimente sind dann nur mit einem bereits bestehenden Gesamtmodell zu beschreiben, für welches lediglich die Parameter an den jeweiligen Brennstoff anzupassen sind. Dies setzt einerseits ein gültiges und validiertes Modell zur kombinierten Beschreibung von Kinetik und Stoffübergang voraus (meist aus Literaturarbeiten) und erfordert andererseits die Durchführung einer geringeren Zahl von TGA-Experimenten, bei welchen jeweils nur ein variierender Einflussparameter untersucht wird. Ein solcher Ansatz wurde auch in der vorliegenden Arbeit verfolgt. Der Weg der kompletten Neuerstellung eines Modells allein auf Basis eigener TGA-Untersuchungen wurde nicht eingeschlagen. Für die erforderlichen getrennten Analysen von kinetikdominiertem sowie diffusionsdominiertem Bereich war die vorhandene TGA-Apparatur aufgrund der einsetzbaren Probenträger und der Genauigkeit der Waage nicht geeignet. Die erforderliche sehr große Anzahl systematischer Versuche wurde nicht im Fokus der vorliegenden Arbeit

gesehen. Folglich wurde ein Modell aus der Literatur für die Oxidation von Biomassekoks an den vorliegenden Brennstoff angepasst und implementiert.

Der Koks, welcher im Zuge der Volatilisierung gebildet wird, wird während des Koksabbrandes mit sauerstoffhältigen Komponenten aus der Gasphase oxidiert. An dieser Stelle sei erwähnt, dass in der vorliegenden Arbeit heterogene Reaktionen des festen Kohlenstoffs lediglich mit O_2, nicht aber mit H_2O oder CO_2 aus der Gasphase berücksichtigt werden. Wurzenberger implementiert in seiner Arbeit zur Simulation wandernder Festbetten biogener Brennstoffe (Wurzenberger et al., 2002) Oxidationsreaktionen mit allen drei Komponenten und erzielt damit durchaus gute Ergebnisse. Eine genaue Analyse der Beschreibungsansätze der chemischen Reaktionskinetik (Aktivierungsenergie und Präexponentieller Faktor im Arrhenius-Ansatz) zeigt allerdings, dass bei Betriebsbedingungen, die der vorliegenden Arbeit zugrunde liegen, die Geschwindigkeiten der Reaktionen mit H_2O und CO_2 um mehrere Größenordnungen kleiner sind als jene mit O_2. Werden diese beiden Reaktionen also vernachlässigt, so ist keine wesentliche Beeinträchtigung der Ergebnisse bei zugleich signifikant einfacherer Modellstruktur zu erwarten. Die Berechtigung dieser Herangehensweise wird in den Arbeiten von van der Lans et al. und Zhou et al. (van der Lans et al., 2000; Zhou et al., 2005) bestätigt. Wird nun davon ausgegangen, dass die reaktive Kokskomponente lediglich aus Kohlenstoff besteht (siehe Kapitel 6.7.2.2), so kann der Arbeit von Zhou et al. (Zhou et al., 2005) folgend die Reaktionsgleichung des Koksabbrandes gemäß Gleichung 6.27 aufgestellt werden.

$$\mathrm{C} + \frac{1}{\Phi_\mathrm{C}}\mathrm{O_2} \rightarrow 2\left(1 - \frac{1}{\Phi_\mathrm{C}}\right)\mathrm{CO} + \left(\frac{2}{\Phi_\mathrm{C}} - 1\right)\mathrm{CO_2} \tag{6.27}$$

Die Stöchiometrie der Reaktionsgleichung enthält dabei einen Parameter, der in der Literatur häufig als *stöchiometrischer Faktor der Koksverbrennung* (*stoichiometric ratio for char combustion*) bezeichnet wird. Dieser Parameter errechnet sich aus dem molaren Verhältnis der Reaktionsprodukte CO zu CO_2 gemäß Gleichung 6.28 (Zhou et al., 2005):

$$\Phi_\mathrm{C} = \frac{1 + 1/r_\mathrm{C}}{0{,}5 + 1/r_\mathrm{C}} \qquad \text{mit} \quad r_\mathrm{C} = \frac{n_\mathrm{CO}}{n_\mathrm{CO2}} \tag{6.28}$$

In einer früheren Arbeit von van der Lans et al. (van der Lans et al., 2000) wird das Verhältnis von CO zu CO_2 für die Oxidation von Biomassekoks als unveränderlich und in der Größenordnung 1 angenommen. Die darauf aufbauende Arbeit von Zhou et al. (Zhou et al., 2005) geht einen Schritt weiter und schlägt eine Temperaturabhängigkeit dieses Verhältnisses in Form eines Arrhenius-Ansatzes vor (siehe Gleichung 6.29), die dazu führt, dass bei höheren Partikeltemperaturen mehr CO als CO_2 gebildet wird. Während bei Raumtemperatur das Verhältnis genau 1 beträgt, errechnet sich für eine Partikeltemperatur von 1.300 K ein Verhältnis von etwa 1,33. Diese Approximations-Funktion wurde in das implementierte Modell des Koksabbrandes integriert. Eine ähnliche Funktion mit geringfügig unterschiedlichen Parametern wird auch von Kær in seiner Arbeit zur Simulation der Strohverbrennung auf Wanderrosten verwendet (Kær, 2005).

$$r_\mathrm{C} = 12 \exp\left(-\frac{3.300}{T_\mathrm{p}}\right) \tag{6.29}$$

Zur Beschreibung des Reaktionsverlaufes bewährt sich die Definition des Konversionsgrades des Koksabbrandes nach Janse et al. (Janse et al., 1998) in Gleichung 6.30. Hierfür ist der Koksmassenstrom bei Beginn des Abbrandes (Koksgehalt aus der Brennstoffanalyse), sowie nach theoretisch unendlicher Reaktionszeit zu berücksichtigen. Da davon ausgegangen wird, dass die reaktive Kokskomponente bei langer Verweilzeit vollständig ausbrennen kann, ist letzterer Wert mit Null zu bewerten; es bleibt lediglich der nichtreaktive Ascheanteil zurück, welcher nicht in die Definition einfließt.

$$X_{\mathrm{Koks}} = \frac{\dot{m}^{0}_{\mathrm{Koks}} - \dot{m}_{\mathrm{Koks}}}{\dot{m}^{0}_{\mathrm{Koks}} - \dot{m}^{\infty}_{\mathrm{Koks}}} = \frac{\dot{m}_{\mathrm{BS,TS}} w_{\mathrm{Koks,BS,TS}} - \dot{m}_{\mathrm{Koks}}}{\dot{m}_{\mathrm{BS,TS}} w_{\mathrm{Koks,BS,TS}}} \tag{6.30}$$

Die Reaktionsgleichung der Koksoxidation in Gleichung 6.27 legt nahe, dass die Abbrandgeschwindigkeit von den beiden Edukten Koks und Sauerstoff abhängt. Selbst bei nicht produktgehemmter chemischer Reaktion (wie an dieser Stelle angenommen wurde) haben damit auch die Produkte aufgrund der Verdünnung des Sauerstoffs in der Gasphase einen limitierenden Einfluss auf die Umsetzung des Kokses.

Wird nun in einem ersten Schritt die Oxidation des Kokses unter Bedingungen durchgeführt, die eine Limitierung durch Stoffübergang ausschließen, so befindet man sich im kinetikdominierten Regime und die Reaktionsgeschwindigkeit lässt sich gemäß Gleichung 6.31 beschreiben (z. B. Di Blasi et al., 1999a; van der Lans et al., 2000; Zhou et al., 2005).

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \dot{m}_{\mathrm{Koks}}}{\partial t}\right)_{\mathrm{Kinetik}} &= -k_{\mathrm{Koks,Kinetic}} p_{\mathrm{O2,Surface}} \dot{m}_{\mathrm{Koks}} \\ \text{mit} \quad k_{\mathrm{Koks,Kinetic}} &= A_{\mathrm{Koks}} \exp\left(-\frac{E_{\mathrm{A,Koks}}}{\mathrm{R}T_{\mathrm{p}}}\right) \end{aligned} \tag{6.31}$$

Die Abbrandkinetik in Gleichung 6.31 geht davon aus, dass der Abbrand von Koks aus biogenen Rohmaterialien als Einkomponenten-Reaktion zu beschreiben ist, was durch zahlreiche Literaturarbeiten bestätigt wird (Di Blasi et al., 1999a; Henrich et al., 1999; van der Lans et al., 2000; Zolin et al., 2000; Senneca et al., 2002b; Zolin et al., 2002; Shim et al., 2004; Zhou et al., 2005). Várhegyi et al. zeigen in einer ihrer Arbeiten von 2011 (Várhegyi et al., 2011b), dass der Abbrand von Koks aus Weizenstroh mit einem einstufigen Mechanismus hervorragend beschrieben werden kann. In einer früheren Arbeit von 2006 zeigt die gleiche Forschergruppe aber auch (Várhegyi et al., 2006), dass die Beschreibung des Abbrandes von Koks aus Maiskolben durch drei Parallelreaktionen bessere Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten liefert. Eine Reaktion ist dabei einer sauerstoffabhängigen Volatilisierung zuzurechnen, die beiden anderen beschreiben direkt die heterogene Koksoxidation. Eine genaue Auswertung enthüllt dabei, dass die Mittelwerte der kinetischen Parameter des Dreikomponenten-Modells sehr genau mit den Parametern des in dieser Arbeit verwendeten Einkomponenten-Modells übereinstimmen. Branca und Di Blasi zeigen in einer Arbeit (Branca et al., 2003), dass für die Beschreibung des Abbrandes von Koks verschiedener Holzarten ein Ansatz mit zwei parallelen Reaktionen (sauerstoffabhängige Volatilisierung sowie eigentliche Koksoxidation) erforderlich ist. Der Ansatz wird speziell für Koks, der bei milden Pyrolysetemperaturen gebildet wurde, empfohlen.

Die Oxidationsreaktion von Koks mit Sauerstoff wird in der Regel als Reaktion erster Ordnung hinsichtlich des Eduktes Sauerstoff betrachtet (Di Blasi et al., 1999a; van der Lans et al., 2000; Zhou et al., 2005), meist als Funktion des Partialdruckes an der Partikeloberfläche. Teilweise sind aber auch Arbeiten publiziert (Janse et al., 1998; Henrich et al., 1999; Senneca et al., 2002b; Várhegyi et al., 2011b), die je nach Herkunft des Kokses auch Reaktionsordnungen von kleiner als eins vorschlagen (0,4 bis 0,9). Shim et al. (Shim et al., 2004) erwähnen auch einen Einfluss des Konversionsgrades des Kokses auf die Reaktionsordnung hinsichtlich Sauerstoff. Mit steigendem Umsetzungsgrad des Kokses wird dort eine sinkende Reaktionsordnung berichtet (beginnend mit 0,7 und abfallend bis auf unter 0,5 bei Reaktionsende). Die Ergebnisse sind aber nicht frei von Diffusionslimitierung und können deshalb zur Kinetikbestimmung nur begrenzt eingesetzt werden. Rein mechanistisch betrachtet ist eine Reaktionsordnung hinsichtlich Sauerstoff zwischen Null und Eins zu erwarten, welche durch die ablaufenden Absorptions- und Desorptionsvorgänge determiniert wird. Nach Janse et al. (Janse et al., 1998) ist bei hohen Temperaturen die Chemisorption von Sauerstoff an die Koksoberfläche geschwindigkeitsdominierend und die Reaktionsordnung hinsichtlich Sauerstoff entsprechend Eins. Bei niedrigen Temperaturen ist die Reaktion des adsorbierten Sauerstoffs mit Kohlenstoff zu CO und CO_2 sowie deren Desorption geschwindigkeitsbestimmend und die Reaktionsrate hinsichtlich Sauerstoff entsprechend Null. Konkurrieren beide Mechanismen im mittleren Temperaturbereich, so ergibt sich eine mittlere globale Reaktionsrate zwischen den beiden Extrema. Auch die beiden genannten Reaktionen zu CO und CO_2 laufen je nach Temperatur verschieden schnell ab, sodass sich ein temperaturabhängiges Verhältnis beider Reaktionsprodukte einstellt (siehe Gleichung 6.29).

Hinsichtlich des Restgehaltes an unreagiertem Koks wird ebenfalls eine Reaktion erster Ordnung angenommen, die von den meisten Autoren empfohlen wird. Di Blasi et al. zeigen in einer ihrer Arbeiten (Di Blasi et al., 1999a), dass für Weizenstroh die Annahme einer Reaktionsordnung von etwa 1,5 hinsichtlich Koks unter geringfügiger Veränderung des Präexponentiellen Faktors (Aktivierungsenergie bleibt im Wesentlichen gleich) eine etwas bessere Beschreibung des Abbrandverhaltens gelingt. Die Arbeit zeigt aber recht deutlich, dass die verbesserten Ergebnisse den Modellierungs-Mehraufwand im betrachteten Betriebsbereich nicht rechtfertigen. Várhegyi et al. verwenden in einer ihrer Arbeiten über Maiskolben (Várhegyi et al., 2006) ein Modell mit einer etwas komplexeren Abhängigkeit der Reaktionsrate vom Reaktionsumsatz als das hier verwendete Potenzgesetz mit Reaktionsordnung 1. Auch dieser Ansatz ermöglicht eine etwas bessere Anpassung an experimentelle Ergebnisse führt aber ebenfalls zu einer weiteren Erhöhung der Modellkomplexität und der Anzahl an Modellparametern. In einer späteren Arbeit zeigen die Autoren (Várhegyi et al., 2011b), dass dieser erweiterte Ansatz für die Beschreibung von Weizenstroh nicht erforderlich ist und die Verwendung eines einfachen Potenzansatzes mit einer Reaktionsordnung von 1 vorzuziehen ist. Janse et al. erwähnen schließlich (Janse et al., 1998) ein Maximum der Reaktionsrate bei einem Konversionsgrad von etwa 20 bis 30 %, welches durch die Ausbildung eines Porennetzwerkes mit großer Oberfläche und dessen anschließenden Abbau im Zuge des Koksabbrandes erklärt wird, was bereits von Russel et al. (Russell et al., 1998) postuliert wurde. Zur Modellierung dieses Effektes empfehlen die Autoren ebenfalls eine etwas komplexere Funktion in Abhängigkeit von der Kokskonversion als das erwähnte Potenzgesetz. Da für die in dieser Arbeit verwendeten Brennstoffe kaum Analysen veröffentlich worden sind, wird empfohlen, in weiterführenden Arbeiten speziell den Einfluss der Restkoksmasse als auch den Einfluss des Sauerstoffpartialdruckes auf die Reaktionsrate zu untersuchen. In der vorliegenden Arbeit wird für beide Parameter ein Potenzgesetz erster Ordnung angenommen.

Hinsichtlich des Temperatureinflusses auf die Reaktionsgeschwindigkeit wird wie üblich ein Arrhenius-Ansatz gewählt, der im Gegensatz zur Reaktionsordnung aber detaillierterer Modellierung bedarf. Eine Arbeit von Di Blasi et al. (Di Blasi et al., 1999a) aber ganz speziell die Arbeiten von Zolin at al. (Zolin et al., 2000; Stenseng et al., 2001b; Zolin et al., 2001; Zolin et al., 2002) zeigen sehr deutlich, dass die Reaktivität des Kokses sehr wesentlich durch seine „Entstehungsgeschichte", also durch die charakteristische Volatilisierungstemperatur, bei der der reaktive Koks gebildet wurde, beeinflusst wird. Die Autoren haben sehr strukturierte TGA-Untersuchungen von Biomasse (konkret Weizenstroh) im kinetisch dominierten Bereich durchgeführt. Dabei konnte sehr klar gezeigt werden, dass Koks, welcher bei hohen Volatilisierungstemperaturen gebildet wird, eine geringere Reaktivität zeigt, also thermisch deaktiviert wird. Die Hauptgründe für dieses Verhalten (auch als *thermal annealing* bezeichnet) liegen in einer Änderung der Koksmorphologie und der Makroporosität mit steigender Temperatur (Williams et al., 2001), sodass ein Verlust and spezifischer Koksoberfläche sowie eine Reduktion der Anzahl oxidativ aktiver Stellen an der Oberfläche (nach Russell et al., 1998 beispielsweise Gitterfehlstellen, Kohlenstoffeckpunkte, funktionelle Gruppen mit Sauerstoff oder Wasserstoff, anorganische Verunreinigungen) zu verzeichnen ist. Auch die Reaktivität dieser aktiven Stellen ist bei höheren Temperaturen herabgesetzt (Zolin et al., 2002). Wie man sich die chemische Struktur und die Morphologie verschiedener Biomasse-Kokse vorzustellen hat, wird in den Arbeiten von Sharma et al. (Sharma et al., 2001; Sharma et al., 2002; Sharma et al., 2004) relativ gut dargestellt. Wie die spezifische Oberfläche und die Mikroporosität von Biomassekoks durch verschiedene thermische Einflussparameter verändert werden können, ist einer Arbeit von Raveendran und Ganesh (Raveendran et al., 1998) zu entnehmen. Shim et al. erwähnen in ihrer Arbeit (Shim et al., 2004) darüber hinaus, dass die Reaktivität auch mit steigendem Konversionsgrad abnimmt (da die Zahl der hochreaktiven Stellen sinkt). Über Änderungen der Zusammensetzung und der Struktur (amorphe und kristalline Phasen) von Biomassekoks im Zuge der Volatilisierung und der Koksoxidation geben die Arbeiten von Wornat et al. (Wornat et al., 1995) sowie von Rocca et al. (Rocca et al., 1999) Auskunft. Der übermäßige Aufbau einer Ascheschicht während des Koksabbrandes führt zu einer schlechteren Zugänglichkeit für Sauerstoff und damit ebenfalls zu einer Herabsetzung der Reaktionsgeschwindigkeit. Sehr wesentlich ist auch der Gehalt anorganischer Komponenten in der Biomasse, von denen bekannt ist, dass sie katalytische Wirkung für den Koksabbrand haben. Das sind speziell Kalium und Natrium aber auch Kalzium und Magnesium (Zolin et al., 2001). Bei höheren Temperaturen geht ein großer Teil dieser Komponenten durch Ausgasung in die Gasphase oder aber durch Reaktion zu inerten Verbindungen (z. B. Karbonaten) verloren, beziehungsweise verliert durch starke Dispersion in der organischen Matrix an Aktivität. Auch Stroh (Zolin et al., 2001) sowie Maiskolben (Várhegyi et al., 2006), welche aufgrund saurer Wäsche bei erhöhten Temperaturen (*leaching*) einen reduzierten Ascheanteil aufweisen, zeigen sowohl im Koksabbrand als auch bereits bei der Volatilisierung eine geringere Reaktivität. Diesen Effekten ist bereits bei der Dimensionierung und beim Engineering einer Verbrennungsanlage Rechnung zu tragen.

Da für Maisganzflanzen-Biomasse keine entsprechenden Arbeiten zur Koksreaktivität veröffentlich sind, wird für die vorliegende Arbeit stattdessen das Verhalten des Kokses von Weizenstroh verwendet, wie es von Zolin et al. in den entsprechenden Arbeiten untersucht wurde. Diese Annäherung scheint durchaus vertretbar, da die Ascheanalysen hinsichtlich anorganischer Spurenkomponenten für beide Biomassen in etwa gleich (vergleiche Zolin et al., 2001 und Hofbauer, 1992) und auch Elementar- und Immediatanalyse der Biomassen vergleichbar sind. Zolin et al. zeigen in ihren Arbeiten (Zolin et al., 2000; Zolin et al., 2001;

Zolin et al., 2002), dass die thermische Deaktivierung in der Modellbildung am besten durch eine Temperaturabhängigkeit des Präexponentiellen Faktors in Gleichung 6.31 beschrieben werden kann. Ihre Experimente haben gezeigt, dass die Aktivierungsenergie im Arrhenius-Ansatz in Abhängigkeit unterschiedlicher Volatilisierungstemperaturen keine eindeutige Tendenz aufweist und die Verwendung einer konstanten Aktivierungsenergie (Mittelwert) zulässig ist. Der Empfehlung der Autoren folgend wird von einer Aktivierungsenergie $E_{\mathrm{A,Koks}}$ von 135 kJ/mol ausgegangen. Dieser Wert für die Aktivierungsenergie wird in der Arbeit von Senneca et al. (Senneca et al., 2002b) sehr gut bestätigt. Wie bereits erwähnt wird dieser Wert auch durch die gewichteten Mittelwerte der drei Parallelreaktionen in der Arbeit von Várhegyi et al. über Maiskolbenkoks (Várhegyi et al., 2006) außerordentlich genau wiedergegeben. Bei Branca et al. (Branca et al., 2003) wird für die einstufige Oxidation von Koks aus Holz ein niedrigerer Wert von 115 kJ/mol vorgeschlagen, Janse et al. (Janse et al., 1998) ermitteln für Koks aus Pinienholz einen Wert von 125 kJ/mol. Für Weizenstrohkoks geben Várhegyi et al. (Várhegyi et al., 2011b) wiederum eine etwas höhere Aktivierungsenergie von 151 kJ/mol an. In Anbetracht der für die vorliegende Arbeit relevanten Brennstoffe stellt der verwendete Wert für die Aktivierungsenergie einen guten Kompromiss dar. Ein interessantes Faktum ist, dass dieser Wert auch sehr gut für die Oxidation von Koks aus verschiedenen fossilen Kohlen einsetzbar ist. So berichten Russel et al. (Russell et al., 1998) von einem Wert von 130 kJ/mol als Mittelwert vier verschiedener Steinkohlen und zeigen in einem Literatur-Review, dass dieser Wert auch von zahlreichen Autoren bestätigt werden kann.

Die von der Volatilisierungstemperatur abhängigen Präexponentiellen Faktoren werden durch einen Sauerstoffpartialdruck von 10132,5 Pa dividiert (die Versuche von Zolin et al. wurden unter atmosphärischem Druck bei einem Sauerstoffgehalt von 10 vol% durchgeführt) um einheitenkonforme Parameter zu erhalten. Diese Parameter sind in einem Bereich der Volatilisierungstemperatur von 973 bis 1673 K verfügbar und wurden zur Modellimplementierung mit einer Näherungsfunktion regressiert (siehe Gleichung 6.32). Da das verwendete Polynom nur innerhalb, nicht aber außerhalb des Gültigkeitsbereiches verlässliche Werte liefern kann, wurde die Funktion unterhalb von 1000 K und oberhalb von 1520 K limitiert (auf die Funktionswerte für die jeweiligen Temperaturen). Eine tiefergehende Modellierung würde nach Einschätzung von Zolin et al. (Zolin et al., 2000) ein genaueres Wissen über den Zeit/Temperatur-Verlauf während der Volatilisierung voraussetzen, welches für prozesstechnische Anwendungen wie die vorliegende nicht ohne weiteres zur Verfügung steht.

$$A_{\mathrm{Koks}} = A_{\mathrm{Koks}}\left(T_{\mathrm{Vol}}\right) = \begin{cases} 1{,}44773460 \quad \text{für} \quad T_{\mathrm{Vol}} < 1.000\,\mathrm{K} \\ \exp\begin{pmatrix} 4{,}3349 \cdot 10^{-10}\, T_{\mathrm{Vol}}^{4} - 2{,}1935 \cdot 10^{-6}\, T_{\mathrm{Vol}}^{3} \\ + 4{,}0778 \cdot 10^{-3}\, T_{\mathrm{Vol}}^{2} - 3{,}3089 T_{\mathrm{Vol}} + 991{,}48 \end{pmatrix} \\ 0{,}00273239 \quad \text{für} \quad T_{\mathrm{Vol}} > 1.520\,\mathrm{K} \end{cases} \tag{6.32}$$

Die aus der Literatur ermittelten Präexponentiellen Faktoren für rohes und gewaschenes Weizenstroh (Zolin et al., 2001) sind gemeinsam mit den Ergebnissen der Modellbeschreibung aus Gleichung 6.32 in Abhängigkeit von der Volatilisierungstemperatur in Abbildung 6-18 dargestellt. Das Diagramm macht deutlich, dass die Reaktivität des Kokses um mehr als 3 Größenordnungen abnimmt, wenn die Volatilisierungstemperatur von 700 °C auf 1.400 °C gesteigert wird. Auch die Reaktivität des gewaschenen Strohs liegt für Temperaturen unter 1.200 °C stets deutlich unter jener der unbehandelten Biomasse. Die thermische Deaktivierung ist bei unbehandeltem Stroh aber viel deutlicher ausgeprägt als bei gewa-

schenem Stroh; Zolin et al. führen in ihrer Arbeit (Zolin et al., 2002) weiters aus, dass die Koksdeaktivierung für die untersuchte Biomasse auch viel stärker ausgeprägt ist als jene konventioneller fossiler Brennstoffe. Für den in der vorliegenden Arbeit relevanten Temperaturbereich ist die Vorhersagequalität des entwickelten Modells zur Beschreibung des Präexponentiellen Faktors ausreichend; durch die beidseitige Limitierung werden unphysikalische Werte während des Iterationsverlaufes vermieden.

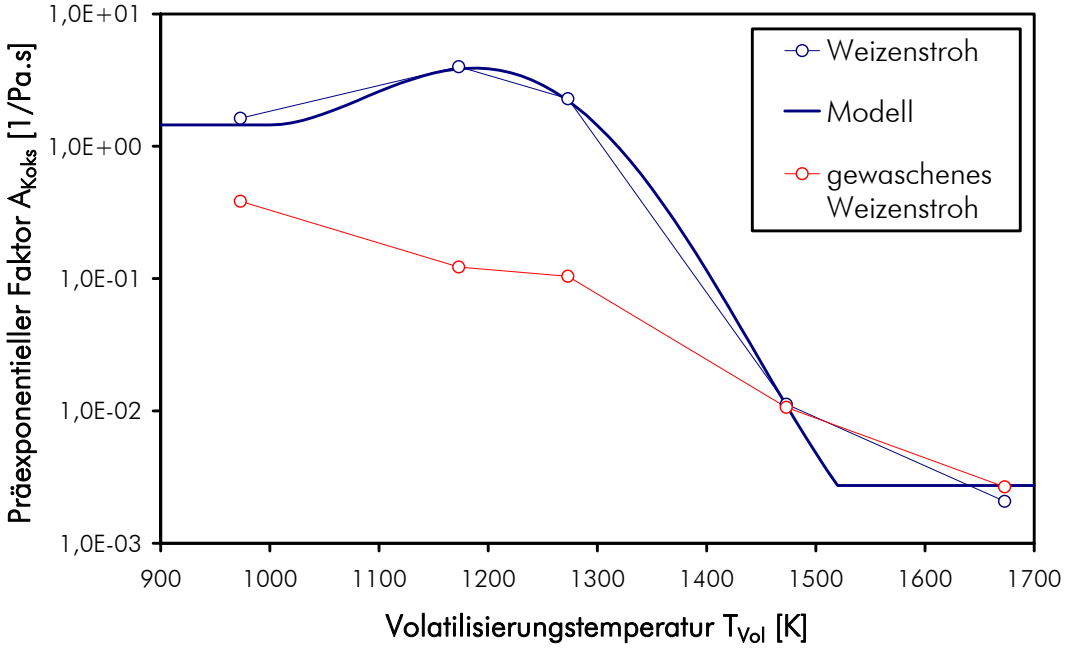


Abbildung 6-18: Darstellung der thermischen Deaktivierung der Koksoxidation anhand der Abhängigkeit des Präexponentiellen Faktors im Arrhenius-Ansatz von der Volatilisierungstemperatur (experimentelle Werte nach Zolin et al., 2001, selbst entwickeltes Modell nach Gleichung 6.32)

Auch bei Di Blasi et al. (Di Blasi et al., 1999a) ist eine Untersuchung zur thermischen Deaktivierung des Kokses von Weizenstroh zu finden. Die Untersuchungen dort wurden unter Bedingungen durchgeführt, die maximale Koksreaktivität zur Folge haben (sehr geringe Volatilisierungstemperatur, große Aufheizraten). Auch dort zeigt sich die Deaktivierung im Wesentlichen in einer Reduktion des Präexponentiellen Faktors im Arrhenius-Ansatz. Die Autoren ermitteln aber eine deutlich niedrigere Aktivierungsenergie von etwa 75 kJ/mol, sodass die Ergebnisse mit jenen der Arbeiten von Zolin et al. nicht direkt zu vergleichen sind.

Wird in einem zweiten Schritt der Koksabbrand bei sehr schneller Kinetik betrachtet (z. B. bei hoher Temperatur), so tritt eine Limitierung durch den Stofftransport des Reaktionspartners Sauerstoff an die Partikeloberfläche auf. Die Reaktionsgeschwindigkeit kann dann in Abhängigkeit des Stofftransportes (Filmdiffusion) beschrieben werden. Eine Möglichkeit zur Modellierung des Stoffüberganges in durchströmten Festbetten wurde vor einiger Zeit in zwei Arbeiten von van der Lans et al. sowie von Zhou et al. (van der Lans et al., 2000; Zhou et al., 2005) vorgeschlagen und deren Anwendbarkeit bei der Simulation der Verbrennung von Weizenstroh eindrucksvoll demonstriert. Aus diesem Grund sowie aufgrund der mathematisch relativ einfachen Implementierung wurde dieser Ansatz auch für die vorliegende Arbeit gewählt. Die Modellierung bedient sich dabei des sogenannten *Colburn-Faktors J* (oft auch *Chilton-Colburn-Faktor* nach den beiden Autoren, die diese dimensionslose Kennzahl 1934

erstmals definierten), welcher den Stoffübergang (dargestellt durch die dimensionslose Sherwoodzahl) ins Verhältnis zur Reynoldszahl und zu fluiddynamischen Eigenschaften des umströmenden Gases (in Form der Schmidtzahl) setzt. Die Definition des Colburn-Faktors ist in Gleichung 6.33 gegeben (van der Lans et al., 2000; Zhou et al., 2005). Sherwood- und Reynoldszahl beziehen sich dabei auf einen charakteristischen Partikeldurchmesser sowie auf die Gasleerrohrgeschwindigkeit.

$$J = \frac{Sh_\mathrm{d}}{Sc^{1/3} Re_\mathrm{d}} \tag{6.33}$$

Die in der Definition des Colburn-Faktors verwendeten dimensionslosen Kenngrößen sind in Gleichung 6.34 zusammengefasst (Dwivedi et al., 1977; van der Lans et al., 2000; Zhou et al., 2005). Ist der Wert des Colburn-Faktors für einen bestimmten Prozess bekannt, lässt sich daraus also der Stoffübergangskoeffizient (Filmdiffusionskoeffizient) $k_\mathrm{Koks,Diffusion}$ ermitteln.

$$Sh_\mathrm{d} = \frac{k_\mathrm{Koks,Diffusion} d_\mathrm{p}}{D} \qquad Sc = \frac{\eta_\mathrm{Gas}}{\rho_\mathrm{Gas} D} \qquad Re_\mathrm{d} = \frac{v_\mathrm{s,Gas} d_\mathrm{p} \rho_\mathrm{Gas}}{\eta_\mathrm{Gas}} \tag{6.34}$$

In einer relativ alten Arbeit von Dwivedi und Upadhyay (Dwivedi et al., 1977) wurden zahlreiche Ergebnisse früherer Untersuchungen neu analysiert und eine allgemeingültige Beschreibung der Abhängigkeit des Colburn-Faktors von der Strömungsform (Reynoldszahl) in Festbettschichten aufgestellt. Der von den Autoren vorgeschlagene Zusammenhang ist in Gleichung 6.35 gegeben. Mit dieser Korrelation lassen sich die experimentellen Stoffübergangskoeffizienten der untersuchten Literaturarbeiten, welche sich über 6 Größenordnungen und einen Bereich der Reynoldszahl von etwa 10 bis 100.000 erstrecken, mit einer durchschnittlichen Abweichung von knapp 18 % vorhersagen (Dwivedi et al., 1977).

$$\varepsilon_\mathrm{Bett} \cdot J = \frac{0{,}765}{Re_\mathrm{d}^{0{,}82}} + \frac{0{,}365}{Re_\mathrm{d}^{0{,}386}} \tag{6.35}$$

Führt man nun die Definitionen der dimensionslosen Parameter in der Colburnkorrelation zusammen (Gleichungen 6.33, 6.34 und 6.35) und gruppiert um, so lässt sich der Stoffübergangskoeffizient im filmdiffusionsdominierten Regime nach Gleichung 6.36 ermitteln. Es ist festzuhalten, dass für jede Komponente des Brennstoffes (Kolben, Stängel, Blatt) ein eigener Stoffübergangskoeffizient (mit jeweils eigener Reynoldszahl aufgrund eigener charakteristischen Länge) zu ermitteln und daraus ein oberflächengewichteter Mittelwert zu bilden ist. Neben der Dichte und Viskosität des Gases erfordert diese Gleichung auch Kenntnis des molekularen Diffusionskoeffizienten von Sauerstoff in der Gasmischung. In der vorliegenden Arbeit wird hierfür das Modell von Wilke und Lee verwendet (Poling et al., 2001), welches in Kapitel 14.1.1.2 erläutert wird.

$$k_\mathrm{Koks,Diffusion} = \frac{D^{2/3} \cdot v_\mathrm{s,Gas} \cdot \rho_\mathrm{Gas}^{2/3}}{\eta_\mathrm{Gas}^{2/3} \cdot \varepsilon_\mathrm{Bett}} \cdot \left(\frac{0{,}765}{Re_\mathrm{d}^{0{,}82}} + \frac{0{,}365}{Re_\mathrm{d}^{0{,}386}} \right) \tag{6.36}$$

Mit diesem Stoffübergangskoeffizienten sowie der Definition des stöchiometrischen Faktors der Koksverbrennung (Gleichung 6.28) lässt sich die Reaktionsrate des Koksabbrandes

im filmdiffusionslimitierten Regime für ein Kontrollvolumen V_{Zelle} wie folgt darstellen (van der Lans et al., 2000; Kær, 2005; Zhou et al., 2005):

$$\left(\frac{\mathrm{d}\dot{m}_{\text{Koks}}}{\mathrm{d}t}\right)_{\text{Diffusion}} = -k_{\text{Koks,Diffusion}} \cdot \frac{p_{\text{O2,Bulk}} - p_{\text{O2,Surface}}}{\mathrm{R} \cdot T_{\text{p}}} \cdot \Phi \cdot \mathrm{M}_{\text{Koks}} \cdot \left(A_{\text{spez}}\right)_{\text{m}} \cdot V_{\text{Zelle}} \tag{6.37}$$

Die Reaktionsrate ist neben dem Stoffübergangskoeffizienten abhängig von der treibenden Konzentrationsdifferenz (hier die Differenz der Partialdrücke des Sauerstoffs in der Kernströmung und an der Partikeloberfläche), dem stöchiometrischen Faktor, der Molmasse der Kokskomponente, einer mittleren charakteristischen spezifischen Oberfläche der Partikelschüttung sowie vom Rauminhalt des Kontrollvolumens. Thunman et al. zeigen in einer Arbeit (Thunman et al., 2001), dass fertig ausgegaster Holzkoks einen Kohlenstoffgehalt von zumindest 92 % (daf) aufweist. Ähnliche Daten sind auch den Arbeiten von Di Blasi et al. (Di Blasi et al., 1999c) und Henrich et al. (Henrich et al., 1999) zu entnehmen. Aus diesem Grund wird, wie in vielen anderen Literaturarbeiten auch, an dieser Stelle angenommen, dass die Molmasse des Kokses jener von molekularem Kohlenstoff (12,011 g/mol) entspricht. Die mittlere spezifische Oberfläche bezieht sich auf die geometrische Oberfläche der Brennstoffpartikel (van der Lans et al., 2000); die mikro- und makroporöse Struktur der Kokspartikel sowie deren Verlauf im Zuge der Koksumsetzung wird gegebenenfalls über die kinetisch limitierte Reaktionsrate modelliert. Die Ermittlung der spezifischen Oberfläche ist Kapitel 14.1.2.3 zu entnehmen. Die allgemeine Gaskonstante in Gleichung 6.37 ist mit der Einheit J/kmol.K einzusetzen.

Die beiden Gleichungen 6.31 und 6.37 können nach den Sauerstoffpartialdrücken umgeformt werden:

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial\dot{m}_{\text{Koks}}}{\partial t}\right)_{\text{Kinetik}} \cdot \frac{1}{k_{\text{Koks,Kinetic}}} \cdot \frac{1}{\dot{m}_{\text{Koks}}} = -p_{\text{O2,Surface}} \\
&\left(\frac{\mathrm{d}\dot{m}_{\text{Koks}}}{\mathrm{d}t}\right)_{\text{Diffusion}} \cdot \frac{1}{k_{\text{Koks,Diffusion}}} \cdot \frac{\mathrm{R} \cdot T_{\text{p}}}{\Phi \cdot \mathrm{M}_{\text{Koks}} \cdot \left(A_{\text{spez}}\right)_{\text{m}} \cdot V_{\text{Zelle}}} = p_{\text{O2,Surface}} - p_{\text{O2,Bulk}}
\end{aligned} \tag{6.38}$$

Werden beide Gleichungen durch Addition kombiniert, so kann der, a priori unbekannte, Sauerstoffpartialdruck an der Partikeloberfläche eliminiert werden:

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial\dot{m}_{\text{Koks}}}{\partial t}\right)_{\text{Kinetik+Diffusion}} \cdot \left(\frac{1}{k_{\text{Koks,Kinetic}}} \cdot \frac{1}{\dot{m}_{\text{Koks}}}\right. \\
&\left. + \frac{1}{k_{\text{Koks,Diffusion}}} \cdot \frac{\mathrm{R} \cdot T_{\text{p}}}{\Phi \cdot \mathrm{M}_{\text{Koks}} \cdot \left(A_{\text{spez}}\right)_{\text{m}} \cdot V_{\text{Zelle}}}\right) = -p_{\text{O2,Bulk}}
\end{aligned} \tag{6.39}$$

Weitere Umformung sowie die Verwendung eines effektiven Stoffübergangskoeffizienten, welcher den kinetischen und den diffusionsdominierten Stoffübergangskoeffizienten kombiniert, führt direkt auf die Reaktionsrate der Koksverbrennung im kombinierten kinetischen und filmdiffusionsdominierten Regime (Gleichung 6.40).

$$\left(\frac{\partial \dot{m}_{\text{Koks}}}{\partial t}\right)_{\text{Kinetik+Diffusion}} = -k_{\text{Koks,effektiv}} \cdot p_{\text{O2,Bulk}} \cdot \dot{m}_{\text{Koks}}$$

$$mit \quad k_{\text{Koks,effektiv}} = \frac{1}{\frac{1}{k_{\text{Koks,Kinetic}}} + \frac{1}{k_{\text{Koks,Diffusion}}} \cdot \frac{\dot{m}_{\text{Koks}}}{M_{\text{Koks}}} \cdot \frac{R \cdot T_p}{\Phi \cdot \left(A_{\text{spez}}\right)_m \cdot V_{\text{Zelle}}}} \tag{6.40}$$

Die Beschreibungsgleichung für den effektiven Stoffübergangskoeffizienten ist dabei typisch für die Linearkombination zweier oder mehrerer in Serie geschalteter Widerstände des Stoff- oder Wärmeaustausches und wird in dieser Form von zahlreichen Autoren verwendet (van der Lans et al., 2000; Grammelis et al., 2005; Kær, 2005; Zhou et al., 2005). Eine ähnliche Koppelung von Kinetik und Diffusion wird auch bei Gómez-Barea et al. verwendet (Gómez-Barea et al., 2005).

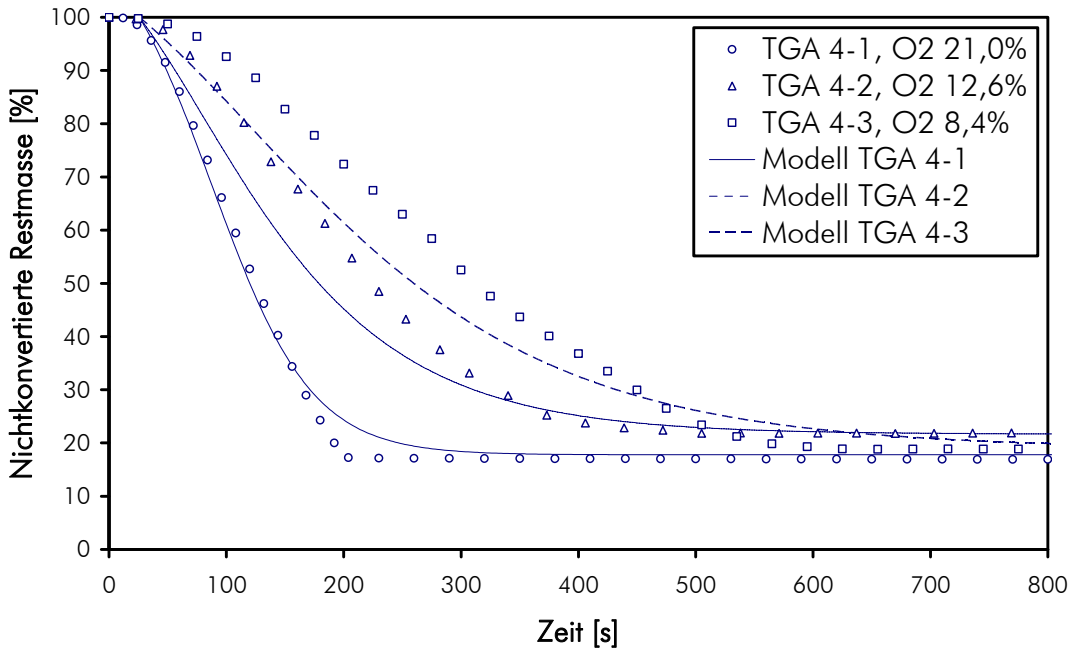


Abbildung 6-19: TGA-Kurven für Koks aus dem Biomassebrennstoff Mais-Ganzpflanze in oxidierender Atmosphäre im Vergleich zu Ergebnissen des Koksabbrand-Modells - nichtkonvertierte Restmasse in Abhängigkeit von der Zeit bei einem Spülgas-Volumenstrom von 100 Nml/min, einer Temperatur von 800 °C und verschiedenen Sauerstoffgehalten

Der Versuch der Beschreibung der realen TGA-Ergebnisse des Koksabbrandes mit dem vorgestellten gekoppelten Modell ist aufgrund der sehr beschränkten Kenntnis über die wahren Zustände im TGA-Ofen schwierig. Für eine präzise Modellierung des TGA-Versuches wäre eine vollständige CFD-Untersuchung unter Anwendung des gekoppelten Modells erforderlich, was nicht im Fokus der vorliegenden Arbeit lag. Um dennoch eine Aussage darüber zu erhalten, ob die erhaltenen TGA-Resultate mit dem verwendeten Modellansatz zumindest qualitativ zu beschreiben sind, ist eine Abschätzung der relevanten Modell-Eingangsparameter für die reale Situation der TGA-Experimente erforderlich. Diese Abschätzung umfasst im Wesentlichen die wirksame Nusselt-Zahl und damit den Wärmeübergang für das verbrennende Koksbett im TGA-Tiegel. Darüber hinaus ist eine repräsentative Strömungsgeschwindigkeit des Gases über dem Koksbett in Abhängigkeit des Spülgas-Volumenstroms abzuschätzen. Diese Angaben wurden basierend auf theoretischen Überle-

gungen angenommen und geringfügig adaptiert um den TGA-Verlauf des Koksabbrandes unter Luftatmosphäre (20,95 vol% O_2) für den hohen und den niedrigen Spülgas-Volumenstrom möglichst optimal abzubilden. Zusätzlich wurde noch eine Totzeit von 25 (hoher Spülgas-Volumenstrom) bzw. 45 Sekunden (niedriger Spülgas-Volumenstrom) zur Kurvenanpassung eingeführt, welche die Zeitverzögerung zwischen der Umschaltung der Gasströme und dem Einsetzen der Reaktion abbilden sollte. Mit diesen Voraussetzungen kann dann das implementierte Modell zur Beschreibung aller durchgeführten TGA-Experimente zum Koksabbrand angewendet werden. Dabei ist anzumerken, dass für die Versuche bei zwei unterschiedlichen Spülgas-Volumenströmen die relevanten Modell-Eingangsparameter Gas-Strömungsgeschwindigkeit und Nusselt-Zahl jeweils konstant gehalten werden und im Wesentlichen die Variation des Sauerstoffpartialdruckes analysiert wird. Die Ergebnisse dieser Modellbeschreibung sind in Abbildung 6-19 für den hohen und in Abbildung 6-20 für den niedrigen Spülgas-Volumenstrom dargestellt.

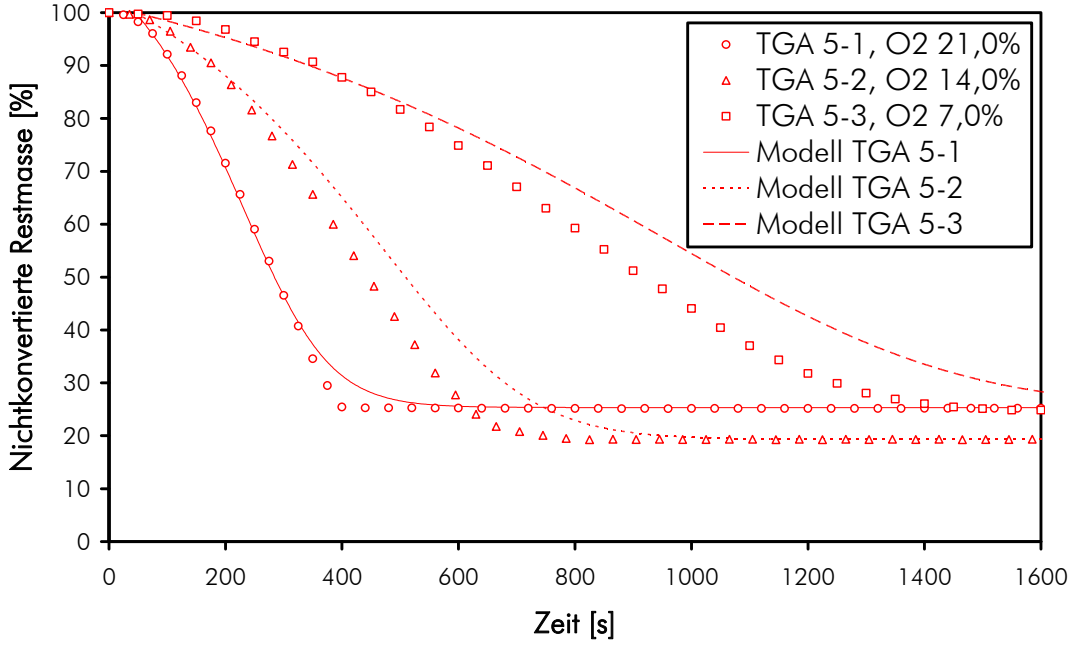


Abbildung 6-20: TGA-Kurven für Koks aus dem Biomassebrennstoff Mais-Ganzpflanze in oxidierender Atmosphäre im Vergleich zu Ergebnissen des Koksabbrand-Modells - nichtkonvertierte Restmasse in Abhängigkeit von der Zeit bei einem Spülgas-Volumenstrom von 30 Nml/min, einer Temperatur von 800 °C und verschiedenen Sauerstoffgehalten

Die erste Auswertung zeigt, dass die Beschreibung des Sauerstoffeinflusses auf den Koksabbrand mit dem implementierten Koksabbrand-Modell hervorragend ist, speziell wenn in Betracht gezogen wird, dass hier lediglich ein der Literatur entnommenes und nicht an den vorliegenden Brennstoff angepasstes Modell verwendet wird. Auch der Einfluss unterschiedlicher Spülgas-Volumenströme auf das Abbrandverhalten wird sehr gut wiedergegeben. Die Versuche mit hohen Sauerstoffgehalten zeigen ein sehr abruptes Ende des Abbrandvorganges, welches so vom Modell nicht wiedergegeben werden kann. Das Modell sagt ein gleitendes Ende der Oxidation voraus wodurch die typische Koksabbrandzeit mehr oder weniger deutlich überschätzt wird. Bei niedrigeren Sauerstoffgehalten zeigen auch die experimentellen Ergebnisse diesen gleitenden Übergang zum konstanten Gewicht der inerten Aschefraktion und die Beschreibung des Kurvenverlaufs ist deutlich besser. Mit dem verwendeten Koks-

abbrandmodell kann das, in den selbst durchgeführten TGA-Experimenten beobachtete, Verhalten qualitativ und zum großen Teil auch quantitativ sehr gut beschrieben werden.

Hinsichtlich der Massenbilanz gasförmiger Komponenten stellt die Koksverbrennung wie bereits erwähnt eine Senke für Sauerstoff und eine Quelle für Kohlenmonixid und Kohlendioxid dar. Für die Energiebilanz ist die Koksverbrennung als Quelle thermischer Energie aufzufassen. Hinsichtlich der Umwandlungsenthalpie der Koksoxidation ΔH_{Koks}, sprich dem Heizwert der reaktiven Koksfraktion, sind relativ wenige belastbare Literaturangaben verfügbar. Bei Thunman et al. (Thunman et al., 2001) wird Holzkoks thermisch nahezu wie reiner Kohlenstoff (Graphit) betrachtet, wodurch sich obere Heizwerte zwischen 32,5 und 34 MJ/kg ergeben. Für Koks aus Stroh oder Maisganzpflanzen erscheint dieser Wert etwas zu hoch. Raveendran und Ganesh haben in einer Arbeit (Raveendran et al., 1996a) die oberen Heizwerte von Koks aus verschiedenen Biomassen bestimmt und erhalten Werte zwischen 24,2 (Holz) über 26,4 (Maiskolben) bis zu 31,0 MJ/kg (Reisschalen) jeweils bezogen auf die aschefreie Substanz. Für die vorliegende Arbeit wird ein Wert von 29,6 MJ/kg Koks (daf) für ΔH_{Koks} angenommen. Die Reaktion ist exotherm, der Wert für die Umwandlungsenthalpie ist also negativ.

6.7.2.4 Modell zur Beschreibung der Stickstoffoxid-Bildung

Wie bereits in Kapitel 3.1.2.2 abgeleitet, ist für die Bildung von Stickstoffoxiden in der vorliegenden Arbeit lediglich der Weg des im Brennstoff enthaltenen Stickstoffs von Interesse. Die Bildung von thermischem oder promptem NO_x kann aufgrund der Reaktionsbedingungen als vernachlässigbar eingestuft werden. Für Verhältnisse, bei denen aufgrund hoher Temperaturen die Bildung von NO_x aus dem in der Verbrennungsluft enthaltenen Stickstoff nicht ausgeschlossen werden kann, liefern Saario et al. in ihrer Arbeit (Saario et al., 2005) ein gutes Beispiel der Implementierung des Zeldovich-Mechanismus in eine komplexe Simulation.

Es sind heute zahlreiche Literaturarbeiten zur Freisetzung des Brennstoff-Stickstoffs in technischen Verbrennungssystemen verfügbar; die Mechanismen sind (zumindest für die Simulation im ingenieurwissenschaftlichen Bereich) ausreichend erforscht und dokumentiert. Historisch gesehen wurde zunächst die Verbrennung von Kohle untersucht. Pershing et al. (Pershing et al., 1979) haben bereits relativ früh die Stickoxidbildung bei der Kohleverbrennung untersucht und dabei auch die Phasen Volatilisierung und Koksabbrand unterschieden. Darauf aufbauend haben zahlreiche Autoren generell die Freisetzung stickstoffhaltiger Gaskomponenten während der Volatilisierung (Perry et al., 2000; Chang et al., 2003) sowie während des Koksabbrandes verschiedener Kohlen (Lázaro et al., 1996; Wang et al., 1996; Thomas, 1997; Zhang et al., 2001) genauer untersucht und als wesentlichste Vorläufersubstanzen (oft auch als Leitspezies) NH_3 und HCN identifiziert. Die Mechanismen der Bildung von N_2 und NO aus dem Stickstoff im Brennstoff über diese temporären Zwischenprodukte wurden in verschiedenen Detailtiefen untersucht und publiziert (u.a. Friebel et al., 1999; Feng et al., 2003). Eine kombinierte Modellbeschreibung von Verbrennung und Stickstoffoxid-Bildung für die CFD-Simulation eines kohlestaubgefeuerten Kessels wird beispielsweise bei Xu et al. (Xu et al., 2000) angewandt. Gute Abrisse über den Stand des Wissens in diesem Bereich geben Review-Beiträge, vor allem die Arbeiten von Leppälahti et al. (Leppälahti et al., 1995) und Hill et al. (Hill et al., 2000), die auch die Anwendung der im Bereich der Kohleverbrennung erforschten Mechanismen auf den neuen und an Bedeutung gewinnenden

Bereich der Biomasseverbrennung diskutieren. Die Implementierung dieser Mechanismen für eine konkrete Biomasseanwendung und die Ermittlung der charakterisierenden NO_x-Bildungsparameter wird beispielsweise in den Arbeiten von Liu et al. (Liu et al., 2002a; Liu et al., 2003) demonstriert.

Zahlreiche Literaturarbeiten zeigen, dass die Verteilung der gebildeten NO_x-Vorläufersubstanzen sehr wesentlich davon abhängt, wie der Brennstoff-Stickstoff in der organischen Struktur des Brennstoffes eingebettet ist. Hier existieren zwischen fossilen Brennstoffen und Biomassebrennstoffen erwartungsgemäß deutliche Unterschiede, aber auch zwischen verschiedenen Arten der Biomasse (vor allem zwischen holzartigen, halmgutartigen oder ölreichen Biomassen) sind Unterschiede im NO_x-Bildungsverhalten feststellbar. Zur Aufklärung der Struktureinflüsse haben verschiedene Autoren Untersuchungen mit reinen Modellsubstanzen durchgeführt (z.B. Sugiyama et al., 1978; Hämäläinen et al., 1994; Hansson et al., 2004). In der Arbeit von Becidan et al. (Becidan et al., 2007a) wurden neben realen biogenen Brennstoffen auch Modellsubstanzen untersucht. Die Autoren zeigen, dass auch bei Biomasse die wesentlichsten NO_x-Vorläufersubstanzen NH_3 und HCN sind und haben deren Bildungscharakteristik in Abhängigkeit der organischen Struktur beschrieben (Pyrrol-, Pyridin- und Aminosäurenverbindungen), in die der Brennstoff-Stickstoff eingebettet ist.

Für die vorliegende Untersuchung sind speziell die Arbeiten von Winter et al. (Winter et al., 1999) und Zhou et al. (Zhou et al., 2006) interessant, die jeweils das Stickstoffoxid-Bildungsverhalten von Weizenstroh unter typischen Bedingungen einer Festbett- oder Rostverbrennung untersucht haben. Die Verbrennungsbedingungen (Rauchgasrezirkulationsrate, Sauerstoffpartialdruck und Temperatur) sind mit der vorliegenden Arbeit nahezu ident und die Werte beider Veröffentlichungen stimmen ebenfalls sehr gut überein. Die Arbeit von Winter et al. berücksichtigt als NO_x-Vorläufersubstanz zusätzlich noch N_2O, jene von Zhou et al. berücksichtigt statt N_2O zusätzlich noch HCNO. Da beide Komponenten aber eher eine untergeordnete Rolle spielen und während der Verbrennung sehr schnell weiter umgesetzt werden, wird an dieser Stelle der Empfehlung von Hill et al. (Hill et al., 2000) gefolgt, die aus einem Querschnitt zahlreicher Literaturstellen die alleinige Berücksichtigung von NH_3 und HCN als Vorläufersubstanzen vorschlagen. Zusätzlich sind noch N_2 und NO zu berücksichtigen, sodass der im Brennstoff enthaltene Stickstoff insgesamt zu vier Gaskomponenten umgewandelt werden kann. Die Arbeiten von Winter et al. (Winter et al., 1999) zeigen, dass die Umwandlung des Brennstoff-Stickstoffs im relevanten Temperaturbereich zwischen 750 und 900 °C nahezu konstant ist (lediglich die Bildung von NH_3 wird bei niedrigeren Temperaturen etwas bevorzugt), weshalb im implementierten Modell der vorliegenden Arbeit kein Temperatureinfluss auf das Bildungsverhalten berücksichtigt wird. In diesem Temperaturbereich liegt die Umwandlung von Brennstoff-Stickstoff in NO aber auf einem Maximum. Der Sauerstoffpartialdruck während der Stickstoff-Freisetzung hat einen stärkeren Einfluss als die Temperatur und bei niedrigem Sauerstoffgehalt erfolgt die Umwandlung des Brennstoff-Stickstoffs in geringerem Ausmaß zu NO und verstärkt in Richtung NH_3 und HCN. Für die vorliegende Arbeit wird vereinfachend der Parametersatz aus der Arbeit von Winter et al. (Winter et al., 1999) für einen konstanten Sauerstoffpartialdruck von 10 kPa verwendet. Dieser Satz von Parametern des implementierten Stickstoffoxid-Bildungsmodells ist in Tabelle 6-8 dargestellt. Zunächst wird der im Brennstoff enthaltene Stickstoff aufgeteilt in einen Anteil, der während der Volatilisierung freigesetzt wird (N_{vol}) und einen, der während des Koksabbrandes freigesetzt wird (N_{Koks}). Für diese einzelnen Phasen wird weiters das Verhältnis der entstehenden gasförmigen Stickstoff-Spezies festgelegt. Dabei wird genauso wie bei Winter et

al., Zhou et al. und Klason et al. (Winter et al., 1999; Zhou et al., 2006; Klason et al., 2007) angenommen, dass der gesamte Brennstoff-Stickstoff zu gasförmigen Komponenten umgesetzt wird und in der nichtreaktiven Aschefraktion kein Stickstoff mehr enthalten ist. Jener Brennstoff-Stickstoff, der nicht zu NH_3, HCN oder NO umgesetzt wird, wird als N_2 freigesetzt. Die verwendeten Konversionsparameter werden sehr gut durch die Arbeiten von Zhou et al. über Weizenstroh (Zhou et al., 2006) sowie von Saenger et al. über Kaffeefrucht-Abfälle (Saenger et al., 2001) bestätigt. Da für die Modellierung des Koksabbrandes davon ausgegangen wurde, dass die reaktive Kokskomponente ausschließlich aus Kohlenstoff besteht, musste das Modell des Koksabbrandes noch um die Elemente Stickstoff und Wasserstoff erweitert werden. Nur durch diese Erweiterung ergibt sich die bilanztechnische Möglichkeit, neben N_2 und NO (hierfür wird Sauerstoff verbraucht) auch NH_3 und HCN freizusetzen.

Tabelle 6-8: NO_x-Bildungscharakteristik des verwendeten Primärbrennstoffs für die Implementierung im Modell der Stickstoffoxid-Emissionsbildung adaptiert von Winter et al. (Winter et al., 1999)

Parameter	Einheit	Wert
N-Gehalt im Brennstoff	[wt%, TS]	1,05
N/C-Verhältnis Rohbrennstoff	[kg/kg]	0,023
Volatiler Stickstoff N_{Vol}	[kg/kg]	0,660
Koks-Stickstoff N_{Koks}	[kg/kg]	0,340
Volatilisierung (N/N_{Vol})		
N zu NH_3	[kg/kg]	0,016
N zu HCN	[kg/kg]	0,076
N zu NO	[kg/kg]	0,151
N zu N_2	[kg/kg]	0,757
Koksabbrand (N/N_{Koks})		
N zu NH_3	[kg/kg]	0,000
N zu HCN	[kg/kg]	0,015
N zu NO	[kg/kg]	0,085
N zu N_2	[kg/kg]	0,900

Es zeigt sich, dass HCN und speziell auch NH_3 vorwiegend während der Volatilisierung freigesetzt werden (nach Winter et al. auch während der in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigten sekundären Teerspaltung) und während des Koksabbrandes vorwiegend molekularer Stickstoff entsteht, welcher für die Bildung von Brennstoff-NO_x unkritisch ist. In Summe hat also der Volatilisierungsvorgang den stärksten Einfluss auf das NO_x-Bildungspotential der Verbrennungstechnologie. Zusammenfassend ist festzuhalten, dass der vorwiegende Teil des Stickstoffs im vorliegenden Modell als N_2 freigesetzt wird, ein nicht unerheblicher Teil auch direkt als NO. Die Freisetzung der Vorläufersubstanzen NH_3 und HCN ist von geringerer Bedeutung. Diese Verteilung geht auch aus Abbildung 6-21 hervor.

Hinsichtlich der Ausgasungsraten der Stickstoff-Komponenten wird in der Literatur ein sehr einfacher Weg vorgeschlagen. Die Arbeiten von Winter et al. und Zhou et al. (Winter et al., 1999; Zhou et al., 2006), beide basierend auf experimentellen Ergebnissen zeigen, dass die Ausgasungsrate des volatilen Stickstoffs während der gesamten Volatilisierung und die Ausgasungsrate des Koks-Stickstoffs während des gesamten Koksabbrandes proportional zur jeweiligen Umwandlungsrate des Kohlenstoffs ist. Dies wird auch durch den Übersichtsbeitrag von Hill et al. (Hill et al., 2000) bestätigt. Die Freisetzung von Kohlenstoff und Stickstoff

laufen also während der gesamten Feststoffverbrennung parallel mit gleichen spezifischen Raten ab, der Proportionalitätsfaktor ergibt sich aus der Brennstoff-Elementarzusammensetzung (Verhältnisse N/C für die flüchtigen sowie für die nichtflüchtigen Bestandteile). Das genaue Timing der Freisetzung des Brennstoff-Stickstoffs ist deshalb wichtig, weil die Route der nachfolgenden Gasreaktionen maßgeblich vom jeweiligen Sauerstoffpartialdruck abhängt, der in der Nähe des festen Brennstoffes starke Gradienten aufweisen kann. Die Umwandlungsenthalpie des Brennstoff-Stickstoffs wird aufgrund des geringen Massenanteils am Gesamtbrennstoff vereinfachend mit den jeweiligen Umwandlungsenthalpien der Volatilisierung sowie des Koksabbrandes gleichgesetzt.

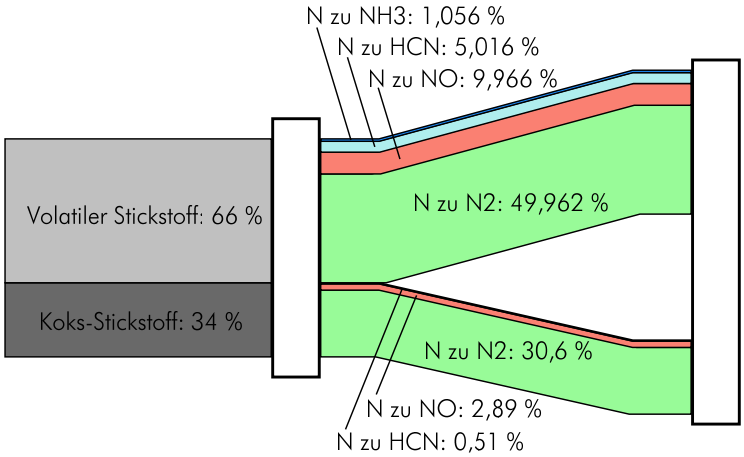


Abbildung 6-21: Grafische Darstellung der Verteilung und Freisetzung des im Brennstoff gebundenen Stickstoffs

Die freigesetzten gasförmigen Stickstoffkomponenten NH_3, HCN und NO (N_2 ist im vorliegenden Modell inert) werden im Anschluss den bereits beschriebenen homogenen Gasphasenreaktionen unterworfen. Hierbei werden je nach Sauerstoffpartialdruck die Vorläufersubstanzen NH_3 und HCN zu NO oxidiert oder mit NO zu N_2 disproportioniert, wodurch eine Reduktion des NO herbeigeführt wird (siehe Kapitel 6.7.1). Entsprechenden Sauerstoffüberschuss und Reaktionszeit vorausgesetzt findet im Anschluss eine weitere Oxidation von NO zu NO_2 statt (zum überwiegenden Teil erst in der Atmosphäre); diese Umwandlung ist aber nicht mehr emissionsrelevant, weshalb in der vorliegenden Arbeit die Summenkomponente NO_x mit der Einzelkomponente NO gleichgesetzt wird. Ein Gesamtschema des implementierten Modells zur Beschreibung der Bildung von Stickstoffoxid aus dem im Brennstoff enthaltenen Stickstoff ist Abbildung 6-22 zu entnehmen.

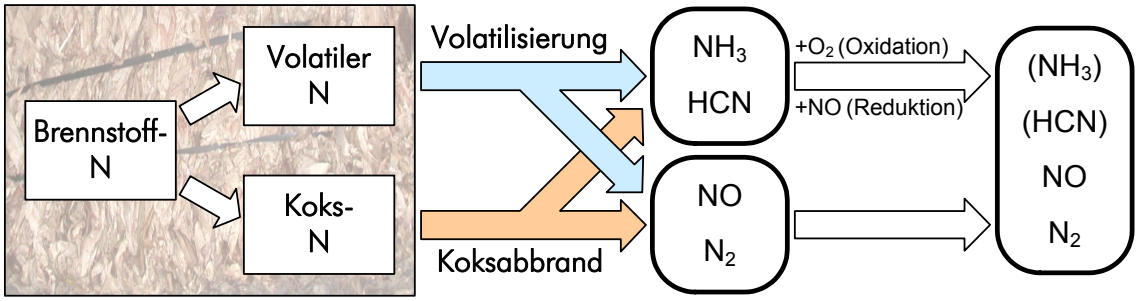


Abbildung 6-22: Schematische Darstellung des implementierten Modells zur Beschreibung der Stickstoffoxid-Bildung aus dem im Brennstoff enthaltenen Stickstoff

Die Literatur zeigt, dass für das entstandene NO in technischen Verbrennungssystemen je nach Betriebsbedingungen noch weitere Reaktionspfade von Bedeutung sein können. Die beiden wesentlichsten Pfade sind dabei das NO_x-Reburning sowie die Reduktion von NO_x an festen Koksoberflächen (Hill et al., 2000). NO_x-Reburning bezeichnet Gasphasenreaktionen, bei denen NO mit verschiedenen Gaskomponenten der Verbrennungsatmosphäre reduziert wird. Biomassepyrolyse erzeugt ein Gasgemisch, welches ein sehr effektives Reduktionsmittel für NO darstellen kann (Zhou et al., 2006). Besonders aktive Gaskomponenten sind hierbei Kohlenwasserstoffe, CO und H_2; die Reaktionspfade führen über intermediäre Radikale. Die Literatur enthält zahlreiche Arbeiten über experimentelle Untersuchung und Modellierung von NO_x-Reburning (Hulgaard et al., 1993; Kristensen et al., 1996; Glarborg et al., 1998; Coelho et al., 2001; Dagaut et al., 2003; Zabetta et al., 2005). Die Berücksichtigung dieses Reaktionsmechanismus ist vor allem bei stark unterstöchiometrischer, „fetter" Verbrennung sowie bei der gezielten Brennstoff-Stufung erforderlich. Für die vorliegende Arbeit ist das NO_x-Reburning von untergeordneter Priorität und wird in der Modellierung vernachlässigt. Auch der festphasige Koks der abbrennenden Biomasse ist ein hervorragendes Reduktionsmittel für bereits gebildetes NO_x. Dabei wird NO an festem Kohlenstoff adsorbiert und zu N_2 reduziert; der Sauerstoff verbleibt in Form von chemisorbiertem CO in der festen Phase und wird in weiterer Folge während des Koksabbrandes freigesetzt (Hill et al., 2000; Zhou et al., 2006). Ein umfassender Review-Beitrag zu diesem Reaktionsmechanismus wird bei Aarna et al. (Aarna et al., 1997) ausgeführt. Eine Reihe von Autoren untersuchte die Kinetik der Umsetzung von NO mit festem Kohlenstoff in Form von Biomasse-Koks sowie Koks aus fossilen Quellen (Zevenhoven et al., 1998; Sorensen et al., 2001; Garijo et al., 2003; Zhou et al., 2006; Dong et al., 2007). Dabei wurde festgestellt, dass bei biomassestämmigen Koksarten der Temperatureinfluss auf die Reduktionsreaktion sehr gut mit einem Arrhenius-Ansatz beschrieben werden kann, während für den Einfluss der NO-Konzentration ein Potenzansatz mit einer Reaktionsordnung zwischen 0,45 und 0,7 zu verwenden ist (Sorensen et al., 2001; Garijo et al., 2003; Zhou et al., 2006; Dong et al., 2007). Eine Reihe von Arbeiten dokumentiert darüber hinaus, dass auch die Anwesenheit von CO in der Gasphase einen positiven Effekt auf die Reduktionsreaktion zeigt (Zevenhoven et al., 1998; Aarna et al., 1999; Sorensen et al., 2001; Dong et al., 2007). Ausreichende Kontaktzeit vorausgesetzt trägt die heterogene Reduktion von NO_x an Koks sehr deutlich zur Herabsetzung der Stickstoffoxid-Emissionen einer Verbrennungsanlage bei. In der vorliegenden Arbeit wird davon ausgegangen, dass die Kontaktzeit der Gasphase mit Koks sowohl an der Ballenfront als auch auf dem Nachverbrennungsrost relativ gering ist, sodass auch dieser Reaktionsmechanismus der Einfachheit halber vernachlässigt wurde.

6.7.2.5 Massenbilanz und Stoffübergang im externen Feststoff-Solver

Die Verbrennung eines festen Brennstoffes stellt im Wesentlichen einen Materieübergang vom festen in den gasförmigen Zustand unter globaler Freisetzung von Wärme dar. Bei getrennter Betrachtung der Phasen „entsteht" also in der Gasphase global betrachtet Materie, während sie in der Festphase „verschwindet". Dieser Übergang muss sowohl die Massen- als auch die Elementarerhaltung (in dieser Arbeit die Elemente C, H, O und N) erfüllen. Innerhalb beider Phasen finden weitere Stofftransport- und Umwandlungsvorgänge statt, die ihrerseits ebenfalls die Massen- und Elementarerhaltung erfüllen müssen. Auch für die in den jeweiligen Phasen enthaltenen Spezies (Gaskomponenten in der Gasphase, Brennstoffkomponenten in der Festphase) gelten unter Berücksichtigung wechselseitiger Umwandlungen durch chemische Reaktionen entsprechende Erhaltungssätze. Die Einhaltung der Erhaltungs-

sätze sowie die Transport- und Umwandlungsvorgänge in der Gasphase werden vollständig vom verwendeten CFD-Solver abgedeckt. Die Vorgänge in der Festphase sowie der Materieübergang und die Energiefreisetzung bei der heterogenen Verbrennung müssen vom externen Feststoff-Solver übernommen werden. Nachdem die Umsetzungsraten der einzelnen Brennstoffkomponenten in den Kapiteln 6.7.2.1 bis 6.7.2.4 hergeleitet wurden, ist diese Bilanzierung einfach und eindeutig (siehe auch van der Lans et al., 2000 und Zhou et al., 2005).

Der Brennstoff besteht zu jedem Zeitpunkt nach dem Eintritt in das Simulationsgebiet aus der Brennstoff-Feuchte sowie einem volatilen und einem nichtvolatilen Feststoffanteil. Der nichtvolatile Anteil spaltet sich in Beiträge der drei Pseudomomponenten und einen Beitrag der nichtreaktiven Asche auf. Der volatile Anteil setzt sich nur aus den Beiträgen der drei Pseudokomponenten zusammen. Die Startgehalte aller Beiträge errechnen sich aus der Brennstoffzusammensetzung und den Modellparametern aus Tabelle 6-5. Diese Zusammenhänge sind in Gleichung 6.41 dargestellt.

$$
\begin{aligned}
&\dot{m}_{\mathrm{BS}} = \dot{m}_{\mathrm{H2O,BS}} + \dot{m}_{\mathrm{BS}}^{\mathrm{vol}} + \dot{m}_{\mathrm{BS}}^{\mathrm{nonvol}} \\
&= \dot{m}_{\mathrm{H2O,BS}} + \dot{m}_{\mathrm{Cell,BS}}^{\mathrm{vol}} + \dot{m}_{\mathrm{Cell,BS}}^{\mathrm{nonvol}} + \dot{m}_{\mathrm{Hcell,BS}}^{\mathrm{vol}} + \dot{m}_{\mathrm{Hcell,BS}}^{\mathrm{nonvol}} + \dot{m}_{\mathrm{Lign,BS}}^{\mathrm{vol}} + \dot{m}_{\mathrm{Lign,BS}}^{\mathrm{nonvol}} + \dot{m}_{\mathrm{Asche,BS}} \\
&\left(\dot{m}_{\mathrm{H2O,BS}}\right)_{\mathrm{IN}} = \left(\dot{m}_{\mathrm{BS}}\right)_{\mathrm{IN}} \cdot \frac{w_{\mathrm{H2O}}^{0}}{100} \\
&\left(\dot{m}_{\mathrm{Cell,BS}}^{\mathrm{vol}}\right)_{\mathrm{IN}} = \left(\dot{m}_{\mathrm{BS}}\right)_{\mathrm{IN}} \cdot \frac{w_{\mathrm{Cell}}^{0}}{100} \cdot \left(1 - \frac{w_{\mathrm{Cell}}^{\infty}}{100}\right) \qquad \left(\dot{m}_{\mathrm{Cell,BS}}^{\mathrm{nonvol}}\right)_{\mathrm{IN}} = \left(\dot{m}_{\mathrm{BS}}\right)_{\mathrm{IN}} \cdot \frac{w_{\mathrm{Cell}}^{0}}{100} \cdot \frac{w_{\mathrm{Cell}}^{\infty}}{100} \\
&\left(\dot{m}_{\mathrm{Hcell,BS}}^{\mathrm{vol}}\right)_{\mathrm{IN}} = \left(\dot{m}_{\mathrm{BS}}\right)_{\mathrm{IN}} \cdot \frac{w_{\mathrm{Hcell}}^{0}}{100} \cdot \left(1 - \frac{w_{\mathrm{Hcell}}^{\infty}}{100}\right) \qquad \left(\dot{m}_{\mathrm{Hcell,BS}}^{\mathrm{nonvol}}\right)_{\mathrm{IN}} = \left(\dot{m}_{\mathrm{BS}}\right)_{\mathrm{IN}} \cdot \frac{w_{\mathrm{Hcell}}^{0}}{100} \cdot \frac{w_{\mathrm{Hcell}}^{\infty}}{100} \\
&\left(\dot{m}_{\mathrm{Lign,BS}}^{\mathrm{vol}}\right)_{\mathrm{IN}} = \left(\dot{m}_{\mathrm{BS}}\right)_{\mathrm{IN}} \cdot \frac{w_{\mathrm{Lign}}^{0}}{100} \cdot \left(1 - \frac{w_{\mathrm{Lign}}^{\infty}}{100}\right) \qquad \left(\dot{m}_{\mathrm{Lign,BS}}^{\mathrm{nonvol}}\right)_{\mathrm{IN}} = \left(\dot{m}_{\mathrm{BS}}\right)_{\mathrm{IN}} \cdot \frac{w_{\mathrm{Lign}}^{0}}{100} \cdot \frac{w_{\mathrm{Lign}}^{\infty}}{100}
\end{aligned}
\tag{6.41}
$$

Während der Brennstofftrocknung wird lediglich das physikalisch im Brennstoff gebundene Wasser als Gaskomponente freigesetzt. Für ein Kontrollvolumen (im Weiteren mit *Zelle* bezeichnet) kann die in Gleichung 6.42 dargestellte Massenbilanz aufgestellt werden. Der Ausdruck Δt_{Zelle} bezeichnet dabei die Verweilzeit des Feststoffes im Kontrollvolumen. Die Massenbilanzen werden also nicht in ihrer ursprünglichen differentiellen Form, sondern für die Implementierung bereits in einer diskretisierten Form (Upwind-Verfahren erster Ordnung) dargestellt.

$$
\begin{aligned}
&\left(\dot{m}_{\mathrm{H2O,BS}}\right)_{\mathrm{Zelle,EIN}} + \left(\frac{\partial \dot{m}_{\mathrm{H2O,BS}}}{\partial t}\right)_{\mathrm{Zelle}} \cdot \Delta t_{\mathrm{Zelle}} - \left(\dot{m}_{\mathrm{H2O,BS}}\right)_{\mathrm{Zelle,AUS}} = 0 \\
&\left(\frac{\partial \dot{m}_{\mathrm{H2O,BS}}}{\partial t}\right)_{\mathrm{Zelle}} \cdot \Delta t_{\mathrm{Zelle}} - \left(\dot{m}_{\mathrm{H2O,Trocknung}}\right)_{\mathrm{Zelle,Gas}} = 0
\end{aligned}
\tag{6.42}
$$

Während der Volatilisierung wird der volatile Anteil aller festen Pseudokomponenten vollständig abgebaut, während der nichtvolatile Anteil vollständig in Koks umgewandelt wird; die Asche bleibt unbeeinflusst. Die Umwandlung der nichtvolatilen Anteile und damit die Bildung von Koks verläuft parallel zur Volatilisierung mit einer proportionalen Umwandlungs-

rate (Proportionalitätsfaktor ist das initiale Verhältnis aus nichtvolatilen zu volatilen Bestandteilen). Damit kann für jedes Kontrollvolumen also eine Bilanz für die volatilen (Gleichung 6.43) und für die nichtvolatilen Anteile (Gleichung 6.44) aufgestellt sowie die Gesamtraten für die Volatilisierung und für die Koksentstehung angegeben werden. Für die Stoffumwandlung während der Volatilisierung und die damit einhergehende Entstehung gasförmiger Komponenten gilt ebenfalls eine Gesamtmassenerhaltung (Gleichung 6.45).

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial \dot{m}_{\text{Volatilisierung}}}{\partial t}\right)_{\text{Zelle}} = \left(\frac{\partial \dot{m}_{\text{Cell, BS}}}{\partial t} + \frac{\partial \dot{m}_{\text{Hcell, BS}}}{\partial t} + \frac{\partial \dot{m}_{\text{Lign, BS}}}{\partial t}\right)_{\text{Zelle}} \\
&\left(\dot{m}^{\text{vol}}_{\text{Cell,BS}}\right)_{\text{Zelle,EIN}} + \left(\frac{\partial \dot{m}_{\text{Cell, BS}}}{\partial t}\right)_{\text{Zelle}} \cdot \Delta t_{\text{Zelle}} - \left(\dot{m}^{\text{vol}}_{\text{Cell,BS}}\right)_{\text{Zelle,AUS}} = 0 \\
&\left(\dot{m}^{\text{vol}}_{\text{Hcell,BS}}\right)_{\text{Zelle,EIN}} + \left(\frac{\partial \dot{m}_{\text{Hcell, BS}}}{\partial t}\right)_{\text{Zelle}} \cdot \Delta t_{\text{Zelle}} - \left(\dot{m}^{\text{vol}}_{\text{Hcell,BS}}\right)_{\text{Zelle,AUS}} = 0 \\
&\left(\dot{m}^{\text{vol}}_{\text{Lign,BS}}\right)_{\text{Zelle,EIN}} + \left(\frac{\partial \dot{m}_{\text{Lign, BS}}}{\partial t}\right)_{\text{Zelle}} \cdot \Delta t_{\text{Zelle}} - \left(\dot{m}^{\text{vol}}_{\text{Lign,BS}}\right)_{\text{Zelle,AUS}} = 0
\end{aligned} \tag{6.43}$$

$$\begin{aligned}
&\left(\left(\frac{\partial \dot{m}_{\text{Koks}}}{\partial t}\right)_{\text{Bildung}}\right)_{\text{Zelle}} = -\left(\begin{array}{l}\frac{\partial \dot{m}_{\text{Cell, BS}}}{\partial t} \cdot \frac{\left(\dot{m}^{\text{nonvol}}_{\text{Cell, BS}}\right)_{\text{IN}}}{\left(\dot{m}^{\text{vol}}_{\text{Cell, BS}}\right)_{\text{IN}}} + \frac{\partial \dot{m}_{\text{Hcell, BS}}}{\partial t} \cdot \frac{\left(\dot{m}^{\text{nonvol}}_{\text{Hcell, BS}}\right)_{\text{IN}}}{\left(\dot{m}^{\text{vol}}_{\text{Hcell, BS}}\right)_{\text{IN}}} \\ + \frac{\partial \dot{m}_{\text{Lign, BS}}}{\partial t} \cdot \frac{\left(\dot{m}^{\text{nonvol}}_{\text{Lign, BS}}\right)_{\text{IN}}}{\left(\dot{m}^{\text{vol}}_{\text{Lign, BS}}\right)_{\text{IN}}}\end{array}\right)_{\text{Zelle}} \\
&\left(\dot{m}^{\text{nonvol}}_{\text{Cell,BS}}\right)_{\text{Zelle,EIN}} + \left(\frac{\partial \dot{m}_{\text{Cell, BS}}}{\partial t} \cdot \frac{\left(\dot{m}^{\text{nonvol}}_{\text{Cell, BS}}\right)_{\text{IN}}}{\left(\dot{m}^{\text{vol}}_{\text{Cell, BS}}\right)_{\text{IN}}}\right)_{\text{Zelle}} \cdot \Delta t_{\text{Zelle}} - \left(\dot{m}^{\text{nonvol}}_{\text{Cell,BS}}\right)_{\text{Zelle,AUS}} = 0 \\
&\left(\dot{m}^{\text{nonvol}}_{\text{Hcell,BS}}\right)_{\text{Zelle,EIN}} + \left(\frac{\partial \dot{m}_{\text{Hcell, BS}}}{\partial t} \cdot \frac{\left(\dot{m}^{\text{nonvol}}_{\text{Hcell, BS}}\right)_{\text{IN}}}{\left(\dot{m}^{\text{vol}}_{\text{Hcell, BS}}\right)_{\text{IN}}}\right)_{\text{Zelle}} \cdot \Delta t_{\text{Zelle}} - \left(\dot{m}^{\text{nonvol}}_{\text{Hcell,BS}}\right)_{\text{Zelle,AUS}} = 0 \\
&\left(\dot{m}^{\text{nonvol}}_{\text{Lign,BS}}\right)_{\text{Zelle,EIN}} + \left(\frac{\partial \dot{m}_{\text{Lign, BS}}}{\partial t} \cdot \frac{\left(\dot{m}^{\text{nonvol}}_{\text{Lign, BS}}\right)_{\text{IN}}}{\left(\dot{m}^{\text{vol}}_{\text{Lign, BS}}\right)_{\text{IN}}}\right)_{\text{Zelle}} \cdot \Delta t_{\text{Zelle}} - \left(\dot{m}^{\text{nonvol}}_{\text{Lign,BS}}\right)_{\text{Zelle,AUS}} = 0
\end{aligned} \tag{6.44}$$

$$\left(\frac{\partial \dot{m}_{\text{Volatilisierung}}}{\partial t}\right)_{\text{Zelle}} \cdot \Delta t_{\text{Zelle}} - \left(\left(\begin{array}{l}\dot{m}_{\text{CO}} + \dot{m}_{\text{CO2}} + \dot{m}_{\text{CxHy}} \\ + \dot{m}_{\text{H2}} + \dot{m}_{\text{H2O,vol}} + \dot{m}_{\text{HCN}} \\ + \dot{m}_{\text{NH3}} + \dot{m}_{\text{NO}} + \dot{m}_{\text{N2}}\end{array}\right)_{\text{Volatilisierung}}\right)_{\text{Zelle, Gas}} = 0 \tag{6.45}$$

Für die Bilanzierung der reaktiven Kokskomponente ist zu berücksichtigen, dass Koks zeitgleich durch Volatilisierung gebildet und durch Oxidation abgebaut werden kann. Nachdem beide Umwandlungsraten bereits bekannt sind, ist das Aufstellen der Massenbilanz für die Festphase sowie für den Stoffübergang zu gasförmigen Komponenten (inklusive des Verbrauchs von Sauerstoff für die Oxidation von C und N) sehr einfach (siehe Gleichung 6.46).

$$\begin{aligned}&\left(\dot{m}_{\text{Koks}}\right)_{\text{Zelle,EIN}}+\left(\left(\frac{\partial\dot{m}_{\text{Koks}}}{\partial t}\right)_{\text{Bildung}}+\left(\frac{\partial\dot{m}_{\text{Koks}}}{\partial t}\right)_{\text{Kinetik+Diffusion}}\right)_{\text{Zelle}}\cdot\Delta t_{\text{Zelle}}-\\&-\left(\dot{m}_{\text{Koks}}\right)_{\text{Zelle,AUS}}=0\\&\left(\left(\frac{\partial\dot{m}_{\text{Koks}}}{\partial t}\right)_{\text{Kinetik+Diffusion}}\right)_{\text{Zelle}}\cdot\Delta t_{\text{Zelle}}-\left(\begin{pmatrix}\dot{m}_{\text{CO}}+\dot{m}_{\text{CO2}}+\dot{m}_{\text{O2}}\\+\dot{m}_{\text{HCN}}+\dot{m}_{\text{NO}}+\dot{m}_{\text{N2}}\end{pmatrix}_{\text{Kinetik+Diffusion}}\right)_{\text{Zelle, Gas}}=\\&=0\end{aligned}\tag{6.46}$$

Abschließend gilt noch die Gesamtbilanz für den Stoffübergang von der Festphase in die Gasphase über alle heterogenen Reaktionsschritte für das jeweilige Kontrollvolumen (siehe Gleichung 6.47).

$$\left(\dot{m}_{\text{BS}}\right)_{\text{Zelle,EIN}}-\begin{pmatrix}\dot{m}_{\text{H2O,Trocknung}}+\dot{m}_{\text{CO}}+\dot{m}_{\text{CO2}}+\dot{m}_{\text{CxHy}}\\+\dot{m}_{\text{O2}}+\dot{m}_{\text{H2}}+\dot{m}_{\text{H2O,vol}}+\dot{m}_{\text{HCN}}\\+\dot{m}_{\text{NH3}}+\dot{m}_{\text{NO}}+\dot{m}_{\text{N2}}\end{pmatrix}_{\text{Zelle, Gas}}-\left(\dot{m}_{\text{BS}}\right)_{\text{Zelle,AUS}}=0\tag{6.47}$$

Mit diesen Massenbilanzgleichungen können für jedes beliebige Kontrollvolumen *i* bei bekanntem Eingangsmassenstrom und bekannter Eingangszusammensetzung unter Anwendung der Umsetzungsraten für die heterogenen Reaktionsschritte (Kapitel 6.7.2.1 bis 6.7.2.4) sofort der Massenstrom und die Zusammensetzung des Feststoffs am Austritt sowie der Massenstrom der gebildeten Gaskomponenten berechnet werden. Als Eintrittsrandbedingung für die Ballendomäne ist in der, dem Brennstoffeintritt nächstgelegenen Zelle der Massenstrom und die Zusammensetzung des rohen Brennstoffs vorzugeben. Als Eintrittsrandbedingung für den Nachverbrennungsrost ist der Massenstrom und die Zusammensetzung des Feststoffes am Ausgang der letzten Zelle der Ballendomäne zu setzen (nichtkonvertierter Feststoff fällt von der brennenden Ballenoberfläche auf den Nachverbrennungsrost herab). Bei bekanntem Temperaturfeld des Feststoffes sowie bekannter Gasatmosphäre (Zusammensetzung, physikalische Stoffeigenschaften, Strömungsgeschwindigkeit) ist das erhaltene Gleichungssystem direkt lösbar. Damit steht neben einer ortsaufgelösten Freisetzung von Gaskomponenten auch die exakte Zusammensetzung des festen Brennstoffes an jeder beliebigen Stelle im Ballen oder auf dem Nachverbrennungsrost zur Verfügung.

6.7.2.6 Energiebilanz und Wärmeübergang im externen Feststoff-Solver

Die zu berücksichtigenden heterogenen Massenumwandlungsprozesse sind sehr stark (exponentiell) von der Partikeltemperatur abhängig. Aus diesem Grund ist es unumgänglich, die Temperaturverteilung im Feststoff beschreiben zu können (Fjellerup et al., 2003). Zwei Effekte sind hierbei zu berücksichtigen: die effektive Wärmeleitfähigkeit im porösen Feststoff, die eine Überlagerung mehrerer Wärmeübertragungsphänomene darstellt (Wärmeleitung im Partikel und im Fluid, Konvektion im Lückenraum, Strahlung zwischen Partikeln), sowie der effektive Wärmeübergang zwischen dem porösen Feststoff und der Fluid-Kernströmung (Konvektiver Wärmeübergang sowie Stahlungswärmeaustausch zwischen Feststoff und Gas sowie zwischen Feststoff und festen Brennraumoberflächen).

Der Wärmeübergang zwischen Feststoff und Fluid-Kernströmung kann mit konventionellen Ansätzen relativ gut beschrieben werden. Die Modellierung der effektiven Wärmeleitfähigkeit im porösen Feststoff gestaltet sich jedoch deutlich schwieriger; eine ganze Reihe von Literaturarbeiten haben sich mit der mathematischen Beschreibung der auftretenden Effekte in unterschiedlicher Detailtreue befasst. Eine gute Einführung in die Thematik sowie ein Überblick über gängige Modellierungsansätze wird im Übersichtsbeitrag von Kantorovich et al. (Kantorovich et al., 1999) gegeben. Die Autoren arbeiten heraus, welche wesentlichen Einflussfaktoren auf die effektive Wärmeleitfähigkeit zu berücksichtigen sind (Wärmeleitfähigkeiten im Fluid und im Feststoff, Mikro- und Makroporosität, geometrische Gestalt von Partikeln und Poren, Porengrößenverteilung) und wie diese modellmäßig erfasst werden können. Da sich die genannten Einflussfaktoren mit dem Konversionsgrad des festen Brennstoffes ändern, ist auch die effektive Wärmeleitfähigkeit eine Funktion dieses Umwandlungsgrades. Ein wesentliches Ergebnis dieser Arbeit ist auch die Schlussfolgerung, dass der Beitrag des Strahlungswärmeaustausches zwischen Partikeln und Gas sowie zwischen Partikeln untereinander in den meisten Fällen der Verbrennung kohlenstoffreicher Brennstoffe mit guter Genauigkeit vernachlässigt werden kann. Lediglich bei sehr hohen Temperaturen sowie sehr großen Poren ist dieser Mechanismus zu berücksichtigen. Ein ähnliches Ergebnis liefert auch die Arbeit von Curtis et al. (Curtis et al., 1988), die den effektiven Wärmetransport (mit speziellem Fokus auf Wärmestrahlung im porösen Feststoff) bei der Pyrolyse von Zellulose untersucht hat. Die Vernachlässigung der intrapartikulären Wärmestrahlung verursacht dementsprechend einen maximalen Fehler im Temperaturfeld zwischen 2 % (bei 700 bis 900 K Partikeltemperatur) und 5 % (bei 1.000 bis 2.000 K). Auch der Einfluss des Emissionsfaktors der Partikeloberfläche ist von untergeordneter Bedeutung (Einfluss etwa 1 % bei Variation zwischen 0 und 1).

Während für den intrapartikulären Wärmetransport die Strahlung weitestgehend vernachlässigt werden kann, gilt dies für den Wärmeaustausch zwischen Feststoff und Fluid-Kernströmung sowie zwischen Feststoff und festen Brennkammerwänden erwartungsgemäß nicht. In einer Arbeit von Klason et al. (Klason et al., 2008) werden Biomasse-Verbrennungsapparate unterschiedlicher Leistungsgrößen mittels CFD analysiert, wobei auf die absolute Größe und die Richtung des Wärmetransportes zwischen Brennstoff-Bett und Ofenatmosphäre/Ofenwand besonderer Wert gelegt wird. Die Autoren schlussfolgern, dass eine quantitativ korrekte Modellierung nur durch Anwendung hochentwickelter Strahlungsmodelle zu erreichen ist. Im konkreten Fall bedeutet das, dass auch für die Beschreibung des Strahlungswärmeaustausches des Brennstoff-Bettes das *Discrete-Ordinates-Modell* heranzuziehen ist. Einfachere Modelle (die rechentechnisch natürlich Vorteile bieten würden) weisen zum Teil gravierende Abweichungen zu den gezeigten experimentellen Ergebnissen auf. Prinzipiell ist die durch Strahlung abgegebene Wärmestromdichte nach dem Stefan-Boltzmann-Gesetz proportional zur vierten Potenz der Oberflächentemperatur; Proportionalitätsfaktoren sind der Emissionsfaktor und die Stefan-Boltzmann-Konstante (Babu et al., 2003a). Neben dem Strahlungswärmeaustausch ist bei nichtstagnantem Fluid aber auch der konvektive Wärmeübergang zwischen Feststoff und Fluid-Kernströmung zu berücksichtigen. Wie bereits erwähnt, ist dieser Vorgang phänomenologisch relativ gut erfassbar und die mathematische Beschreibung des konvektiven Wärmeüberganges in Abhängigkeit der lokalen Reynoldszahl erfolgt häufig mithilfe spezieller Nusselt-Korrelationen (Wakao, 1976; Wakao et al., 1979; Kær, 2005; Guardo et al., 2006; VDI, 2006; Johansson et al., 2007) oder mittels Biot-Korrelationen (Dixon, 1985) Es wurden aber auch Arbeiten publiziert, in denen dieser Wärmeübergang mit höherer Genauigkeit untersucht wurde, wie beispielsweise jene von Guardo

et al. (Guardo et al., 2006). Die Autoren untersuchen in dieser Arbeit den konvektiven Wärmetransport zwischen einer regelmäßigen Kugelpackung und einem bewegten Fluid mit den Mitteln der numerischen Strömungssimulation. Mit sehr guten Modellen und hochauflösenden Simulationsgittern erreichen die Autoren hervorragende Übereinstimmung mit Messungen sowie mit direkten analytischen Ergebnissen. Eine Anwendung dieser Vorgangsweise für die unregelmäßig geformte Biomasse (für unterschiedliche Konversionsgrade während der Verbrennung) ist prinzipiell auch möglich, ist aber sehr aufwändig und wurde bislang noch nicht publiziert. Unter dem Strich ist davon auszugehen, dass für die in der vorliegenden Arbeit angestrebte komplexe Simulation des gesamten technischen Verbrennungsprozesses die detaillierte Beschreibung der komplizierten und zufälligen Struktur des festen Brennstoffes nicht sinnvoll ist und eine vereinfachte Modellierung gefunden werden muss. Eine ähnliche Schlussfolgerung wurde bereits in der Arbeit von Dixon (Dixon, 1985) über effektive Wärmeleitfähigkeit im Schüttschichten und den effektiven Wärmeübergang an angrenzende feste Wände gezogen. Der folgende Abschnitt skizziert die Modellierung des Wärmetransportes im porösen Brennstoffbett sowie den Wärmeübergang Feststoff/Gas, die in der vorliegenden Arbeit zur Anwendung gelangt.

Effektive Wärmeleitfähigkeit im porösen Feststoff

In der Literatur ist ausreichend dokumentiert, dass die Porosität des Feststoffes einen relativ starken Einfluss auf die effektive Wärmeleitfähigkeit ausübt (Curtis et al., 1988; Kantorovich et al., 1999). Die meisten Modelle, die heute ingenieurwissenschaftliche Anwendung finden, betrachten den porösen Feststoff als isotropes Medium, die Phasenverteilung Gas/Feststoff wird mit der globalen Porosität beschrieben, die Mikroporosität des Feststoffes wird vernachlässigt oder mit einem Globalparameter beschrieben (Kantorovich et al., 1999). In der vorliegenden Arbeit wird davon ausgegangen, dass sich die Porosität während der Umsetzung des Brennstoffes nicht maßgeblich ändert (siehe Kapitel 14.1.2.3), weshalb dieser Einfluss nicht modelliert wurde. Weiters zeigen die Arbeiten von Fjellerup et al. sowie von Peters et al. (Peters et al., 2002; Fjellerup et al., 2003), dass der Einfluss von Partikelform und Partikelgröße auf die effektive Wärmeleitfähigkeit von relativ geringer Bedeutung ist. Aus diesem Grund wird in der vorliegenden Arbeit diesbezüglich auch ein etwas einfacherer Weg gewählt. Für die effektive Wärmeleitfähigkeit im porösen Feststoff wird der Einfluss von Partikelform und Partikelgröße vernachlässigt, für den Wärmeübergang zur Fluidkernströmung wird dieser Einfluss allerdings berücksichtigt.

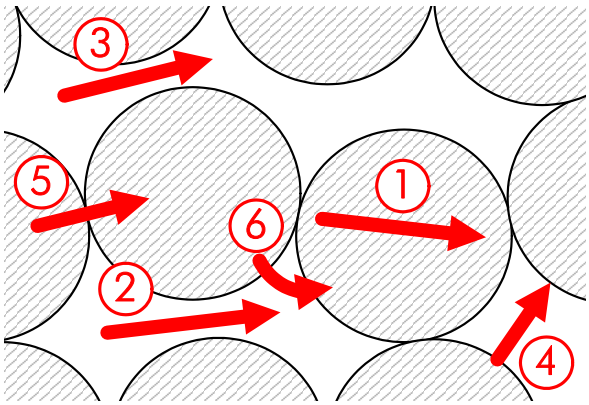
In der bereits öfters zitierten Arbeit von Zhou et al. (Zhou et al., 2005) wird für die Modellierung der effektiven Wärmeleitfähigkeit im Brennstoffbett sehr erfolgreich ein Modell von Fjellerup et al. (Fjellerup et al., 2003) verwendet, welches auch für die vorliegende Arbeit herangezogen wurde. Ausgehend von den frühen Arbeiten von Yagi und Kunii (Yagi et al., 1957), die die Wärmeleitung in einer Kugelschüttung bei stagnantem Fluid untersucht haben, ergänzen Fjellerup et al. die Bestimmungsgleichungen um einen konvektiven Transportterm, der die verstärkte Wärmeleitfähigkeit unter nichtstagnanten Bedingungen abbilden soll. Dieser Zusatzterm hängt von der Gasart, deren Wärmeleitfähigkeit sowie von den lokalen Strömungsverhältnissen ab (Gleichung 6.48).

$$\lambda_{\text{Bett,eff}} = \lambda_{\text{Bett,eff,0}} + 0{,}5 \cdot \boldsymbol{Pr} \cdot \boldsymbol{Re}_d \cdot \lambda_{\text{GAS}} \tag{6.48}$$

Die effektive Wärmeleitfähigkeit einer porösen Schüttung unter stagnanten Bedingungen lässt sich beispielsweise mit dem Modell von Yagi und Kunii (Yagi et al., 1957) beschreiben.

Dieses Modell reduziert die zahlreichen Einflussfaktoren auf eine überschaubare Anzahl von Modellparametern, bildet aber dennoch eine ganze Reihe verschiedener Wärmetransportphänomene ab, die in Abbildung 6-23 dargestellt sind. Unter Verwendung des Modells von Yagi und Kunii kann die effektive Wärmeleitfähigkeit einer porösen Schüttung unter stagnanten Bedingungen gemäß Gleichung 6.49 modelliert werden.

$$\lambda_{\text{Bett,eff,0}} = \varepsilon_{\text{Bett}}\left(\lambda_{\text{GAS}} + \alpha_{\text{rv}} \cdot \Delta l_{\text{p}}\right) + \frac{\Delta l_{\text{p}}\left(1-\varepsilon_{\text{Bett}}\right)}{\dfrac{1}{\lambda_{\text{GAS}}/l_{\text{v}} + \alpha_{\text{rs}}} + \dfrac{l_{\text{p}}}{\lambda_{\text{p}}}} \tag{6.49}$$



1 Wärmeleitung im Partikel
2 Wärmeleitung in den Poren
3 Strahlung in den Poren
4 Strahlung zwischen Partikeln
5 Wärmeleitung an Kontaktstellen
6 Wärmeleitung in der Partikelgrenzschicht

Abbildung 6-23: Berücksichtigte Wärmetransportphänomene im Modell von Yagi und Kunii (adaptiert nach Yagi et al., 1957; Fjellerup et al., 2003)

Die effektiven Wärmeübergangskoeffizienten für Strahlung in den Leerräumen α_{rv} sowie für Strahlung an den Kontaktstellen α_{rs} können nach Yagi und Kunii mit folgenden beiden Gleichungen abgeschätzt werden (Gleichungen 6.50 und 6.51):

$$\alpha_{\text{rv}} = 0{,}1952\left(1 + \frac{\varepsilon_{\text{Bett}}\left(1-\varepsilon_{\text{rad,p}}\right)}{2\varepsilon_{\text{rad,Bett}}\left(1-\varepsilon_{\text{Bett}}\right)}\right)^{-1}\left(\frac{T_{\text{p}}}{100}\right)^{3} \tag{6.50}$$

$$\alpha_{\text{rs}} = 0{,}1952\left(\frac{\varepsilon_{\text{rad,p}}}{2-\varepsilon_{\text{rad,p}}}\right)\left(\frac{T_{\text{p}}}{100}\right)^{3} \tag{6.51}$$

Die a priori unbekannten Längenparameter können nach Fjellerup et al. (Fjellerup et al., 2003) für ein Bett uniform verteilter Zylinder (gute Näherung für ein Bett aus Weizenstroh, erste Abschätzung für ein Bett aus Mais-Ganzpflanze) wie folgt ausgedrückt werden (Gleichungen 6.52 bis 6.54):

$$\Delta l_{\text{p}} = 0{,}96795 \cdot d_{\text{p}}\left(1-\varepsilon_{\text{Bett}}\right)^{-1/3} \tag{6.52}$$

$$l_{\text{v}} = 0{,}15912 \cdot \Delta l_{\text{p}} \cdot \varepsilon_{\text{Bett}}^{1{,}7304}\left(\frac{\lambda_{\text{GAS}}}{\lambda_{\text{Luft}}}\right)^{0{,}3716} \tag{6.53}$$

$$l_{\text{p}} = \frac{2}{3} d_{\text{p}} \tag{6.54}$$

$$\left(\dot{Q}_{\lambda,x+y+z}\right)_{\text{Zelle}} = dy \cdot dz \left[\left(T_p\big|_{x+dx} - T_p\big|_x\right) \frac{1}{dx\left(\frac{0{,}5}{\lambda_{\text{Bett,eff}}\big|_{x+dx}} + \frac{0{,}5}{\lambda_{\text{Bett,eff}}\big|_x}\right)} + \left(T_p\big|_{x-dx} - T_p\big|_x\right) \frac{1}{dx\left(\frac{0{,}5}{\lambda_{\text{Bett,eff}}\big|_{x-dx}} + \frac{0{,}5}{\lambda_{\text{Bett,eff}}\big|_x}\right)} \right] +$$

$$dx \cdot dz \left[\left(T_p\big|_{y+dy} - T_p\big|_y\right) \frac{1}{dy\left(\frac{0{,}5}{\lambda_{\text{Bett,eff}}\big|_{y+dy}} + \frac{0{,}5}{\lambda_{\text{Bett,eff}}\big|_y}\right)} + \left(T_p\big|_{y-dy} - T_p\big|_y\right) \frac{1}{dy\left(\frac{0{,}5}{\lambda_{\text{Bett,eff}}\big|_{y-dy}} + \frac{0{,}5}{\lambda_{\text{Bett,eff}}\big|_y}\right)} \right] +$$

$$dx \cdot dy \left[\left(T_p\big|_{z+dz} - T_p\big|_z\right) \frac{1}{dz\left(\frac{0{,}5}{\lambda_{\text{Bett,eff}}\big|_{z+dz}} + \frac{0{,}5}{\lambda_{\text{Bett,eff}}\big|_z}\right)} + \left(T_p\big|_{z-dz} - T_p\big|_z\right) \frac{1}{dz\left(\frac{0{,}5}{\lambda_{\text{Bett,eff}}\big|_{z-dz}} + \frac{0{,}5}{\lambda_{\text{Bett,eff}}\big|_z}\right)} \right] \tag{6.55}$$

Während der Volatilisierung und vor allem während des Koksabbrandes ändern sich die anzuwendenden Längenparameter, weshalb für die einzelnen Umwandlungsphasen auch unterschiedliche charakteristische Längenparameter verwendet wurden. Damit wurden alle unbekannten Ausdrücke auf bekannte Parameter und Stoffdaten (siehe Kapitel 14.1) zurückgeführt, sodass die effektive Wärmeleitfähigkeit berechnet werden kann. Ist das Feld der effektiven Wärmeleitfähigkeit sowie das Partikeltemperaturfeld in den Schüttschichten bekannt, so kann für jede diskrete Volumenzelle dieser Brennstoffbetten der Netto-Wärmestrom, der mit allen benachbarten Volumenzellen ausgetauscht wird, berechnet wer-

den. Die Ermittlungsgleichung für diesen Wärmestrom für den dreidimensionalen Fall ist in Gleichung 6.55 dargestellt.

Der Wärmeleitungsterm ist dabei eine Serienschaltung zweier Widerstände (Wärmeleitfähigkeiten jeweils zur Hälfte in der betreffenden Zelle und in der Nachbarzelle); eine Vorgangsweise die in ähnlicher Form auch in der Arbeit von Bruch et al. (Bruch et al., 2003) gewählt wurde. Zur Erläuterung dieses Zusammenhangs zeigt Abbildung 6-24 ein Diskretisierungsschema des Modellierungsansatzes für die Wärmeleitung.

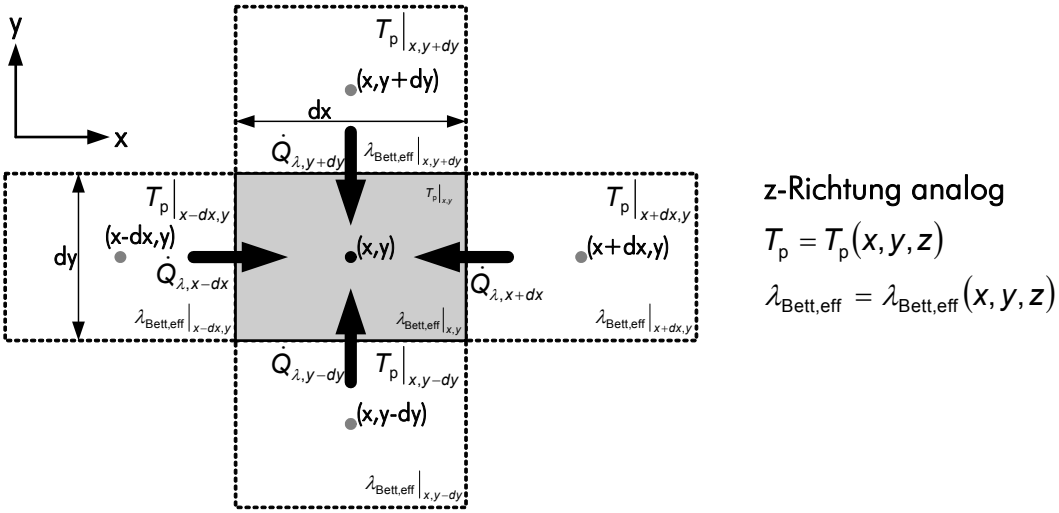


Abbildung 6-24: Diskretisierungsschema für die Modellierung der Wärmeleitung im porösen Feststoff

In der Literatur wird berichtet, dass das Modell von Yagi und Kunii für einen weiten Bereich von Partikelformen mit hoher Genauigkeit eingesetzt werden kann, obwohl es ursprünglich lediglich für feste Kugeln entwickelt wurde. Die experimentellen Untersuchungen in der Arbeit von Fjellerup et al. (Fjellerup et al., 2003) sowie deren Review zeigen, dass das Modell auch speziell für die Ermittlung der effektiven Wärmeleitfähigkeit in Schüttschichten von Weizenstroh-Koks einsetzbar und der Einfluss der Partikelform auf die Simulationsergebnisse überraschend gering ist. Die wesentlichen Einflussparameter sind viel mehr der charakteristische Partikeldurchmesser sowie die Porosität der Schüttschicht (Fjellerup et al., 2003). Ein weiterer wesentlicher Einfluss auf die effektive Wärmeleitfähigkeit geht von einer möglichen Versinterung oder Zusammenbackung der einzelnen Partikel aus, wodurch die Wärmeleitung an den Partikelkontaktstellen deutlich gesteigert wird. Speziell bei beginnender Ascheerweichung auf dem Nachverbrennungsrost ist dieser Effekt von Bedeutung. In einer Arbeit von Kunii und Smith (Kunii et al., 1960) wird ein Modell zur Erfassung dieses Einflusses vorgeschlagen, welches aus Komplexitätsgründen aber keinen Eingang in die vorliegende Arbeit findet.

Prinzipiell könnte die effektive Wärmeleitfähigkeit der vorliegenden ballenförmigen rohen Biomasse sowie des Biomassekokses mittels einer geeigneten Apparatur zumindest in einem gewissen Temperaturbereich auch direkt experimentell bestimmt werden. Eine mögliche Vorgangsweise bei der Untersuchung von Ballen aus Sojabohnenstroh ist in der Arbeit von Eric et al. (Eric et al., 2012) skizziert. Die Autoren untersuchen dabei bei relativ niedrigen Temperaturen die Abhängigkeit der stagnanten effektiven Wärmeleitfähigkeit von der Porosität des Biomasseballens. Diese Abhängigkeit scheint in der zitierten Arbeit allerdings gegenläufig

(höhere effektive Wärmeleitfähigkeit für höhere Porositäten) zu anderen, renommierteren Arbeiten (Yagi et al., 1957; Kunii et al., 1960; Fjellerup et al., 2003) zu sein. Außerdem ist die Abweichung, die die vorgestellte Testapparatur für ein Referenzmaterial liefert, deutlich zu groß, sodass die Ergebnisse von Eric et al. nicht in die vorliegende Arbeit eingebunden wurden. Auch in der Arbeit von Robinson et al. (Robinson et al., 2001) wird die Wärmeleitfähigkeit poröser Schichten experimentell und theoretisch erfasst, wobei die Autoren hier den Fokus auf versinternde Ascheablagerungen bei der Verbrennung von Kohle und Weizenstroh legen. Für eine tiefergehende Modellierung der effektiven Wärmeleitfähigkeit wäre die Durchführung eigener Versuche mit dem tatsächlich verwendeten biogenen Brennstoff dringend erforderlich.

Effektiver Wärmeübergang zwischen porösem Feststoff und Fluid-Kernströmung

Der effektive Wärmeübergang zwischen Feststoff und Ofenatmosphäre wird als Kombination aus konvektivem Wärmeübergang und Wärmestrahlung modelliert. Diese Betrachtungsweise wird von mehreren Autoren vorgeschlagen (Pyle et al., 1984; Babu et al., 2003a; Bruch et al., 2003; Babu et al., 2004b), jedoch soll für die vorliegende Arbeit sowohl der Strahlungswärmeaustausch mit festen Brennkammerwänden, als auch jener mit dem Gas der Ofenatmosphäre berücksichtigt werden. Dies geschieht durch einen globalen Ansatz und Berechnung einer charakteristischen mittleren Strahlungstemperatur T_m für die am Strahlungswärmeaustausch teilnehmenden Fluid- und Oberflächenelemente. Die beim effektiven Wärmeübergang übertragene Wärmestromdichte kann damit durch Gleichung 6.56 beschrieben werden (Pyle et al., 1984; Babu et al., 2003a; Bruch et al., 2003). Der Strahlungsanteil am Wärmeübergang wird nur für jene diskreten Volumenzellen berücksichtigt, die an der Oberfläche des Ballens oder des Rostbettes liegen (kein Strahlungswärmeaustausch im Inneren des Brennstoffvolumens); diese Unterscheidung muss der externe Feststoff-Solver treffen können.

$$\dot{q}_{\mathrm{eff}} = \alpha_{\mathrm{p}}\left(T_{\mathrm{GAS}} - T_{\mathrm{p}}\right) + b \cdot \sigma \cdot \varepsilon_{\mathrm{rad,p}}\left(T_{\mathrm{m}}^{4} - T_{\mathrm{p}}^{4}\right) \quad \text{mit} \quad b = \begin{cases} 1 & \text{wenn Zelle} = \text{Randzelle} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{6.56}$$

Zur Berechnung des konvektiven Wärmeübergangs ist ein, von den lokalen Strömungsverhältnissen und der Partikelform abhängiger, Wärmeübergangskoeffizient α_p zu ermitteln. Hierfür werden Nusselt-Korrelationen verwendet, die den konvektiven Wärmeübergang in Abhängigkeit der Gasart und der lokalen Reynoldszahl beschreiben können. Diese Korrelationen sind auch stark von der Form des umströmten Partikels (sowie der Hauptströmungsrichtung) abhängig, sodass an dieser Stelle zwischen Kolben, Stängeln und Blättern (also vereinfacht zwischen Zylindern und ebenen Platten) unterschieden werden muss. Für die Kolben und Stängel wird entsprechend eine Nusselt-Korrelation für querangeströmte Zylinder (mit den jeweiligen charakteristischen Durchmessern *d* der Komponenten aus Kapitel 14.1.2.3) verwendet, die in einer Arbeit von Søren Kær (Kær, 2005) empfohlen wird. Für die Blätter wird eine Nusselt-Korrelation für die Umströmung einer ebenen Platte (der Breite *b*) verwendet, die dem VDI-Wärmeatlas (VDI, 2006) entnommen werden kann. Die beiden verwendeten Nusselt-Korrelationen sind in den Gleichungen 6.57 und 6.58 dargestellt. Aus der Nusselt-Zahl kann über deren Definition im Anschluss für jede Brennstoffkomponente ein eigener Wärmeübergangskoeffizient ermittelt werden. Die Berechnung des mittleren Wärmeübergangskoeffizienten α_p erfolgt durch oberflächengewichtete Mittelwertbildung.

$$Nu_{\text{Zylinder,d}} = 0{,}3 + \frac{0{,}62 \cdot Re_{\text{d}}^{1/2} \cdot Pr^{1/3}}{\left[1 + \left(\frac{0{,}4}{Pr}\right)^{2/3}\right]^{1/4}} \cdot \left[1 + \left(\frac{Re_{\text{d}}}{282.000}\right)^{5/8}\right] \tag{6.57}$$

$$\begin{aligned} Nu_{\text{Platte,b}} &= \sqrt{Nu_{\text{Platte,b,lam}}^2 + Nu_{\text{Platte,b,turb}}^2} \\ Nu_{\text{Platte,b,lam}} &= 0{,}664 \cdot \sqrt{Re_{\text{b}}} \cdot \sqrt[3]{Pr} \\ Nu_{\text{Platte,b,turb}} &= \frac{0{,}037 \cdot Re_{\text{b}}^{0{,}8} \cdot Pr}{1 + 2{,}443 \cdot Re_{\text{b}}^{-0{,}1} \cdot \left(Pr^{2/3} - 1\right)} \end{aligned} \tag{6.58}$$

Die Ermittlung des Strahlungswärmeaustausches ist zwar mathematisch einfach, stellt aber aufgrund der geometrischen Komplexität ein rechentechnisches Problem dar. Um die Wärmestrahlung exakt zu erfassen, sind für jede Volumenzelle, die am Strahlungswärmeaustausch teilnimmt, die ortsaufgelöste Position der strahlenden Oberfläche sowie die winkelaufgelösten Sichtlinien zu allen anderen strahlenden Oberflächen und strahlenden Fluidelementen in der Verbrennungskammer zu berücksichtigen. Diese Komplexität wurde bereits in Kapitel 6.6 dargelegt. Die anzusetzende Integro-Differentialgleichung sowie Ansätze zur Problemlösung für den Strahlungswärmeaustausch zwischen festen und fluiden Phasen werden beispielsweise in der Arbeit von Knaus et al. (Knaus et al., 1997) gegeben. Es wurde entschieden, diese Orts- und Winkelabhängigkeit des Strahlungswärmeaustausches im externen Feststoff-Solver aufgrund der Komplexität sowie aufgrund des schwierigen Datenaustausches mit dem kommerziellen CFD-Solver der fluiden Phase in der vorliegenden Arbeit vorerst nicht zu implementieren. Stattdessen wird ein globaler Ansatz gewählt, der lediglich die Ermittlung einer charakteristischen mittleren Temperatur der strahlenden Brennkammerelemente (Oberflächen und Fluidelemente) erfordert, die mit den Oberflächen der Brennstoff-Schüttschichten im Strahlungswärmeaustausch stehen. Dieser Ansatz ist vergleichbar mit jenem aus der Arbeit von Bech et al. (Bech et al., 1996) mit der einzigen Ausnahme, das in der vorliegenden Arbeit das Brennstoffbett dreidimensional und die Brennstoffoberfläche daher zweidimensional aufgelöst werden. Damit ist die zweidimensionale Temperaturverteilung auf den Brennstoffoberflächen erfassbar. Die Ermittlung der charakteristischen Mitteltemperatur T_m für alle j strahlenden Brennkammerelemente aus den Temperaturen jedes einzelnen Elementes i (Teil des Lösungsraumes des CFD-Solvers für die Fluidphase) geschieht durch Mittelwertbildung nach Gleichung 6.59.

$$T_{\text{m}} = \sqrt[4]{\sum_{\text{i}=1}^{\text{j}} T_{\text{i}}^4} \tag{6.59}$$

Mit diesem Gleichungssystem lässt sich der effektive Wärmestrom, der zwischen porösem Brennstoffbett und Fluidkernströmung sowie Brennkammerwänden ausgetauscht wird, für jede diskrete Volumenzelle des Brennstoffbetts nach Gleichung 6.60 ermitteln.

$$\left(\dot{Q}_{\text{eff}}\right)_{\text{Zelle}} = \dot{q}_{\text{eff}} \cdot \left(A_{\text{spez}}\right)_{\text{m,Zelle}} \cdot V_{\text{Zelle}} \tag{6.60}$$

Energiebilanz

Um eine geschlossene Energiebilanz für die externe Behandlung des festen Brennstoffes aufstellen zu können, fehlt noch die Beschreibung des Wärmeaustausches zwischen Brennstoffbett und den direkt kontaktierenden, umgebenden Brennkammerwänden. Zur Beschreibung dieses Wärmeaustausches wird ähnlich wie bei der Wärmeleitung im porösen Feststoff eine Serienschaltung von Widerständen implementiert. Der Koeffizient für den Wärmeübergang vom porösen Feststoff errechnet sich aus der effektiven Wärmeleitfähigkeit im porösen Feststoff angesetzt für den Abstand des Zellmittelpunktes der wandnächsten Zelle bis zur Brennkammerwand, aus dem Wärmeübergang zwischen Feststoff und Wand (der spezifische Wärmeübergangskoeffizient α_w kann hierbei beispielsweise nach Kantorovich et al., 1999 abgeschätzt werden) sowie aus dem Wärmeübergang von der Brennkammerwand an den umgebenden gasdurchströmten Windmantel (dieser Wärmeübergang wird aber bereits im Gasphasen-Solver erfasst und ist in der Energiebilanz für die feste Phase nicht mehr zu berücksichtigen). Die Wärmeleitung im Blech der Brennkammerwand wird vernachlässigt. Mit dieser Formulierung kann eine allgemeingültige Energiebilanz für das poröse Feststoffbett entwickelt werden. In differentieller Schreibweise ist diese Energiebilanz beispielsweise in den Arbeiten von Pyle et al., Curtis et al. oder Babu et al. (Pyle et al., 1984; Curtis et al., 1988; Babu et al., 2004b) dargestellt. Daraus kann die im externen Finite-Volumen-Solver benötigte diskretisierte Form der Energiebilanz abgeleitet werden (Gleichung 6.61):

$$
\begin{aligned}
&\left(\dot{m}_{\mathrm{BS}} \cdot c_{p,\mathrm{BS}}\left(T_{\mathrm{p}} - 298{,}15\right)\right)_{\mathrm{Zelle,EIN}} + \\
&\left[\Delta H_{\mathrm{vap}}\left(\frac{\partial \dot{m}_{\mathrm{H2O,BS}}}{\partial t}\right)_{\mathrm{Zelle}} + \Delta H_{\mathrm{vol}}\left(\frac{\partial \dot{m}_{\mathrm{Volatilisierung}}}{\partial t}\right)_{\mathrm{Zelle}} + \right. \\
&\left. \Delta H_{\mathrm{Koks}}\left(\left(\frac{\partial \dot{m}_{\mathrm{Koks}}}{\partial t}\right)_{\mathrm{Kinetik+Diffusion}}\right)_{\mathrm{Zelle}}\right] \cdot \Delta t_{\mathrm{Zelle}} + \\
&\sum_{\mathrm{i}=1}^{10} \dot{m}_{\mathrm{i}} \cdot \int_{T=298{,}15K}^{T_{\mathrm{p}}} c_{p,i}(T)\,\mathrm{d}T + \\
&\left(\dot{Q}_{\lambda,\mathrm{x+y+z}}\right)_{\mathrm{Zelle}} + \dot{q}_{\mathrm{eff,Zelle}} \cdot \left(A_{\mathrm{spez}}\right)_{\mathrm{m,Zelle}} \cdot V_{\mathrm{Zelle}} + \\
&\frac{1}{dx\dfrac{0{,}5}{\lambda_{\mathrm{Bett,eff}}} + \dfrac{1}{\alpha_{\mathrm{w}}}}\left(T_{\mathrm{P}} - T_{\mathrm{w}}\right)dydz + \frac{1}{dy\dfrac{0{,}5}{\lambda_{\mathrm{Bett,eff}}} + \dfrac{1}{\alpha_{\mathrm{w}}}}\left(T_{\mathrm{P}} - T_{\mathrm{w}}\right)dxdz + \\
&\frac{1}{dz\dfrac{0{,}5}{\lambda_{\mathrm{Bett,eff}}} + \dfrac{1}{\alpha_{\mathrm{w}}}}\left(T_{\mathrm{P}} - T_{\mathrm{w}}\right)dxdy - \\
&\left(\dot{m}_{\mathrm{BS}} \cdot c_{p,\mathrm{BS}}\left(T_{\mathrm{p}} - 298{,}15\right)\right)_{\mathrm{Zelle,AUS}} = 0
\end{aligned}
\tag{6.61}
$$

Die erste sowie die letzte Zeile in Gleichung 6.61 bezeichnen die fühlbare Wärme des Feststoffes am Eintritt beziehungsweise am Austritt der betrachteten Volumenzelle. Die zweite und die dritte Zeile enthalten die Umwandlungswärmen für die heterogenen Prozesse Brennstofftrocknung, Volatilisierung und Koksabbrand (Kapitel 6.7.2.1, 6.7.2.2 und 6.7.2.3); die vierte Zeile beschreibt die fühlbare Wärme des bei diesen heterogenen Umwandlungsprozessen freigesetzten Gases. Die fünfte Zeile beinhaltet die durch Wärmeleitung im Brennstoffbett

sowie durch Konvektion und Strahlung mit der umgebenden Ofenatmosphäre ausgetauschte Wärme (dieses Kapitel). Als Referenztemperatur für zu- und abgeführte Masse an Gaskomponenten verlangt der verwendete CFD-Solver für die Fluidströmung eine Temperatur von 298,15 K, die folglich auch für das Gesamtmodell zu gelten hat. Die sechste und siebte Zeile enthalten schließlich die Beschreibung des Wärmeübergangs vom porösen Feststoff an die umgebenden festen Brennkammerwände. Deren Temperatur wird auch durch den Wärmeübergangskoeffizienten von der Wand zum windmantelseitigen Gasstrom bestimmt und gemeinsam mit dem Gasphasen-Solver ermittelt.

Sind die Konversionsraten der heterogenen Verbrennungsprozesse bekannt, so ist mit der Energiebilanz eine implizite Gleichung zur Ermittlung des Temperaturfeldes vorhanden; das Problem ist unter Anwendung passender Eintrittsrandbedingungen iterativ lösbar. Da aber sowohl das Temperaturfeld als auch die Umsetzungsraten der heterogenen Reaktionsschritte anfänglich unbekannt sind, ist zur Problemlösung noch eine äußere Iterationsschleife vorzusehen (siehe Kapitel 6.10).

6.8 Fluiddynamische Modellierung des Feststoffs

Die fluiddynamische Modellierung der festen Brennstoff-Schüttschichten, also die Modellierung des Einflusses der Brennstoff-Betten auf die Strömung der Fluidphase ist vergleichsweise einfach. Im verwendeten CFD-Solver stellt eine poröse Schüttschicht fester Partikel ein sogenanntes *poröses Medium* dar, welches eine Impulssenke für die Gasströmung bildet (siehe Impulsbilanz in Gleichung 6.3). Durch diesen Impulsverlust wird die Strömung gebremst und ein Druckverlust erzeugt (FLUENT, 2005). Die Porosität der Schüttschicht wird verwendet um zwischen Leerrohr-Geschwindigkeit und tatsächlicher physikalischer Gasgeschwindigkeit (in den Lückenräumen) zu konvertieren. Weiters besteht auch noch die Möglichkeit, einen Einfluss des porösen Mediums auf die Turbulenzkenngrößen zu modellieren, was für die vorliegende Arbeit aber nicht genutzt wurde.

Die Senke in der Impulsbilanz S_p (Quelle mit negativem Vorzeichen) errechnet sich nach der allgemeinen Forchheimer-Gleichung (Peters et al., 2003b; FLUENT, 2005) wie folgt:

$$S_p = -\left(\frac{\eta}{K_1} \mathbf{v} + K_2 \frac{\rho}{2} \mathbf{v} \cdot |\mathbf{v}| \right) \tag{6.62}$$

In dieser vektoriellen Gleichung sind die beiden Modellparameter (Forchheimer-Parameter) K_1 und K_2 skalare Größen, wenn davon ausgegangen werden kann, dass das poröse Medium als isotrope Impulssenke wirkt. Der erste Teil der Bestimmungsgleichung wird als Viskositätsteil bezeichnet und stellt das klassische Darcy-Gesetz dar. Wichtig ist dieser Anteil bei niedrigen Reynoldszahlen im viskosen Strömungsbereich, bei niedrigen Strömungsgeschwindigkeiten und laminarer Strömung. Di Blasi verwendet in einer Arbeit (Di Blasi, 1997) diesen Ansatz für die Beschreibung laminarer Strömung durch eine Schüttschicht. Der zweite Term wird als Trägheitsteil bezeichnet und wird nach Peters et al. (Peters et al., 2003b) für Reynoldszahlen größer als 10 bedeutsam. Er stellt die Erweiterung der Darcy-Gleichung nach Forchheimer dar. Entsprechend werden der Parameter K_1 als Viskosi-

tätsparameter (*viscous resistance*) und der Parameter K_2 als Trägheitsparameter (*inertial resistance*) der Impulssenke bezeichnet. Betrachtet man vereinfacht eindimensionales Problem, so lässt sich der Druckverlust entlang der Schüttschicht wie folgt ermitteln (siehe auch Eric et al., 2012):

$$\frac{\partial p}{\partial x} = -\left(\frac{\eta}{K_1} v_x + K_2 \frac{\rho}{2} v_x^2 \right) \tag{6.63}$$

Für Schüttschichten werden üblicherweise für weite Bereiche der Reynoldszahl die beiden Forchheimer-Parameter mithilfe der relativ bekannten Ergun-Gleichung ermittelt (Peters et al., 2003b; FLUENT, 2005):

$$K_1 = \frac{d_p^2 \cdot \varepsilon_{\text{Bett}}^3}{150(1-\varepsilon_{\text{Bett}})^2} \tag{6.64}$$

$$K_2 = \frac{3{,}5(1-\varepsilon_{\text{Bett}})}{d_p \cdot \varepsilon_{\text{Bett}}^3} \tag{6.65}$$

Peters et al. (Peters et al., 2003b) verwenden diesen Ansatz zur Beschreibung der Strömung in einer Schüttung aus Birkenholzpartikeln mit vergleichbarer Porosität aber deutlich kleineren Partikeln im Vergleich zur vorliegenden Arbeit. Die Autoren erzielen damit in einem komplexen Gesamtmechanismus sehr gute Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten des Trocknungs- und Pyrolyseprozesses. Die Vorhersagequalität des Druckverlustmodells alleine wird in der Arbeit von Peters et al. allerdings nicht quantifiziert.

In einer eigenen Untersuchung zum Strömungsdruckverlust von Schüttschichten aus Holzhackschnitzeln (Miltner et al., 2007; Miltner et al., 2008) wurden Ergebnisse ausgedehnter experimenteller Analysen den theoretischen Vorhersagen der Ergun-Gleichung gegenübergestellt und eklatante Abweichungen festgestellt. Für eine adäquate Abbildung der experimentellen Ergebnisse wurden Forchheimer-Parameter regressiert, die um ein bis zwei Größenordnungen von jenen der Ergun-Gleichung abweichen (K_1 ist dabei kleiner und K_2 größer als mit der Ergun-Gleichung). Am Rande dieses Forschungsprojektes wurde kurz auch der für die vorliegende Arbeit interessante Mais-Ganzpflanzen-Brennstoff untersucht und ein ähnliches Ergebnis erhalten. Für eine erste Abschätzung des Druckverlustverhaltens des eingesetzten Primärbrennstoffes ist diese Kurzanalyse ausreichend; für eine tiefergehende Charakterisierung (speziell die Abhängigkeit von Partikelgröße und Porosität) sind weiterführende experimentelle Untersuchungen erforderlich. Als Schlussfolgerung dieser Arbeit ist zu postulieren, dass die Ergun-Gleichung nicht in der Lage ist, den Druckverlust von Schüttungen gängiger biogener Brennstoffe abzubilden. Der Hauptgrund hierfür ist sicherlich jener, dass die Ergun-Gleichung (und hier speziell die Modellkonstanten der Gleichung) ursprünglich für monodisperse Kugelpackungen entwickelt wurde. Die Partikelgrößenverteilung realer Biomasse-Schüttungen lässt sich für die Ergun-Gleichung nicht mit einem mittleren charakteristischen Partikeldurchmesser beschreiben und auch die von der idealen Kugel abweichende Form der Biomassepartikel kann nicht erfasst werden. Ähnliche Erkenntnisse liefert auch die Arbeit von Eric et al. (Eric et al., 2012), in der die Durchströmung von Sojastrohballen bei verschiedenen Porositäten experimentell untersucht werden. Die Autoren verwenden zur Regression der experimentellen Ergebnisse die Struktur der Ergun-Gleichung und ermitteln damit eigene

Ergun-Modellkonstanten für ihren Brennstoff (lediglich in Abhängigkeit von der Porosität, der Partikeldurchmesser konnte nicht variiert werden). Auch hier unterscheiden sich die beiden Forchheimer-Parameter um ein bis zwei Größenordnungen von jenen, die durch die Ergun-Gleichung prognostiziert werden. Die Autoren erhalten einen Satz von Modellparametern, mit denen sich die Ergebnisse der durchgeführten Experimente sehr genau wiedergeben lassen, doch bleiben die Autoren die Anwendung auf Ergebnisse, die nicht in die Regression einflossen, leider schuldig. Damit ist die Allgemeingültigkeit der Formulierung in einem breiteren Bereich der Porosität noch nicht bestätigt. In einem darauffolgenden Paper (Repić et al., 2013) publiziert das Autorenteam Ergebnisse numerischer Strömungssimulationen mit einem einfachen Gesamtmodell und vergleicht diese mit experimentellen Resultaten aus Verbrennungsversuchen an einer Großanlage (1,5 MW_{th}). Welche Modelle genau verwendet wurden, wird zwar nicht näher spezifiziert, die Qualität der Simulationsergebnisse ist aber jedenfalls bemerkenswert.

Zum Vergleich wird der Verlauf des Schüttungsdruckverlusts, der experimentell für den gegenständlichen Maisganzpflanzen-Brennstoffs ermittelt wurde, jenen gegenübergestellt, die mit der Gleichung von Ergun (Peters et al., 2003b; FLUENT, 2005) sowie mit der Gleichung von Eric et al. (Eric et al., 2012), jeweils unter Verwendung einer Bettporosität von 0,70, ermittelt werden können. Dieser Vergleich ist gemeinsam mit den Verläufen zweier Holz-Hackschnitzel-Schüttungen (Miltner et al., 2008) in Abbildung 6-25 dargestellt.

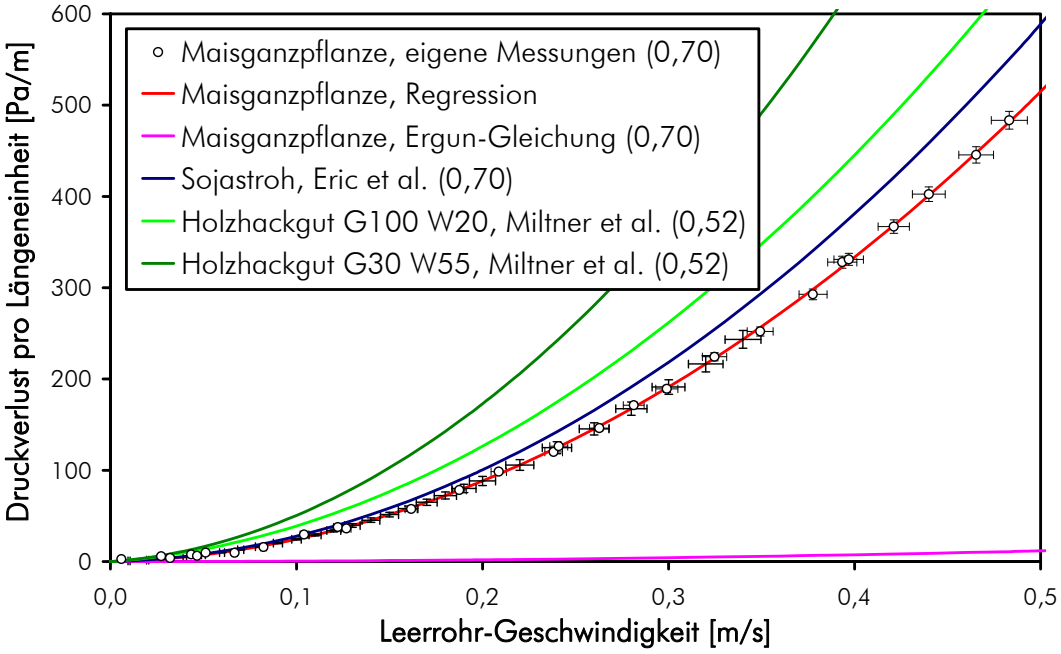


Abbildung 6-25: Druckverlustverläufe von Biomasse-Schüttungen verschiedener Quellen (Miltner et al., 2008; Eric et al., 2012) in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit; die Werte in runden Klammern bezeichnen die jeweilige Porosität

Die Abbildung zeigt, dass die eigenen Messergebnisse für Maisganzpflanzenballen relativ genau mit jenen von Eric et al. für Sojastrohballen übereinstimmen. Für letztere ist jedoch keine Verteilung der Partikelgrößen bekannt. Auch die Druckverlustverläufe der beiden untersuchten Holzhackgut-Schüttungen kommen unter Berücksichtigung der niedrigeren Porosität in einer ähnlichen Größenordnung zu liegen. Die Modellierung des Druckverlustes mit der Ergun-Gleichung (nach den Gleichungen 6.64 und 6.65) liefert ein absolut unbefriedigen-

des Ergebnis und ist deshalb auszuscheiden. Die Regression der Messergebnisse für Maisganzpflanze mittels eines Polynoms zweiter Ordnung (Ordinatenabstand Null) liefert jedoch eine sehr gute Modellbeschreibung. Diese Regressionsfunktion entspricht der Forchheimer-Gleichung und unter Berücksichtigung der Stoffeigenschaften der durchströmenden Luft können aus den Regressionsparametern sehr einfach die Forchheimer-Parameter ermittelt werden. Die erhaltenen Forchheimer-Parameter sind gemeinsam mit jenen aus der Arbeit von Eric et al. (Eric et al., 2012) für Sojastrohballen, Miltner et al. (Miltner et al., 2008) für zwei verschiedene Holzhackgüter und jenen, die durch Anwendung der Ergun-Gleichung für eine Bettporosität von 0,7 und einen charakteristischen Partikeldurchmesser von 0,04 m (siehe Kapitel 14.1.2.3) ermittelt werden können, in Tabelle 6-9 zusammengefasst. Da die Bettporosität der Maisganzpflanzen-Ballen bei den real durchgeführten Experimenten etwas anders war als jene, die als Mittelwert für die Simulationen herangezogen wurde, wurden die ermittelten Forchheimer-Parameter unter Berücksichtigung der Gleichungen von Eric et al. auf die jeweilige Porosität des Ballens und des Rostbetts (0,699 bzw. 0,625) umskaliert. Da für den vorliegenden Brennstoff keine Porositätsabhängigkeit ermittelt werden konnte, war dies die einzige Möglichkeit, der unterschiedlichen Packungsdichte der einzelnen Brennstoff-Schüttschichten gerecht zu werden. Dabei wurde vorausgesetzt, dass der funktionelle Zusammenhang des fluiddynamischen Widerstands von der Bettporosität für die Sojastrohballen von Eric et al. und jener für die Maisganzpflanzen-Ballen exakt gleich sind. Mit den so erhaltenen Parametern wurden alle Simulationen durchgeführt. Der sich ändernde Partikeldurchmesser im Rostbett (Kapitel 14.1.2.3) konnte in die Modellierung des fluiddynamischen Widerstands aufgrund fehlender Daten nicht implementiert werden. Diese Vereinfachung ist für die vorliegende Arbeit nicht besonders störend, da im Nachverbrennungsrost das Strömungsfeld dadurch nicht negativ beeinflusst wird. Hier ist die Gasströmung im Wesentlichen eindimensional ausgerichtet (von unten nach oben) und durch eine ungenaue Impulssenke im porösen Medium wird lediglich der entstehende Druckverlust über die Schüttung fehlerhaft vorhergesagt, nicht jedoch das Strömungsfeld selbst. Im Ballenvolumen, wo eine dreidimensionale Strömung vorherrscht, würde eine solche Vereinfachung schwerwiegendere Ungenauigkeiten verursachen.

Tabelle 6-9: Forchheimer-Parameter für Schüttschichten verschiedener biogener Brennstoffe

Parameter	Porosität [-]	K_1 [10^{-7} m²]	K_2 [1/m]
Maisganzpflanze (eigene Messungen)	0,700	3,687	3.256
Sojastroh nach Eric et al., 2012	0,700	3,401	3.732
Ergun-Gleichung für Maisganzpflanze	0,700	410,5	76
Holzhackgut G100 W20	0,520	1,208	3.999
Holzhackgut G30 W55	0,520	1,230	5.954
Maisganzpflanze (skaliert für Ballen)	0,699	3,650	3.288
Maisganzpflanze (skaliert für Rostbett)	0,625	1,986	6.128

Abschließend ist anzumerken, dass der Strömungsdruckverlust des Brennstoff-Ballens von einer Vielzahl an Parametern (beispielsweise Pressdichte, Materialfeuchte, Alter und mikrobiologischer Abbaugrad, Lagerung) sowie deren zeitlicher und örtlicher Variabilität abhängt. Diese Faktoren sind großteils unbekannt oder modelltheoretisch schwierig zu erfassen, weshalb die verwendeten Forchheimer-Parameter einen sinnvollen Mittelwert darstellen.

6.9 Randbedingungen

An den Grenzen der Simulationsdomäne sind in der Regel Randbedingungen anzugeben. Der physikalische Hintergrund hierzu ist, dass an bestimmten Orten des Simulationsraumes Strömungszustände oder Systemgrößen bekannt sind und in der Simulation verwendet werden sollen (beispielsweise ist die Zuströmung zum Verbrennungsapparat aus der Globalbilanzierung bekannt). Der mathematische Grund für die Anwendung von Randbedingungen besteht darin, dass die entwickelten Differentialgleichungen zu deren Lösung integriert werden müssen und dafür die Integrationskonstanten zu bestimmen sind (Paschedag, 2004). Für instationäre Simulationen sind darüber hinaus auch noch Anfangsbedingungen vorzugeben (nicht zu verwechseln mit der Initialisierung für iterative Lösungsverfahren).

Der Verbrennungsapparat und damit die Simulationsdomäne sind durch feste Wände begrenzt. Auch innerhalb des Apparates sind feste Wände zur Abtrennung der unterschiedlichen Zonen angeordnet, die im Wesentlichen gleich behandelt werden. An allen festen Wände gilt für die Strömung die Haftbedingung (*no slip condition*), das heißt die Geschwindigkeitskomponenten sind in alle Raumrichtungen null (nicht bewegte feste Wände). Dies entspricht mathematisch einer Dirichlet-Randbedingung. Für den Stofftransport sind alle Wände undurchlässig, was durch einen Nullgradienten der Konzentrationen normal zur Wand beschrieben wird (Neumann-Randbedingung), katalytische Effekte auf chemische Reaktionen wurden nicht angegeben. Wände, welche die Simulationsdomäne abschließen (externe Wände) werden in der vorliegenden Simulation entweder als adiabate Wände betrachtet (kein Wärmestrom über die Wand, Nullgradient für die Temperatur, Neumann-Randbedingung) oder es wird ortsabhängig eine feste Oberflächentemperatur vorgegeben (Dirichlet-Randbedingung, abgeschätzt aus experimentellen Ergebnissen). Interne Wände werden durch ihre Materialstärke und Wärmeleitfähigkeit charakterisiert, wodurch bei bekannter Temperaturdifferenz der Wärmedurchgang normal zur Wand ermittelt werden kann. Aus dem Wärmeübergang und den benachbarten Fluidgebieten kann dann wiederum ein Temperaturfeld berechnet werden. Durch Iteration wird auf diesem Wege ein konvergentes Temperaturfeld erhalten. Da der Temperaturverlauf im Fluidrandgebiet und auch innerhalb der festen Wand ein Teil der Lösung ist (Lösung der eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung), sind interne Wände auch nicht strikt als thermische Randbedingung aufzufassen. Abschließend kann durch die Vorgabe der Wärmeleitfähigkeit des jeweiligen Wandmaterials zusätzlich auch die zweidimensionale Wärmeleitung in der Wandebene abgebildet werden (*shell conduction*). Als Randbedingung für die Strahlungsmodellierung werden Wände als undurchlässig (opak) und diffus rückstrahlend betrachtet; ein konstanter Emissionsgrad ist vorzugeben (siehe Kapitel 14.1.2).

Zuläufe zur Simulationsdomäne werden als Dirichlet-Randbedingung vorgegeben. Basierend auf den Ergebnissen der Globalbilanzierung werden hier der Massenstrom, eine Gastemperatur sowie die genaue Gaszusammensetzung vorgegeben. Der verwendete kommerzielle CFD-Solver verwendet hierfür die Bezeichnung *mass flow inlet*. Außerdem sind an dieser Stelle auch Turbulenzparameter einzugeben, die die Strömung charakterisieren sollen. Üblicherweise werden hierfür (unabhängig vom verwendeten Turbulenzmodell) die Turbulenzintensität und der hydraulische Durchmesser des Zulaufquerschnittes herangezogen. Die Turbulenzintensität ist dabei das Geschwindigkeitsverhältnis der turbulenten Fluktuationen zur Hauptströmung (Paschedag, 2004) und ist in Gleichung 6.66 definiert. Während der hyd-

raulische Durchmesser relativ einfach zu bestimmen ist, ist die Turbulenzintensität am Eintrittsquerschnitt ein Simulationsergebnis und a priori unbekannt. Die hier betrachteten Zulauf-Strömungen sind in allen betrachteten Betriebszuständen voll-turbulent und die Literatur empfiehlt in diesem Fall die Verwendung einer Turbulenzintensität von 10 % (FLUENT, 2005). Die Unsicherheit, welche durch diese Annahme in die Simulation eingebracht wird, wurde in der vorliegenden Arbeit dadurch reduziert, dass alle Eintritte an Stellen in der jeweiligen Rohrleitung verlegt wurden, die weit genug (mindestens 10 Rohrdurchmesser) vom interessierenden Bereich entfernt liegen (Empfehlung nach Paschedag (Paschedag, 2004)). Diese Vorgangsweise reduziert auch den Einfluss, den die Vorgabe eines über den Zuleitungsquerschnitt konstanten Geschwindigkeitsprofiles auf die Lösung innerhalb der interessierenden Strömungsdomäne nimmt (im Vergleich zum Geschwindigkeitsprofil bei voll ausgebildeter turbulenter Strömung mit Haftbedingung an der Wand).

$$I_t = \frac{|\mathbf{v}'|}{|\bar{\mathbf{v}}|} \cdot 100 \ [\%] \tag{6.66}$$

Im Zuge der Definition von Zulaufrandbedingungen besteht auch die Möglichkeit, auf dem Zulaufquerschnitt die Strömungsrichtung mittels Geschwindigkeitsvektoren vorzugeben, falls die Strömung nicht exakt entlang des Normalenvektors der Eintrittsfläche verlaufen soll. Diese Randbedingung wurde in dieser Arbeit fallweise bei Eintritt von Verbrennungsluft durch Düsen mit gerichteter Strömung verwendet. In den meisten Fällen wurde aber in einem solchen Fall auch die stromaufwärts liegende Struktur mitmodelliert, sodass der auftretende Geschwindigkeitsvektor ein Teil der Lösung ist. Abschließend sind zur Modellierung des Strahlungswärmeaustausches für die außerhalb der Simulationsdomäne anzusetzenden Wandstrukturen die Oberflächentemperatur (*black body temperature*) und deren Emissionsgrad vorzugeben (FLUENT, 2005).

Ablaufrandbedingungen sind im konkreten Fall relativ einfach zu definieren, da durch das Saugzuggebläse am Ausgang des Verbrennungsapparates ein (im Wesentlichen) konstanter Druck vorgegeben wird. Für eine solche Dirichlet-Randbedingung bietet der verwendete CFD-Solver die Option pressure outlet. Hier ist ein konstanter Überdruck bezogen zum atmosphärischen Druck anzugeben. Da bei ungünstiger Positionierung des Austritts aus der Simulationsdomäne auf dem Austrittsquerschnitt auch lokale Rückströmungen von außerhalb der Domäne auftreten können, ist der Zustand dieses einströmenden Gases vorzugeben (Temperatur, Zusammensetzung, Turbulenzparameter). Im idealen Fall stimmt der hier zu definierende Zustand genau mit dem Zustand des austretenden Gases überein, weshalb eine iterative Annäherung erforderlich wäre. Da aber die Temperatur und Gaszusammensetzung, welche mit dem CFD-Modell ermittelt wird, in den wesentlichen Punkten relativ gut mit den Ergebnissen der Globalbilanzierung übereinstimmt (lediglich die emissionsrelevanten Komponenten Kohlenmonoxid und Stickstoffoxid können aufgrund der einfachen Modellierung in der Globalbilanzierung abweichen, treten aber generell in niedrigen Konzentrationen auf), können hier direkt die Daten des Heißgasstromes aus der Globalbilanzierung eingetragen werden. Wie bei den Zulaufrandbedingungen sind abschließend auch hier die Parameter für den Strahlungswärmeaustausch vorzugeben. Abbildung 6-26 zeigt exemplarisch an einer typischen Ofengeometrie für die numerische Strömungssimulation die Lage und die Typen der eingesetzten Randbedingungen. Eine Detailansicht in Abbildung 6-27 zeigt anhand einer Schnittdarstellung dieser Ofengeometrie speziell die unterschiedlich definierten festen Wände und Begrenzungen der Simulationsdomäne.

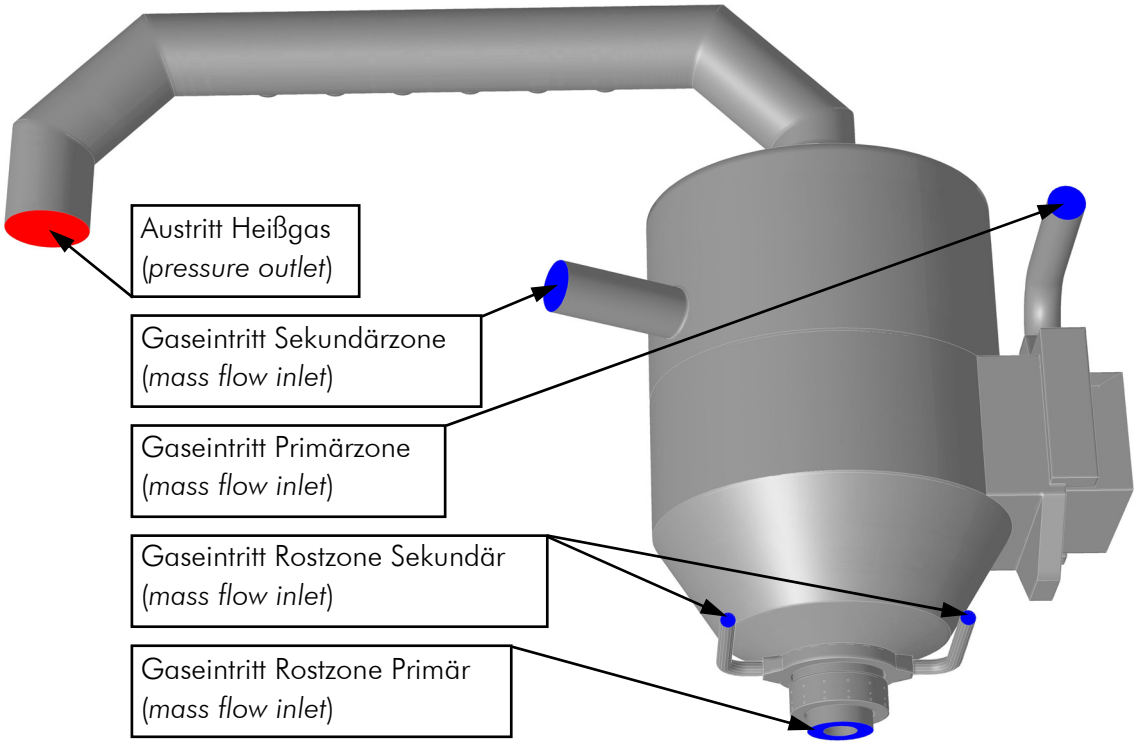


Abbildung 6-26: Überblick über Lage und Typen der eingesetzten Randbedingungen für die numerische Strömungssimulation am Beispiel einer komplexen Ofengeometrie

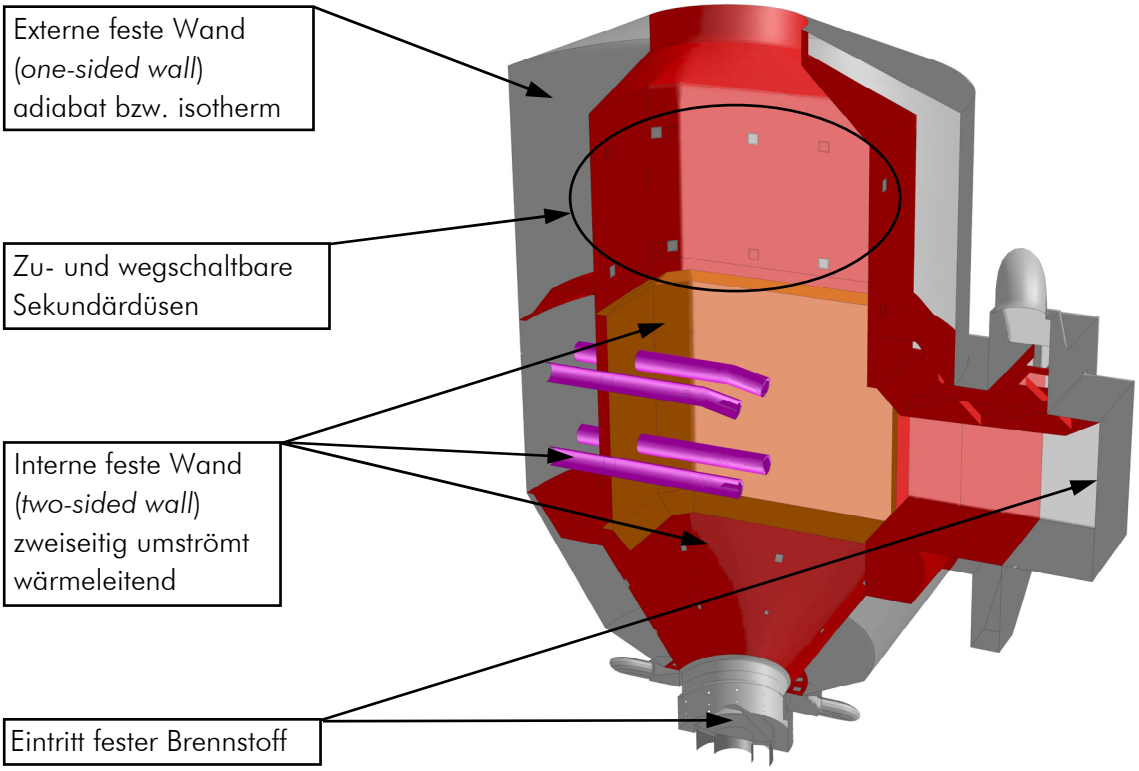


Abbildung 6-27: Detailansicht über Lage und Typen der eingesetzten Randbedingungen für die numerische Strömungssimulationen anhand der Schnittdarstellung einer Ofengeometrie

Da ein wesentlicher Teilaspekt des betrachteten Verbrennungskonzepts die Rückführung von Verbrennungsrauchgas in den Verbrennungsapparat zur Temperaturkontrolle ist, wird mit diesem Gas auch Kohlenmonoxid und Stickstoffoxid rückgeführt. Dieser Tatsache wird, wie bereits beschrieben, dadurch Rechnung getragen, dass aus den Ergebnissen der Globalbilanzierung die entsprechende Gaszusammensetzung an den Zuläufen der Simulationsdomäne vorgegeben wird. Da die Emissionsmodellierung für diese beiden Komponenten innerhalb der Globalbilanzierung aber wesentlich ungenauer als in der CFD ist, sind die als Randbedingungen vorgegebenen Gaszusammensetzungen nicht korrekt und müssten eigentlich iterativ aus den CFD-Ergebnissen für die Gaszusammensetzung am Ofenaustritt ermittelt werden (Feedback-Schleife). Der Einfluss, den eine ungenaue Startkonzentration auf den Reaktionsverlauf und die Endkonzentration dieser beiden Spezies hat, kann allerdings als gering erachtet werden und wird an dieser Stelle vernachlässigt. Der Einfluss auf Komponenten, die in höheren Konzentrationsbereichen vorliegen, ist in jedem Fall vernachlässigbar. Eine direkte iterative Kopplung von Prozesssimulations- und CFD-Techniken ist aber ebenfalls denkbar und wurde für komplexere Anwendungen (vor allem bei aufwändigerer Reaktionstechnik) bereits erfolgreich demonstriert (Möbus et al., 2003).

Auch für die Simulation des festen Brennstoffes mit dem eigens entwickelten Feststoff-Solver ist die Festlegung von Randbedingungen erforderlich. Diese umfassen aber lediglich den Massenstrom und die Eintrittstemperatur des Brennstoffes sowie dessen Zusammensetzung (Elementar- und Immediatanalyse).

6.10 Implementierung und Problemlösung

An dieser Stelle soll kurz dargestellt werden, wie die entwickelten Modelle zu einer Gesamtformulierung zusammengeführt wurden, um daraus ein simulationsfähiges Gesamtmodell zu erhalten. Hierzu ist die Anwendung verschiedener Diskretisierungs- und Lösungsverfahren erforderlich, die ebenfalls kurz andiskutiert werden sollen. Es werden die beiden verwendeten Simulationsumgebungen sowie der erforderliche Datenaustausch zwischen diesen Domänen skizziert. Außerdem wird kurz die verwendete Hardware charakterisiert, die im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendet wurde. Abschließend wird noch gezeigt, wie das Simulationsproblem zur Lösung geführt und wie der Verlauf der Lösungsfindung (Konvergenzverlauf) beurteilt werden kann.

6.10.1 Numerische Methoden

Die in den vorhergehenden Kapiteln entwickelten Bilanz- und Modellgleichungen können im Rahmen der CFD zur Berechnung von Geschwindigkeits-, Temperatur- und Konzentrationsfeldern verwendet werden, die im mathematischen Sinne die abhängigen Variablen darstellen (FLUENT, 2005). Da die meisten dieser Gleichungen partielle Differentialgleichungen sind, die untereinander mit algebraischen Gleichungen gekoppelt sind, ist in den allermeisten Fällen eine direkte analytische Lösung nicht möglich (Paschedag, 2004). Um praktische Anwendbarkeit zu erreichen, werden numerische Lösungsverfahren herangezogen. Für das partielle Differentialgleichungssystem muss also ein System aus algebraischen Näherungs-

gleichungen entwickelt werden, welches für diskrete Punkte in der Simulationsdomäne Näherungslösungen ermitteln kann. Die Festlegung der diskreten Punkte im Simulationsraum wird als *Diskretisierung des Lösungsraumes* bezeichnet und wurde in Kapitel 6.2 diskutiert. Die Überführung der partiellen Differentialgleichungen in algebraische Gleichungen wird als *Diskretisierung der Gleichungen* bezeichnet und liefert ein Gleichungssystem, welches auf numerischem Wege mithilfe von Computern gelöst werden kann (Paschedag, 2004). *Diskretisierung* generell bezeichnet also die Umwandlung der partiellen Differentialgleichungen auf einem kontinuierlichen Strömungsgebiet auf ein algebraisches Gleichungssystem auf einem diskretisierten Strömungsgebiet.

Bei der Methode der Finiten Volumina erfolgt die Diskretisierung der Gleichungen durch Integration der partiellen Differentialgleichungen über jedes einzelne diskrete Kontrollvolumen. Das Volumenintegral kann im Weiteren in ein Oberflächenintegral umgewandelt werden, wodurch Bestimmungsgleichungen für die Flüsse der abhängigen Variablen über die jeweiligen Begrenzungsflächen der Kontrollvolumina erhalten werden (Paschedag, 2004). Das führt zu der Notwendigkeit, Bilanzgrößen sowie Ableitungen von Bilanzgrößen, deren Wert an den Stützstellen (im Inneren der Kontrollvolumina) bei fortschreitendem Lösungsvorgang bekannt ist, für die Zellgrenzen zwischen den Stützstellen zu ermitteln (Paschedag, 2004; FLUENT, 2005). Hierfür sind zahlreiche Möglichkeiten entwickelt worden, die maßgeblichen Einfluss auf die Qualität der Lösung und auf die Stabilität des Lösungsvorganges haben. Für die vorliegende Arbeit kamen folgende Verfahren zum Einsatz (Paschedag, 2004):

- Zentrales Differenzenverfahren
- Upwind-Verfahren erster Ordnung
- Upwind-Verfahren zweiter Ordnung
- QUICK-Verfahren (Upwind-Verfahren dritter Ordnung)

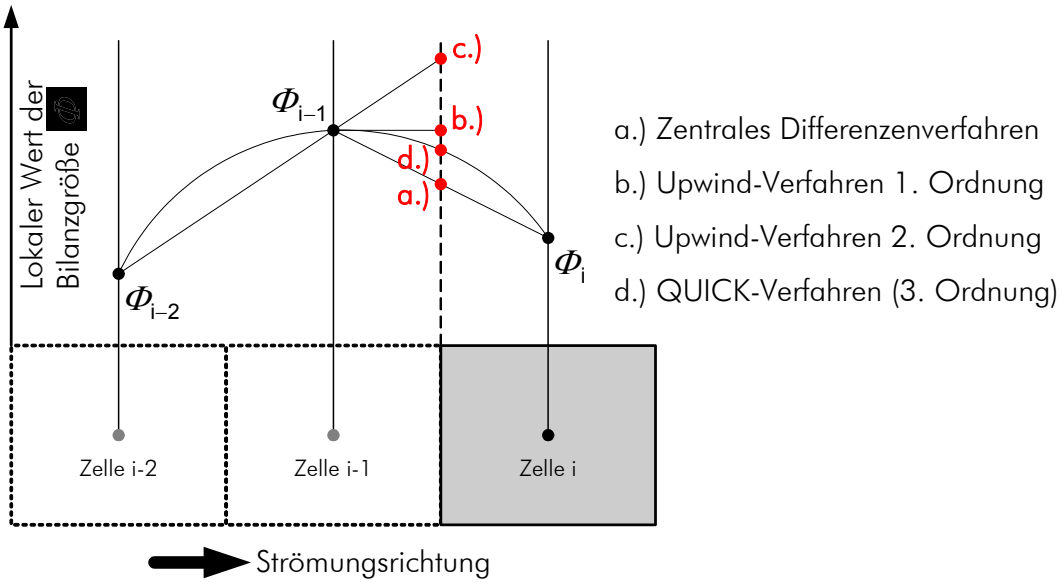


Abbildung 6-28: Diskretisierungsverfahren für Bilanzgleichungen (Paschedag, 2004)

Diese Diskretisierungsverfahren unterscheiden sich voneinander durch die Lage und Anzahl jener Stützstellen, deren aktueller Wert der jeweiligen Bilanzgröße für die Ermittlung der Bilanzgröße an der betreffenden Zellgrenze herangezogen wird. Zur Veranschaulichung ist in

Abbildung 6-28 dargestellt, wie der Wert einer Bilanzgröße an der Zellgrenze zwischen den Zellen *i* und *i-1* mit den unterschiedlichen Diskretisierungsverfahren im vereinfachten Fall einer eindimensionalen Strömung ermittelt werden könnte. Die ausführliche Herleitung dieser Verfahren, deren mathematische Implementierung, die zu erwartenden Vor- und Nachteile sowie die Entwicklung der algebraischen Gleichungen sind der Literatur zu entnehmen (Löhner, 2001; Ferziger et al., 2002; Leveque, 2004; Paschedag, 2004; Cebeci et al., 2005).

Beim zentralen Differenzenverfahren ermittelt sich der Wert der Bilanzgröße einfach als Mittelwert zwischen den benachbarten Stützstellen (lineare Interpolation jeweils gewichtet mit dem Abstand der Stützstelle zur Zellgrenze). Aufgrund seiner physikalischen Struktur eignet sich dieses Verfahren hauptsächlich für die Diskretisierung der diffusiven Terme, wofür es im verwendeten CFD-Solver auch herangezogen wird (Paschedag, 2004; FLUENT, 2005). Bei konvektionsdominierten Vorgängen wird der Wert an der Zellgrenze aber viel mehr von der stromaufwärts liegenden Zelle beeinflusst als von der stromabwärts gelegenen, sodass das Verfahren der zentralen Differenzen hier ungeeignet ist. Konvektionsterme werden deshalb mit Verfahren diskretisiert, die eine verstärkte Gewichtung auf die stromaufwärts (*upwind*) gelegenen Stützstellen legen. Beim Upwind-Verfahren erster Ordnung wird der Wert der Bilanzgröße an der Zellgrenze jenem an der Stützstelle der stromaufwärts gelegenen Zelle gleichgesetzt. Beim Upwind-Verfahren zweiter Ordnung wird der Wert an der Zellgrenze durch lineare Extrapolation der Werte zweier stromaufwärts gelegener Stützstellen ermittelt. Das Upwind-Verfahren dritter Ordnung verwendet zur Bestimmung des Wertes an der Zellgrenze neben den beiden stromaufwärts liegenden Zellen auch noch eine stromabwärts liegend Zelle (Paschedag, 2004; FLUENT, 2005). Die Methode, die im verwendeten CFD-Solver implementiert ist, ist das QUICK-Verfahren (*quadratic upstream interpolation for convective kinetics*). Die Lösungsprozedur im CFD-Solver umfasst zunächst die Initialisierung der Lösungsfelder mit Standardwerten (keine Strömung, homogene Temperatur- und Gaskomponentenverteilung) und dann die Anrechnung für eine gewisse Anzahl von Iterationen mit dem Upwind-Verfahren erster Ordnung für die konvektiven Terme. In den meisten Fällen ist für diese einfache Diskretisierung das Konvergenzverhalten besser und die Rechendauer pro Iteration geringer, sodass relativ bald ein plausibles Lösungsfeld erhalten werden kann (Strömungsfeld, Start der chemischen Reaktionen, Temperaturverteilung, Wärmestrahlung). Sobald vernünftige Lösungsfelder mit dem CFD-Solver erreicht wurden, werden schrittweise Diskretisierungsverfahren höherer Ordnung für die konvektiven Terme eingestellt (bei Simulation mit dem Komplettmodell in der komplexen Ofengeometrie aus Stabilitäts- und Konvergenzgründen durchwegs Upwind zweiter Ordnung, bei einfacheren Simulationen auch QUICK), um die Lösungsqualität zu verbessern. In dieser Phase wird auch der externe Feststoff-Solver hinzugeschaltet, dessen Massen- und Speziesbilanzen mit dem Upwind-Verfahren erster Ordnung diskretisiert sind. Aufgrund des starken Einflusses der Partikeltemperatur auf das Lösungsfeld ist die Temperatur in der Energiegleichung nach dem Upwind-Verfahren zweiter Ordnung diskretisiert. Eine Abschätzung des numerischen Fehlers, der durch Diskretisierung der Bilanzgleichungen im Vergleich zur exakten Lösung in die Simulation eingeschleppt wird, wird beispielsweise bei Larsson (Larsson, 2001) gegeben; man spricht in diesem Zusammenhang von numerischer Diffusion.

Die Implementierung des Drucks in die Grundgleichungen gestaltet sich insofern schwierig, als in der Impulsbilanz der Druckgradient berücksichtigt werden muss, für den zunächst keine Bestimmungsgleichung zur Verfügung steht. Die starke Koppelung des Geschwindig-

keits-, Druck- und Dichtefeldes über die Impulsbilanz, Kontinuitätsgleichung und Gaszustandsgleichung (Idealgasgleichung) erschwert die direkte Lösung des Gleichungssystems maßgeblich. In der Praxis wird zur einfacheren numerischen Lösung des Problems das sogenannte *Druckkorrekturverfahren* herangezogen, bei dem zunächst ein Druckfeld angenommen wird, mit dem das Geschwindigkeits- und das Dichtefeld (durch Lösen der Impulsbilanz und der Zustandsgleichung) ermittelt wird. Wenn mit dieser Lösung die Kontinuitätsgleichung nicht erfüllt wird, so wurde ein falsches Druckfeld vorausgesetzt, welches für einen zweiten Iterationsschritt korrigiert werden muss. Für die Ermittlung dieses korrigierten Druckfeldes wurde in der vorliegenden Arbeit der *SIMPLE-Algorithmus* gewählt (Paschedag, 2004; Date, 2005; FLUENT, 2005), welcher in der CFD-Praxis häufig zum Einsatz kommt und seine Leistungsfähigkeit bewiesen hat. Zu numerischen Problemen während des Lösungsvorganges kann es auch in Zusammenhang mit der Beschreibung von Turbulenz sowie chemischer Reaktionen kommen. Die Gründe hierfür liegen in den unterschiedlichen Zeitskalen der betrachteten Phänomene im Vergleich zu den Zeitskalen der mittleren Gasströmung und einer damit einhergehenden Steifheit der Gleichungssysteme. Welche Ansätze zur Behandlung dieser Schwierigkeiten in modernen CFD-Codes implementiert werden können, wird für turbulente Strömungen bei Wilcox (Wilcox, 1994) und für reaktive Strömungen bei Oran et al. (Oran et al., 2001) beschrieben.

Aufgrund der Nichtlinearität der implementierten Gleichungen ist es erforderlich, die Änderungen der zu lösenden abhängigen Variablen von einem Iterationsschritt zum nächsten zu limitieren, da ansonsten Fluktuationen und Oszillationen zu erwarten sind. Diese Limitierung erfolgt mit dem Konzept der Unter-Relaxation (*under-relaxation*), welche im FLUENT-Handbuch (FLUENT, 2005) sowie bei Paschedag (Paschedag, 2004) dargestellt ist. Sowohl im CFD-Solver für die fluide Phase als auch im externen Feststoff-Solver werden die Bilanzgleichungen nicht gekoppelt, sondern sequentiell gelöst (*segregated solver*). Durch die nichtlineare Kopplung zwischen den Gleichungen ist zur Lösung des Gesamtsystems also ein iterativer Prozess erforderlich (FLUENT, 2005).

6.10.2 Eingesetzte Software

Die dargestellten Modelle für die CFD-Simulation des komplexen Vorgangs der Biomasseverbrennung wurden nicht in einer einzelnen, sondern in zwei getrennten Software-Umgebungen implementiert. Für die Beschreibung und Simulation der partikelbeladenen Gasphase wurde der kommerzielle CFD-Solver FLUENT© in den Programmversionen 6.1.18, 6.1.22 sowie 6.3.26 verwendet. Detaillierte Informationen zu dieser Simulationsumgebung sind dem bereits öfter zitierten Handbuch (FLUENT, 2005) zu entnehmen. In dieser Software sind bereits alle Modelle für Strömung, Turbulenz, homogene Gasphasenreaktionen sowie Wärmestrahlung implementiert und der Lösungsprozess lässt sich komfortabel überwachen und steuern. Andererseits sind in diesem kommerziellen Paket kaum leistungsfähige Modelle zur Beschreibung heterogener Verbrennung verfügbar, sodass diese Funktionen (zumindest zum Zeitpunkt der Entstehung der vorliegenden Arbeit) vom Anwender hinzugefügt werden müssen. Hierfür wurden eine externe Simulationsumgebung und ein externer Gleichungslöser herangezogen. FLUENT© böte zwar die Möglichkeit, umfangreiche Modellergänzungen über das Konzept der *user-defined-functions* (*udf*) direkt im Solver zu implementieren, jedoch wurde aus Gründen der Flexibilität und der Übersichtlichkeit ein externer Ansatz gewählt. Ähnlich wie auch bereits im Abschnitt der Globalbilanzierung wurde hierfür die kommerzielle Spread-

sheet-Tabellenkalulationsumgebung Microsoft© Office Excel© 2003 11.8328.8329 SP3 verwendet, sodass ein großer Teil der Stoffdaten und thermodynamischen Berechnungen direkt übernommen werden konnte. Excel© bietet die Vorteile einer sehr übersichtlichen Umgebung für die Modellierung und einer sehr einfachen und visuellen Programmierung (*Visual Basic for Applications – VBA*) wodurch die Modellentwicklung und die Problemsuche deutlich erleichtert werden. Alle Zwischen- und Endergebnisse sind im Spreadsheet direkt sicht- und bewertbar; die grafische Analyse des Iterationsvorganges und des Lösungsprozesses sind schnell und unkompliziert umsetzbar. Für eine Modellerstentwicklung, bei der jeder Schritt sofort auf Plausibilität geprüft werden muss, erscheint diese Simulationsumgebung daher dem Autor als ideal. Andererseits bietet Excel© standardmäßig keine leistungsfähigen Solver im Paket und die Durchführung von Feldoperationen ist aufgrund des Software-Overheads relativ langsam und träge. Die Umgebung eignet sich also gut für die Entwicklung von Modellansätzen aber weniger für eine leistungsfähige Verarbeitung einer größeren Anzahl von Simulationsszenarien. Aus diesem Grund sei an dieser Stelle erwähnt, dass in der vorliegenden Arbeit keine umfangreichen Parametervariationen präsentiert werden können, sondern lediglich jene, die auch zur Modellvalidierung herangezogen wurden.

Für die vorliegende Anwendung ist der externe Feststoff-Solver auf zwei getrennte heterogene Bereiche der Brennkammer anzuwenden. Einerseits das Volumen, welches der Primärbrennstoff Biomasseballen einnimmt, und andererseits jenes, des sich auf dem Nachverbrennungsrost ausbildenden Betts an kohlenstoffreichem, bereits ausgegastem Material. Wo diese beiden Volumina in der Brennkammer angeordnet sind, ist Abbildung 6-29 zu entnehmen. Die Brennstoffeigenschaften beider Volumen sind zwar unterschiedlich, der Solver ist jedoch der gleiche.

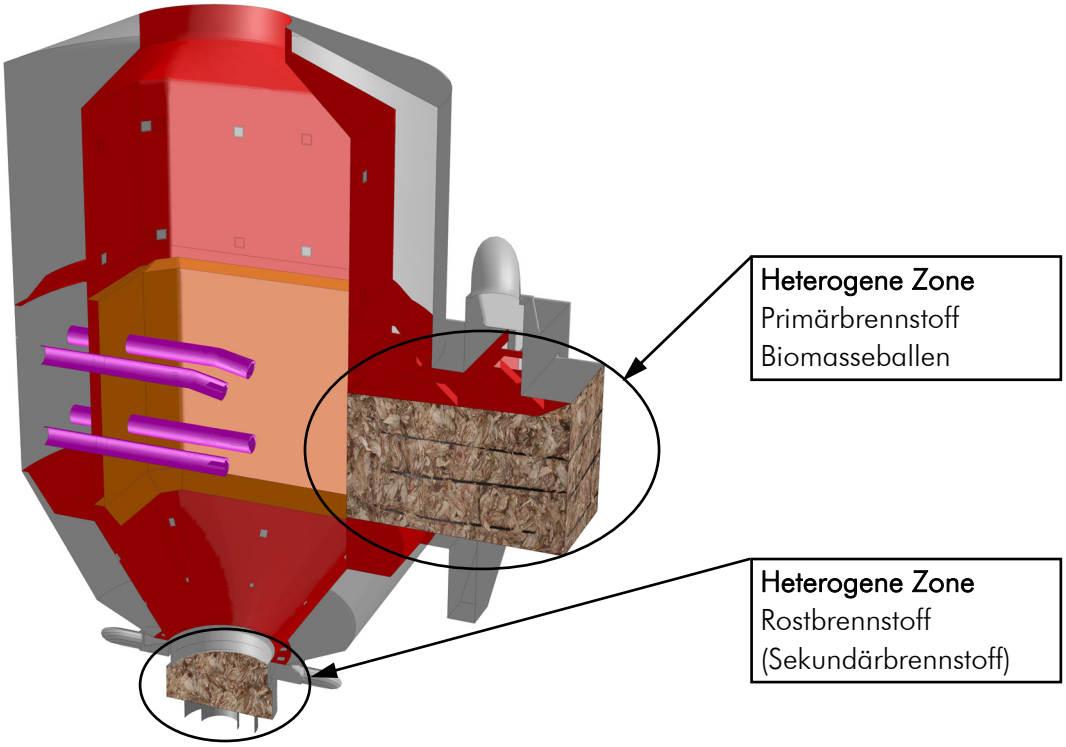


Abbildung 6-29: Lokalisierung der beiden heterogenen Brennstoffzonen im Verbrennungsapparat

Ein Vorteil der verwendeten Vorgangsweise ist, dass Gasphase und Feststoff weitestgehend unabhängig voneinander behandelt und gelöst werden können. Im Gasphasen-Solver beschränkt sich die Beschreibung des Feststoffes auf die Festlegung ortsaufgelöster Quellen und Senken für Masse (Spezies), Impuls und Energie; eine weitere Modellierung ist hier nicht erforderlich. Für den Festphasen-Solver gilt analog, dass keine Beschreibung der Gasströmung implementiert werden muss, sondern lediglich die Ergebnisse des kommerziellen Solvers als Eingangsgrößen übernommen werden müssen. Diese strikte Trennung verlangsamt zwar den Lösungsprozess, bringt aber maximale Flexibilität in der Entwicklung von Modellen und Lösungsalgorithmen für die heterogene Verbrennung.

Das Gesamtmodellkonzept umfasst nicht nur zwei getrennte Solver sondern weiters auch einen Mehrgitter-Ansatz (Paschedag, 2004). Das heißt, dass beide Solver auf unterschiedliche diskrete Gitter angewendet werden, die jedoch beide den gleichen geometrischen Raum abdecken. Im externen Feststoff-Solver wird der Ballen (Primärbrennstoff) dreidimensional aufgelöst, das Rostbett jedoch nur eindimensional in z-Richtung (Betthöhe, homogene Schichten). Hier wird angenommen, dass im Rostbett Gradienten lediglich in Längsrichtung, nicht jedoch in lateraler Richtung auftreten. Im Gasphasen-Solver sind beide Volumen natürlich voll dreidimensional aufgelöst. Durch die Verwendung eines, in Einschubrichtung des Primärbrennstoffes ausgerichtete, vollstrukturierte und orthogonalen Gitters wird der numerische Aufwand für den externen Feststoff-Solver deutlich reduziert. Die Massenbilanz ist lediglich in eine Raumrichtung (entlang der x-Achse) zu diskretisieren, orthogonal dazu (y- und z-Achse) findet kein Massentransport des festen Brennstoffes statt. Für den Brennstoff auf dem Nachverbrennungsrost gilt die analoge Annahme in Richtung der z-Achse. Die Energiebilanz ist dennoch in alle drei Raumrichtungen anzusetzen. Im Gegensatz dazu verwendet der kommerzielle CFD-Solver für die Fluidphase (nahezu) beliebige Gitter; in der vorliegenden Arbeit wurde ein in zwei Raumrichtungen unstrukturiertes hexaedrisches Gitter verwendet (*pave*-Oberflächengitter mit *cooper*-Tool projiziert). Alle Feldvariablen müssen zwischen beiden Solvern mittels Gitter-Interpolation ausgetaucht werden können. Eine grafische Darstellung dieses Datenaustauschs zwischen den beiden Solvern sowie die Vorgansweise der kombinierten Lösungsprozedur bei der komplexen Simulation einer heterogenen Biomassefeuerung sind Abbildung 6-30 zu entnehmen.

Nach der kompletten Problemdefinition in den beiden Solvern wird zunächst im Gasphasen-Solver eine Initialisierung durchgeführt und das kalte Strömungsfeld mit Diskretisierungen erster Ordnung approximativ berechnet. Dann wird das Spezies-Transport-Modell zugeschaltet und die Gaszusammensetzung der eintretenden Gasströme (pro Verbrennungszone unterschiedliche Mischungen aus Frischluft und Rezirkulationsgas) festgelegt. In den heterogenen Brennstoff-Volumenbereichen des Gasphasen-Solvers werden Startwerte für die Freisetzungsraten von Masse (Spezies) und Energie angenommen und erneut eine approximative Lösung ermittelt. Dann wird zur Unterstützung der Zündung der brennbaren gasförmigen Substanzen in speziellen Bereichen lokal eine hohe Temperatur aufgeprägt und die Modelle für chemische Reaktionen und Wärmestrahlung aktiviert. Daraufhin startet die Verbrennung und der Solver ermittelt iterativ ein erstes repräsentatives Lösungsfeld für Gasströmung, Temperatur und Zusammensetzung. Erst in dieser Phase wird der Festphasen-Solver hinzugezogen. Über UDFs (*user defined functions*) werden für die Volumen Primärbrennstoff Ballen sowie Rostbett die maßgeblichen Parameter aus dem Gasphasen-Solver FLUENT© in Dateien in ASCII-Format exportiert. Neben den Raumkoordinaten umfasst dieser Datenexport den Betrag der absoluten Gasgeschwindigkeit, Gastemperatur und Zusammensetzung (im Wesentlichen

Sauerstoffgehalt), sowie lokale Stoffeigenschaften der Gasphase wie Dichte, Viskosität, Wärmeleitfähigkeit oder Prandtlzahl. Auch die lokale Nusselt-Zahl wird ermittelt und exportiert. Für jede einzelne diskrete Zelle des Gasphasen-Solvers wird ein Datensatz generiert und zwischengespeichert.

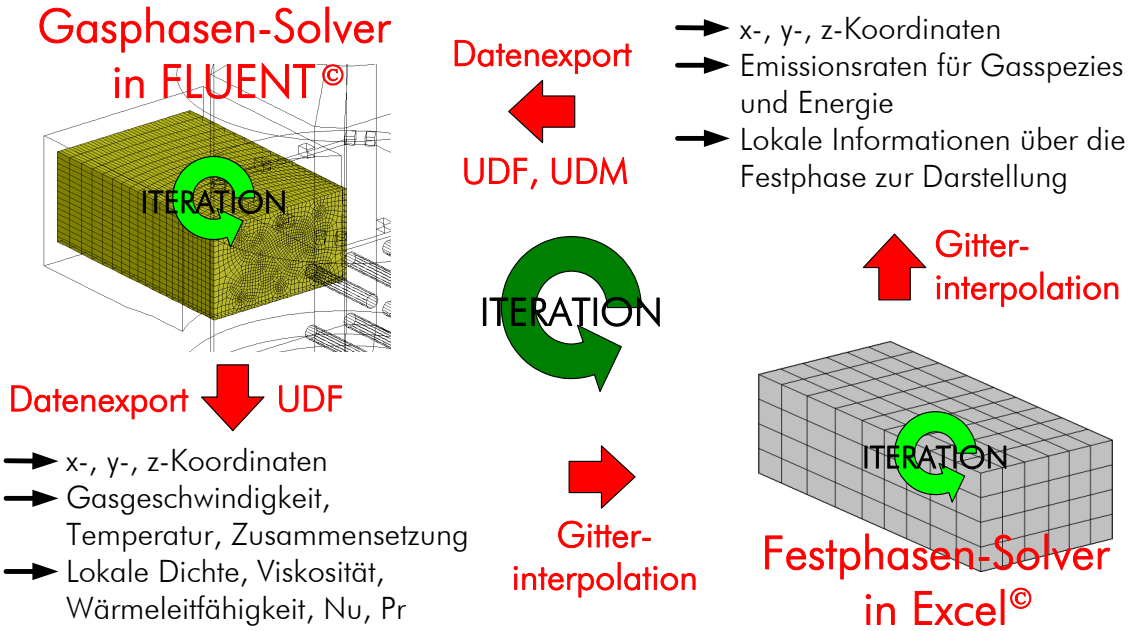


Abbildung 6-30: Kombinierte Lösungsprozedur mit getrenntem Gasphasen- und Feststoff-Solver und erforderlicher Datenaustausch

Der exportierte Lösungssatz wird im Feststoff-Solver importiert und an das vorhandene Gitter angepasst. Da das Gitter des Gasphasen-Solvers in den meisten Fällen wesentlich feiner ist als jenes des Festphasen-Solvers ist an dieser Stelle eine Gitterinterpolation erforderlich (im Wesentlichen eine auf den geometrischen Informationen basierte Mittelwertbildung). Mit diesen Eingangsparametern kann dann die Lösung im Festphasen-Solver gestartet werden, welche ebenfalls iterativ verläuft. Zunächst wird das Partikeltemperaturfeld im Brennstoff-Volumen als konstant angenommen und die Massen- und Speziesbilanzen gelöst, sodass die Reaktionsraten ermittelt werden können. Bei vorgegebener Partikeltemperatur sind die Massen- und Speziesbilanzen ohne Iteration direkt lösbar. Mit diesen Reaktionsraten können die Quellen und Senken für Energie berechnet und die Energiebilanz gelöst werden. Als Lösung der Energiebilanz wird das Partikeltemperaturfeld im Brennstoffvolumen erhalten. Zu diesem Zweck ist eine Nullstellensuche für den Energiebilanzfehler für alle Zellen der Brennstoffvolumina durchzuführen. Als einzige unabhängige Variable verbleibt für diesen Schritt die jeweilige Partikeltemperatur innerhalb der Zelle. Für diese Nullstellensuche wurde ein einfacher Newton-Raphson-Solver implementiert. Aufgrund der Wärmeleitung sowie des Stofftransportes sind die Lösungen für die diskreten Volumenzellen untereinander hinsichtlich der Partikeltemperatur relativ stark gekoppelt. Es zeigt sich, dass aus diesem Grund für eine isoliert betrachtete Zelle nur in den seltensten Fällen sofort eine Nullstelle gefunden werden kann; die Nullstellensuche ist nur im Verbund aller Zellen eines Brennstoffvolumens erfolgreich. Aus diesem Grund wurde der Solver dahingehend erweitert, zunächst ein Minimum für den Energiebilanzfehler der jeweiligen Zelle zu suchen und anschließend zur nächsten Zelle voranzuschreiten. Eine fixe Reihenfolge in der die Zellen durchlaufen werden führt speziell für das numerisch schwierige Rostbett (siehe Kapitel 6.10.4) in den meisten Fällen zur Diver-

genz. Deshalb wird nach jedem Iterationsschritt die Zelle mit dem größten Residuum gesucht und dort der nächste Iterationsschritt durchgeführt (würde dabei für die gleiche Zelle erneut iteriert, wird entsprechend das zweitgrößte Residuum gesucht). Durch wiederkehrende Minimumssuche über die einzelnen Zellen wird am Ende schließlich für alle Zellen innerhalb der vorgegebenen Toleranz eine Nullstelle des Bilanzfehlers gefunden, sodass die Energiebilanz für alle Zellen einzeln sowie auch global geschlossen ist. Zur Beschleunigung dieses Konvergenzvorganges wird zunächst mit einer groben Toleranz begonnen, die im weiteren Verlauf dann stufenweise verfeinert wird (üblicherweise 3 Stufen mit jeweils um einen Faktor 10 niedrigerer Toleranz). Da die Massen- und Speziesbilanzen mit jeder neuen Partikeltemperatur automatisch direkt gelöst werden, liegt bei konvergentem Partikeltemperaturfeld eine gesamtkonvergente Lösung für den Feststoff vor.

Die Ergebnisse des Festphasen-Solvers können anschließend zurück an den Gasphasen-Solver transferiert werden. Hierfür wird wieder eine Gitter-Interpolation der Ergebnisse auf grobem Gitter in Ergebnisse auf feinerem Gitter durchgeführt und die relevanten Daten in ASCII-Dateien exportiert. Konzeptuell werden zwei unterschiedliche Datensätze exportiert: volumenbezogene Daten (Emissionsraten von Masse und Energie in den finiten Volumenzellen) sowie oberflächenbezogene Daten (Wärmeströme an den Schüttschicht-Grenzflächen). Die volumenbezogenen Daten umfassen neben den räumlichen Koordinaten lediglich die örtlich aufgelösten Emissionsraten von Energie und den zehn berücksichtigten Gaskomponenten. Um das Potential zur grafischen Auswertung der kommerziellen Software auch für den selbstentwickelten Feststoff-Solver nutzbar zu machen, können darüber hinaus noch all jene Parameter des Feststoffes exportiert werden, die in dreidimensionalen Contour-Plots oder ähnlichen Analyse-Tools dargestellt werden sollen. Die oberflächenbezogenen Daten umfassen einerseits die ortsaufgelöste Strahlungswärmestromdichte an der Oberfläche der Brennstoffvolumina zur Ofenatmosphäre und andererseits die ortsaufgelöste effektive Wärmestromdichte der wandberührten Oberflächen der Brennstoffvolumina in Richtung der direkt kontaktierenden Ofenwände.

Der Import der Ergebnisse des Feststoff-Solvers wird über UDFs und UDMs (*user defined memory*, frei definierbarer räumlich aufgelöster Skalar) in den Gasphasen-Solver FLUENT© eingelesen und zugeordnet. Mit den neuen Freisetzungsraten für Masse und Energie wird ein neuer Iterationsschritt des Gesamtsystems gestartet. Nach einigen Durchläufen hat sich das Lösungsfeld in beiden Solvern soweit stabilisiert, dass im Gasphasen-Solver für die Bilanzgleichungen Diskretisierungen höherer Ordnung angewendet werden können. Sobald die Lösung den definierten Konvergenzkriterien (siehe Kapitel 6.10.4) genügt, wird die Iteration abgebrochen und das Lösungsfeld steht zur Analyse bereit. Diese Lösungsanalyse wird sowohl mit den Mitteln des kommerziellen Solvers als auch mit den Mitteln der Spreadsheet-Tabellenkalulationsumgebung durchgeführt.

Abbildung 6-31 zeigt einen Screenshot der Simulationsumgebung zur Beschreibung der festen Phase und der heterogenen Reaktionsschritte („Ballenmodel.xls“). Die einzelnen Fenster zeigen das Front-End (Eingabe der wesentlichsten Simulationsparameter und Simulationsstart), das tabellarische Modell selbst (etwa 190 Einträge pro diskreter räumlicher Zelle), die automatische Konvergenz- und Plausibilitätskontrolle (Überprüfung der Schließung aller Bilanzen innerhalb der geforderten Toleranz) sowie ein in Echtzeit erstelltes Diagramm zur raschen Überprüfung der Simulationsergebnisse. Eine in der vorliegenden Arbeit häufig verwendete räumliche Auflösung des Ballens umfasst 12.600 diskrete Zellen (18 in x-Richtung,

35 in y-Richtung und 20 in z-Richtung) und resultiert in einer Dateigröße des Modells inklusive der Daten von etwa 180 MB.

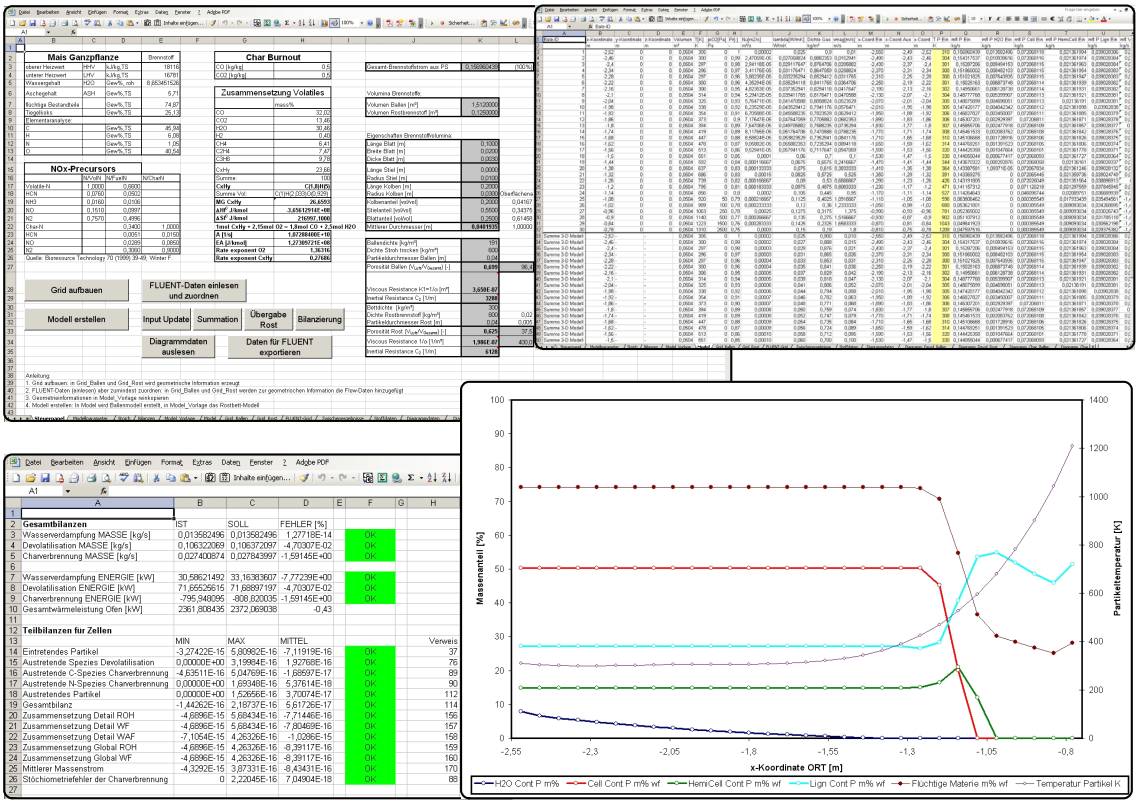


Abbildung 6-31: Screenshot der Simulationsumgebung „Ballenmodell" zur Beschreibung der festen Brennstoffphasen bei der heterogenen Biomasseverbrennung

Ein Screenshot der kommerziellen CFD-Simulationsumgebung FLUENT© ist Abbildung 6-32 zu entnehmen. Auch hier sind die unterschiedlichen Fenster zur Eingabe der Simulationsparameter, zur Auswahl der zu implementierenden Modellformulierungen sowie Diagramme und Grafiken zur Überprüfung des Konvergenzverlaufes und der endgültigen Lösung zu sehen.

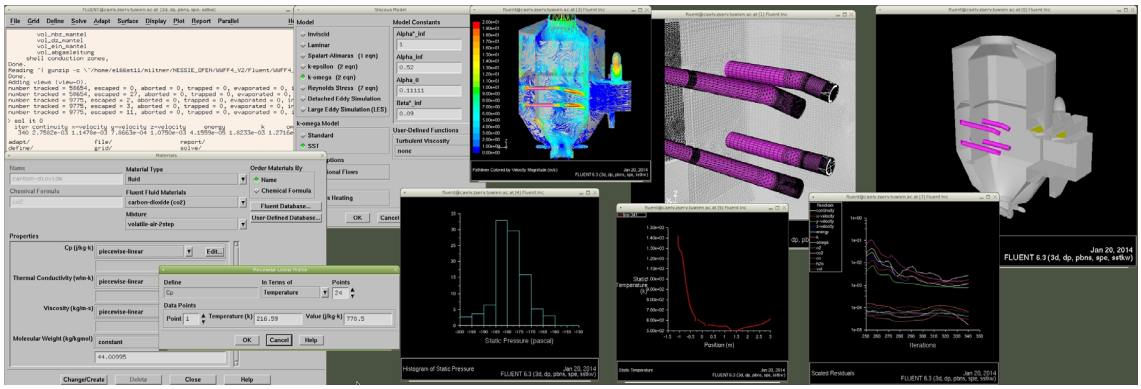


Abbildung 6-32: Screenshot des kommerziellen CFD-Solvers FLUENT© zur Beschreibung der Vorgänge in der Gasphase bei der heterogenen Biomasseverbrennung

6.10.3 Eingesetzte Hardware

Die Simulationsarbeiten mit dem selbst entwickelten heterogenen Feststoff-Solver („Ballenmodell") wurden ausnahmslos auf einem herkömmlichen Arbeitsplatz-Rechner (Intel®Core™2 Quad CPU Q6600 2,4 GHz, 4 GB RAM) durchgeführt. Die Implementierung in Microsoft© Office Excel© 2003 lässt dabei lediglich die Verwendung eines Microsoft©-WINDOWS©-Betriebssystems zu (Microsoft© WINDOWS© XP Professional SP3). Die Rechenperformance ist damit aufgrund des Software-Overheads bei weitem nicht so hoch wie bei einem spezialisierten Hardware-System, ist aber dennoch ausreichend für die Code-Entwicklung und Evaluierung. Die Implementierung und Simulation der Gasphasenströmung mit dem kommerziellen CFD-Solver FLUENT© erfolgte hingegen vorwiegend auf fortschrittlichen Cluster-Systemen. Im Zuge der vorliegenden Arbeit kamen im Wesentlichen drei verschiedene Infrastrukturen zum Einsatz, die zum Zeitpunkt der Entstehung der Arbeit an der Technischen Universität Wien verfügbar waren.

sc.zserv.tuwien.ac.at ist ein AlphaServer-SC-45-System, welches am Zentralen Informatikdienst (ZID) der Technischen Universität Wien seit 2002 zur Verfügung stand (Berger et al., 2002). Es ist dies ein Cluster-System bestehend aus 10 Knoten ES45 zu je 4 Prozessoren DEC 21264C mit einer Prozessortaktung von 1 GHz. Die Hauptspeicherbestückung besteht aus 16 GB pro Knoten und ermöglicht damit auch die Simulation komplexerer Geometrien mit hohen Zellzahlen. Als Betriebssystem wird Tru64 Unix verwendet. Durch die Verwendung von Shared Memory ist das Cluster-System auch in der Lage, auf Basis von SMP (*symmetric multiprocessing*) Aufgaben auf mehrere CPUs aufzuteilen, um die Berechnungszeit zu verringern (Parallelisierung).

navier.vt.tuwien.ac.at ist ein am Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften der TU Wien betriebenes PC-Cluster-System, welches in der ursprünglichen Form im Jahre 2004 in Betrieb genommen wurde. Durch laufende Erweiterungen der Prozessoren und Hauptspeichermodule wurde das System dem stets steigenden Leistungsbedarf angepasst. Ursprünglich mit P4-Prozessoren zu je 2,4 GHz Taktrate und 2 GB Hauptspeicher ausgestattet, erfolgte der Ausbau schließlich auf AMD64-DualCore-CPUs zu je 3,2 GHz und 16 GB Hauptspeicher pro Knoten (Harasek et al., 2014). Als Betriebssystem fungiert eine Linux-Variante. Aufgrund der schwächeren Bandbreite des Hauptspeicherbusses ist die Rechenperformance nicht direkt der Taktrate der CPUs proportional, sodass ein direkter Vergleich mit der AlphaCluster-Architektur erschwert wird.

caelv.zserv.tuwien.ac.at schließlich ist eine Einzelmaschine des ZID an der TU Wien, die 8 Stück AMD Quad-Core-CPUs vom Typ AMD Opteron 8356 zu je 2,3 GHz Taktrate bietet. Das Gesamtsystem verfügt über eine Hauptspeichergröße von 128 GB und bietet ebenfalls die Möglichkeit hocheffizienter Parallelisierung von Simulationsjobs. Auch dieses Computersystem ist mit einer Linux-Variante als Betriebssystem ausgestattet.

6.10.4 Überwachung des Konvergenzverlaufs

Bei der Lösung des aufgestellten und diskretisierten Gleichungssystems mit iterativen Methoden kann in der Regel die exakte Lösung erst mit einer unendlichen Anzahl von Iterationen erreicht werden (Paschedag, 2004). Aus diesem Grund sind Abbruchkriterien zu definie-

ren, die es erlauben, die Lösungsprozedur zu einem bestimmten Zeitpunkt abzubrechen und eine angenäherte Lösung zu erhalten, deren Abweichung zur exakten Lösung zumindest größenordnungsmäßig abgeschätzt werden kann. In der Praxis werden hierfür mehrere Parameter, die sich während des Lösungsverlaufes ändern, von Iteration zu Iteration analysiert (*monitoring*) und bei Unterschreiten definierter Toleranzgrenzen wird die Lösung als konvergent betrachtet.

Der kommerzielle Gasphasen-Solver verwendet standardmäßig zur Überwachung des Konvergenzverlaufes das Konzept des Residuums. Kann die Lösung der diskretisierten Erhaltungsgleichung einer Bilanzgröße als Nullstellensuche eines linearen Gleichungsfunktionals angeschrieben werden, so definiert sich das Residuum der *k*-ten Iteration als Abweichung zur Nullstelle und deshalb als Bilanzfehler (*imbalance*) in der Erhaltung der Bilanzgröße (Paschedag, 2004; FLUENT, 2005). Für Feldgrößen ist das Residuum ein Vektor, für skalare Größen (wie die Masse im Rahmen der Kontinuitätsgleichung) ist das Residuum eine skalare Größe. Für jede Rechenzelle der Domäne wird für jeden Iterationsschritt ein eigenes Residuum ermittelt. Aus dieser großen Anzahl skalarer und vektorieller Größen wird durch geeignete Methoden für jede Bilanzgröße pro Iteration ein charakteristisches skalares Residuum ermittelt (Paschedag, 2004; FLUENT, 2005). Da die absolute Größenordnung solcher Residuen aber sehr stark von der jeweiligen Bilanzgröße und der Problemstellung abhängt, werden unskalierte Residuen nur sehr selten zur direkten Konvergenzprüfung herangezogen. Um aussagekräftigere Werte zu erhalten, werden Residuen deshalb meistens skaliert, also auf einen aussagekräftigen Wert bezogen (beispielsweise aktuelle Zellgeschwindigkeiten oder Eintrittsrandbedingungen). Die so erhaltenen skalierten Residuen (*scaled residuals*) sind ein geeignetes Werkzeug um zu entscheiden, ob eine Lösung bereits konvergent ist und die Iteration abgebrochen werden kann (FLUENT, 2005). Residuen in der vorliegenden Arbeit haben bei Iterationsstart einen Wert von 1 und bei Iterationsabbruch je nach gewählter Initialisierung eine Größenordnung von 10^{-3} bis 10^{-6}.

Für den Festphasen-Solver wird als skaliertes Residuum lediglich der Energiebilanzfehler benötigt, da Massen- und Stoffbilanzen direkt gelöst werden können. Das Residuum wird aus der Wurzel der Summe der Bilanzfehlerquadrate aller Zellen der jeweiligen Brennstoffvolumina ermittelt und auf den übertragenen Gesamtwärmestrom zur Skalierung bezogen. Üblicherweise entspricht ein skaliertes Residuum in der Größenordnung 10^{-5} bereits einem Gesamtenergiebilanzfehler von unter 0,1 %, sodass dieser Wert als Abbruchkriterium festgelegt werden kann. Versuche zeigen, dass je nach Problemstellung Residuen zwischen 10^{-10} und 10^{-16} erreicht werden können, bevor durch die begrenzte Rechengenauigkeit der Simulationsumgebung die bestmögliche Lösung erreicht ist. Hier ist das Partikeltemperaturfeld aber bereits bis auf die 4. oder 5. Nachkommastelle gelöst.

Zusätzlich zum Monitoring der Residuen werden auch für charakteristische skalare Größen die Lösungen zweier aufeinanderfolgender Iterationsschritte verglichen (Paschedag, 2004) und für die Differenz ein Abbruchkriterium definiert. Als skalare Größen kommen hierfür beispielsweise Massenströme über Kontrollflächen sowie Temperatur, chemische Zusammensetzung oder Turbulenzkenngrößen an definierten charakteristischen Punkten der Simulationsdomäne aber auch als Oberflächen- und Volumenintegral in Frage. Das Monitoring dieser Größen während der Lösungsprozedur wird sowohl im kommerziellen CFD-Solver als auch im externen Feststoff-Solver zur Konvergenzentscheidung verwendet. Zusätzlich zum

Monitoring der Residuen ist damit eine striktere Aussage über den Konvergenzgrad einer Lösung zu treffen.

Abbildung 6-33 stellt einen beispielhaften Verlauf der Residuen innerhalb des Gasphasen-Solvers dar. Simuliert wurde hier auf fein diskretisiertem Gitter (3,93x10^6 Zellen) beginnend von einer kalten Initialisierung das komplexe Gesamtmodell (Strömung, Turbulenz, chemische Reaktionen, Wärmestrahlung) jedoch mit konstanten Bedingungen für die feste Brennstoffphase (konstante Quellen für Spezies und Energie). Während der ersten 500 Iterationen wurde lediglich das Strömungs- und Turbulenzfeld angerechnet und danach die chemischen Reaktionen hinzugeschaltet und lokal eine Zündtemperatur aufgeprägt. Es ist deutlich zu erkennen, dass chemische Reaktionen nur in jeder zehnten Strömungsfeld-Iteration berechnet werden. Nach 600 Iterationen wurde schließlich noch das Strahlungsmodell hinzugeschaltet. Die nachfolgenden Peaks bis zur 1500. Iteration erfolgen im Zuge der sukzessiven Umschaltung der Bilanzgleichungsdiskretisierung von erster auf zweite Ordnung. Der dargestellte Verlauf der Residuen zeigt, dass ein Modell mit relativ gutmütigem Konvergenzverhalten vorliegt.

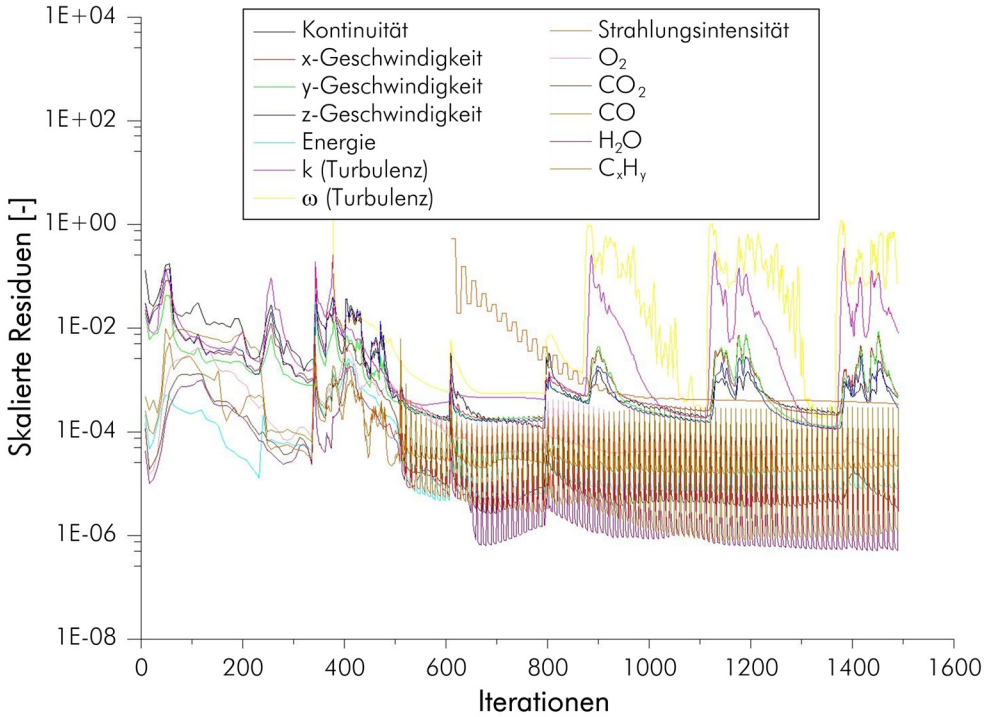


Abbildung 6-33: Beispielhafter Residuenverlauf für den kommerziellen Solver der Fluidphase

Abbildung 6-34 zeigt einen beispielhaften Verlauf der Residuen innerhalb des Feststoff-Solvers. Hier wurden sequentiell ein eindimensional aufgelöstes Ballenmodell mit 30 Zellen sowie ein eindimensionales Rostbettmodell mit 20 Zellen von der kalten Initialisierung (Temperatur homogen 300 K) bis zur Konvergenz simuliert. Die Übergabeparameter von der fluiden Phase wurden bei diesen Simulationen konstant gehalten. Die Kurven beider Modelle zeigen an verschiedenen Stellen Plateaus gefolgt von stärkeren Abfällen, welche die Umstellung auf ein schärferes Toleranzkriterium markieren (siehe Kapitel 6.10.2). Das Ballenmodell zeigt bei üblichen Betriebsbedingungen ein ausgesprochen angenehmes Konvergenzverhalten, innerhalb weniger Iterationen kann von der Initialisierung weg ein vernünftiges Lösungsfeld errechnet werden. Das Konvergenzverhalten des Rostbettmodells (gleicher mathemati-

scher Aufbau, anderer Einsatzbereich, andere Betriebsparameter) ist deutlich unvorteilhafter. Aufgrund der viel stärkeren Wärmetönung (ein Großteil des Koksabbrandes geschieht hier) sowie der stärkeren Kopplung der Zellen des Volumens untereinander (höhere Wärmeleitfähigkeit, geringere räumliche Distanzen) ist die Lösungsfindung deutlich komplexer und zeitaufwändiger. Die Anwendung eines Unterrelaxations-Faktors in der Größenordnung von 0,5 bis 0,75 ist zur Dämpfung und Vermeidung von fluktuierenden und oszillierenden Lösungen erforderlich. Aufgrund der höheren Wärmetönung liegt das erreichbare Niveau der Residuen hier auch deutlich höher als beim Ballenmodell (gleiche Präzision der Partikeltemperatur resultiert beim Rostbettmodell in einem größeren Energiebilanzfehler als beim Ballenmodell).

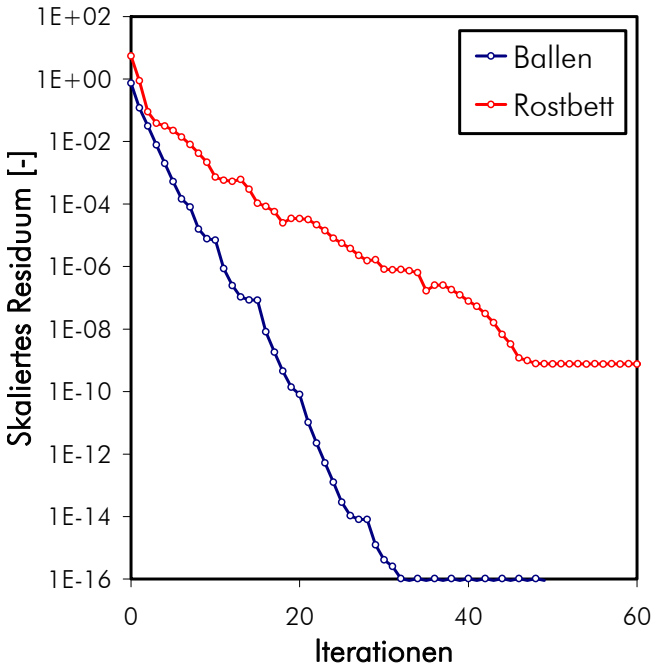


Abbildung 6-34: Beispielhafter Residuenverlauf für den Feststoff-Solver

Durch wiederholte Lösung durch die beiden Solver und Datenaustausch ist meist innerhalb relativ weniger Iterationsschritte innerhalb des geforderten Toleranzbereiches eine Konvergenz des Gesamtsystems aus fluider Phase und fester Phase erreichbar. Die erforderlichen 5 bis 15 Iterationsschritte sind manuell einzuleiten und zu überwachen. Werden große Zellzahlen im Feststoff-Gitter verwendet, so macht sich die Kopplung aller Gitterzellen untereinander aufgrund der Wärmeleitfähigkeit in Form eines sehr hohen rechentechnischen Aufwandes bemerkbar (etwa ab 10.000 Zellen). Zur Beschleunigung des Lösungsvorgangs werden deshalb zunächst jeweils alle Zellen isoliert betrachtet und erst am Ende des Iterationsdurchgangs die Querbeeinflussung durch Wärmeleitung ermittelt. Da die effektive Wärmeleitung im Feststoff gegenüber den anderen thermischen Effekten innerhalb der Einzelzelle (Wärmetönung durch Reaktion, Wärmeübergang ans Gas, Wärmestrahlung) von deutlich kleinerer Größenordnung ist, liegt ein gut gedämpftes System vor, mit dem auf diese Weise innerhalb weniger zusätzlicher Iterationen eine konvergente Lösung produziert werden kann. In Summe ist die Lösungsvorgang um ein Vielfaches schneller.

7 Modellvalidierung für die numerische Strömungssimulation

Die numerische Strömungssimulation ist ein mächtiges Werkzeug für die fluiddynamische und reaktionstechnische Beschreibung komplexer verfahrenstechnischer Prozesse, Anlagen und Apparate. Wie bei allen Simulationsarbeiten stet und fällt die Qualität der erzielbaren Ergebnisse mit der mathematischen Beschreibung und Modellierung. Um, wie in der vorliegenden Arbeit, Strömungs- und Reaktionsphänomene in einem komplexen Biomasseverbrennungsapparat zu beschreiben, sind daher alle wesentlichen implementierten Modellierungsschritte kritisch zu hinterfragen, ihre Anwendbarkeit zu überprüfen und ihre Ergebnisse zu validieren. Für manche Modelle reicht in diesem Zusammenhang eine Literaturrecherche, andere wiederum sollten für die konkrete Anwendung mit eigenen Messergebnissen verglichen werden. In der vorliegenden Arbeit werden aus diesem Grund die wesentlichsten Modellierungsschritte isoliert und unabhängig voneinander betrachtet.

Da ein wesentliches Merkmal des hier analysierten Verbrennungsprozesses die intensive turbulente Durchmischung im Kern der Brennkammer darstellt, ist die Auswahl eines geeigneten Modells zur Beschreibung der Turbulenz (siehe Kapitel 6.4) unabdingbar. Die Strömung im Apparat wird im Wesentlichen durch zwei fluiddynamische Ausprägungen charakterisiert: der gerade sowie der verdrallte Freistrahl in der Primärverbrennungszone (in kleinerem Umfang auch in der Sekundär- und Rostverbrennungszone vorhanden) und der großskalige und langsam rotierende Wirbel in der Sekundärverbrennungszone. Aus diesem Grund werden der gerade sowie der verdrallte turbulente Freistrahl isoliert als Einzelphänomen betrachtet. Hier können Simulationsergebnisse der verfügbaren Turbulenzmodelle mit selbst durchgeführten Messungen sowie mit Messergebnissen aus der Literatur verglichen und somit die Qualität der Simulationen validiert werden. Die gesamte Analyse ist in Kapitel 14.4 im Anhang dargestellt; im hier folgenden Abschnitt wird aus Platzgründen lediglich eine Zusammenfassung der Erkenntnisse sowie die Auswahl des geeignetsten Turbulenzmodells für die nachfolgenden komplexen Simulationen des Verbrennungsapparates gezeigt.

Einen weiteren Fokuspunkt der Modellanalyse und –validierung bildet die Untersuchung des homogenen Gasphasenreaktionsmechanismus. Da die komplexen reaktionstechnischen Vorgänge im realen Apparat durch einen relativ einfachen Mechanismus mit zehn Gaskomponenten und sieben Einzelreaktionen approximiert werden, ist eine zumindest grundsätzliche Einschätzung der Leistungsfähigkeit sowie der zu erwartenden Aussagekraft der Ergebnisse unerlässlich. Deshalb wird der entwickelte Mechanismus isoliert anhand eines idealisierten Rohrreaktors bei verschiedenen Reaktionsregimen analysiert. Die Ergebnisse einer ausge-

dehnten Parametervariation werden dabei auf physikalische Sinnhaftigkeit untersucht und in gewissem Umfang soll auch ein Bezug zu realen Messergebnissen gezogen werden.

Abschließend wird das Verhalten des heterogenen Verbrennungsmodells anhand einer vereinfachten Geometrie mit eindimensionaler Diskretisierung für den Feststoff analysiert. Hiermit können zunächst das (zum Teil schwierige) Konvergenzverhalten und die Lösungsstabilität des Modells abgeschätzt und geeignete Methoden zur Beschleunigung der Lösungsermittlung erarbeitet werden. Andererseits können damit sowohl die Partikeltemperatur und die Gehalte der Pseudokomponenten im Feststoff als auch die Freisetzungsraten gasförmiger Komponenten und der Wärmeaustausch zwischen fester und fluider Phase untersucht und auf Plausibilität getestet werden. Eine einfache Sensitivitätsanalyse gibt darüber hinaus einen Eindruck über die Abhängigkeit der Ergebnisse des heterogenen Verbrennungsmodells von den wesentlichsten Betriebsparametern der Gasphase.

7.1 Zusammenfassung der Ergebnisse der Freistrahlsimulation und Auswahl eines Turbulenzmodells für die Ofensimulation

Die durchgeführten Analysen, deren Detaildarstellung Kapitel 14.4 zu entnehmen ist, haben klar und deutlich gezeigt, dass die heute verfügbaren RANS-Turbulenzmodelle sowohl für den geraden Freistrahl als auch für den untersuchten Drallstrahl mit Prallplatte sehr unterschiedliche Strömungsfelder vorhersagen, die bereits auch bei ersten überschlägigen CFD-Simulationen komplexerer Apparate große Fehlerquellen darstellen können. Aus diesem Grund ist eine qualifizierte Auswahl des geeignetsten Turbulenzmodells mithilfe experimenteller Daten oder Daten aus der Literatur unumgänglich.

Die am Beginn der Auswertung beider Freistrahlen präsentierten Contourplots der 1%-Strahlgrenze verwenden sowohl für die Isofläche als auch für die Färbung der Fläche nach dem Geschwindigkeitsbetrag sehr niedrige Geschwindigkeiten (0,07378 bis 0,2 bzw. 0,4 m/s). Deshalb werden die Unterschiede der einzelnen Turbulenzmodelle mit diesen Darstellungen noch verstärkt. Mangels ausreichend genauer Messdaten aus den eigenen Experimenten oder aus der Literatur sind diese Darstellungen aufgrund der niedrigen Geschwindigkeiten nicht für die Validierung verwendbar.

Die Auswertung für den geraden Freistrahl zeigt, dass das Geschwindigkeitsfeld (ausgewertet wurde lediglich das Axialgeschwindigkeitsfeld) durch das Standard-k-ε-, das Realizable-k-ε sowie das SST-k-ω-Modell am besten beschrieben werden. Für die Beschreibung des Turbulenzfeldes kann zu diesen Modellen noch das Reynolds-Stress-Modell hinzugezählt werden; hinsichtlich des Geschwindigkeitsfeldes schneidet das Reynolds-Stress-Modell allerdings schlechter ab. Das Modell nach Spalart-Allmaras, das RNG-k-ε- sowie das Standard-k-ω-Modell sind nicht zu empfehlen.

Für die Beschreibung des untersuchten Drallstrahles empfehlen sich ähnliche Turbulenzmodelle jedoch in anderer Reihung. Das am besten geeignete Modell ist hier das Reynolds-

Stress-Modell, welches sowohl das gesamte Strömungsgeschwindigkeitsfeld (Axial-, Tangential- und Radialgeschwindigkeit) im interessierenden Bereich als auch die Verläufe der Turbulenzkenngrößen mit hervorragender Genauigkeit vorhersagt. Auch das SST-k-ω-Modell liefert für den gesamten Bereich von Geschwindigkeits- und Turbulenzparametern sehr gute Werte, wenn auch mit größeren Unsicherheiten als das Reynolds-Stress-Modell. Sehr gute Ergebnisse liefern auch das Standard-k-ε-Modell (speziell für das Tangentialgeschwindigkeitsfeld sowie für die Turbulenzkenngröße) und das Realizable-k-ε-Modell. Ähnlich wie beim geraden Freistrahl gilt auch hier, dass das Strahlnahfeld und der Übergangsbereich besser beschrieben werden können als das Strahlfernfeld.

Da für die komplexe Simulation des Verbrennungsapparates das Turbulenzmodell mit anderen, zum Teil sehr aufwändigen, Modellen kombiniert werden muss, sind neben der Eignung des Turbulenzmodells für die untersuchten Testfälle noch weitere Kriterien für die Auswahl heranzuziehen. Die wesentlichsten dieser Zusatzkriterien sind die Robustheit des Modells und das Konvergenzverhalten während des Iterationsverlaufs. Hier zeigt das Reynolds-Stress-Modell gegenüber dem Standard-k-ε-Modell und dem SST-k-ω-Modell deutliche Nachteile. Aufgrund der höheren Anzahl an Bilanzgleichungen und des komplexeren Modellaufbaus konnte bereits während der Untersuchung der Testgeometrien (reine kalte Strömung mit einem Einstoff-Medium) sehr langsame Konvergenz gegen ein Endresultat festgestellt werden. Auch die Residuen aller Bilanzgrößen blieben selbst nach Erreichen des Endresultates auf wesentlich höherem Niveau als bei den beiden anderen Modellen. Zur Erreichung eines konvergenten und vertrauenswürdigen Ergebnisses sind einige simulationstechnische Tricks anzuwenden (langes Anrechnen mit Diskretisierung erster Ordnung, dann stufenweises Verfeinern für einzelne Parameter in Richtung höherer Diskretisierungen). In Summe dauern damit die Iterationen mit dem Reynolds-Stress-Modell nicht nur länger (siehe Tabelle 14-18), sondern es sind auch mehr Iterationen erforderlich, um das Endergebnis zu erreichen. Erste Simulationen im komplexen Verbrennungsapparate haben ergeben, dass sich diese Situation bei der Verwendung einer Modellierung für homogene Gasphasenreaktionen (und deren Kombination mit turbulenter Durchmischung) sowie einer Modellierung für die Wärmestrahlung noch dramatisch zuspitzt. Höhere Diskretisierungs-Schemata führen in vielen Fällen sofort zu einer spontanen Divergenz des Simulations-Setups.

Aus den genannten Gründen wurde das Reynolds-Stress-Modell für die komplexe Ofensimulation ausgeschieden. In der vorliegenden Arbeit wurde stattdessen durchwegs das SST-k-ω-Modell zur Beschreibung der Turbulenz verwendet. In den Testgeometrien zeigte das Modell eine sehr gute Leistung und auch in Kombination mit Modellen zur Gasphasenkinetik und Wärmestrahlung zeigt es hervorragendes Konvergenzverhalten und ist robust gegen Änderungen im Simulations-Setup. Das k-ε-Modell und seine Unterformen werden heute in der anwendungsorientierten CFD deutlich häufiger eingesetzt, da sie einfach wesentlich populärer sind. Zahlreiche Autoren berichten von ihren Ergebnissen mit diesen Modellen (siehe Literaturhinweise in Kapitel 6.4). Manchmal wurden Studien durchgeführt (Vergleich mit Experimenten, numerische Simulation mit verschiedenen Turbulenzmodellen) und die jeweilige Wahl war gerechtfertigt. Oft kann aber durch unbedachten Einsatz des Modells die Verlässlichkeit der Vorhersage mittels CFD zerstört werden. Aufgrund der Vielseitigkeit des Modells spricht sich Wilcox (Wilcox, 1994) grundsätzlich für das k-ω-Modell und seine Untermodelle aus. Speziell bei Strömungsabrissen und dem Reattachment sowie bei der Vorhersage des Übergangsbereiches von laminarer zu turbulenter Strömung ist seiner Meinung nach k-ω wesentlich leistungsstärker. Wandgebundene Strömungen werden tatsächlich wesentlich bes-

ser beschrieben als mit dem k-ε-Modell (Wilcox, 1994). Bei freien Scherströmungen zeigt das k-ω-Modell Schwächen und eine starke Abhängigkeit von den Strömungsrandbedingungen in der unbehinderten Strömungszone, wobei k-ε gerade hier seine Stärken hat (Wilcox, 1994). Aufgrund dessen ist auch das SST-k-ω-Modell so leistungsfähig. Durch den stetigen Übergang von k-ω in Wandnähe zu k-ε im freien Scherströmungsbereich (siehe Kapitel 14.2.4.2) vereint dieses Modell die Vorzüge beider Grundmodelle und ist in der Lage, verschiedenste Strömungsformen erstaunlich genau vorherzusagen. Damit hat es einen großen inhärenten Vorteil gegenüber den untersuchten reinen k-ε- und k-ω-Modellen. Da wandnahe Strömungen im Verbrennungsapparat ebenfalls relevant sind, war dieser Vorteil auch ein Grund für die Wahl des Turbulenzmodells. Dass die Auswahl des SST-k-ω-Modells zur Simulation des betrachteten Verbrennungsapparates prinzipiell sehr sinnvoll ist, wird auch in der Literatur bestätigt (Kumar et al., 2008).

7.2 Analyse des komplexen Gasreaktionsmechanismus am Testfall Rohrreaktor

Um die Funktionsfähigkeit und die Eigenschaften des implementierten Gasreaktionsmechanismus zu überprüfen, wurde eine ausgedehnte Parameterstudie durchgeführt. Hierzu wurde mittels CFD ein Rohrreaktor abgebildet, auf den der Gasmechanismus inklusive des vereinfachten NO_x-Modells isoliert angewendet wurde. Vereinfachend wurde ein quadratischer Querschnitt mit 1 m Seitenlänge bei einer Rohrlänge von 140 m herangezogen und mit einer uniform verteilten Eintrittsströmungsgeschwindigkeit von 20 m/s beaufschlagt. Nach einer Einlauflänge von 20 m wird die chemische Reaktion gestartet. Die auftretenden Reynoldszahlen liegen im Bereich von 100.000 bis 150.000, der Betrieb liegt also eindeutig im stabil turbulenten Strömungsregime. Dennoch kann nicht strikt von einem idealen Rohrreaktor ausgegangen werden, da sich aufgrund der berücksichtigten Haftbedingung an der Wand keine reine Pfropfenströmung, sondern das bekannte turbulente Geschwindigkeitsprofil einstellt. Der Einfluss des nichtuniformen Geschwindigkeitsprofils auf die radiale Durchmischung sowie auf die axiale Rückdurchmischung ist allerdings nach detaillierten Auswertungen als vernachlässigbar einzustufen. Die Eintrittsrandbedingungen für den untersuchten Rohrreaktor wurden entsprechend der zu erwartenden Verhältnisse am Eintritt der sekundären Verbrennungszone (Gasnachverbrennung) gewählt. Tabelle 14-22 enthält eine Zusammenfassung der Eintrittsrandbedingungen sowie der wesentlichsten Betriebsparameter des in diesem Abschnitt untersuchten Rohrreaktors. Der Rohrreaktor ist ein reaktionstechnisch einfach zu beschreibender Reaktor, für dessen Simulation nicht unbedingt die Methoden der CFD verwendet werden müssen. Genauer gesagt kann durch Integration der in Tabelle 6-2 dargestellten Zeitgesetze ein zeitlicher Verlauf der Konzentration aller Reaktionsteilnehmer in Abhängigkeit der Verweilzeit auf rein analytischem Wege hergeleitet werden. Da die Gehalte der einzelnen Reaktionsteilnehmer aber über die Stöchiometrie der chemischen Reaktionen miteinander verknüpft sind, ergibt sich ein komplexes nichtlineares Gleichungssystem, welches aufgrund der zu erwartenden Steifheit aufwändig in der Problemlösung ist. Um komplexere Reaktionssysteme simulieren zu können, ist deshalb die Verwendung von spezieller Reaktionstechnik-Software (z.B. CHEMKIN®) oder von CFD-Methoden ratsam.

Untersucht wurden in diesem Abschnitt zwei Extremfälle der thermischen Betriebsführung, die im realen Fall nicht anzutreffen sind, für die Modellvalidierung aber wertvolle Erkenntnisse liefern: der adiabate Rohrreaktor und der isotherme Rohrreaktor. Im adiabaten Fall wird keine Wärme ausgetauscht und das Reaktionsmedium erwärmt sich bei exothermer Reaktion sehr stark, sehr hohe Austrittstemperaturen sind die Folge. Im realen Fall würde die Verbrennung durch Zugabe von Rezirkulationsgas gekühlt werden. Der isotherme Fall wurde simulationstechnisch so realisiert, dass die Überschusskomponente N_2 mit sehr hoher Wärmekapazität versehen wurde (10^{20} kJ/kg.K), sodass die gesamte freiwerdende Reaktionswärme ohne Temperaturänderung des Reaktionsgases quasi gepuffert wird. Für beide Fälle wurde eine Analyse des Einflusses der Reaktionsstarttemperatur sowie der Luftverhältniszahl auf die Gaszusammensetzung nach einer Reaktionszeit von 2 Sekunden (entsprechend der mittleren Verweilzeit in der Gasnachverbrennungszone) durchgeführt. Die molare Zusammensetzung des Gases bei Reaktionsende wurde dabei zur Erhöhung der Aussagekraft stets auf die Zusammensetzung des eintretenden Gasstromes bezogen (Molenbruch pro Molenbruch, in der Folge als Molenbruchverhältnis bezeichnet).

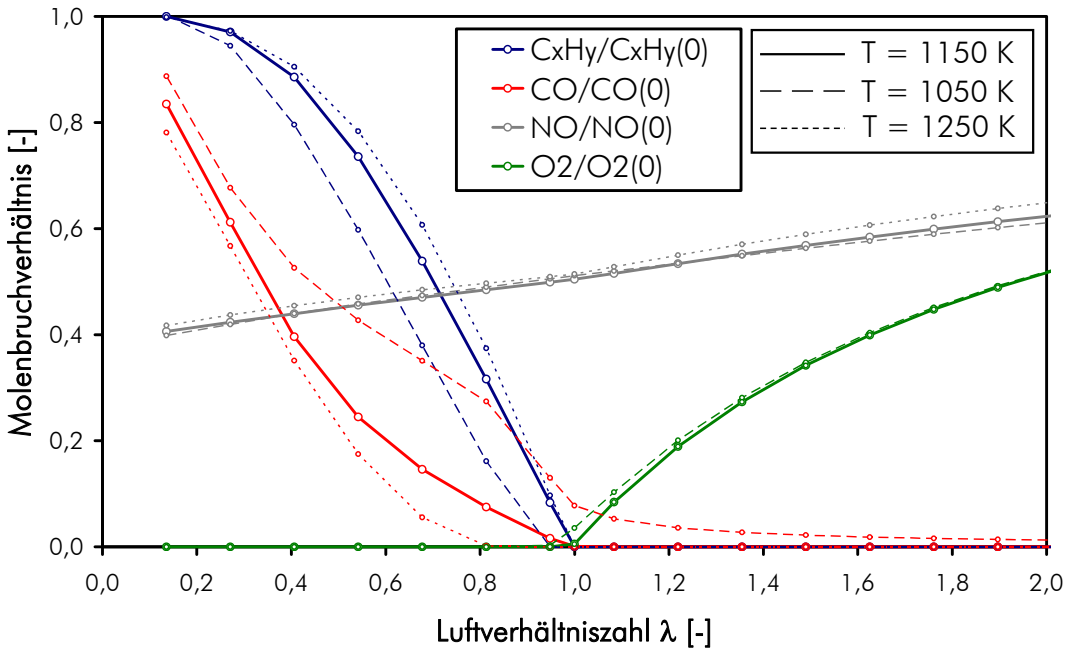


Abbildung 7-1: Molenbrüche für CO, C_xH_y, NO und O_2 nach 2 Sekunden Reaktionszeit im isothermen Rohrreaktor bezogen auf die jeweiligen Molenbrüche bei Reaktionsstart in Abhängigkeit von Reaktionstemperatur und Luftverhältniszahl

Zunächst sollen die Ergebnisse des isothermen Rohrreaktors diskutiert werden, für den Parametervariationen der Reaktionstemperatur von 950 bis 1400 K (50 K Auflösung) sowie der Luftverhältniszahl von 0,15 bis 2,0 (Auflösung etwa 0,15) durchgeführt wurden. Abbildung 7-1 zeigt für drei ausgewählte Temperaturen die Molenbruchverhältnisse von C_xH_y, CO, NO und O_2 in Abhängigkeit der Luftverhältniszahl. Für zunehmend unterstöchiometrische Verhältnisse wird die zunehmend unvollständige Verbrennung aus der Abbildung deutlich. Auf Sauerstoffmangel reagiert dabei die Kohlenwasserstoffkomponente C_xH_y deutlich sensitiver als CO. Dies resultiert daraus, dass die Oxidationsgeschwindigkeit von C_xH_y wesentlich stärker von Sauerstoffgehalt abhängig ist als jene von CO (siehe Tabelle 6-2). Dass bei der Oxidation von C_xH_y wiederum CO entsteht, hat bei den betrachteten Eintrittskonzentrationsverhältnissen nur geringen Einfluss. Für den überstöchiometrischen Zustand ist (nahezu) voll-

ständige Verbrennung nur bei ausreichend hohen Reaktionstemperaturen zu verzeichnen. Hier zeigt sic, dass die Geschwindigkeit der Oxidationsreaktion von CO wesentlich sensitiver auf die Temperatur reagiert als jene der Kohlenwasserstoffkomponente. Bei Temperaturen unter etwa 1100 K sinkt die Reaktionsgeschwindigkeit so weit, dass nach der betrachteten Reaktionsdauer von 2 Sekunden noch nennenswerte Restgehalte an CO verbleiben. Bei 1050 K ist die Geschwindigkeitslimitierung durch die Temperatur bereits deutlich dominierend gegenüber dem Sauerstoffgehalt, sodass sich für das Molenbruchverhältnis für selbst für größere Luftverhältniszahlen ein nicht zu unterschreitender Wert von etwa 0,1 einstellt. Entsprechend bleibt der Restsauerstoffgehalt für diese niedrigen Temperaturen stets über jenem für höhere Temperaturen. Bei ausreichend hoher Verbrennungstemperatur ist weitgehend vollständiger Ausbrand sichergestellt (Molenbruchverhältnisse entsprechend der zu erwartenden Berechnungsgenauigkeit nahe Null), sodass das Verhalten des untersuchten Rohrreaktors jenem des idealen Rohrreaktors sehr gut entsprechen dürfte (vollständige Durchmischung in radialer Richtung, keine Durchmischung in axialer Richtung).

Für NO zeigt sich ein deutlich linearer Zusammenhang des Molenbruchverhältnisses von der Luftverhältniszahl (steigender Gehalt an NO am Austritt mit zunehmender Luftverhältniszahl), dessen Steigung mit zunehmender Temperatur geringfügig größer wird. Eine genaue Auswertung zeigt, dass die Umsetzung der NO_x-Precursor-Spezies NH_3 und HCN immer nahezu vollständig ist. Bei hohen Luftverhältniszahlen wird die Oxidation mit O_2 in Richtung NO bevorzugt, bei niedrigen Luftverhältniszahlen eher die Disproportionierung mit NO zu N_2 (siehe Tabelle 6-3). Damit bildet der Reaktionsmechanismus qualitativ die bekannte CO-NO_x-Schere der Verbrennung sehr gut ab, bei der eine optimale Luftverhältniszahl zur Minimierung der CO-, VOC- als auch der NO_x-Emissionen (wenn erforderlich auch gewichtet nach den einzuhaltenden Emissionsgrenzwerten) zu definieren ist.

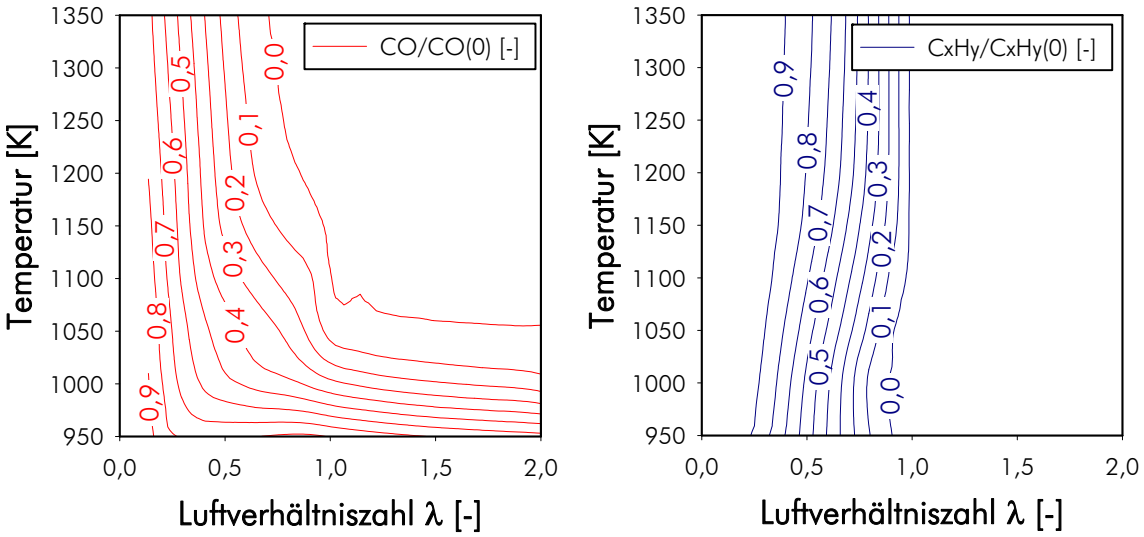


Abbildung 7-2: Molenbruchverhältnisse für CO (links) und C_xH_y (rechts) nach 2 Sekunden Reaktionszeit im isothermen Rohrreaktor bezogen auf die jeweiligen Molenbrüche bei Reaktionsstart in Abhängigkeit von Reaktionstemperatur und Luftverhältniszahl

Um den kombinierten Einfluss von Reaktionstemperatur und Luftverhältniszahl auf den Reaktionsumsatz von CO und C_xH_y besser darstellen zu können, sind in Abbildung 7-2 Isolinien der Molenbruchverhältnisse in Abhängigkeit beider Einflussparameter dargestellt. Diese Diagramme zeigen nun sehr deutlich denn Einfluss des Luftüberschusses auf den Ausbrand,

der bei der Kohlenwasserstoffkomponente stärker ausgeprägt ist (die Isolinien des Molenbruchverhältnisses liegen weiter rechts als jene von CO). Außerdem wird die Limitierung des CO-Umsatzes durch zu niedrige Reaktionstemperaturen deutlich, welche im betrachteten Temperaturbereich für C_xH_y nicht auftritt. Dort ist die Lage der Isolinien des Molenbruchverhältnisses von der Reaktionstemperatur relativ unabhängig.

Werden nun die Isolinien der Molenbruchverhältnisse der wesentlichsten Reaktionspartner in einem Diagramm zusammengeführt, so ergibt sich eine noch bessere und hochverdichtete Aussagekraft. Abbildung 7-3 gibt diese Information für die Komponenten C_xH_y, CO und O_2 in Abhängigkeit von Luftverhältniszahl und Reaktionstemperatur an. Aus der Abbildung geht klar hervor, dass bei hohen Temperaturen und Sauerstoffmangel der Ausbrand der Kohlenwasserstoffkomponente limitiert ist und der Ausbrand von CO bevorzugt verläuft. Unterhalb einer Reaktionstemperatur von etwa 1080 K ist der CO-Ausbrand gehemmt und diese Hemmung nimmt mit weiter sinkender Temperatur noch deutlich zu. Bei niedrigen Temperaturen verbessert sich sogar der Ausbrand von C_xH_y, da aufgrund der thermischen CO-Hemmung mehr Sauerstoff für die Kohlenwasserstoffoxidation übrig bleibt. Erst bei Temperaturen unter 1000 K dürfte dann auch die Oxidationsreaktion von C_xH_y zu langsam werden, sodass nennenswerte Restgehalte zu verzeichnen sind. Entsprechend steigt mit sinkender Reaktionstemperatur der Anteil an nichtreagiertem Sauerstoff am Reaktorende deutlich an.

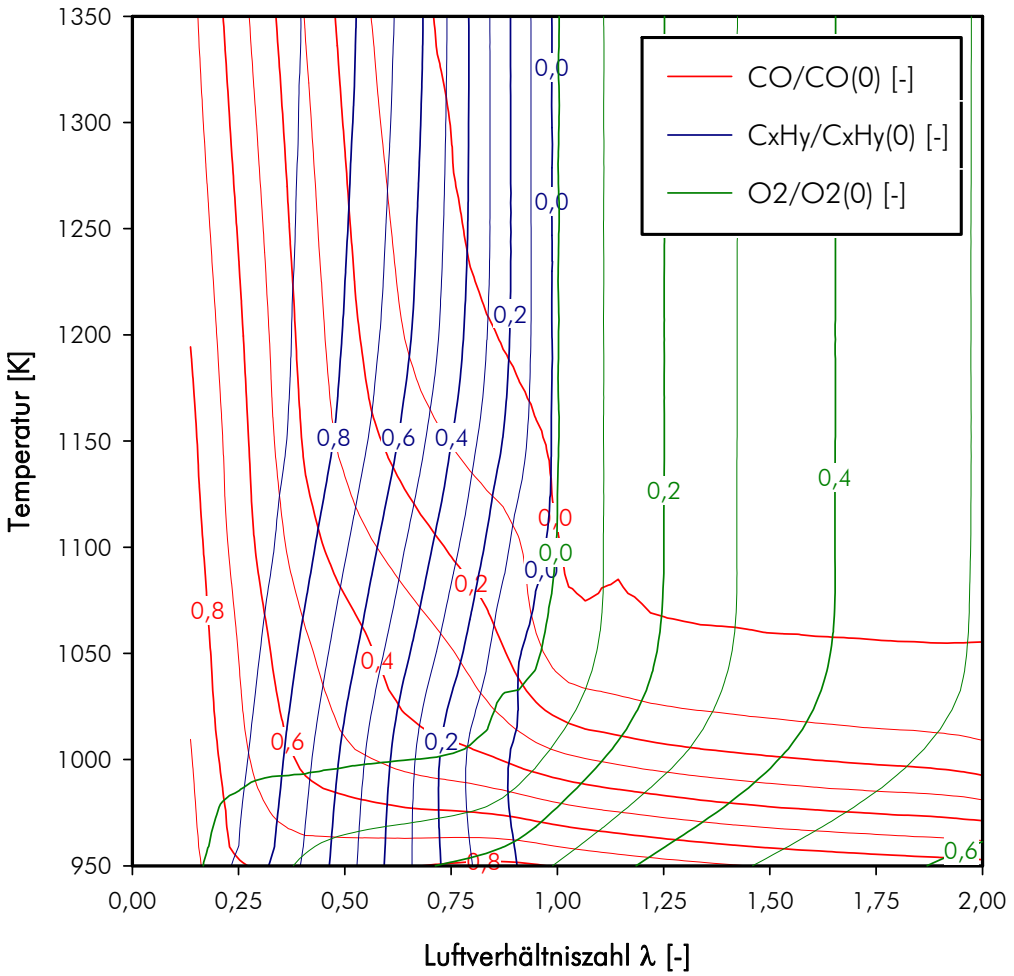


Abbildung 7-3: Molenbruchverhältnisse für CO, C_xH_y und O_2 nach 2 Sekunden Reaktionszeit im isothermen Rohrreaktor bezogen auf die jeweiligen Molenbrüche bei Reaktionsstart in Abhängigkeit von Reaktionstemperatur und Luftverhältniszahl

Wendet man sich nun vom reaktionstechnisch idealisierten isothermen Reaktorkonzept der realitätsnäheren adiabaten Betriebsweise zu, so fällt zunächst die aufgrund der exothermen Oxidationsreaktionen stark steigende Reaktionstemperatur ins Gewicht. Diese Wärmetönung wird beispielsweise in Abbildung 7-4 deutlich, in der neben der Gastemperatur auch die Molenbruchverhältnisse der wesentlichsten Reaktionsteilnehmer in Abhängigkeit der Verweilzeit im adiabaten Rohrreaktor dargestellt sind. Die Eintrittstemperatur für den gezeigten Fall beträgt 1050 K, die Luftverhältniszahl 0,958. Weiters ist in diesem Diagramm sehr gut der Verlauf der Oxidationsreaktionen der brennbaren Komponenten C_xH_y, CO und H_2 sowie deren Abhängigkeit von einem Sauerstoff-Minderangebot zu erkennen. Die stärkste Abhängigkeit von der Luftverhältniszahl zeigt bei den vorliegenden Betriebsbedingungen demnach C_xH_y (höchstes Molenbruchverhältnis bei Reaktionsende) gefolgt von H_2 (etwas besserer Ausbrand, aber immer noch unvollständig). Bei der betrachteten Luftverhältniszahl von 0,958 ist der Ausbrand von CO unter Berücksichtigung der Berechnungsgenauigkeit immer noch nahezu vollständig. Bei höheren Temperaturen zeigt C_xH_y dann einen auf Kosten von H_2 steigenden Reaktionsumsatz. Diese Verhältnisse können, wenngleich auch nicht quantifizierbar, auch aus den experimentellen Erfahrungen im Betrieb mit der Verbrennungs-Pilotanlage bestätigt werden. Für eine genaue Auswertung liegen aber zu wenige experimentelle Daten, speziell zu den Gehalten an VOC bei unterschiedlichen Betriebsbedingungen vor. Hier wurde eine zu geringe Zahl strukturierter Versuche mit vollständiger Gasanalyse durchgeführt.

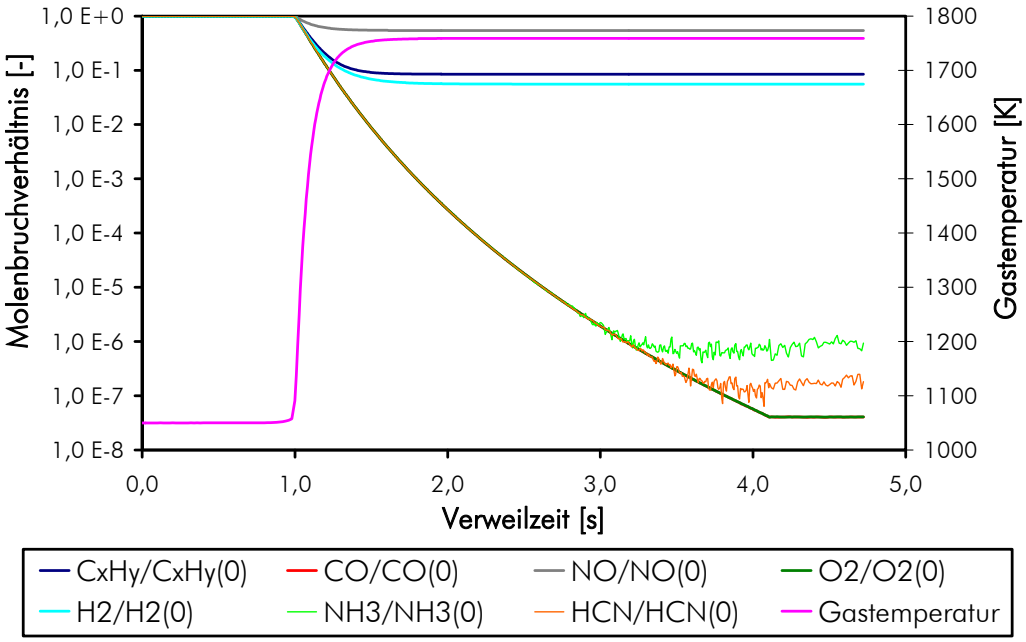


Abbildung 7-4: Verlauf der Molenbruchverhältnisse der wesentlichsten Reaktionsteilnehmer sowie der Gastemperatur in Abhängigkeit der Verweilzeit im adiabaten Rohrreaktor bei einer Eintrittstemperatur von 1050 K und einer Luftverhältniszahl von 0,958 (*CASE 29*)

Auch für die adiabate Betriebsweise des Rohrreaktors wurde eine Variation der beiden Parameter Luftverhältniszahl und Eintrittstemperatur zur Analyse des Einflusses auf den Reaktionsumsatz durchgeführt. Die Ergebnisse weichen nicht nennenswert von jenen für den isothermen Rohrreaktor ab (Abbildung 7-1), deshalb ist das entsprechende Diagramm nur dem Anhang zu entnehmen (Abbildung 14-51). Die Abbildung dort zeigt die Molenbruchverhält-

nisse von C_xH_y, CO, NO und O_2 sowie die Endtemperatur am Reaktoraustritt in Abhängigkeit der Luftverhältniszahl sowie in Abhängigkeit der Reaktoreintrittstemperatur.

Abschließend soll die Leistung des Gesamtreaktionsmechanismus bei der Beschreibung der Stickstoffoxidemissionen anhand des adiabaten Rohrreaktors untersucht werden. An dieser Stelle wird auch ein Vergleich mit experimentellen Resultaten gezogen, die an der realen Verbrennungs-Pilotanlage gewonnen werden konnten. Natürlich ist klar, dass weder die Gasnachverbrennungszone noch der Gesamtapparat reaktionstechnisch ausreichend mit einem Rohrreaktor beschrieben werden können, qualitative Aussagen zum Reaktionsmechanismus und zum Einfluss des Luftüberschusses können aber dennoch getroffen werden. Abbildung 7-5 zeigt den Stickstoffoxidgehalt nach zweisekündiger Reaktion im Rohrreaktor mit einer Temperatur von 1050 K in Abhängigkeit von der Luftverhältniszahl und vergleicht diese Ergebnisse mit einigen Messwerten charakteristischer Betriebspunkte der Pilotanlage (Projektphase WWFF-IV). Diese Messwerte wurden in Abhängigkeit der Luftverhältniszahl für die Gesamtanlage (λ_G) dargestellt. Alle Werte wurden auf Einheiten umgerechnet, die für den Nachweis der Einhaltung des Emissionsgrenzwertes erforderlich sind (mg/Nm³, alle Stickstoffoxide als NO_2 berücksichtigt, hochgerechnet auf einen Restsauerstoffgehalt von 13 vol%, trockene Rauchgasanalyse).

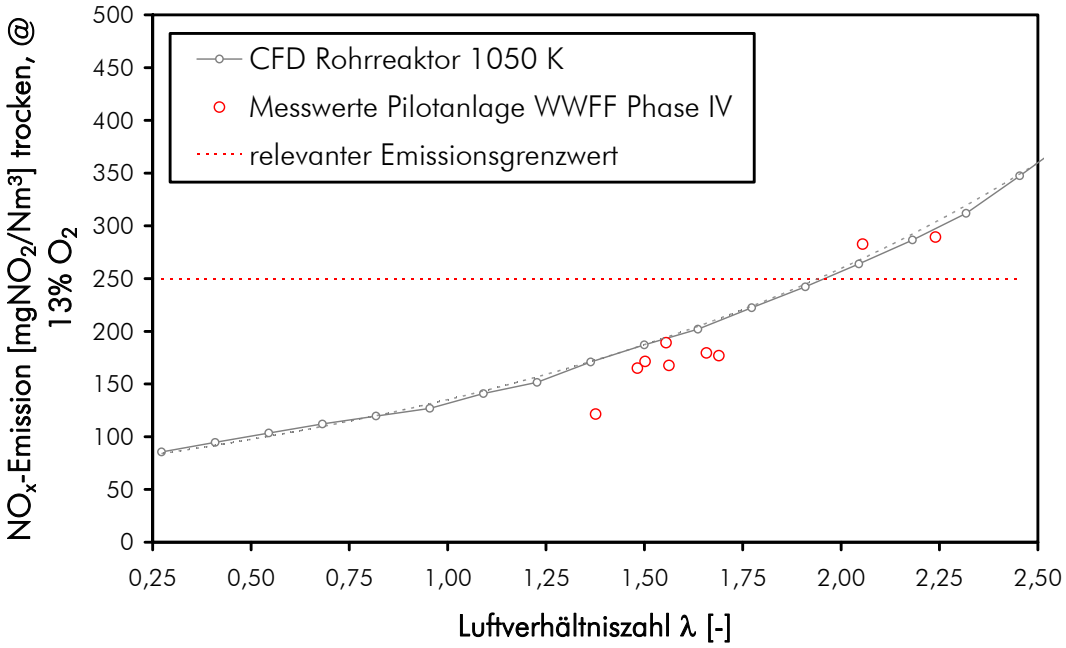


Abbildung 7-5: NO_x-Emissionen des untersuchten adiabaten Rohrreaktors im Vergleich mit experimentellen Ergebnissen sowie dem relevanten Emissionsgrenzwert (Reduzierte Fehlergrenze im ISAT-table mit 10^{-5})

Der Vergleich zeigt, dass die Übereinstimmung der Ergebnisse der simplen CFD-Analyse mit den experimentellen Daten unter Berücksichtigung des komplexen Prozesses der Stickstoffoxidfreisetzung aus dem Brennstoff hervorragend ist. Sowohl die Größenordnung als auch die Abhängigkeit vom Luftüberschuss werden sehr gut abgebildet. Wird also die Freisetzung der NO_x-Precursor-Spezies NH_3, HCN und NO während der heterogenen Verbrennungsschritte Volatilisierung und Koksabbrand gut modelliert, so ist unter Berücksichtigung der experimentellen Messunsicherheiten eine Vorhersage der zu erwartenden Stickstoffoxidemissionen mit guter Genauigkeit und Verlässlichkeit zu erwarten. Bis zu einem gewissen

Grad ist die gute Übereinstimmung der Ergebnisse der realen Verbrennungsanlage mit Ergebnissen aus einem idealisierten Rohrreaktor jedenfalls überraschend. Ein wesentlicher Punkt für die Simulation reaktiver Strömungen, speziell wenn Komponenten vom Interesse sind, die im starken Unterschuss vorliegen, ist die Genauigkeit und die Fehlertoleranz während der Simulation. Der verwendete CFD-Solver verwendet zur Beschleunigung reaktionstechnischer Simulationen den sogenannten *ISAT-Algorithmus* (siehe FLUENT, 2005) und erzielt damit teilweise Einsparungen der Rechenzeit in einer Größenordnung von bis zu 1.000. Dieser Algorithmus verwendet lineare Interpolationsvorgänge, die durch Anwendung einer Fehlergrenze bei ausreichender Genauigkeit des Ergebnisses abgebrochen werden. Die Standardeinstellung des CFD-Solvers für diese Fehlergrenze liegt bei 10^{-3}, was laut Handbuch (FLUENT, 2005) für die Simulation der meisten Verbrennungsvorgänge ausreichend sein sollte. Da die Gehalte der Stickstoffkomponenten im Reaktionsgemisch aber sehr gering sind (Molenbrüche bei Reaktionsstart in einer Größenordnung von 10^{-4} bis 10^{-3}, im Laufe der Reaktion noch deutlich geringer), reicht diese Fehlergrenze für eine verlässliche Vorhersage der chemischen Reaktionen dieser Komponenten nicht mehr aus. Diese Aussage trifft auch auf brennbare Komponenten bzw. Sauerstoff nahe des stöchiometrischen Betriebes zu, bei dem diese Komponenten in sehr niedrigen Gehalten aber dennoch größer als Null vorkommen können. Es zeigt sich, dass aus diesem Grund für die vorliegende Arbeit eine Fehlergrenze von mindestens 10^{-5} erforderlich ist, um Ergebnisse hoher Qualität zu erhalten. Abbildung 7-5 zeigt Ergebnisse, die mit dieser Einstellung erhalten wurden. Zum Vergleich zeigt Abbildung 14-52 die gleiche Darstellung jedoch unter Anwendung der Standardeinstellung von 10^{-3} für die Fehlergrenze. Einerseits erhält man damit eine etwas andere absolute Größenordnung der NO_x-Emissionen und andererseits streuen die Ergebnisse aufgrund des zu milden Abbruchkriteriums in einem sehr breiten Bereich, sodass keine sinnvollen Aussagen mehr zu generieren sind. Für Gaskomponenten, die in höheren Konzentrationsbereichen vorliegen (Molenbruch bei Reaktionsstart ab etwa 10^{-2}) werden unter Anwendung beider untersuchten Fehlergrenzen die gleichen Resultate erhalten. Hinsichtlich der Rechengeschwindigkeit hat die schärfere Fehlergrenze erwartungsgemäß negative Auswirkungen. Für die meisten Betriebsbedingungen bedeutet die Verschärfung der Fehlergrenze im ISAT-table auf 10^{-5} eine Erhöhung der Rechendauer pro Iterationsschritt um einen Faktor 3, für stark unterstöchiometrische Bedingungen mit Luftverhältniszahlen von unter 0,2 wurde sogar eine Erhöhung um einen Faktor 20 beobachtet.

7.3 Analyse des heterogenen Verbrennungsmodells an vereinfachter Testgeometrie

Zur Abschätzung der Vorhersagen, die das heterogene Verbrennungsmodell zu Abbrandverhalten, Zusammensetzung des Feststoffes während Volatilisierung und Koksabbrand, Partikeltemperatur und Entstehung gasförmiger Komponenten erwarten lässt, wurde in einem ersten Schritt eine Validierungsanalyse an einem vereinfachten Testfall durchgeführt. Hierzu wurden alle wesentlichen Betriebsparameter des Standardbetriebszustandes als Randbedingungen verwendet. Die Simulation der fluiden Phase erfolgte auf herkömmlichem Weg (siehe Kapitel 6 und 9) und lieferte daraus die fluiddynamischen Randbedingungen für die Feststoffsimulation. Die Simulation des Feststoffes wurde mit eindimensional aufgelösten Brenn-

stoffvolumina durchgeführt (für den Ballen in Einschubrichtung *x* und für das Rostbett in vertikaler Richtung *z*). Die Abmessungen für den Ballen sind Kapitel 3.2 zu entnehmen, für das Rostbett ergibt sich bei den Verbrennungsbedingungen des Auslegungsfalles eine Bettexpansion (Mächtigkeit) von 50 cm (die Ausdehnung in beide lateralen Richtungen beträgt für den analysierten Verbrennungsapparat ebenfalls jeweils 50 cm).

Zunächst wurde zur Untersuchung der Gitterkonvergenz der Standardbetriebszustand auf unterschiedlich aufgelösten Gittern im Ballen sowie im Rostbett simuliert und analysiert. Für das Ballenvolumen wurden hierfür Zellzahlen von 30 sowie von 90 (entsprechend einer Auflösung in x-Richtung von 6 cm beziehungsweise 2 cm) untersucht, für das Rostbett wurden entsprechend 10 sowie 20 Zellen (Auflösung 5 cm sowie 2,5 cm) gewählt. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sind in Abbildung 14-53 und Abbildung 14-54 im Anhang zusammengefasst, welche die Gehalte der Brennstoff-Pseudokomponenten, der Brennstoff-Feuchte sowie der Partikeltemperatur entlang des Brennstoffvolumens darstellen. Es zeigt sich, dass für das Ballenvolumen beide Auflösungen komplett idente Lösungen ergeben, sodass im weiteren Verlauf die Verwendung der niedrigeren Auflösung (LD) ausreichend ist. Im Rostbettvolumen zeigen die beiden Auflösungen geringfügig abweichende Lösungen, wodurch die Verwendung der höheren Auflösung (HD) zu empfehlen ist. Noch höhere Auflösungen machen jedoch keinen Sinn mehr. Die Darstellung der Ergebnisse der Simulation des Standardbetriebszustandes erfolgt zur Verdeutlichung auf den höher aufgelösten Gittern; die nachfolgende Sensitivitätsanalyse wurde jedoch aus Effizienzgründen für den Ballen bei der niedrigen und für das Rostbett bei der höheren Auflösung durchgeführt.

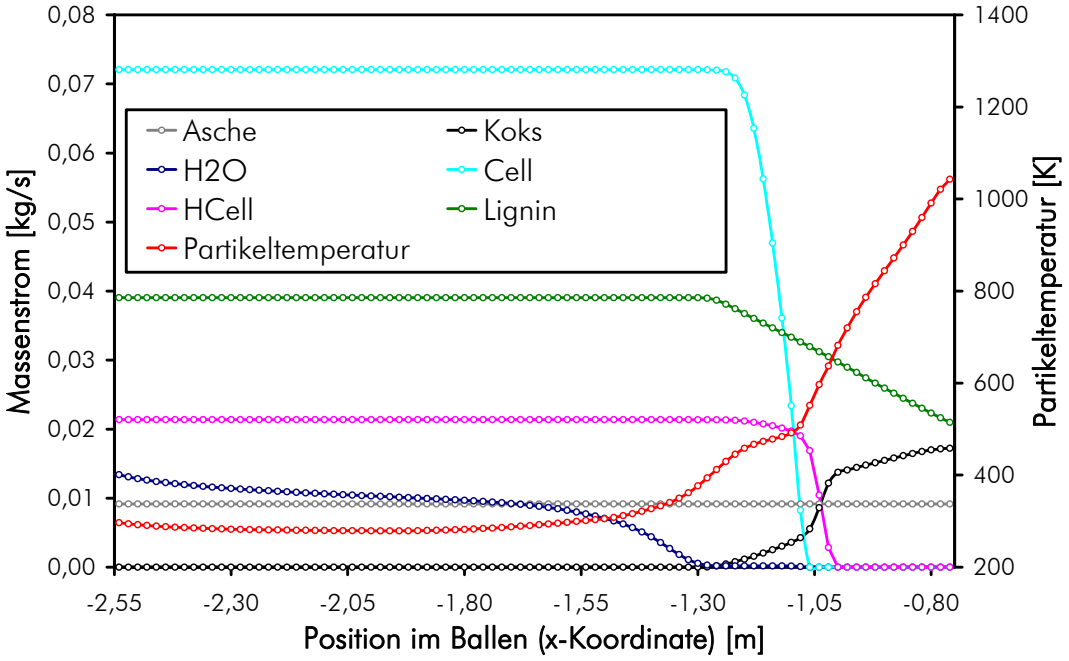


Abbildung 7-6: Verlauf der Massenströme verschiedener Komponenten der festen Brennstoffphase sowie der Partikeltemperatur im Ballen bei eindimensionaler Simulation

Der Standardbetriebszustand soll zunächst durch die Verläufe der Brennstoff-Pseudokomponenten sowie der Partikeltemperatur charakterisiert werden. Abbildung 7-6 stellt zu diesem Zweck die Massenströme der Brennstoff-Feuchte, Zellulose, Hemizellulose, Lignin, Koks sowie der inerten Asche in der festen Brennstoff-Phase gemeinsam mit der Partikeltemperatur in Abhängigkeit von der Position im Ballen dar. Die Richtung des Ballenvor-

schubs verläuft von links nach rechts, die brennende Ballenoberfläche findet sich im Diagramm ganz rechts. Eine analoge Auswertung für das Rostbett ist Abbildung 7-7 zu entnehmen. Der Koksabbrand erfolgt im Diagramm von links nach rechts (im Verbrennungsapparat von oben nach unten) und die brennende Bettoberfläche befindet sich ganz links. Im Anhang sind mit Abbildung 14-55 und Abbildung 14-56 Balkendiagramme der Massenströme aller Pseudokomponenten im Ballen sowie im Rostbett gegeben, die einen guten Einblick auf den Verlauf des Gesamt-Feststoffmassenstroms sowie der Zusammensetzung dieses Stroms im Zuge der heterogenen Verbrennung ermöglichen.

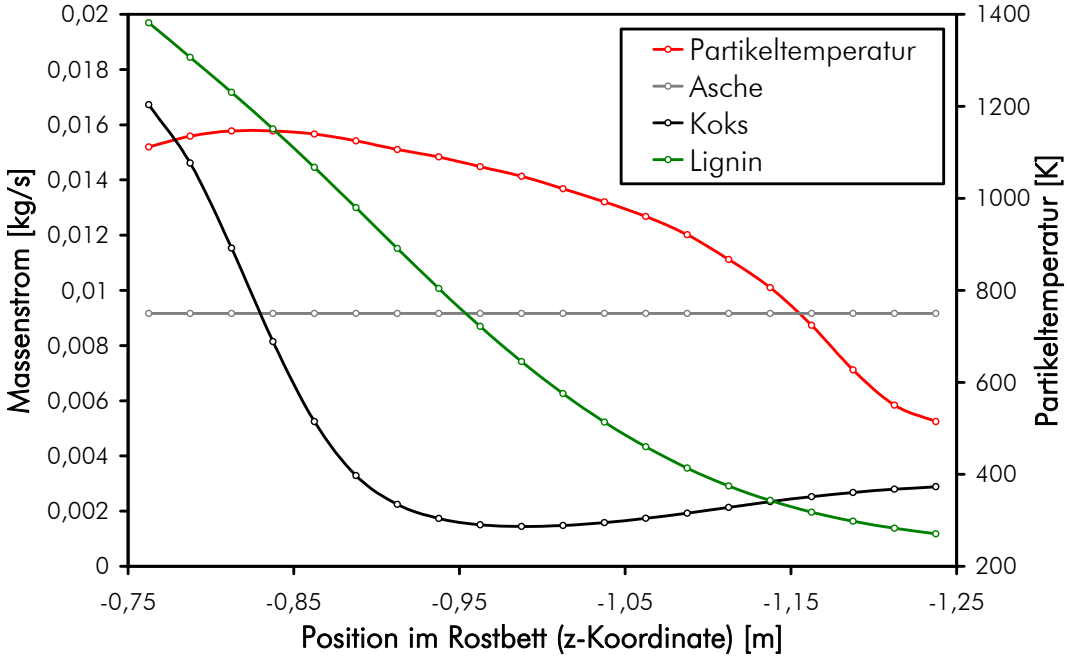


Abbildung 7-7: Verlauf der Massenströme verschiedener Komponenten der festen Brennstoffphase sowie der Partikeltemperatur im Rostbett bei eindimensionaler Simulation

Die Auswertung zeigt, dass ein Großteil der Volatilisierung bereits im Ballen stattfindet und die einzelnen Phasen dieses Vorganges mit deutlicher Überlappung ablaufen. Zunächst findet die Brennstofftrocknung statt, deren Dauer aufgrund der anfänglich konstant niedrigen Partikeltemperatur sehr hoch ist. Mit steigender Temperatur setzt dann die Volatilisierung des Lignins ein, welche aufgrund der niedrigen Reaktionsgeschwindigkeit ebenfalls sehr lange dauert und selbst am Ende des Rostbetts noch nicht vollständig abgeschlossen ist. Gegen Ende des Rostbetts steigt der Koksmassenstrom sogar noch geringfügig an, da bei den auftretenden Partikeltemperaturen die Koksbildung durch Ligninvolatilisierung gegenüber dem Koksabbrand überwiegt. Der Aschenstrom, der den Verbrennungsapparat am Aschenaustrag verlässt, enthält folglich noch etwa 8,9 wt%, TS Lignin; der Gesamtanteil flüchtiger Komponenten in der ausgetragenen Aschenfraktion beträgt etwa 4,9 wt%, TS. Dieser nicht vernachlässigbare Gehalt flüchtiger Komponenten sowie der nennenswerte Gehalt an nicht umgesetztem Koks von 22,2 wt%, TS decken sich sehr gut mit den experimentell erzielten Resultaten (Padouvas, 2003b). In Zahlen ausgedrückt bedeutet dies, dass knapp 0,6 % der Volatilisierung und 12,5 % der Koksoxidation im betrachteten Szenario nicht ablaufen konnten. Die Gesamtwärmeleistung des Verbrennungsapparates sinkt damit um etwa 4,2 % auf 2272 kW. Von dieser Leistung sind 707 kW allein der heterogenen Koksoxidation zuzuschreiben. Die Brennstofftrocknung benötigt eine Leistung von knapp 33 kW und die Volatilisierung eine Leistung von etwas über 71 kW.

Knapp nach der beginnenden Ligninzersetzung startet auch die Volatilisierung der Zellulosefraktion, welche mit einem ausgeprägten Einzelpeak der Reaktionsrate sehr rasch, noch deutlich vor der Ballenfront, abgeschlossen ist. Aufgrund des geringen nichtflüchtigen Anteils der Zellulose (0,5 wt%) ist der Beitrag zur Koksbildung sehr gering. Noch während der Umsetzung der Zellulose setzt auch die Volatilisierung der Hemizellulose ein, welche sich aufgrund der niedrigeren Aktivierungsenergie der Umwandlungsreaktion über einen deutlich weiteren Bereich erstreckt. Auch die Volatilisierung der Hemizellulose ist deutlich vor der Ballenfront abgeschlossen; der Beitrag zur Koksbildung ist trotz des niedrigen Gehaltes an Hemizellulose sehr groß. Die ortsabhängige Zusammensetzung hinsichtlich der Pseudokomponenten im Ballen und im Rostbett ist in Abbildung 14-53 und Abbildung 14-54 im Anhang dargestellt. Zum Zeitpunkt, bei dem das Material der brennenden Ballenfront auf den Nachverbrennungsrost fällt, besteht es nur noch aus Koks (36,7 wt%, TS), Lignin (44,4 wt%, TS) und Asche (18,9 wt%, TS). Der Koksanteil setzt sich dabei zu 97,1 % aus kohlenstoffhältigen und zu 2,9 % aus stickstoffhältigen Komponenten zusammen. Die entsprechenden Werte für die Ligninfraktion betragen im Vergleich dazu 99,4 % respektive 0,6 %.

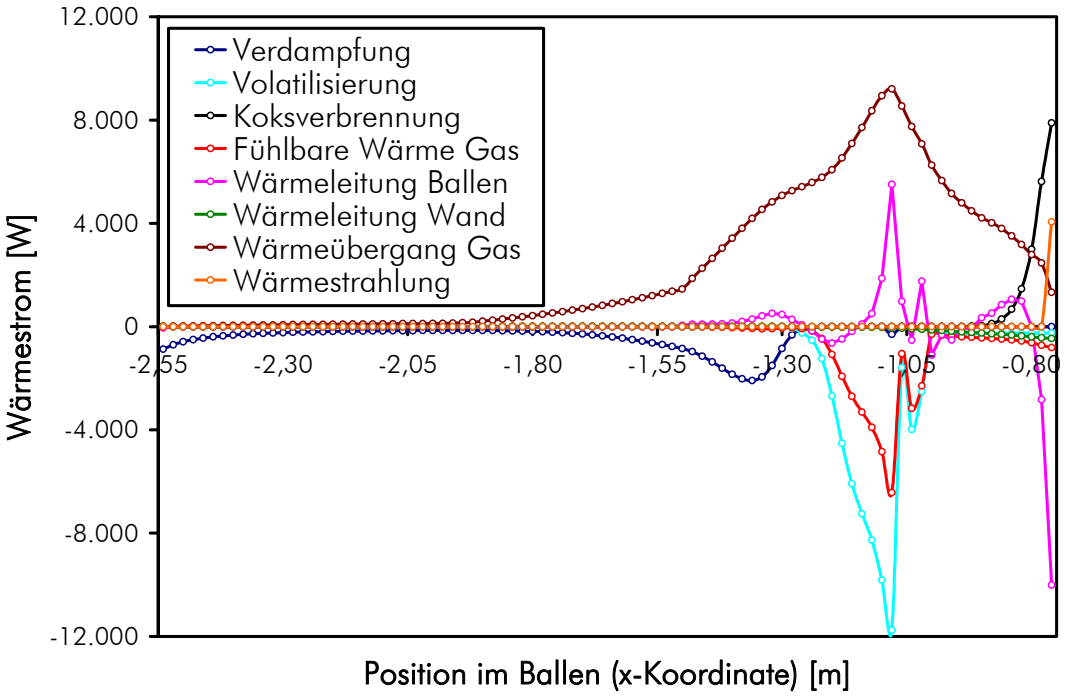


Abbildung 7-8: Verlauf der auftretenden Reaktionswärmen und der Wärmeströme zwischen fester und fluider Phase im Ballen bei eindimensionaler Simulation

Der Einfluss der Umwandlungsenthalpie der Volatilisierung (endotherme Reaktion) äußert sich in einer klar erkennbaren Flachstelle im Verlauf der Partikeltemperatur an der Stelle im Ballen mit maximaler Volatilisierungsrate (bei etwa -1,1 m). Nach der Volatilisierung steigt die Partikeltemperatur stetig weiter an, bleibt jedoch stets unterhalb der jeweiligen Temperatur der Gasphase. Dies geht sehr deutlich aus Abbildung 7-8 hervor, in der die Reaktionswärmen von Verdampfung, Volatilisierung und Koksabbrand den auftretenden Wärmeströmen der verschiedenen Mechanismen zwischen Feststoff und Umgebung (Leitung im Bett und zur Ofenwand, Wärmeübergang zum Gas, Strahlungswärmeübergang, fühlbare Wärme des freiwerdenden Gases) gegenübergestellt werden. Eine analoge Darstellung für das Rostbett sind Abbildung 7-9 zu entnehmen. Die Vorzeichen resultieren aus einer Energiebilanz um die Volumenzelle, d.h. endotherme Reaktionen entziehen der Zelle Energie und verursachen

einen negativen Wärmestrom. Die für die Trocknung und Volatilisierung benötigten Wärmemengen werden dem Feststoff vorwiegend durch Wärmeübergang von der umgebenden Gasatmosphäre und in geringerem Umfang auch durch Wärmeleitung aus wärmeren Feststoffbereichen zugeführt. Die zur Bilanzschließung jeweils erforderliche fühlbare Wärme des Feststoffes ist der Einfachheit halber nicht dargestellt. An der Ballenoberfläche schließlich nimmt die Partikeltemperatur zu, die Wärmeleitung im Feststoff sowie die Wärmestrahlung gewinnen gegenüber dem Wärmeübergang an Bedeutung; die Koksoxidation setzt ein.

Im Rostbett sind die höchsten Partikeltemperaturen knapp unterhalb der Bettoberfläche zu erwarten, was auf zwei Ursachen zurückgeführt werden kann. Einerseits weist der von der Ballenoberfläche herabfallende Brennstoff aufgrund der dort nur in begrenztem Umfang ablaufenden Koksverbrennung noch relativ niedrige Temperaturen auf. Andererseits führt die Wärmeabstrahlung auf der Bettoberfläche zu einer weiteren Absenkung der Partikeltemperatur. Nach dem Erreichen der maximalen Betttemperatur mit gleichzeitig maximaler Koksreaktionsrate sinkt die Partikeltemperatur mit wachsender Entfernung zur Bettoberfläche aufgrund des Gegenstromes mit kühlerer Verbrennungsluft langsam ab. Nach Unterschreiten einer Temperatur von etwa 1000 K sind die Koksabbrandrate und die freiwerdende Reaktionsenthalpie soweit abgefallen, dass die Partikeltemperatur mit hohem Gradienten abfällt (unter gleichzeitiger Vorwärmung der Verbrennungsluft). Die niedrigsten Partikeltemperaturen von etwa 500 K sind entsprechend direkt beim Aschenaustrag anzutreffen. Abbildung 7-9 macht deutlich, dass der Großteil der bei der Koksoxidation freiwerdenden Wärme über den Mechanismus des Wärmeübergangs an die Gasphase abgegeben wird. Wärmestrahlung ist nur direkt an der Rostbettoberfläche bedeutend, dann aber in der gleichen Größenordnung wie der Wärmeübergang. In geringem Umfang sind auch der Wärmetransport durch die fühlbare Wärme der gasförmigen Koksverbrennungsprodukte sowie die Wärmeleitung in der porösen Schüttung von Bedeutung. Speziell in der Nähe des Aschenaustrags wird durch Leitung noch ein nennenswerter Wärmestrom transportiert, der zu einer verstärkten Absenkung der Partikeltemperatur in diesem Bereich führt.

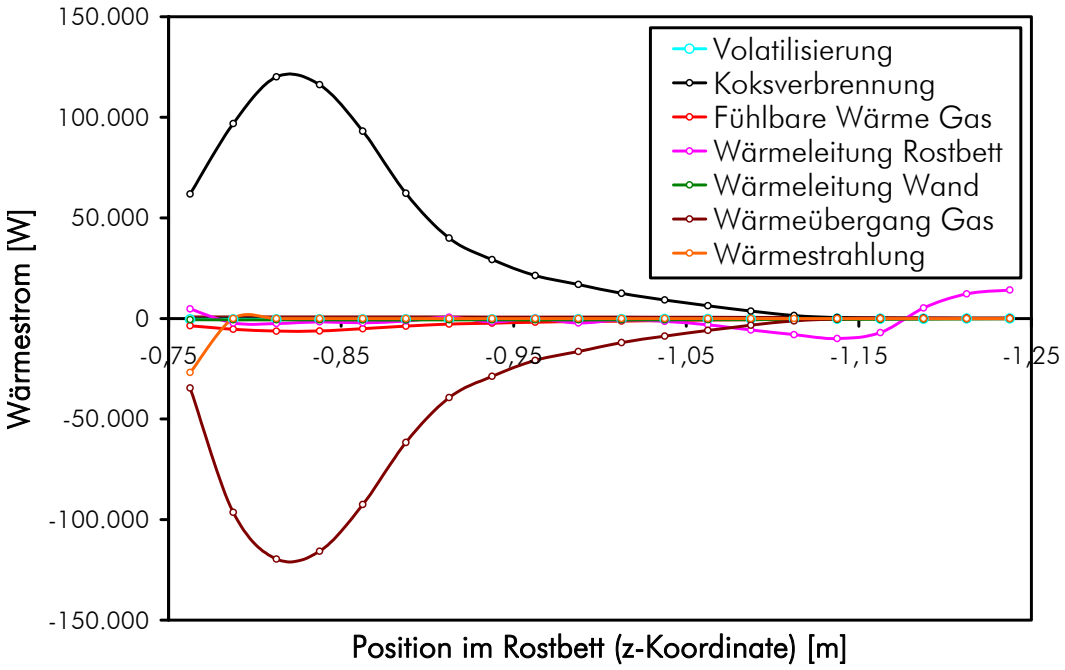


Abbildung 7-9: Verlauf der auftretenden Reaktionswärmen und der Wärmeströme zwischen fester und fluider Phase im Rostbett bei eindimensionaler Simulation

In dem Maße, wie feste Brennstoffmasse abnimmt muss Masse in Form gasförmiger Komponenten freigesetzt werden. Zur Visualisierung der freigesetzten Gaskomponenten sind in Abbildung 7-10 und in Abbildung 7-11 die Masseströme dieser Komponenten entlang der der beiden Brennstoffvolumina (Ballen respektive Rostbett) dargestellt. Im Sinne der Massenerhaltung entsprechen diese Diagramme deshalb der ersten Ableitung der Darstellungen für den Massenstrom der festen Phase in Abbildung 7-6 und Abbildung 7-7. Für den Ballen wird sehr eindrucksvoll der relativ enge Bereich der Umwandlung (Trocknung und vor allem Volatilisierung) deutlich; auch die getrennten Peaks der Ausgasung der Zellulose- und der Hemizellulosefraktion sowie der Brennstofftrocknung sind klar erkennbar. Das Verhältnis der in diesen Phasen freigesetzten Gasspezies ist konstant. Mit einsetzender Koksverbrennung wird die Konsumation von Sauerstoff aus der Gasatmosphäre unter gleichzeitiger Freisetzung von CO und CO_2 erkennbar. Das Verhältnis zwischen freigesetztem CO und CO_2 ist bei dieser Darstellung jedoch nicht erkennbar. Bei einsetzender Koksoxidation wird bei relativ niedriger Temperatur beinahe ausschließlich CO_2 freigesetzt, während bei der höchsten Temperatur an der Ballenoberfläche das Verhältnis CO/CO_2 bis auf 0,3 ansteigt. Entsprechend variiert hier auch der Bedarf an Sauerstoff für die Umsetzung des Kohlenstoffs.

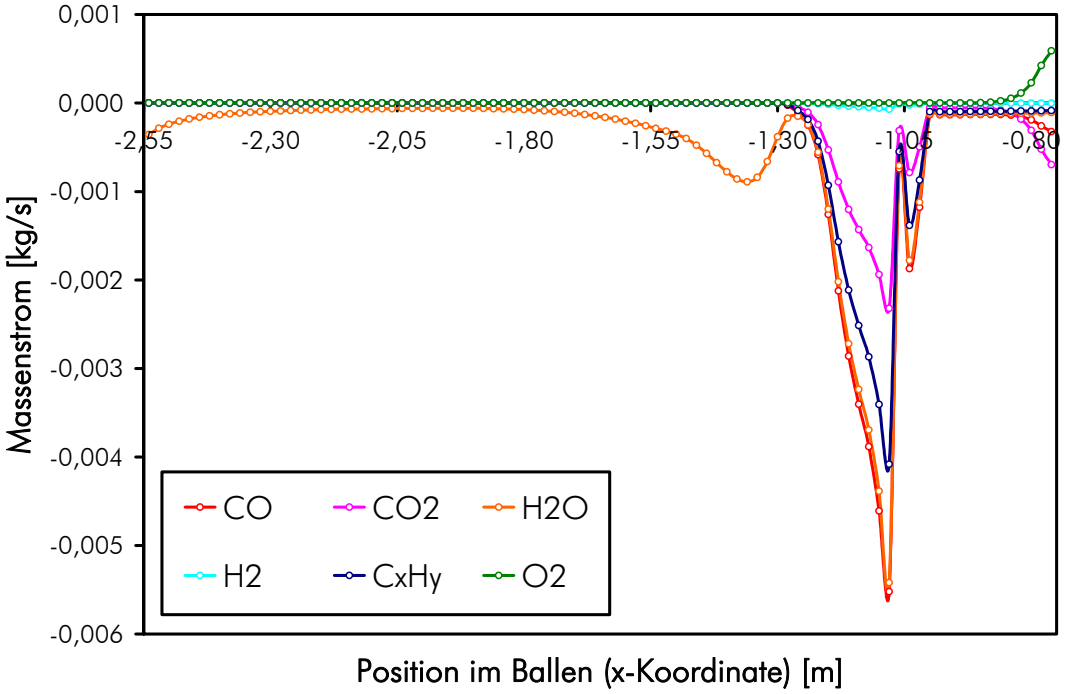


Abbildung 7-10: Verlauf der Massenströme freigesetzter gasförmiger Komponenten im Ballen bei eindimensionaler Simulation

Im Rostbett überwiegt die Gasfreisetzung aufgrund der heterogenen Koksverbrennung jene aufgrund der Volatilisierung des noch verbliebenen flüchtigen Ligninanteils zumindest um eine Größenordnung, so dass hier lediglich die Freisetzung von CO und CO_2 relevant ist. Wie beim Ballen ist auch hier das Verhältnis von CO zu CO_2 nicht konstant, sondern variiert aufgrund der sich ändernden Partikeltemperatur über die Rostbetthöhe. An der Oberfläche beträgt das Verhältnis CO/CO_2 etwa 0,4 und steigt bis zum Punkt der Maximaltemperatur auf 0,43 an. Aufgrund der auftretenden relativ niedrigen Partikeltemperaturen wird also stets mehr CO_2 als CO gebildet. Die konsumierte Sauerstoffmenge hängt stark von diesem Verhältnis ab und bestimmt unter der Randbedingung einer vorgegebenen Luftverhältniszahl λ_{Rost} direkt die erforderliche Verbrennungsluftmenge. Mit sinkender Temperatur sinkt das

CO/CO_2-Verhältnis wieder ab und erreicht bei 1000 K einen Wert von etwa 0,3. Unterhalb dieser Temperatur sinkt das Verhältnis zwar weiter, aufgrund der nun aber sehr langsamen Oxidationsreaktion werden kaum noch nennenswerte Gasmengen freigesetzt (bei einer Höhenkoordinate im Rostbett von etwa -1,00 m).

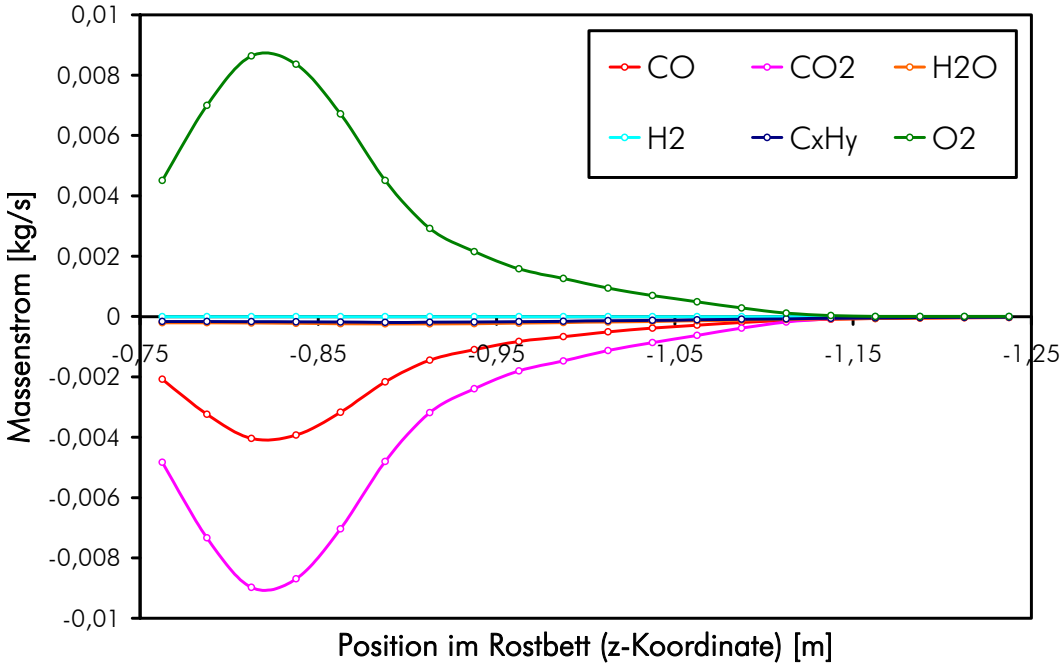


Abbildung 7-11: Verlauf der Massenströme freigesetzter gasförmiger Komponenten im Rostbett bei eindimensionaler Simulation

Die Freisetzungsraten der Stickstoff-Spezies korrespondieren im Wesentlichen mit jenen der anderen Gasspezies und sind für den Ballen und das Rostbett in Abbildung 14-57 und Abbildung 14-58 im Anhang dargestellt. Sowohl während der Volatilisierung als auch während des Koksabbrandes werden N-Spezies freigesetzt, wobei bei den betrachteten Betriebsbedingungen in jeder Phase die Freisetzung von molekularem Stickstoff klar dominiert. Von jenen N-Spezies, die für die Bildung der Stickstoffoxid-Emissionen am Kamin verantwortlich sind, ist NO am relevantesten. Über die Volatilisierung integriert wird etwa doppelt so viel NO freigesetzt wie über die gesamte heterogene Koksoxidation. Die Freisetzung von HCN ist während der Volatilisierung im Ballen noch von begrenzter Bedeutung während sie für die Koksverbrennung irrelevant ist. Die Freisetzung von NH_3 ist in jeder Phase vernachlässigbar und könnte für zukünftige Arbeiten ohne Genauigkeitseinbußen vernachlässigt werden. Da das implementierte NO_x-Bildungsmodell feststoffseitig jedoch von den Betriebsbedingungen unabhängig gestaltet wurde, sind belastbare Aussagen an dieser Stelle jedoch nicht zu treffen. Um die unterschiedlichen Freisetzungsraten von Stickstoff-Spezies während der einzelnen Phasen der heterogenen Verbrennung fundierter abschätzen zu können, ist die Entwicklung eines Modells erforderlich, welches lokale Betriebsbedingungen wie Temperatur und Sauerstoffpartialdruck (Luftverhältniszahl) mitberücksichtigt.

Um den Einfluss der wesentlichsten Betriebsparameter innerhalb der fluiden Phase auf die Vorhersagen des heterogenen Verbrennungsmodells zu evaluieren wurde eine Sensitivitätsanalyse anhand der vereinfachten, eindimensionalen Geometrie durchgeführt. Hierfür wurde das Lösungsfeld für die fluide Phase bis auf den jeweils veränderten Parameter konstant gehalten und lediglich eine neue Lösung für die feste Phase ermittelt. Untersucht wurde der

Einfluss der Gastemperatur, des Sauerstoffpartialdrucks in der Gasphase sowie des Betrags der Gasgeschwindigkeit jeweils im Ballen- und im Rostbettvolumen. Eine Änderung der Verhältnisse der Gasphase im Ballen wirkt sich nicht nur auf den Feststoff im Ballenvolumen, sondern auch auf den Feststoff im Rostbettvolumen aus. Umgekehrt ist dies jedoch nicht der Fall, eine Änderung im Rostbett hat keine Rückwirkung auf den Ballen.

Tabelle 7-1 und Tabelle 7-2 fassen die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse übersichtlich zusammen. Die erste Tabelle zeigt dabei die Ergebnisse für die Variation der genannten Gasphasenparameter im Ballenvolumen, während die zweite Tabelle die Ergebnisse der Variation im Rostbettvolumen abbildet. Die Tabellen enthalten die Änderungen der Partikeltemperatur und des Gehaltes flüchtiger Komponenten an der Ballenoberfläche, die Änderungen der Partikeltemperatur und des Gehaltes nichtflüchtiger Komponenten an der Rostbettoberfläche, die Änderung des Gehaltes nichtflüchtiger Komponenten am Aschenaustrag und schließlich die Änderungen des Gesamtwärmestroms sowie des Wärmestroms aufgrund der Koksoxidation. Angegeben wurden jeweils die Werte am Zellmittelpunkt jener Zelle, die an die Ballenoberfläche, beziehungsweise die Rostbettoberfläche oder den Aschenaustrag angrenzen. Für die Sensitivitätsanalyse wurden ausgehend vom Auslegungszustand die Gastemperatur um jeweils 1 % und 2 % sowie der Sauerstoffpartialdruck und der Betrag der Gasgeschwindigkeit um jeweils 2 % und 4 % gesteigert und reduziert. Wollte man größere Variationsbreiten untersuchen, so wäre der Einfluss der sich ändernden Verhältnisse am Feststoff auf die Gasphase nicht mehr zu vernachlässigen und es müsste für jeden untersuchten Punkt der Sensitivitätsanalyse das komplette gekoppelte Festphasen-Gasphasen-Modell gelöst werden. Für die hier präsentierte Analyse wurde diese aufwändige Vorgangsweise zur Vereinfachung nicht gewählt.

Tabelle 7-1: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse bei Variation von Parametern der fluiden Phase im Ballenvolumen

		Ballen		Rostbett		Ofen gesamt	
		$T_{P,Front}$	$w_{vol,Front}$	$w_{nonvol,Top}$	$w_{nonvol,Bottom}$	$\dot{Q}_{eff}$	$\dot{Q}_{Koks}$
Basis		1009 K	24,2 wt%	76,6 wt%	95,1 wt%	707 kW	2272 kW
	-2,0 %	-2,0 %	+1,8 %	-0,4 %	-0,4 %	-1,1 %	-0,3 %
T_{Gas}	-1,0 %	-1,0 %	+0,9 %	-0,2 %	-0,2 %	-0,6 %	-0,2 %
(Ballen)	+1,0 %	+1,1 %	-0,8 %	+0,1 %	+0,2 %	+0,6 %	+0,2 %
	+2,0 %	+2,3 %	-1,4 %	+0,1 %	+0,4 %	+1,1 %	+0,3 %
	-4,0 %	-0,1 %	0 %	0 %	0 %	0 %	0 %
$p_{O2,Gas}$	-2,0 %	-0,1 %	0 %	0 %	0 %	0 %	0 %
(Ballen)	+2,0 %	+0,1 %	0 %	0 %	0 %	0 %	0 %
	+4,0 %	+0,1 %	0 %	0 %	0 %	0 %	0 %
	-4,0 %	-0,2 %	+0,6 %	-0,1 %	-0,1 %	-0,3 %	-0,1 %
$\lvert v_{Gas} \rvert$	-2,0 %	-0,1 %	+0,3 %	-0,1 %	-0,1 %	-0,2 %	-0,0 %
(Ballen)	+2,0 %	+0,1 %	-0,3 %	+0,1 %	+0,1 %	+0,1 %	+0,0 %
	+4,0 %	+0,2 %	-0,5 %	+0,1 %	+0,1 %	+0,3 %	+0,1 %

Den größten Einfluss auf das heterogene Brennstoffmodell hat erwartungsgemäß die Gastemperatur. Sowohl während der Koksverbrennung als auch während der Brennstofftrocknung und der Volatilisierung steigt die Partikeltemperatur mit steigender Gastemperatur. Bei den endothermen Reaktionsschritten, bei denen die Partikeltemperaturen stets unterhalb der

Gastemperatur liegen, steigert sich dadurch der Wärmeübergang, es wird mehr Wärme zugeführt und ein größerer Teil der flüchtigen Brennstoffkomponenten kann volatilisiert werden (die Trocknung verläuft in allen analysierten Fällen vollständig). Bei der exothermen Koksoxidation liegen die Partikeltemperaturen stets über der Gastemperatur, sodass bei steigender Gastemperatur der Wärmeübergang reduziert wird und ein größerer Anteil der Reaktionswärme in der fühlbaren Wärme des Feststoffs aufgeht. Durch die steigende Partikeltemperatur wird die Koksoxidation noch beschleunigt, weshalb die Sensitivität hier klar nichtlinear ist. Auch die Wärmeleistung des Verbrennungsapparats wird durch eine Veränderung der Gastemperatur beeinflusst. Diese ändert sich mit der Gastemperatur besonders für das Rostbett sehr stark, da hier im Vergleich zum Ballen deutlich mehr Wärme freigesetzt wird. Wärme, die aufgrund zu niedriger Koksreaktionsgrade bei niedrigen Temperaturen nicht freigesetzt werden kann, geht dem Verbrennungsapparat sofort verloren. Wenn im Ballen aufgrund zu niedriger Temperaturen weniger brennbares Gas freigesetzt wird, so wirkt sich dies auf die Wärmeleistung des Ofens deutlich weniger stark aus, da die fehlende Volatilisierung in diesem Fall auf das Rostbett ausgelagert wird. Wärmegewinn durch Koksoxidation ist, wie bereits gezeigt wurde, für den Ballen nur von untergeordneter Bedeutung.

Tabelle 7-2: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse bei Variation von Parametern der fluiden Phase im Rostbettvolumen

		Rostbett			Ofen gesamt	
		$T_{P,Top}$	$w_{nonvol,Top}$	$w_{nonvol,Bottom}$	$\dot{Q}_{eff}$	$\dot{Q}_{Koks}$
Basis		1112 K	76,6 wt%	95,1 wt%	707 kW	2272 kW
	-2,0 %	-3,9 %	+0,5 %	-1,3 %	-13,5 %	-4,0 %
T_{Gas}	-1,0 %	-2,2 %	+0,3 %	-0,7 %	-6,3 %	-1,9 %
(Rostbett)	+1,0 %	+3,3 %	-0,6 %	+0,8 %	+5,3 %	+1,5 %
	+2,0 %	+6,9 %	-1,4 %	+2,1 %	+10,0 %	+3,0 %
	-4,0 %	-0,7 %	+0,2 %	-0,2 %	-1,6 %	-0,5 %
$p_{O2,Gas}$	-2,0 %	-0,4 %	+0,1 %	-0,1 %	-0,8 %	-0,2 %
(Rostbett)	+2,0 %	+0,4 %	-0,1 %	+0,1 %	+0,8 %	+0,2 %
	+4,0 %	+0,9 %	-0,2 %	+0,2 %	+1,5 %	+0,4 %
	-4,0 %	+0,3 %	0 %	+0,1 %	+0,3 %	+0,1 %
$\lvert v_{Gas} \rvert$	-2,0 %	+0,1 %	0 %	+0,0 %	+0,2 %	+0,0 %
(Rostbett)	+2,0 %	-0,1 %	0 %	-0,0 %	-0,1 %	-0,0 %
	+4,0 %	-0,2 %	0 %	-0,0 %	-0,3 %	-0,1 %

Der Einfluss des Sauerstoffpartialdrucks auf die heterogenen Reaktionsschritte ist im untersuchten Bereich relativ klein und wirkt sich ausschließlich auf den Koksabbrand aus. Da der Großteil der Volatilisierung bei Einsetzen der Koksoxidation bereits abgeschlossen ist, kann eine erhöhte Partikeltemperatur aufgrund gesteigerter Koksreaktionsrate keine merkliche Steigerung der Volatilisierungsrate hervorrufen. Die zu diesem Zeitpunkt noch ablaufende Ligninvergasung ist hinsichtlich einer Änderung der Partikeltemperaturänderung relativ unempfindlich. Ein Einfluss auf den Grad des Koksausbrands und den erzielbaren Wärmestrom auf dem Nachverbrennungsrost ist dennoch in begrenztem Umfang zu erwarten.

Der Betrag der Gasgeschwindigkeit zeigt in dieser Analyse den geringsten Einfluss auf die heterogenen Reaktionsschritte. Die Gasgeschwindigkeit ist an mehreren Punkten im heterogenen Modell von Bedeutung. Sie beeinflusst den Stofftransport (Sauerstofftransport an die

Koksoberfläche), den Wärmeübergang (über eine Nusselt-Korrelation) sowie die effektive Wärmeleitfähigkeit im porösen Feststoff. Dennoch ist der Einfluss dieses Parameters auf das Modell sehr schwach ausgeprägt. Eine niedrigere Gasgeschwindigkeit resultiert in einem schlechteren Wärmeübergang zwischen Feststoff und Gas und führt im endothermen Fall (Ballen) zu einer Absenkung und im exothermen Fall (Rostbett) zu einer Steigerung der Partikeltemperatur. Für den Koksausbrand auf dem Nachverbrennungsrost und die Gesamtwärmeleistung sind deshalb im analysierten Bereich niedrigere Strömungsgeschwindigkeiten im Rostbett vorteilhaft (wenngleich das Ausmaß der Änderung marginal ist). Für eine Verbesserung der Volatilisierung dagegen ist die Gasgeschwindigkeit im Ballen zu steigern; auch der Gesamtkoksausbrand nimmt aufgrund der etwas höheren Partikeltemperatur in diesem Fall geringfügig zu.

Die Durchführung der gezeigten Simulationen an vereinfachter, eindimensionaler Geometrie erlaubte ein Kennenlernen des Simulationsverhaltens des entwickelten heterogenen Verbrennungsmodells. Insbesondere konnten Techniken zur Verbesserung der Konvergenz und zur Erhöhung der Lösungsstabilität erarbeitet werden. Die Erfahrung zeigt, dass das Modell für das Ballenvolumen sehr gutmütig ist und sehr rasch konvergente Lösungen von nahezu beliebigen Startbedingungen liefern kann. Das Verhalten für das Rostbettvolumen ist aufgrund der höheren Dichte freigesetzter Wärme deutlich schwieriger. Die Sensitivitätsanalyse zeigt, dass bereits bei relativ kleinen Änderungen der Gastemperatur deutlich unterschiedliche Lösungen für die Feststofftemperatur und damit den gesamten Feststoff geliefert werden. Damit ergeben sich sehr rasch instabile Simulationsverläufe und divergente Lösungen. Hier muss mit guten Startbedingungen und Feldinitialisierungen, kleinen und stufenweisen Änderungen von Eingangsparametern sowie sehr intensiv mit Unter-Relaxation gearbeitet werden, um dennoch konvergente und physikalisch sinnvolle Lösungen zu erhalten.

Alle beobachteten Effekte des heterogenen Verbrennungsmodells lassen sich sinnvoll erklären und entsprechen den experimentellen Erfahrungen an der Versuchsanlage. Ein quantitativer Vergleich ist mangels ausreichender Zahl und Qualität der vorhandenen Messergebnisse leider nicht möglich, da mit dem heterogenen Verbrennungsmodell vorwiegend Größen beschrieben werden, die experimentell nicht oder kaum erfassbar sind. Die Temperatur im Rostbett ist der einzige Wert, der online direkt gemessen werden konnte, wenngleich dieser nur einer Mischtemperatur zwischen Gas und Feststoff entspricht. Die Messergebnisse stehen hier aber in sehr guter quantitativer Übereinstimmung mit den rechnerischen Resultaten. Die durchgeführten Offline-Analysen der ausgetragenen Aschefraktion mit nennenswerten Gehalten an flüchtigen Komponenten und brennbarem Koks zeigen ebenfalls eine sehr gute Übereinstimmung mit den Simulationsergebnissen (Padouvas, 2003a; Padouvas, 2004). Unter dem Strich kann postuliert werden, dass das heterogene Verbrennungsmodell ausreichend genaue Randbedingungen für die fluiddynamische Simulation des Verbrennungsapparates liefern kann. Sollen jedoch beispielsweise Aussagen über konkrete Zusammensetzungen des Feststoffes während des Verbrennungsvorgangs getroffen werden, so muss bewusst bleiben, dass es sich hierbei um eine bestmögliche Abschätzung handelt, deren Gültigkeit erst mit detaillierteren experimentellen Untersuchungen untermauert werden muss. Da die Physik hinter dem Modell aber schlüssig sowie einerseits auf eigenen praktischen Untersuchungen und andererseits auf zahlreichen Literaturarbeiten beruht, kann aber sehr wohl von fundierten Voraussagen der real zu erwartenden Verhältnisse ausgegangen werden.

8 Ergebnisse der Globalbilanzierung

In diesem Abschnitt wird zunächst dargestellt, wie mit den Mitteln der in Kapitel 5 entwickelten Globalbilanzierungsmethoden die verfahrenstechnische Grundauslegung des Verbrennungskreislaufes durchgeführt sowie der Standardbetriebszustand für die Verbrennungs-Pilotanlage definiert wurde. Im Anschluss werden durch Anwendung dieser Methoden einige Aussagen über den Anfahr- und Hochfahrvorgang der Verbrennungsanlage getroffen. Abschließend wird durch Anwendung einer umfangreichen Parametervariation mit Hilfe dieses Simulationswerkzeuges der Einfluss der wesentlichsten Anlagen- und Betriebsparameter auf den Betrieb der Verbrennungsanlage dargestellt.

Zunächst soll allerdings das zu erwartende CO_2-Einsparungspotential der Technologie im Vergleich zu fossilen Alternativen bewertet werden. Für eine Biomasseverbrennungsanlage nach dem in dieser Arbeit diskutierten Konzept und einer Brennstoffwärmeleistung von 2,18 MW_{th} kann unter Annahme eines Jahresnutzungsgrades von 92 % (8060 Betriebsstunden pro Jahr) eine jährlich erzeugte Brutto-Energiemenge von 63,25 TJ_{th} ermittelt werden (chemisch gespeicherte Brennstoffwärmemenge). Müsste diese Wärmemenge durch fossile Quellen aufgebracht werden, so würden klimarelevante CO_2-Emissionen anfallen, deren Höhe von der Art des fossilen Brennstoffes abhängig ist. Zur Quantifizierung des Kohlendioxidausstoßes eines bestimmten Brennstoffes pro erzeugter Einheit an thermischer Energie führt das IPCC (*Intergovernmental Panel on Climate Change*) die sogenannten Emissionsfaktoren ein (Umweltbundesamt, 2013). Emissionsfaktoren nach dieser Definition umfassen nicht nur den stöchiometrisch zu erwartenden Ausstoß an CO_2 aus einer einfachen Brennstoffrechnung, sondern beinhalten auch Faktoren wie zeitliche und örtliche Fluktuation der Brennstoffqualität (ein landesspezifischer Mittelwert wird angegeben), Umwandlungswirkungsgrade der eingesetzten Technologien (ebenfalls als landesspezifischer Mittelwert) sowie die Einbeziehung von klimarelevanten nicht-CO_2-Emissionen (CH_4, VOC, SO_x, NO_x). Für Erdgas wird für das Jahr 2011 in Österreich ein Emissionsfaktor von 55,4 tCO_2/TJ angegeben (Umweltbundesamt, 2013). Der Vergleich mit dem aus einer Brennstoffrechnung zu erwartenden theoretischen CO_2-Ausstoss von 50,0 tCO_2/TJ bei der Verbrennung von Erdgas einer für Österreich typischen Qualität (Prazak-Reisinger, 2013) zeigt, dass die realen umweltrelevanten Kohlendioxidemissionen deutlich höher als die theoretisch zu erwartenden Werte sind. Kann eine biomassegefeuerte Anlage mit dem hier diskutierten Konzept also eine gasgefeuerte Anlage gleicher Größe und gleicher Wärmenutzung ersetzen, so ergibt sich nach dieser Rechnung ein jährliches CO_2-Einsparungspotential von 3.504 t CO_2. Ersetzt die Biomasse eine Leichtölverbrennung (Emissionsfaktor 77,6 tCO_2/TJ), so beträgt das Potential 4.907 t CO_2, bei Steinkohle (Emissionsfaktor 92,7 tCO_2/TJ) beträgt das Potential sogar 5.861 t CO_2. Dieses Einsparungspotential ist aber bei fairer Betrachtung real nicht zu erzie-

len, da genau genommen das Kohlendioxid aus der Verbrennung biogener Brennstoffe nicht zu 100 % als klimaneutral betrachtet werden kann. Um die tatsächlich klimarelevanten CO_2-Emissionen eines Brennstoffes und einer Energiewandlungskette zu beurteilen, ist eine Lebenszyklusanalyse (*LCA – Life Cycle Assessment*) durchzuführen. Darin werden versteckte CO_2-Emissionen (fossile Treibstoffe für Landfahrzeuge bei Anbau, Ernte und Einbringung des Brennstoffs, aufwändigerer Brennstofftransport aufgrund geringerer Energiedichte, energetischer Aufwand der Anlagenerrichtung) aber auch andere negative Umwelteinflüsse (Wasserverbrauch bei künstlicher Bewässerung, Lachgasemissionen durch Düngemitteleinsatz, Kohlenstoffabreicherung im Boden) bewertbar gemacht und ein CO_2-Fussabdruck für die gesamte Kette erstellt. Eine übersichtliche Einführung in diese Thematik wird bei Cherubini et al. gegeben (Cherubini et al., 2009). Die ökologische Bewertung von Mais-Ganzpflanze als Brennstoff fällt aufgrund des Wasserbedarfes der Pflanze eher schlecht aus, außerdem stellt sich hier die Frage der Konkurrenz zur Produktion von Nahrungs- und Futtermitteln. Vorteilhafter in diesem Sinne ist die Nutzung agrarischer Reststoffe der Hauptfrucht (z.B. Stroh) oder der Nutzung von Zwischenfrüchten. Die in der vorliegenden Arbeit diskutierte Verbrennungstechnologie bietet den Vorteil eines sehr breiten möglichen Brennstoffbandes, sofern das Material in Ballenform gebracht und transportiert werden kann.

Abschließend sei angemerkt, dass in der vorliegenden Arbeit lediglich der Verbrennungsteil betrachtet wird. Die Energiewandlungskette, die die thermische Energie des Heißgases in nutzbare elektrische Energie und Fernwärme (Dampfkreislauf, *Rankine-Cycle*) überführt, wird nicht untersucht.

8.1 Standardbetriebszustand

Die Definition des Standardbetriebszustandes umfasst im Wesentlichen die Bestimmung des erforderlichen Brennstoffmassenstromes sowie die Dimensionierung der Frischluft- und Rezirkulationsgasvolumenströme in die einzelnen Verbrennungszonen. Der Brennstoffmassenstrom ergibt sich bei Kenntnis des Heizwerts und der mittleren Feuchte des eingesetzten Brennstoffes sehr einfach aus der gewünschten Wärmeleistung der Verbrennungsanlage, im vorliegenden Fall 2,18 MW_{th}. Die genannten Gasvolumenströme ergeben sich aus der Luftverhältniszahl und dem Rezirkulationsverhältnis der Gesamtanlage sowie der einzelnen Verbrennungszonen.

Die Luftverhältniszahl ist für die Qualität und Stabilität der Verbrennung sowie für den thermischen Wirkungsgrad der Verbrennungsanlage von maßgeblicher Bedeutung. Bei der Nutzung neuartiger Brennstoffe ist die Wahl des idealen Wertes der Luftverhältniszahl selten einfach und kaum mit theoretischen Mitteln vorherzusagen. Aus diesem Grund wurden in der vorliegenden Arbeit zunächst in der Literatur berichtete Werte herangezogen und durch intensive experimentelle Arbeiten an der Verbrennungsversuchsanlage verifiziert und geschärft. Die entwickelten Prozesssimulationsmodelle wurden zur Bestimmung der Prozessströme und zur thermischen Bilanzierung herangezogen.

Die Rezirkulation von Verbrennungsrauchgas bewirkt wie bereits erwähnt eine Reduktion der Verbrennungstemperatur und verhindert oder reduziert dadurch das Aufschmelzen von Asche und die Verschlackung des Brennraumes. Die optimale Wahl des Rezirkulations-

verhältnisses ist deshalb ganz wesentlich vom verwendeten Brennstoff selbst, dem Heizwert und dem Ascheschmelzverhalten, abhängig. Auch hier wurden Literaturangaben mit den experimentellen Erkenntnissen verglichen und anhand der Prozesssimulationsmodelle wurde für eine gewünschte Verbrennungstemperatur das Rezirkulationsverhältnis festgelegt.

Die zu diesen Zwecken herangezogene Literatur umfasst sowohl Standardwerke und Lehrbucher (Günther, 1984; Görner, 1991; Nielsen et al., 1998; Marutzky et al., 1999; Kaltschmitt et al., 2001; Warnatz et al., 2001; Joos, 2006; Karl, 2006; Keating, 2007; Miller et al., 2008; Wesselak et al., 2009; Spliethoff, 2010; Grammelis, 2011) sowie spezielle wissenschaftliche Artikel zur Verbrennung artverwandter Brennstoffe (Ergüdenler et al., 1994; Bech et al., 1996; Di Blasi et al., 1999b; van der Lans et al., 2000; Kær, 2004b; Kristensen et al., 2004; Kær, 2005; Khor et al., 2007; Zhovmir et al., 2007).

Tabelle 8-1 fasst die einzuhaltenden Randbedingungen speziell hinsichtlich der Ascheschmelztemperaturen bei der Ermittlung des Standardbetriebszustandes der Verbrennungsversuchsanlage zusammen.

Tabelle 8-1: Vorgegebene Randbedingungen des Standardbetriebszustandes der Ganzballen-Verbrennungsanlage

Parameter	Einheit	Wert
Brennstoffwärmeleistung	MW_{th}	2,18
Temperatur Heißgas	°C	756
Temperatur Frischluft	°C	20
Temperatur Rauchgas	°C	160
Temperatur Primärverbrennungszone	°C	800
Temperatur Rostzone	°C	800

Unter Vernachlässigung etwaiger Strahlungswärmeverluste der Brennkammer erfolgte mit diesen Randbedingungen die Basisauslegung des Standardbetriebszustandes. Um die Verteilung der Wärmeleistung zwischen Primärzone und Rostzone zu ermitteln, wurde angenommen, dass 10 % der nichtflüchtigen Komponenten in der Primärverbrennungszone und 5 % der flüchtigen Komponenten in der Rostzone verbrennen. Als Brennstoff wurde Mais-Ganzpflanze gewählt (Brennstoffcharakteristika gemäß Tabelle 3-3 und Tabelle 3-4, Verhalten der Asche gemäß Tabelle 3-5).

Die Ermittlung aller relevanten Parameter und Kenndaten des Standardbetriebszustandes erfolgte durch Anwendung der in Kapitel 5 entwickelten Simulationsumgebung zur Erstellung der Globalbilanz des Verbrennungskreislaufes. Durch die Einstellung der jeweiligen lokalen Luftverhältniszahlen konnten die erforderlichen Frischluftströme der einzelnen Verbrennungszonen ermittelt werden. Die jeweiligen Rezirkulationsgasströme wurden für die einzelnen Zonen solange variiert, bis die vorgegebenen Zonentemperaturen erreicht wurden. Bei der Bilanzierung der Massen- sowie der Enthalpieströme wurde dabei ein Bilanzfehler von 0,07 % als Iterationsabbruchkriterium toleriert. Durch die Vorgabe der Rauchgastemperatur ergeben sich in weiterer Folge direkt die am Rauchgaswärmetauscher erzielbare thermische Leistung sowie der thermische Wirkungsgrad der Verbrennungsanlage.

Aufgrund der mathematischen Dreiteilung der Brennkammer ist außerdem der Beitrag der Primärverbrennungszone sowie der Rostzone zur gesamten thermischen Leistung des

Verbrennungsapparates ermittelbar. Da im Zuge der Modellierung auch eine Zusammensetzung und ein Heizwert für den Rostbrennstoff angenommen wurden, kann in diesem Schritt auch direkt die Brennstoffbelastung des Verbrennungsrostes für die weitere detaillierte Auslegung ermittelt werden.

Die wesentlichen verbrennungstechnischen und anlagenspezifischen Parameter des auf diese Weise ermittelten Standardbetriebszustandes sind in Tabelle 8-2 zusammengefasst. Der thermische Anlagenwirkungsgrad definiert sich aus dem Nutzwärmestrom am Wärmetauscher bezogen auf den zugeführten Wärmestrom (Brennstoffwärmeleistung und fühlbare Wärme von Brennstoff und Verbrennungsluft).

Tabelle 8-2: Verbrennungstechnische und anlagenspezifische Parameter des Standardbetriebszustandes der Ganzballen-Verbrennungsanlage

Parameter	Einheit	Wert
Brennstoffwärmeleistung	MW_{th}	2,18
Wärmetauscherleistung	MW_{th}	1,75
Thermischer Anlagenwirkungsgrad	%	79,4
Brennstoffmassenstrom	kg/h	565
Luftverhältniszahl global	-	1,40
Rezirkulationsverhältnis global	vol/vol	1,17
Verhältnis Heißgas/(Frischluft+Rezirkulat)	vol/vol	1,063
Verhältnis Rauchgas/Frischluft	vol/vol	1,136
Frischluftvolumenstrom	Nm^3/h	2.973
Zonale Verteilung Frischluft:	vol/vol	
Primärzone		0,2421
Rostzone		0,2405
Sekundärzone		0,5174
Rezirkulationsgasvolumenstrom	Nm^3/h	3.478
Zonale Verteilung Rezirkulationsgas:	vol/vol	
Primärzone		0,4267
Rostzone		0,3404
Sekundärzone		0,2329
Luftverhältniszahl Primärzone	-	0,70
Rezirkulationsverhältnis Primärzone	vol/vol	2,06
Temperatur Primärverbrennungszone	°C	796
Luftverhältniszahl Rostzone	-	1,80
Rezirkulationsverhältnis Rostzone	vol/vol	1,66
Temperatur Rostzone	°C	800
Brennstoffbelastung Rostzone	kg/h	127
Brennstoffwärmeleistung Rostzone	MW_{th}	0,844
Rauchgasvolumenstrom	Nm^3/h	3.377
O_2-Gehalt Rauchgas	vol%, trocken	6,05
NO_x-Gehalt Rauchgas	$mgNO_2/Nm^3$, trocken, bei 13% O_2-Gehalt	135

Um alle relevanten Stoffströme, welche den Standardbetriebszustand charakterisieren, in übersichtlicher Weise darzustellen, wurde ein verfahrenstechnisches Fließbild der Gesamtverbrennungsanlage erstellt. Dieses Fließbild ist in Abbildung 8-1 dargestellt.

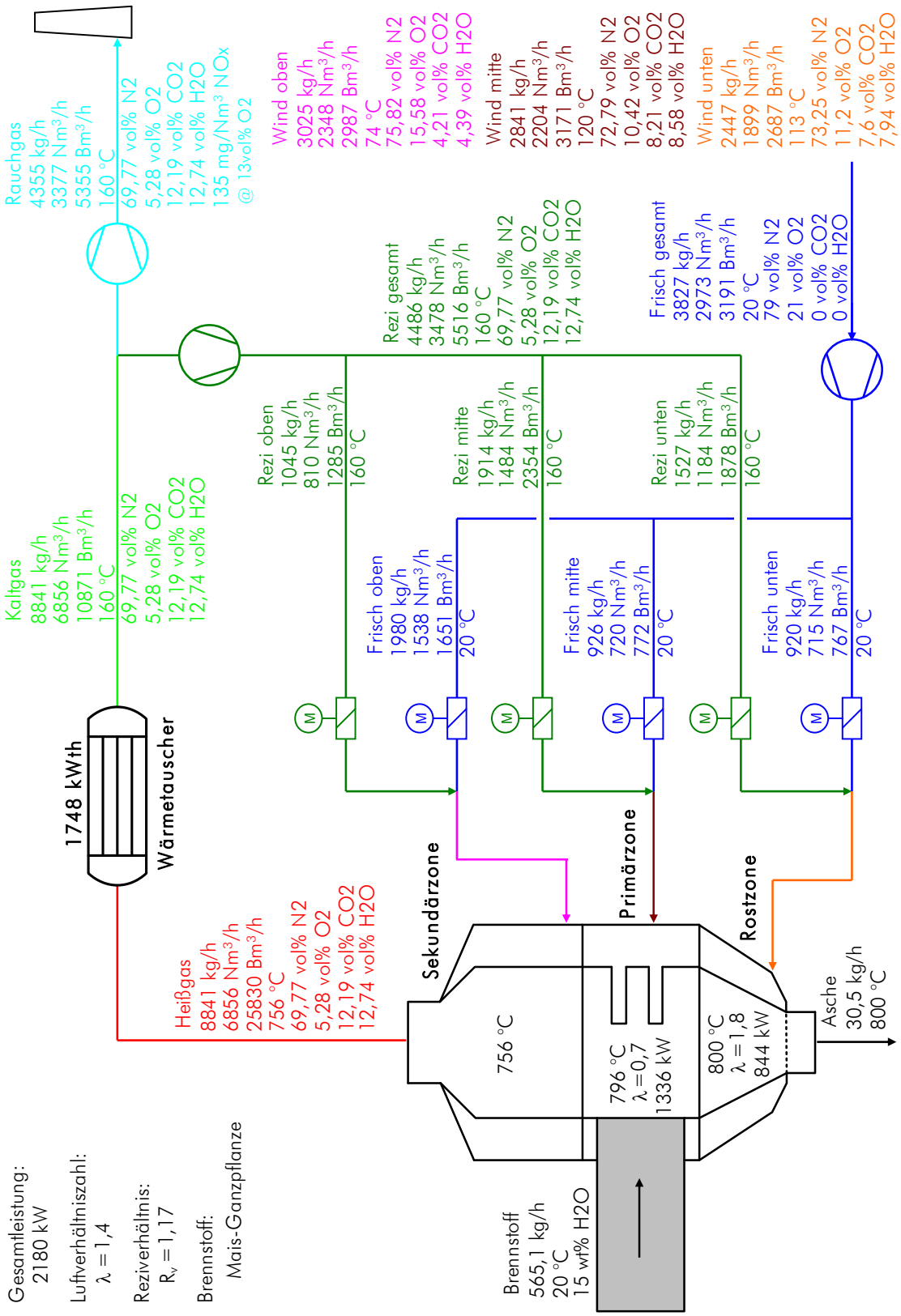


Abbildung 8-1: Verfahrensfließbild des Standardbetriebszustandes der Ganzballen-Verbrennungsanlage mit einer thermischen Leistung von 2,18 MW

Der Standardbetriebszustand ist charakterisiert durch eine relativ starke Luftstufung (vergleiche Kapitel 3.1.2.2), bei der ein nennenswerter Beitrag der Verbrennungsleistung durch

Gasnachverbrennung in der Sekundärverbrennungszone erreicht wird. Aus diesem Grund wird dieser Betriebszustand auch als Sekundärzonenbetrieb oder Shiftbetrieb bezeichnet (ein Teil der Verbrennung wird in die Sekundärzone „geshiftet"). Auf diese Weise können die Stickstoffoxid-Emissionen signifikant reduziert werden. Um einen möglichst vollständigen Ausbrand in der Sekundärzone zu gewährleisten, wird in dieser Zone ein relativ großer Luftüberschuss angewendet, wodurch die Temperatur dieser Brennstoffzone auch unterhalb der Primärzonen- und Rostzonentemperatur liegt. Die höheren Temperaturen in diesen beiden Zonen ermöglichen wiederum schnellere Umsetzungskinetiken bei den heterogenen Verbrennungsschritten. Am Austritt des Verbrennungsapparates ist aufgrund der Materialauswahl in der nachfolgenden Heißgasleitung ein Temperaturlimit von 790 °C einzuhalten, weshalb die Temperatur der Sekundärzone auch durch Zufuhr von Rezirkulationsgas weiter reduziert wurde.

8.2 Anfahr- und Hochfahrvorgang

Neben dem Sekundärzonenbetrieb ist noch eine weitere Variante für den Betrieb der Verbrennungsanlage von wesentlicher Bedeutung, der Primärzonenbetrieb. Dieser Betrieb ist speziell während der Startphase der Verbrennungsanlage vorgesehen, um die Anlage zunächst einmal auf Betriebstemperatur zu bringen. Dieser Betriebszustand wird gewählt, wenn aufgrund zu niedriger Ofentemperaturen im Bereich der Gasnachverbrennungszone keine Luftstufung möglich ist. Die gesamte Verbrennung des Brennstoffes findet in der Primär- und der Rostzone statt. Der Primärzonenbetrieb zielt deshalb darauf ab, den Verbrennungsapparat möglichst schnell auf Betriebstemperatur zu bringen, kann aber auch beibehalten werden, nachdem die Brennkammer die idealen Betriebstemperaturen erreicht hat. Während des Hochfahrvorganges sind die Emissionen unverbrannter Komponenten, speziell CO, als auch die Emissionen an Stickstoffoxiden (aufgrund der fehlenden Luftstufung) verhältnismäßig groß. Der Luftüberschuss während dieser Phase ist hoch (aufgrund experimenteller Resultate ist mit einer globalen Luftverhältniszahl von 1,85 zu rechnen), die Rezirkulationsrate ist gering (um die sich einstellenden Temperaturgradienten zu kontrollieren ist dieser Parameter aber größer als Null), die Gaszufuhr zur Sekundärzone ist ausgesetzt.

Nach dem ersten Zünden des Brennstoffes und der Stabilisierung des Brandes wird der Ofen in einen Hochfahrbetrieb ohne Luftstufung versetzt. Die Routinen hierzu sind weitgehend experimentell erarbeitet; Prozesssimulation kann aufgrund der hohen Dynamik während dieses Vorganges (Temperaturgradienten, instationäre Volumenströme und Gaszusammensetzungen) keinen nennenswerten Beitrag leisten. Die Definition dieses Hochfahrbetriebes kann aber innerhalb gewisser Grenzen mit dem entwickelten Dreizonenmodell durchgeführt werden. Nachdem der Verbrennungsapparat auf Betriebstemperatur gebracht wurde, befindet sich die Anlage im stationären Primärzonenbetrieb, der aber, wie bereits erwähnt, aufgrund der fehlenden Luftstufung und damit einhergehendem hohen Stickstoffoxidgehalt im Rauchgas nicht zu favorisieren ist. Aus diesem Grund wird der Ofen relativ rasch in den Sekundärzonenbetrieb (=Standardbetriebszustand) übergeführt. Während dieser Umschaltprozedur wird die Primärzone immer unterstöchiometrischer betrieben, wodurch in wachsendem Ausmaß brennbare Ausgasungsprodukte entstehen. Eine ausreichende Temperatur in der Sekundärzone vorausgesetzt, können diese Ausgasungsprodukte durch Zufuhr von Sau-

erstoff und intensive Durchmischung gezündet und komplett ausgebrannt werden. Ein Betrieb zwischen den genannten Betriebszuständen ist vom energetischen Standpunkt und aufgrund der Emissionssituation unvorteilhaft.

Da die Dynamik einer sich aufheizenden Verbrennungsanlage mittels statischer Prozesssimulation nicht erfasst werden kann wird an dieser Stelle der Primärzonenbetrieb zu einem bestimmten Zeitpunkt während des Hochfahrvorganges simuliert. Im Vergleich zu den strömungsmechanischen und chemisch-kinetischen Vorgängen ist die Aufheizung der einzelnen Verbrennungszonen sehr langsam, sodass diese Vorgangsweise zulässig ist und brauchbare Erkenntnisse liefert. Um hierbei den Energiebedarf zur Erwärmung des Ofeninventars zu berücksichtigen wird der Senkenterm des Energieverlustes in der Energiebilanz (Gleichung 5.70) verwendet. Die Abschätzung dieses Energiebedarfes kann aufgrund der Dynamik nur sehr grob ausfallen, weshalb die Ergebnisse der Simulation dieses Hochfahrprozesses lediglich als Näherung aufgefasst werden darf. Dennoch können auf diese Weise die Größenordnungen der erforderlichen Gasvolumenströme sowie die Volumenstromverteilungen während der Hochfahrphase abgeschätzt werden. In dieser Arbeit wurden mehrere Zeitpunkte simuliert und die ermittelten Parameter wurden im Hochfahralgorithmus der Verbrennungs-Pilotanlage implementiert.

Tabelle 8-3: Verbrennungstechnische und anlagenspezifische Parameter während der Hochfahrprozedur der Ganzballen-Verbrennungsanlage

Parameter	Einheit	Wert
Brennstoffwärmeleistung	MW_{th}	2,18
Luftverhältniszahl global	-	1,85
Rezirkulationsverhältnis global	vol/vol	0,24
Frischluftvolumenstrom	Nm^3/h	3.929
Zonale Verteilung Frischluft:	vol/vol	
Primärzone		0,7415
Rostzone		0,2585
Sekundärzone		0,0000
Rezirkulationsgasvolumenstrom	Nm^3/h	930
Zonale Verteilung Rezirkulationsgas:	vol/vol	
Primärzone		0,6700
Rostzone		0,3300
Sekundärzone		0,0000
Luftverhältniszahl Primärzone	-	2,03
Rezirkulationsverhältnis Primärzone	vol/vol	0,21
Temperatur Primärverbrennungszone	°C	725
Luftverhältniszahl Rostzone	-	2,03
Rezirkulationsverhältnis Rostzone	vol/vol	0,30
Temperatur Rostzone	°C	725

Eine Zusammenfassung der wesentlichsten beschreibenden Parameter für einen ausgewählten Zeitpunkt während der Hochfahrprozedur ist in Tabelle 8-3 dargestellt, das zugehörige Verfahrensfließbild ist Abbildung 14-59 zu entnehmen. Es ist anzumerken, dass an dieser Stelle zum besseren Vergleich der Betriebszustand für den Volllastfall dargestellt ist. Dieser ist während des Hochfahrbetriebes natürlich nicht zu erreichen (nach den experimentellen

Erfahrungen ist etwa mit 50 % Teillast zu rechnen), die Volumenströme sind entsprechend linear zu skalieren.

Der stabile Primärzonenbetrieb unterscheidet sich vom Standardbetriebszustand lediglich darin, dass die sekundäre Verbrennungszone nicht mit Frischluft und Rezirkulationsgas beaufschlagt wird, sondern die dort vorgesehenen Volumenströme der Primärzone zugeschlagen werden. Folglich unterscheiden sich die beschreibenden Parameter für diese beiden Betriebszustände nur in wenigen Punkten. Tabelle 8-4 zeigt die wesentlichen Parameter für den stationären Primärzonenbetrieb im Vergleich zum Standardbetrieb, das Verfahrensfließbild ist in Abbildung 8-2 dargestellt.

Tabelle 8-4: Verbrennungstechnische und anlagenspezifische Parameter des stationären Primärzonenbetriebes im Vergleich zum Sekundärzonenbetrieb (Standardbetriebszustand)

Parameter	Einheit	Primärzonenbetrieb	Standardbetrieb
Brennstoffwärmeleistung	MW_{th}	2,18	2,18
Brennstoffmassenstrom	kg/h	565	565
Luftverhältniszahl global	-	1,40	1,40
Rezirkulationsverhältnis global	vol/vol	1,17	1,17
Frischluftvolumenstrom	Nm^3/h	2973	2.973
Zonale Verteilung Frischluft:	vol/vol		
Primärzone		0,7595	0,2421
Rostzone		0,2405	0,2405
Sekundärzone		0,0000	0,5174
Rezirkulationsgasvolumenstrom	Nm^3/h	3478	3.478
Zonale Verteilung Rezirkulationsgas:	vol/vol		
Primärzone		0,6595	0,4267
Rostzone		0,3404	0,3404
Sekundärzone		0,0000	0,2329
Luftverhältniszahl Primärzone	-	1,82	0,70
Rezirkulationsverhältnis Primärzone	vol/vol	1,02	2,06
Temperatur Primärverbrennungszone	°C	680	796
Luftverhältniszahl Rostzone	-	1,80	1,80
Rezirkulationsverhältnis Rostzone	vol/vol	1,66	1,66
Temperatur Rostzone	°C	800	800
Brennstoffbelastung Rostzone	kg/h	127	127
Brennstoffwärmeleistung Rostzone	MW_{th}	0,844	0,844
Rauchgasvolumenstrom	Nm^3/h	3377	3.377
NO_x-Gehalt Rauchgas	mg/Nm^3	135	135

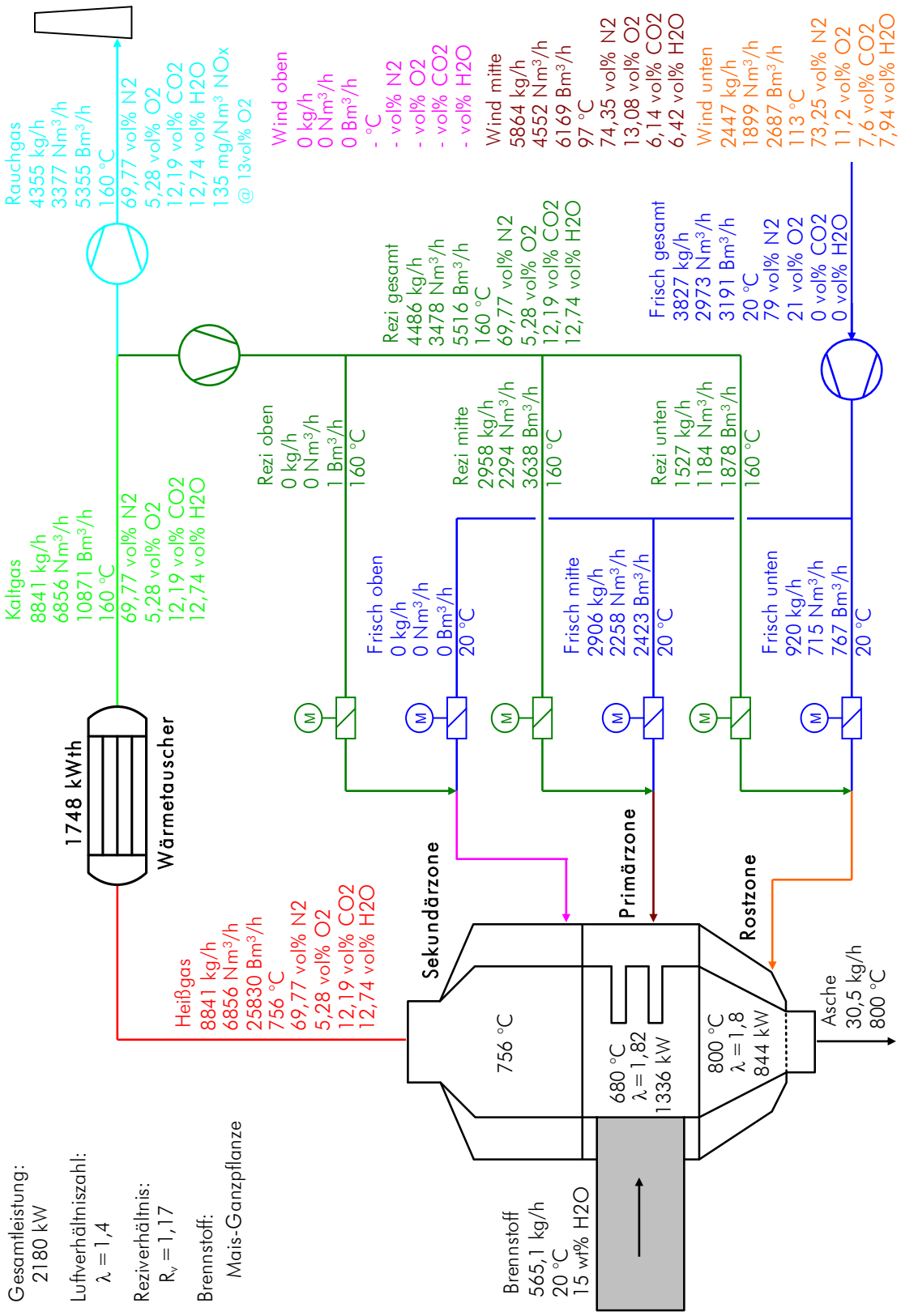


Abbildung 8-2: Verfahrensfließbild der Ganzballen-Verbrennungsanlage im stationären Primärzonenbetrieb

Die Ergebnisse der Simulation von Standardbetrieb und stationärem Primärzonenbetrieb mit dem entwickelten Modell zeigen den gleichen Gehalt an Stickstoffoxiden im Rauchgas

(135 mg/Nm³). Es ist allerdings zu erwarten, dass bei einem Verbrennungsbetrieb ohne Luftstufung die Stickstoffoxidemissionen wesentlich höher sind als hier berechnet. Das im Rahmen der Globalbilanzierung angewandte Modell kann diesen Effekt allerdings nicht abbilden, da es lediglich den globalen Luftüberschuss und nicht den Einfluss der Luftstufung berücksichtigt (siehe Gleichung 5.17). Soll dieses Modell auch für verschiedene Intensitäten der Luftstufung anwendbar sein, so muss es unter Einbeziehung experimenteller Daten erweitert werden.

8.3 Parametervariationen und Sensitivitätsanalyse

Die entwickelte Simulationsumgebung zur Erstellung der Globalbilanzierung mittels Einzonen- und Dreizonenmodell wurde um mehrere Routinen zur automatisierten Variation verschiedenster verbrennungstechnischer und anlagenspezifischer Parameter erweitert. Damit konnten die relativ hoch aufgelösten ein- und zweidimensionalen Parametervariationen durchgeführt werden, welche im folgenden Abschnitt präsentiert werden sollen.

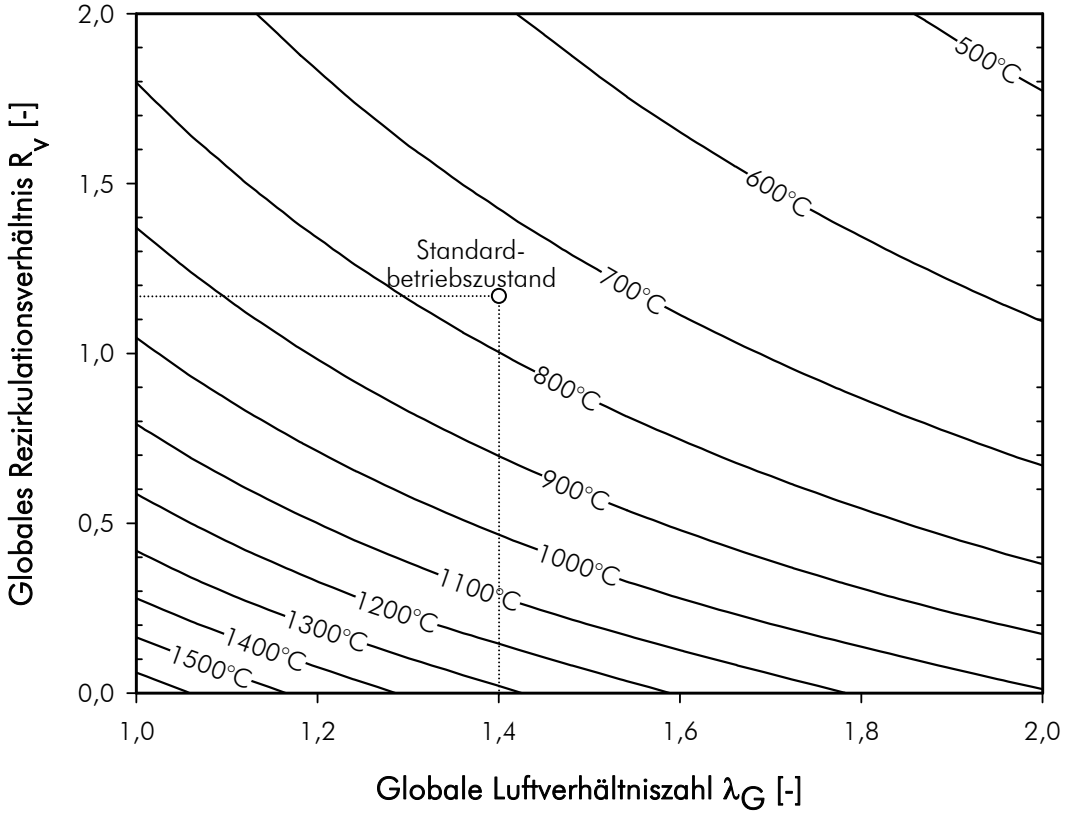


Abbildung 8-3: Einfluss der globalen Luftverhältniszahl und des globalen volumetrischen Rezirkulationsverhältnisses auf die Heißgastemperatur

In Abbildung 8-3 wird der Einfluss der globalen Luftverhältniszahl sowie des globalen volumetrischen Rezirkulationsverhältnisses auf die Heißgastemperatur der Verbrennungsanlage dargestellt. Steigender Luftüberschuss im überstöchiometrischen Bereich sowie steigende Rezirkulationsrate resultieren wie erwartet in einer Reduktion der Heißgastemperatur. Weiters ist zu erkennen, dass der Einfluss der Rezirkulationsrate auf die Temperatur wesentlich aus-

geprägter ist als der Einfluss der Luftverhältniszahl (siehe auch Kapitel 3.1.3). Die Parametervariation ist zwar auch für niedrigere Temperaturen in der Abbildung dargestellt, es ist aber zu erwarten, dass unterhalb von etwa 600 °C keine stabile Verbrennung der ballenförmigen Biomasse mehr gewährleistet werden kann und die für diese Simulation getroffene Annahme der vollständigen Verbrennung nicht mehr erfüllt ist.

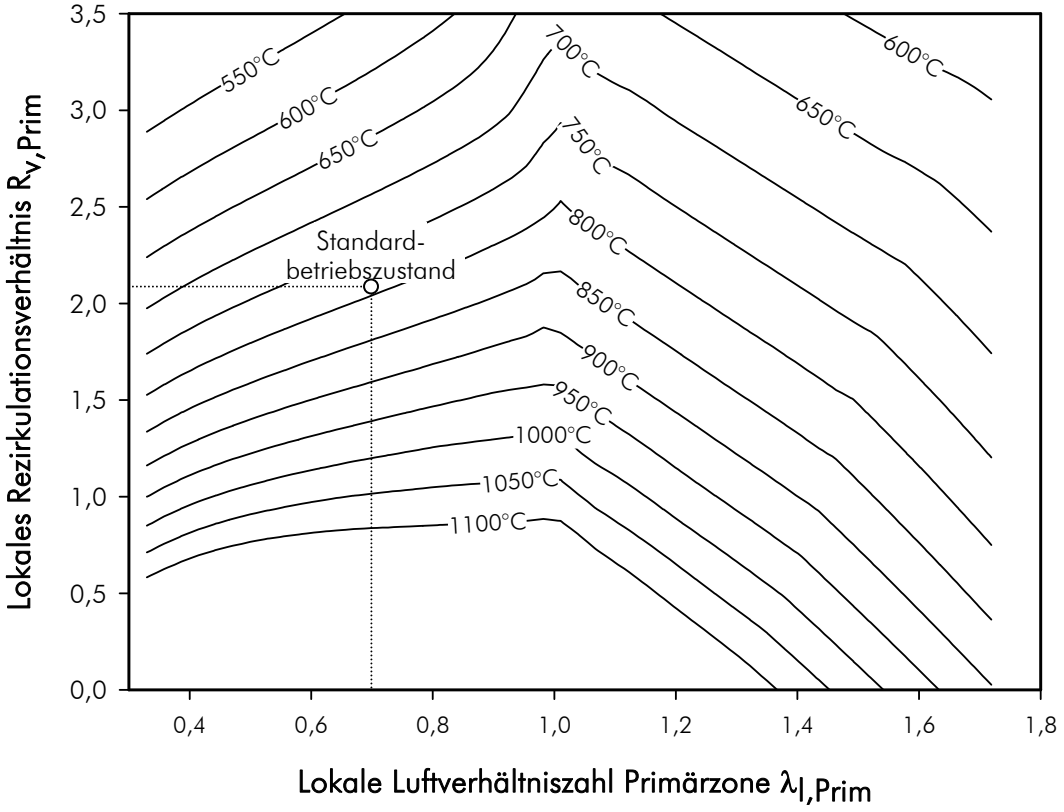


Abbildung 8-4: Einfluss der lokalen Luftverhältniszahl und des lokalen volumetrischen Rezirkulationsverhältnisses der Primärverbrennungszone auf die Temperatur der Verbrennungszone

Abbildung 8-4 zeigt den Einfluss der lokalen Luftverhältniszahl sowie des lokalen volumetrischen Rezirkulationsverhältnisses auf die Temperatur der Primärverbrennungszone. Dieses Ergebnis wurde durch Anwendung des Dreizonen-Verbrennungsmodells erhalten. Hier ist innerhalb gewisser Grenzen (genauer in Kapitel 5.2 dargestellt) eine Stoff- und Energiebilanzierung auch bei unterstöchiometrischen Verhältnissen und damit unvollständiger Verbrennung und Entstehung volatiler brennbarer Gase durchführbar. Die Abbildung zeigt klar ein jeweiliges Temperaturmaximum bei exakt stöchiometrischen Bedingungen (Luftverhältniszahl = 1). Darunter ist aufgrund der reduzierten Energiefreisetzung bei der unvollständigen Verbrennung die zu erwartende Zonentemperatur geringer. Bei höherer Luftverhältniszahl sinkt die Temperatur aufgrund von Verdünnungseffekten. Die Isothermen sind knapp unterhalb des stöchiometrischen Bereiches speziell bei niedrigen Temperaturen deutlich nichtmonoton. Dieses Verhalten lässt sich durch die limitierte Anzahl verwendeter Ausgasungsprodukte und deren Reaktionscharakteristik bei unterschiedlichem Sauerstoffpartialdruck erklären. Für Temperaturen unter 600 °C ist auch diese Darstellung aufgrund der Stabilität der Verbrennung sowie aufgrund der vorhandenen Daten bezüglich der Verbrennungskinetik, welche dann außerhalb des angegebenen Gültigkeitsbereiches angewandt wird, als ungenau bzw. nicht zutreffend einzustufen.

Der Einfluss der globalen Verbrennungsparameter Luftverhältniszahl und Rezirkulationsverhältnis auf die zu erzielende Leistung am Heißgaswärmetauscher ist Abbildung 8-5 zu entnehmen. Der Einfluss beider Faktoren ist nicht sonderlich groß, es ist aber klar ersichtlich, dass die Variation des Luftüberschusses wesentlich stärker zu einer Reduktion der Wärmetauscherleistung führt (Größenordnung 6 % zwischen $\lambda = 1$ und $\lambda = 2$) als die Variation des Rezirkulationsverhältnisses. Damit zeigt sich deutlich, dass die Einstellung einer gewünschten Verbrennungstemperatur durch Anwendung von Rauchgasrezirkulation die thermodynamisch effizientere Methode ist und einem übersteigerten Luftüberschuss vorzuziehen ist (siehe auch Kapitel 3.1.3).

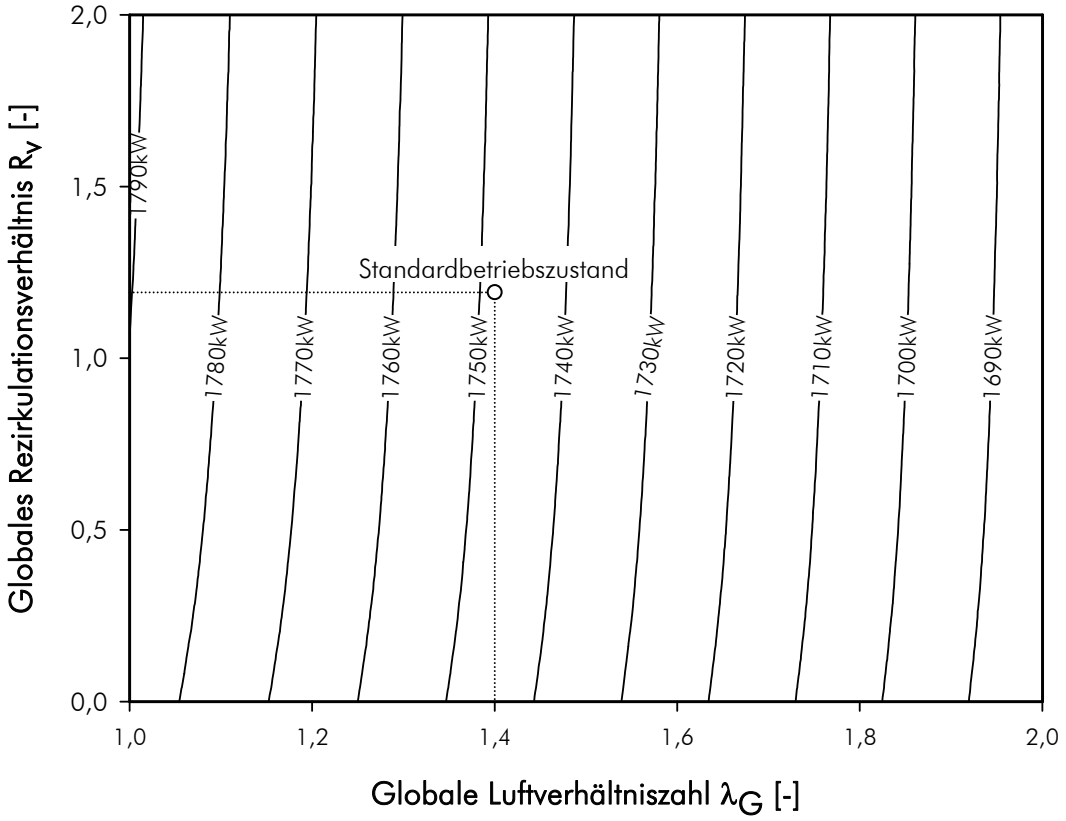


Abbildung 8-5: Einfluss der globalen Luftverhältniszahl und des globalen volumetrischen Rezirkulationsverhältnisses auf die erzielbare Wärmetauscherleistung

Eine wesentliche Einflussgröße auf die Wärmetauscherleistung ist erwartungsgemäß auch die Temperatur am Austritt des Wärmetauschers, welche der Rauchgastemperatur am Kamin entspricht. Eine steigende Rauchgastemperatur bewirkt direkt eine sinkende Wärmetauscherleistung. Da mit der Rauchgasrezirkulation auch eine gewisse Menge fühlbarer Wärme in den Verbrennungsraum rückgeführt wird, steigt mit steigender Rauchgastemperatur allerdings die zu erwartende Heißgastemperatur am Eintritt des Wärmetauschers. Dennoch bleibt unter dem Strich eine Reduktion in der entnehmbaren Leistung am Wärmetauscher. Dieser Zusammenhang ist in Abbildung 8-6 dargestellt.

Die Temperatur des Rauchgases hat aufgrund der Rauchgasrezirkulation nicht nur einen Einfluss auf die Heißgastemperatur der Verbrennungsanlage, sondern auch auf die Temperaturen in den einzelnen Verbrennungszonen. Aus diesem Grund steigen bei sonst gleichen Einstellungen bei einer Steigerung der Rauchgastemperatur auch die Temperaturen der primären Verbrennungszone sowie der Rostzone. Die Temperatur der sekundären Verbren-

nungszone entspricht der Heißgastemperatur. Da in der primären Verbrennungszone die Rezirkulationsrate höher ist als in der Rostzone, steigt hier die Temperatur auch etwas stärker mit steigender Rauchgastemperatur an. Die beschriebenen Effekte sind in Abbildung 8-7 dargestellt.

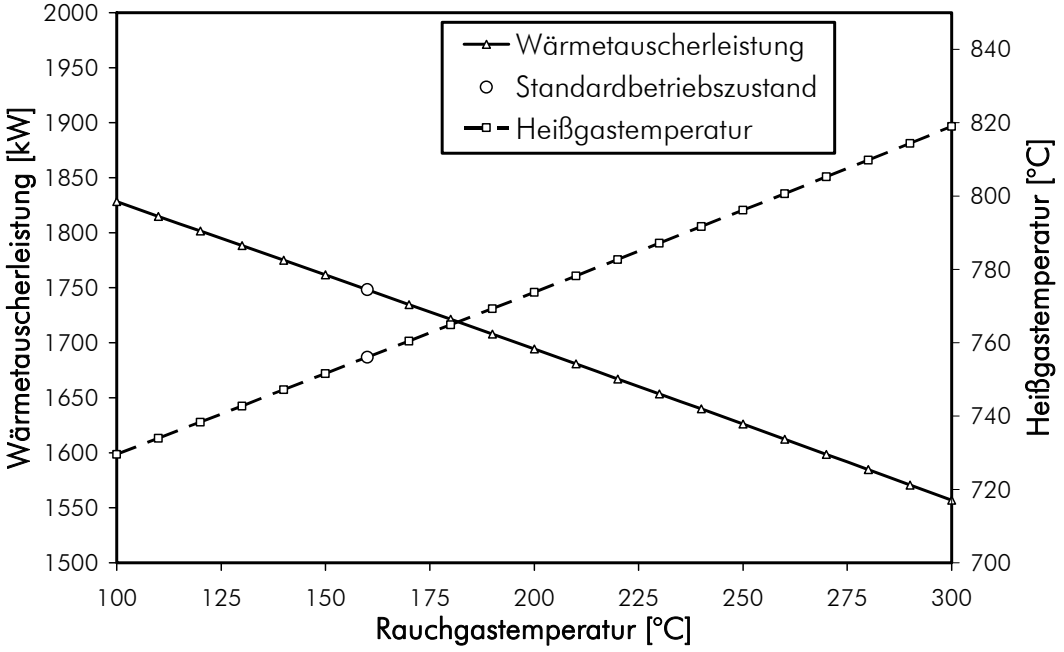


Abbildung 8-6: Einfluss der gewählten Rauchgastemperatur auf die erzielbare Wärmetauscherleistung sowie auf die Heißgastemperatur des Verbrennungsapparates bei sonst konstanten Bedingungen

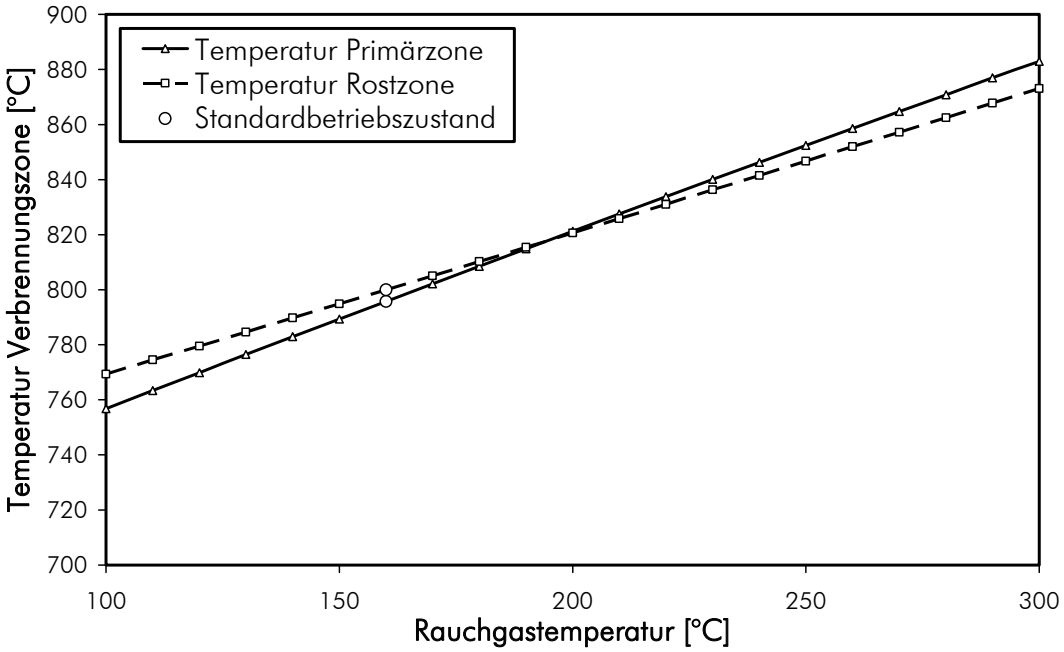


Abbildung 8-7: Einfluss der Rauchgastemperatur auf die Temperaturen der Primärverbrennungszone sowie der Rostzone aufgrund der Rauchgasrezirkulation

Eine wesentliche Einflussgröße auf den Wärmehaushalt des Verbrennungsapparates ist auch der Strahlungswärmeverlust. Dieser wird im Modell nicht ermittelt, sondern muss direkt vorgegeben werden. Die genaue Ermittlung der Strahlungsverluste ist schwierig und stark von den Umgebungsbedingungen abhängig. Aus diesem Grund wird der Wärmeverlust bei der Ermittlung des Standardbetriebszustandes nicht erfasst und vernachlässigt. Der Einfluss des gesamten sowie der zonalen Wärmeverluste auf die Ofentemperaturen wird aber im Folgenden diskutiert.

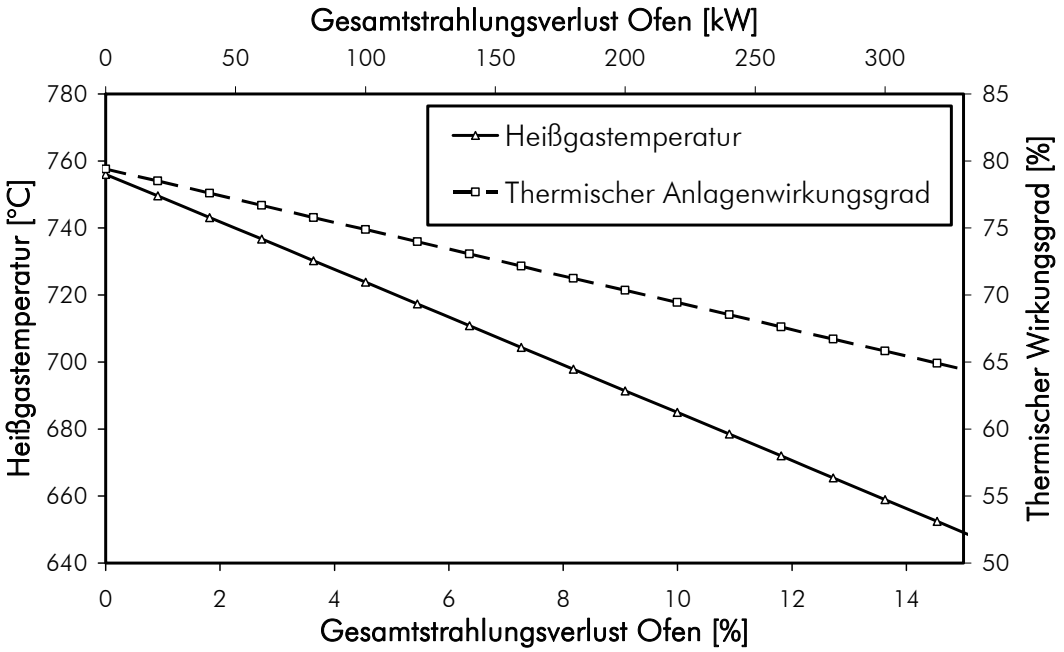


Abbildung 8-8: Einfluss des Gesamtstrahlungswärmeverlustes des Verbrennungsapparates auf die Heißgastemperatur sowie den thermischen Anlagenwirkungsgrad

Der Einfluss des Gesamtwärmeverlustes des Verbrennungsapparates auf die Heißgastemperatur und damit zusammenhängend auf den thermischen Anlagenwirkungsgrad ist in Abbildung 8-8 dargestellt. Die Auswirkung des Wärmeverlustes auf die Ofentemperatur ist groß; bei der für die betrachtete Anlagengröße konservativen Annahme von 8 % Strahlungswärmeverlust sinkt die Heißgastemperatur von 756 °C auf unter 700 °C sofern die bestimmenden Betriebsparameter nicht angepasst werden (Rezirkulationsverhältnis). Der thermische Anlagenwirkungsgrad sinkt in diesem Fall von 79,4 % auf 71,3 %. Der größte Verlust bleibt aber dennoch die nicht nutzbare fühlbare Wärme im Abgas (Abgasverlust); im Standardbetriebszustand nimmt dieser Abgasverlust einen Wert von 20,4 % an. Der Verlust aufgrund fühlbarer Wärme im Aschestrom ist aufgrund der geringen Aschemenge vernachlässigbar (etwa 0,25 %).

Abbildung 8-9 zeigt den Einfluss des Strahlungsverlustes der Primärzone auf die Temperatur der primären Verbrennungszone sowie den Einfluss des Strahlungsverlustes der Rostzone auf die Temperatur dieser Verbrennungszone. Darüber hinaus zeigt diese Darstellung auch den Einfluss der lokalen Wärmeverluste auf die Heißgastemperatur wenn diese unabhängig voneinander variiert werden. Da die primäre Verbrennungszone einen größeren Beitrag zur Gesamtleistung des Verbrennungsapparates liefert, hat der Wärmeverlust in dieser Zone auch einen größeren Einfluss auf die Ofentemperaturen. Aufgrund der Konstruktion dieser Zone mit einem vollständigen, umlaufenden Windmantel ist in diesem Bereich aber generell

ein niedrigerer Strahlungswärmeverlust als in der Rostzone zu erwarten. Es ist anzunehmen, dass die Rostzone aufgrund des teilweise fehlenden Windmantels sowie der höheren Energiedichte und der generell etwas höheren Temperaturen an der realen Anlage einen höheren prozentuellen Strahlungswärmeverlust verursachen wird.

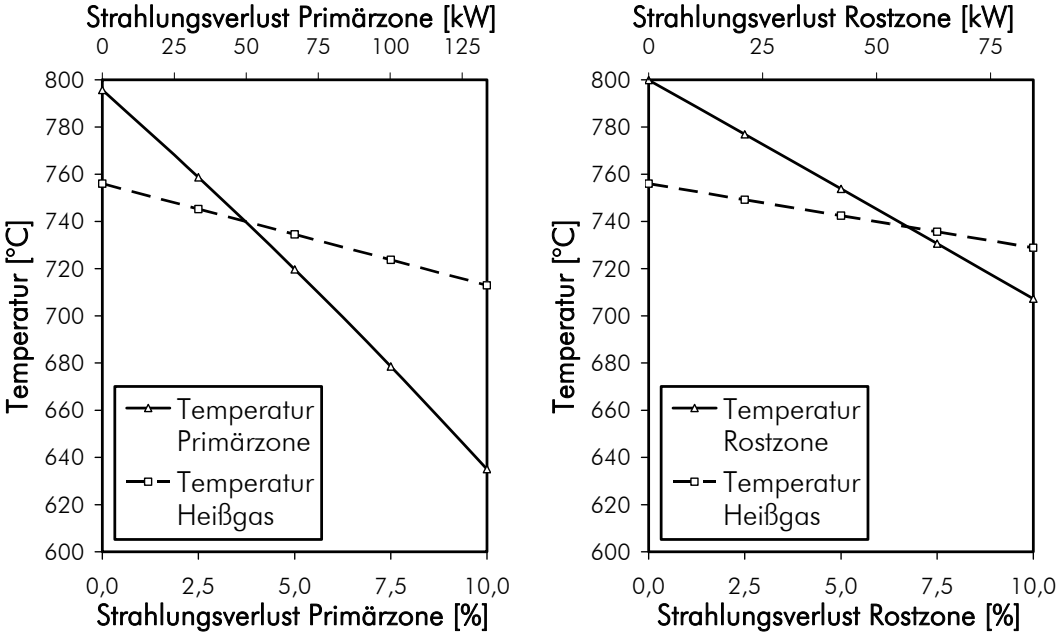


Abbildung 8-9: Einfluss des zonalen Strahlungswärmeverlustes auf die Heißgastemperatur sowie die Temperatur der Verbrennungszone

In Abbildung 8-10 ist der Einfluss der lokalen Luftverhältniszahl der Primärverbrennungszone auf die Temperatur dieser Zone dargestellt. Im Unterschied zu Abbildung 8-4 werden in dieser Abbildung eine Kurvenschar für konstantes Rezirkulationsverhältnis und eine Kurvenschar für konstanten Rezirkulationsgasvolumenstrom gezeigt. Kurvenscharen ergeben sich deshalb, da neben der Auslegungstemperatur dieser Zone von 796 °C auch Varianten mit höheren (+50 °C und +100 °C) sowie mit niedrigeren Temperaturen (-50 °C und -100 °C) berechnet wurden. Dadurch ist das Diagramm zwar schwer zu lesen, ist aber von großer Bedeutung für den praktischen Anlagenbetrieb sowie für die Auslegung und Parametrierung der Anlagenautomatisierung und der involvierten Regelkreise.

Die blauen Kurven zeigen, dass die Primärzonentemperatur mit steigender lokaler Luftverhältniszahl und konstantem Rezirkulationsverhältnis relativ stark absinken. Der Effekt der proportionalen Steigerung des Rezirkulationsgasstromes mit seiner hohen Wärmekapazität übersteigt die mit steigender Luftverhältniszahl zunehmende Verbrennungswärme. Lediglich im schwach unterstöchiometrischen Bereich ist eine leichte Zunahme der Temperatur in Richtung eines kleinen lokalen Maximums im exakt stöchiometrischen Punkt erkennbar. Im überstöchiometrischen Bereich sinkt die Temperatur, wie bereits erläutert, weiter ab. Die roten Kurven zeigen, dass die Primärzonentemperatur mit steigender lokaler Luftverhältniszahl und konstantem Rezirkulationsgasstrom zum stöchiometrischen Punkt hin stark ansteigen. In diesem Fall wird die zunehmende Verbrennungswärme nicht durch zusätzliches Rezirkulationsgas weggepuffert und kann sich demnach voll auf die Temperatur auswirken. Das globale Maximum im stöchiometrischen Punkt ist klar erkennbar.

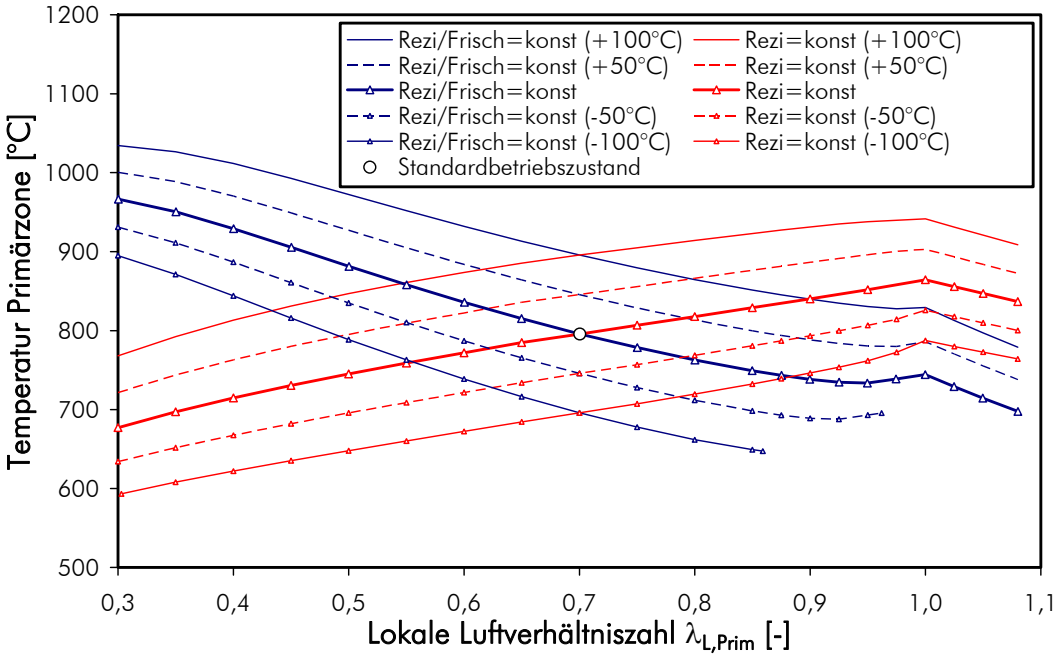


Abbildung 8-10: Einfluss der lokalen Luftverhältniszahl der Primärverbrennungszone auf die Temperatur der Verbrennungszone bei konstantem Rezirkulationsverhältnis sowie bei konstantem Rezirkulationsgasvolumenstrom

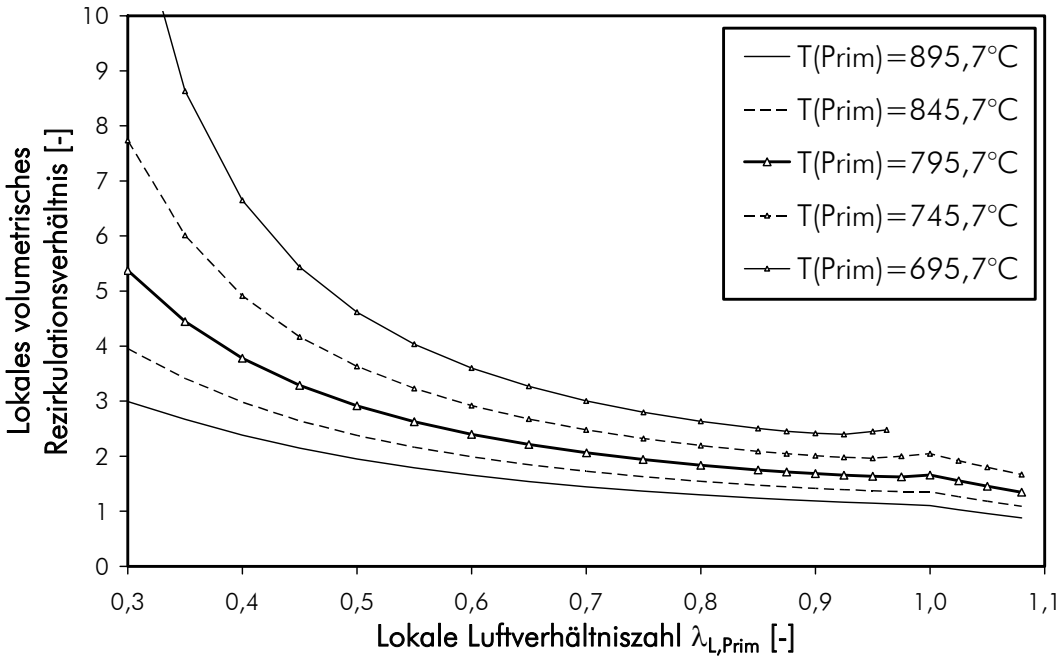


Abbildung 8-11: Erforderliches lokales volumetrisches Rezirkulationsverhältnis für die Konstanthaltung einer vorgegebenen Temperatur in der Primärverbrennungszone

Auch Abbildung 8-11 ist für die Anlagenautomatisierung und den Anlagenbetrieb ausgesprochen wertvoll. Diese Abbildung zeigt, welches lokale Rezirkulationsverhältnis eingestellt werden muss, um bei schwankender lokaler Luftverhältniszahl eine konstante Temperatur der Primärverbrennungszone zu erreichen. Auch hier wurden wieder Varianten mit höheren (+50 °C und +100 °C) sowie mit niedrigeren Temperaturen (-50 °C und -100 °C) simuliert.

Bei sinkender lokaler Luftverhältniszahl muss der Primärzone entsprechend ein sinkender Verbrennungsluftstrom zugeführt werden. Sinkende Luftverhältniszahl bedeutet immer auch sinkende Verbrennungstemperatur; um eine konstante Zonentemperatur zu erhalten, muss deshalb auch der Rezirkulationsgasstrom für die Zone reduziert werden. Aufgrund der höheren Wärmekapazität des Rezirkulationsgases im Vergleich zur Verbrennungsluft sowie aufgrund des relativ niedrigen Heizwertes des in der Zone verbrannten Brennstoffes ist das Rezirkulationsgas weniger stark zu senken als die Verbrennungsluft, wodurch das Rezirkulationsverhältnis bei sinkender Luftverhältniszahl insgesamt steigt. Die mittels Simulation erhaltenen Zusammenhänge wurden im Anschluss mit einfachen Regressionsfunktionen approximiert und in den Regleralgorithmen der Verbrennungs-Pilotanlage als Offset-Werte hinterlegt. Dadurch können die Algorithmen bei vorgegebener Luftverhältniszahl und vorgegebener Solltemperatur bereits einen Schätzwert für das erforderliche Rezirkulationsverhältnis vorgeben. Die verbleibende Regelabweichung in der Zonentemperatur wird sodann durch PID-Regler ausgeregelt.

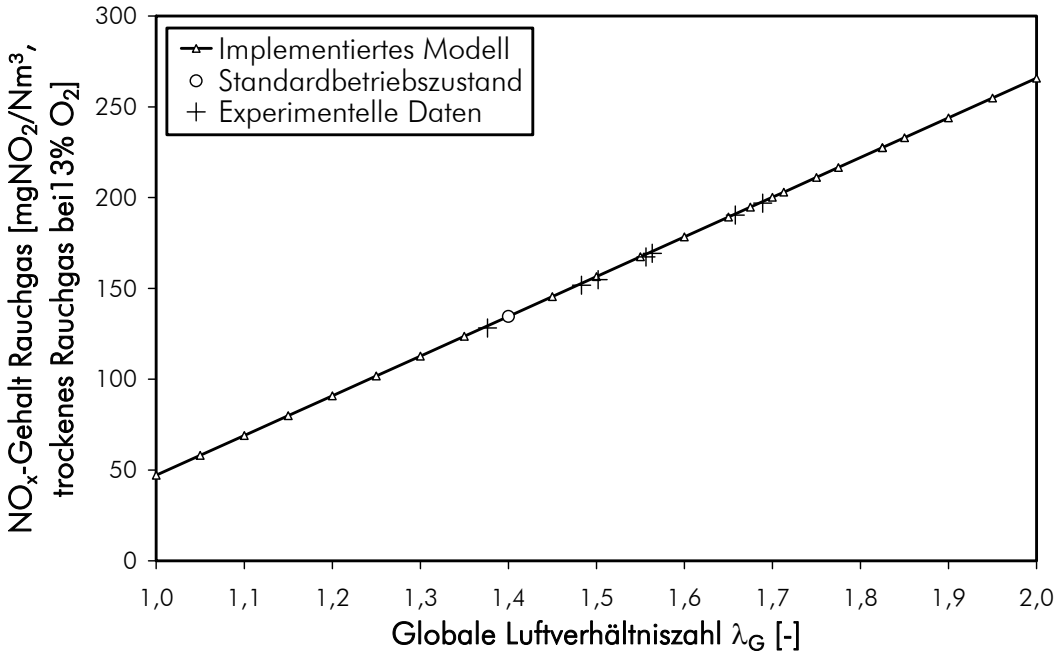


Abbildung 8-12: Einfluss der globalen Luftverhältniszahl auf die Stickstoffoxidemissionen im Rauchgas der Verbrennungsanlage, experimentelle Daten von Kerschbaum et al., 2004

In Abbildung 8-12 ist die zu erwartende Stickstoffoxid-Emission im Verbrennungsrauchgas in Abhängigkeit von der globalen Luftverhältniszahl dargestellt. Im Diagramm sind die, mit dem in Kapitel 5.1 beschriebenen, Modell errechneten Werte mit experimentellen Ergebnissen verglichen, welche Kerschbaum et al. (Kerschbaum et al., 2004) entnommen wurden. In dieser Literaturstelle wurden wesentliche experimentelle Resultate veröffentlicht, die an der Verbrennungs-Pilotanlage mit 2 MW thermischer Leistung erzielt werden konnten. Das implementierte Modell zur Vorausberechnung der zu erwartenden Stickstoffoxid-Emissionen wurde ebenfalls dieser Veröffentlichung entnommen. Abbildung 8-12 zeigt sehr deutlich, dass innerhalb des experimentell untersuchten Bereiches der Luftverhältniszahl (1,4 bis 1,7) mit diesem Modell sehr gute Voraussagen gemacht werden können. Bei Kerschbaum et al. (Kerschbaum et al., 2004) werden auch im Bereich zwischen 2 und 2,25 sehr gute Übereinstimmungen berichtet. Ein bereits erwähnter Mangel im Modell ist das Fehlen des Einflusses der Luftstufung auf die Entstehung von Stickstoffoxiden. Wie bereits in Kapitel 3.1.2.2 be-

schrieben, hat die Luftstufung erheblichen Einfluss auf die Entstehung dieses Schadgases und wird deshalb als wesentlichste Primärmaßnahme zur Reduktion des Gehaltes im Rauchgas verwendet. Da bei der Erstellung des Modells aber lediglich der Einfluss der globalen Luftverhältniszahl experimentell untersucht werden konnte und der Betrieb der Pilotanlage im Wesentlichen mit konstanter Luftstufung durchgeführt wurde, konnte dieser Einfluss bislang noch nicht mathematisch erfasst werden und bleibt Nachfolgearbeiten vorbehalten.

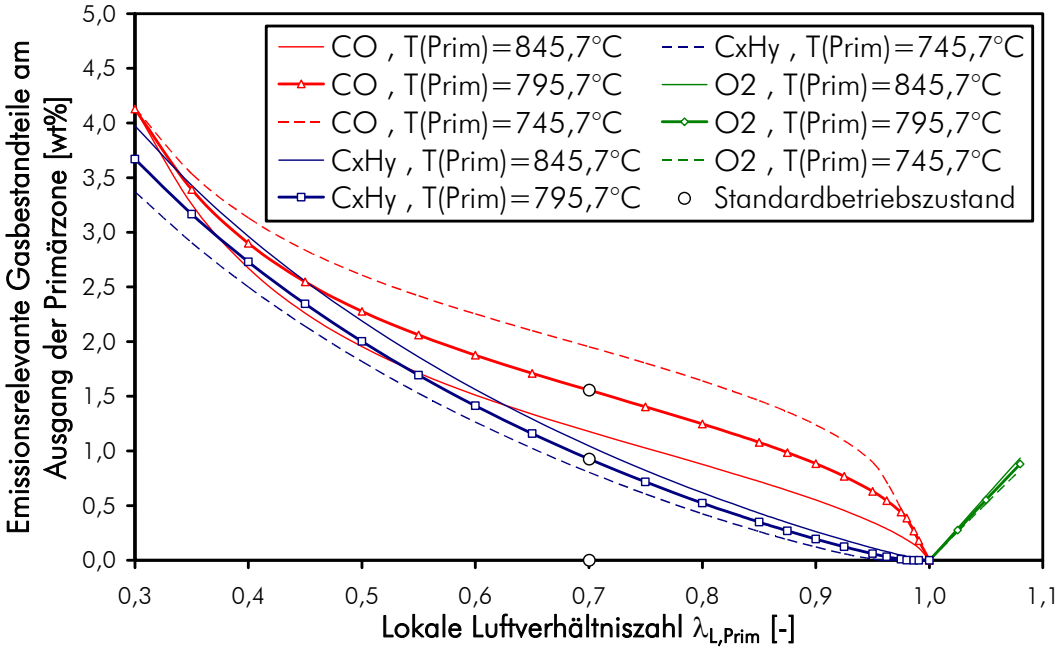


Abbildung 8-13: Einfluss der lokalen Luftverhältniszahl der Primärverbrennungszone auf die Gehalte der emissionsrelevanten Gasbestandteile CO, CxHy und O2 im Rauchgas am Ausgang dieser Verbrennungszone

Abbildung 8-13 zeigt schließlich die Gehalte der wesentlichsten emissionsrelevanten Gasbestandteile im Rauchgas am Austritt der Primärverbrennungszone bei unterschiedlichen lokalen Luftverhältniszahlen. Für das Dreizonenmodell sind Kohlenmonoxid, Sauerstoff sowie die Sammelkomponente für unverbrannte Gase C_xH_y die bestimmenden Gasspezies. An dieser Stelle wurden neben dem Szenario mit Auslegungstemperatur (795,7 °C) eine Variante mit 50 °C höherer und eine Variante mit 50 °C niedrigerer Temperatur analysiert. Wie zu erwarten war, zeigt sich, dass im unterstöchiometrischen Bereich kein Sauerstoff die Zone verlässt, jedoch CO und C_xH_y als Produkte unvollständiger Verbrennung enthalten sind. Im überstöchiometrischen Bereich werden diese brennbaren Gasspezies vollständig oxidiert, keine Todbereiche mit unvollständiger Durchmischung oder unzureichende Verweilzeit werden berücksichtigt. Der Restsauerstoffgehalt steigt dann linear mit der Luftverhältniszahl an. Die Zusammensetzung der Ausgasungsprodukte vor der Reaktion mit dem Sauerstoff ist in allen betrachteten Fällen gleich, dies wurde bereits in Kapitel 5.2 erläutert. Die Reaktionsstartkonzentration von C_xH_y ist niedriger als jene von CO und dies bleibt in den meisten Fällen auch während der Oxidationsreaktion der Fall. Die Oxidationsgeschwindigkeit von C_xH_y ist wesentlich stärker von Sauerstoffgehalt abhängig als jene von Kohlenmonoxid (siehe Tabelle 6-2). Außerdem entsteht bei der Oxidation von C_xH_y wiederum CO, sodass der Gehalt an CO in Summe höher bleibt als jener von C_xH_y. Dass in vielen Fällen aufgrund dessen in der Anfangsphase der Reaktion sogar eher Kohlenmonoxid gebildet wird denn wegreagieren kann, zeigt auch Abbildung 5-11. Dieses Diagramm stellt einen zeitlich aufgelösten Oxi-

dationsreaktionsverlauf bei einem charakteristischen Betriebszustand dar. Höhere Verbrennungstemperaturen bevorzugen gemäß der verwendeten Reaktionskinetiken (siehe Tabelle 6-2) eher die Oxidation von Kohlenmonoxid wodurch die Oxidation der Kohlenwasserstoffe reduziert wird (Konkurrenzreaktionen). Niedrigere Temperaturen begünstigen hingegen die Oxidationsreaktion der Kohlenwasserstoffkomponenten.

Diagramme wie die hier dargestellten können zu einer schnellen und groben Auslegung der wesentlichen verbrennungstechnischen Parameter bei bekannter Brennstoffzusammensetzung und erforderlicher Verbrennungstemperatur herangezogen werden. Zusätzlich geben die hier angestellten Analysen einen tiefer gehenden Einblick in die, an der Verbrennungsanlage zu erwartenden, Vorgänge. Einige der ermittelten Zusammenhänge konnten direkt in die Programmierung der Regelalgorithmen der Ganzballen-Verbrennungspilotanlage herangezogen werden. Abschließend zeigen die hier präsentierten Ergebnisse, dass innerhalb der relevanten verbrennungstechnischen und operativen Grenzen die entwickelten Modelle zur Globalbilanzierung sicher anwendbar sind und sinnvolle Ergebnisse liefern können. Mit den damit erstellten Massen-, Energie- und Stoffbilanzen können verlässliche Sätze von Randbedingungen für die nachfolgende numerische Strömungssimulation erstellt werden.

9 Ergebnisse der Numerischen Strömungssimulation

Dieses Kapitel stellt ausgewählte Ergebnisse der numerischen Strömungssimulation unter Verwendung der dargestellten Modellansätze dar. Da der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit auf der Entwicklung und Validierung dieser Modelle liegt, ist dieses Kapitel eher kurz und überblicksartig gehalten. Es soll keine vollständige Auswertung und Optimierung des betrachteten Verbrennungsapparates präsentiert, sondern vielmehr gezeigt werden, welche Art von Ergebnissen zu erwarten ist und welche Schlussfolgerungen gezogen werden können. Hierzu werden zunächst Ergebnisse der Simulationen des in dieser Arbeit definierten Standardbetriebszustands sowohl für die Gasphase als auch für die feste Brennstoffphase gezeigt. Im Anschluss wird als Beispiel eines Optimierungsschrittes der Betriebsbedingungen eine Variation des Ausmaßes der Luftstufung, also der Verteilung der Sauerstoffzufuhr zwischen Primär- und Sekundärverbrennungszone, durchgeführt und analysiert. Abschließend wird als Beispiel einer Geometrieoptimierung untersucht, durch welche baulichen Änderungen das Emissionsverhalten der Verbrennungsanlage hinsichtlich CO und NO_x verbessert werden kann. Dabei kann deutlich gemacht werden, dass auch anfänglich plausible Verbesserungsmaßnahmen nach einer genaueren Untersuchung mit den hier entwickelten Werkzeugen verworfen werden müssen. Die Auswertung zeigt jedoch auch, dass mit diesen Methoden die Ausarbeitung alternativer und konkreter Verbesserungsvorschläge mit deutlichen Vorteilen im Emissionsverhalten auf einer fundierten Basis und auf effizientem Wege möglich ist.

Eine genaue Auswertung der Feldgrößen zeigt, dass trotz vollständig stationärer Simulation aufgrund eines leicht fluktuierenden Strömungsfelds ein instationäres Verhalten aller Bilanzgrößen am Apparateaustritt zu erwarten ist. Dieses instationäre Verhalten manifestiert sich speziell in fluktuierenden Ergebnissen für Auswertungen nach unterschiedlicher Anzahl von Iterationen. Während Volumenströme, Temperaturen und Gehalte der meisten Gaskomponenten nur um etwa ±1 % um den Mittelwert schwanken, weist der Gehalt an Kohlenmonoxid eine Schwankungsbreite von bis zu ±40 % auf. Numerische Ergebnisse werden im vorliegenden Kapitel aus diesem Grund aus den Mittelwerten mehrerer Punkte entlang einer Schwingungsperiode bei unterschiedlichen Iterationszahlen gebildet (von einer zeitlichen Mittelung kann dennoch nicht gesprochen werden). Grafische Darstellungen wie Contour-Plots bleiben jedoch Momentaufnahmen zu einem bestimmten Iterations-„Zeitpunkt“. Um einen Einblick in die zu erwartende Schwankungsbreite innerhalb des Strömungsfeldes zu erhalten, wurde eine Anzahl von Momentaufnahmen zu unterschiedlichen Iterations-Zeitpunkten, jeweils 80 Iterationsschritte voneinander entfernt, in einfacher Weise statistisch ausgewertet. Abbildung 14-69 im Anhang zeigt den Mittelwert des Betrages des Vektors der

Gas-Leerrohrgeschwindigkeit an der Ballenoberfläche, der aus acht Iterations-Zeitpunkten gebildet wurde. Die insgesamt 640 Iterationsschritte decken sehr genau die größte Wellenlänge der auftretenden Schwankungen der beobachteten Auswertungsvariablen ab und sollten somit ein repräsentatives Betriebsspektrum darstellen. Zusätzlich hierzu gibt Abbildung 14-70 die größten Abweichungen der einzelnen „Zeitpunkte" vom errechneten Mittelwert wieder. Deutlich zu erkennen ist in diesen Abbildungen, dass die einzelnen Freistrahlen instationär um ihre Achse rotieren (Präzession) und die Fluktuation der Gasgeschwindigkeit damit in einzelnen Zellen der Ballenoberfläche bis zu 50 % erreichen kann. Die dargestellte Simulation enthält aus Gründen der Einfachheit Primärdüsen ohne Drallkörper, sodass in der Simulation tatsächlich reine gerade Freistrahlen gebildet werden, bei denen der Effekt der Präzession bekannt ist. In der realen Brennkammer enthalten aber vier von sechs Düsen die bereits in Kapitel 4 dargestellten Drallkörper und bei diesen rotierenden Freistrahlen kann höhere Stabilität und geringere Präzession erwartet werden. Ein instationäres Verhalten ist aber jedenfalls zu erwarten und ein solches kann nur durch eine voll instationäre Simulation erfasst werden, welche nicht im Fokus der vorliegenden Arbeit lag.

Zur Visualisierung der CFD-Ergebnisse in diesem Abschnitt werden Darstellungen verschiedener Zielvariablen auf Schnittebenen durch den Verbrennungsapparat verwendet. Vorwiegend kommen hierbei die vertikale x-z-Ebene bei y=0 (häufig als Symmetrieebene beziehungsweise als Schnitt durch die mittlere Primärdüsenebene bezeichnet), die vertikale y-z-Ebene bei x=0, sowie mehrere horizontale Schnittebenen zum Einsatz. Horizontale Schnittebenen sind dabei beispielsweise die x-y-Ebene bei z=0,77 m (durch die untere Ebene der Sekundärdüsen) sowie die x-y-Ebene bei z=1,40 m (durch die obere Ebene der Sekundärdüsen). Die Blickrichtungen liegen dabei jeweils entlang der negativen Achsrichtungen (x-z-Ebene in negativer y-Richtung, y-z-Ebene in negativer x-Richtung, x-y-Ebenen in negativer z-Richtung).

9.1 Simulation des Standardbetriebszustands

An dieser Stelle sollen zunächst die Simulationsergebnisse des Standardbetriebszustandes dargestellt und daraus prozesstechnisch relevante Aussagen abgeleitet werden. In diesem Zusammenhang ist auch die Validierung der erhaltenen Ergebnisse mit experimentellen Resultaten erforderlich, die im folgenden Abschnitt so weit als möglich präsentiert wird. Da aber die Zugänglichkeit zu verlässlichen und präzisen Messwerten an einer realen, großmaßstäblichen Verbrennungsanlage klar begrenzt ist, muss sich diese Validierung auf globale Prozessgrößen sowie qualitative Aussagen beschränken. Dem Anwender muss bewusst sein, dass ein wesentliches Anwendungsfeld numerischer Strömungssimulation eben die Abbildung messtechnisch schwer oder kaum zugänglicher Phänomene ist. Aus diesem Grund ist der Validierung von Teilmodellen anhand vereinfachter Fragestellungen eine umso größere Bedeutung beizumessen.

Tabelle 9-1 zeigt eine Zusammenstellung der wichtigsten globalen Prozessparameter und vergleicht Ergebnisse experimenteller Untersuchungen mit jenen der Globalbilanzierung und der numerischen Strömungssimulation. Diese Parameter umfassen die relativ einfach zugänglichen Parameter Temperatur und Zusammensetzung des Heißgases sowie einige aus-

gewählte Wandtemperaturen der Brennkammer. Der ausgewertete Betriebszustand des Experiments deckt sich nicht völlig mit dem Auslegungszustand, welcher Globalbilanzierung und numerischer Strömungssimulation zugrunde liegt; die Abweichungen sind Tabelle 4-2 (SI_ZF42) zu entnehmen. Hinsichtlich der Messgenauigkeit der experimentellen Daten ist bei der Gaszusammensetzung von 1 % der Bereichsspanne (entsprechend ±0,25 vol% bei O_2, ±5 mg/Nm³ bei CO und NO_x) und bei Temperaturen von 2 % der Bereichsspanne (±15 °C) auszugehen. Die Oberflächentemperatur des Strahlungsschirms wurde während ausgewählter Versuchszeitpunkte berührungslos pyrometrisch bestimmt und ist folglich (verglichen mit den anderen Temperaturen, welche mittels Thermoelementen gemessen wurden) mit größeren Unsicherheiten behaftet (schätzungsweise ±40 °C).

Tabelle 9-1: Ergebnisse für den Standardbetriebszustand im Vergleich zwischen Experiment, Globalbilanzierung und numerischer Strömungssimulation

Parameter	Einheit	CFD	Exp.	PS
Heißgasparameter				
Gastemperatur	°C	827	742	756
H_2O-Gehalt	vol%	12,31	-	12,74
O_2-Gehalt	vol%, trocken	6,02	6,87	6,05
CO_2-Gehalt	vol%, trocken	13,71	-	13,97
CO-Gehalt	mg/Nm³, trocken	0,6	158	-
NO_x-Gehalt	mgNO_2/Nm³, trocken	209	175	135
Blechtemperaturen				
Sekundärzone	°C	728	611	-
Primärzone	°C	356	346	-
Strahlungsschirm	°C	1006	810-950	-
Feststoff-Ausbrandzone	°C	393	468	-

Die Qualität der ersten CFD-Ergebnisse für die untersuchten Heißgasparameter ist zunächst sehr zufriedenstellend. Die Gastemperatur wird mit einer Abweichung von 8,5 % ausgesprochen genau vorhergesagt, wobei anzumerken ist, dass im Rahmen der CFD-Simulationen keinerlei thermische Verluste (Strahlung und Konvektion an die Umgebung, fühlbare Wärme in der Asche) Berücksichtigung fanden. Alle Aussenwände wurden mit adiabater Randbedingung modelliert. Der Sauerstoffgehalt wird extrem präzise getroffen (das Experiment wurde bei einer Luftverhältniszahl von 1,5 betrieben, die Simulationen gehen beide von 1,4 aus) und auch der Wassergehalt weicht nur minimal (3 %) vom Ergebnis der Prozesssimulation ab. Es ist zu vermuten, dass die geringe Abweichung hier aus einer unzureichend geschlossenen Elementarbilanz für H im Brennstoff der Globalbilanzierung herrührt (siehe Kapitel 5.2). Eine sehr große Diskrepanz ist bei der Vorhersage der CO-Emission zu vermerken, die von der CFD-Simulation um mehr als zwei Größenordungen unterschätzt wird. Der Grund hierfür liegt in einem unvollständig implementierten Reaktionsmechanismus für CO; dieses Problem wird im Zuge einer Sensitivitätsanalyse in Kapitel 9.2 noch ausführlich diskutiert. Die Abweichung des NO_x-Gehalts mit etwa 35 % ist unter Berücksichtigung der Komplexität der Thematik durchaus akzeptabel. Darüber hinaus ist anzumerken, dass das implementierte Modell sehr gut in der Lage ist, Tendenzen des NO_x-Gehalts bei variierenden Betriebsbedingungen vorherzusagen (siehe ebenfalls Kapitel 9.2).

Die Blechtemperaturen für die primäre Verbrennungszone werden ebenfalls äußerst genau abgebildet, sowohl für den Strahlungsschirm als auch für die innere Brennkammerwand. Die auftretenden Abweichungen der Blechtemperaturen in der Sekundär- sowie der Feststoff-Nachverbrennungszone sind auf unterschiedliche Betriebsbedingungen in Experiment und CFD zurückzuführen. Im Experiment findet mehr Verbrennung in der Rostzone und weniger in der sekundären Gasnachverbrennungszone statt, was auch an der unterschiedlichen Gasbeaufschlagung dieser beiden Zonen abzulesen ist (siehe Tabelle 4-2). Der Standardbetriebszustand (und damit auch die CFD-Ergebnisse) gehen aber von einer ausgeprägteren Ausgasung im Primärbereich und einer stärkeren Verschiebung der Verbrennungsleistung in den Gasnachverbrennungsbereich aus.

Nach der Analyse globaler Parameter wird im Anschluss die Situation im Inneren der Brennkammer untersucht. Abbildung 9-1 und Abbildung 9-2 stellen den Betrag der Gasgeschwindigkeit auf den vertikalen und horizontalen Auswerteebenen dar. Diese Visualisierungen liefern einen ersten Eindruck zu den Strömungsvorgängen im Apparateinneren.

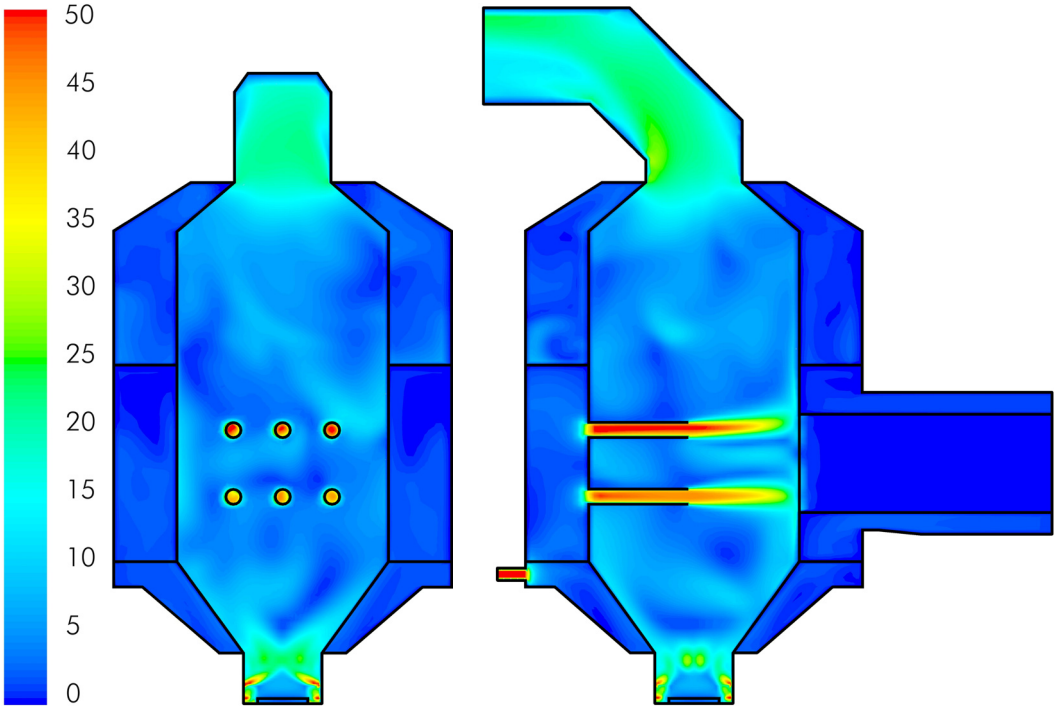


Abbildung 9-1: Contour-Plots des Betrages der Gasgeschwindigkeit (0 – 50 m/s) auf den vertikalen Auswerteebenen (links: y=0; rechts: x=0)

Deutlich ausgeprägt sind die Freistrahlen der Primärdüsen zu erkennen, die auf die Ballenoberfläche auftreffen. Eine genaue Betrachtung zeigt, dass das Strahlzentrum der oberen Düsenreihe nach oben abgelenkt wird und die Ballenoberfläche nur mehr teilweise trifft; eine detailliertere Auswertung dieses Phänomens erfolgt weiter hinten in diesem Kapitel. Diese Ablenkung der Freistrahlen begründet sich vorwiegend auf den ausgeprägten Querstrom aus der Rostzone, die auf die primären Freistrahlen einwirkt. Die Notwendigkeit einer Neupositionierung oder Neuausrichtung der Primärdüsen hinsichtlich einer besseren Bedeckung der Ballenoberfläche wird damit deutlich. Basierend auf diesen ersten Erkenntnissen wurde im Realapparat daraufhin die Auslassöffnung der oberen Düsenreihe um 15° nach unten abgeknickt ausgeführt („Knickdüsen“), wodurch auch das Abbrandbild deutlich verbessert werden konnte. Die Strömungsanalyse dieser Geometrievariante zeigte ebenfalls deutlich besseres

Anströmverhalten an die Ballenoberfläche. Abbildung 9-1 deutet weiters an, dass die untere Primärdüsenreihe mit deutlich geringerem Volumenstrom beaufschlagt wäre als die obere Düsenreihe. Die Auswertung von Simulationsergebnissen mehrerer „Iterationszeitpunkte" zeigt allerdings deutlich, dass dieses Phänomen nur temporär auftritt und in den meisten Fällen eine annähernd gleichmäßige Beaufschlagung der beiden Düsenreihen auftritt (siehe Abbildung 14-69 und Abbildung 14-70 im Anhang). Dennoch ist es wichtig zu erwähnen, dass der Volumenstrom der einzelnen Freistrahlen der Primärzone offensichtlich zeitlichen Schwankungen unterworfen ist. Eine genaue und fundierte Analyse hiervon ist allerdings nur mit einer transienten CFD-Untersuchung sinnvoll.

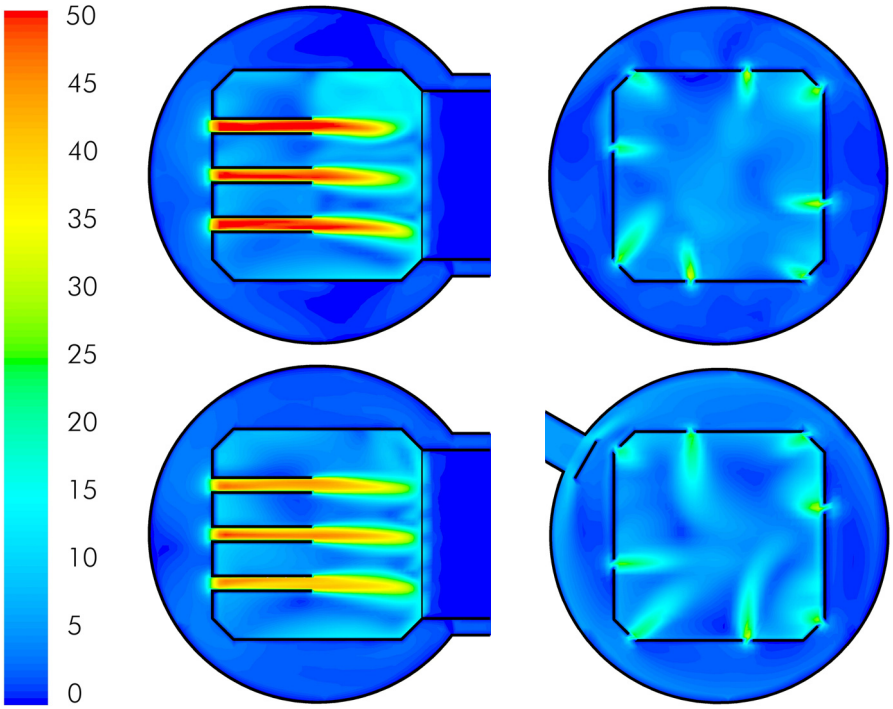


Abbildung 9-2: Contour-Plots des Betrages der Gasgeschwindigkeit (0 – 50 m/s) auf den horizontalen Auswerteebenen (links unten: z=-0,2365; links oben: z=+0,2365; rechts unten: z=0,77; rechts oben: z=1,40)

Abbildung 9-2 zeigt als weiteren Aspekt, dass die Freistrahlen der Primärdüsen auch in horizontaler Ebene abgelenkt werden und zwar durch den aus der Rostzone aufsteigenden Gasstrom. Diese Ablenkung ist allerdings nicht stationär, sodass die Strahlen mit einer bestimmten (aber aus der vorliegenden Analyse nicht näher bestimmbaren) Frequenz zwischen linker und rechter Seite pendeln. Der von der Feststoff-Nachverbrennungszone aufsteigende Gasstrom zeigt also in Summe einen deutlich negativen Einfluss auf die Homogenität der Gasanströmung der Ballenoberfläche.

Auch die Strömungssituation in der Sekundärzone ist in Abbildung 9-2 gut zu erkennen, deren Blendenöffnungen so ausgerichtet sind, dass die entstehenden Freistrahlen in einer Ebene einen Drall und in der darüberliegenden Ebene einen Gegendrall (Drallaufhebung zur Reduktion des Druckverlusts) erzeugen. Um eine annähernd axisymmetrische Rotation zu erzeugen ist die Anströmung im Windmantel der Sekundärzone allerdings zu ungleichmäßig, die Düsen auf der dem Einlass abgewandten Seite werden deutlich schwächer beaufschlagt.

Eine hervorragende Zusatzinformation zum Betrag der Gasgeschwindigkeit liefert auch eine Darstellung kurzer Strömungspfadlinien auf den Auswertebenen, die Abbildung 9-3 und Abbildung 9-4 zu entnehmen ist. Diese Darstellungen erlauben die Identifikation von Wirbelstrukturen und Totzonen, die die reaktionstechnische Performance eines Reaktors deutlich negativ beeinflussen können. Abbildung 9-3 zeigt eine ausgeprägte Wirbelwalze unterhalb der unteren Primärdüsenreihe, welche ein instationäres Ergebnis des Zusammenspiels der vom Rost aufsteigenden Verbrennungsgase und der primären Freistrahlen ist. Auch die Zuströmung von Pfadlinien zu den Freistrahlen (*Entrainment*) ist klar zu erkennen.

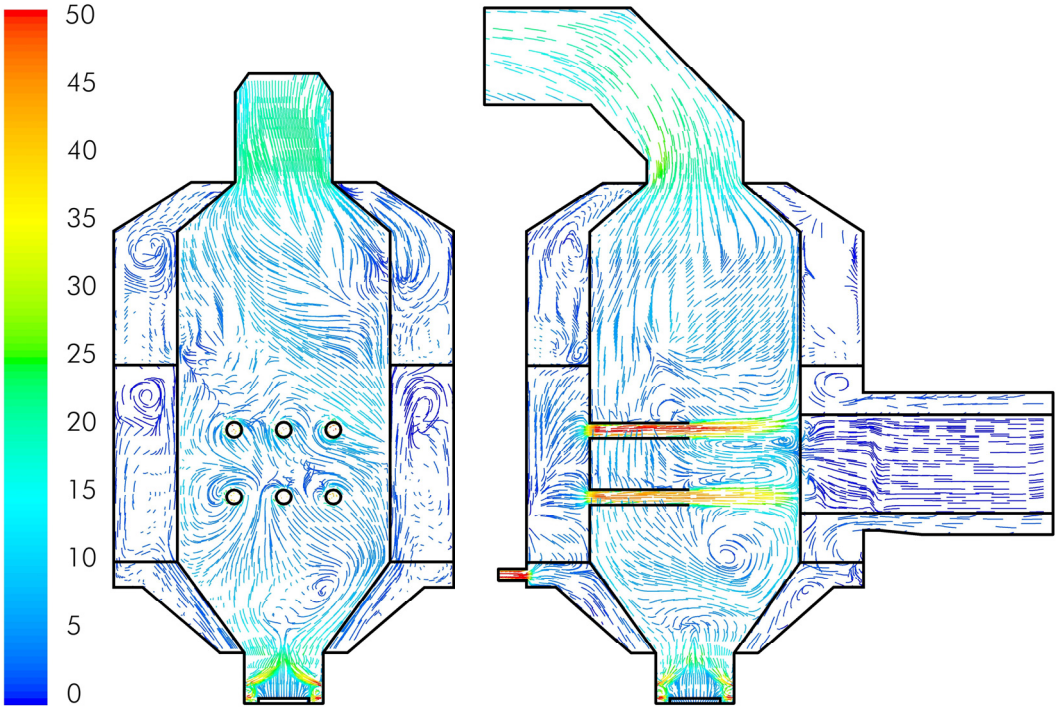


Abbildung 9-3: Strömungspfadlinien eingefärbt nach dem Betrag der Gasgeschwindigkeit (0 – 50 m/s) auf den vertikalen Auswerteebenen (links: y=0; rechts: x=0)

Im Bereich der Sekundärzone schließlich lassen die Pfadlinien eine mangelhafte Ausnutzung des Reaktionsraumes vermuten. Vom Standpunkt der Reaktionstechnik bietet das Konzept des Pfropfenreaktors (Rohrreaktor) bei sonst gleichen Bedingungen den vollständigsten Umsatz der Reaktionsedukte. Rückströmungen und Verwirbelungen beeinflussen den Umsatz negativ. Das vorliegende Ofenkonzept sieht deshalb zunächst eine intensive Einmischung von Sekundärluft in das Verbrennungsgas der Primärzone gefolgt von einer idealen geradlinigen Strömung mit definierter und eng verteilter Verweilzeit vor. Die Abbildung beweist, dass dieses Konzept im Realapparat auf diese Weise nur bedingt umgesetzt werden konnte, vom reaktionstechnischen Standpunkt bietet die Sekundärzone also Potenzial für Verbesserungen. In der dritten Brennkammergeneration (siehe Abbildung 4-3 in Kapitel 4) wurde die Konstruktion der Gasnachverbrennungszone entsprechend adaptiert (intensivierte Sekundärlufteindüsung, engeres Verweilzeitspektrum im Reaktionsteil) und der Nutzen dieses Ansatzes experimentell bestätigt (Harasek et al., 2011).

Abbildung 9-4 zeigt um die primären Freistrahlen sehr gleichmäßige Strömungsverhältnisse mit globalen Rückströmbereichen. Dadurch werden von der Ballenoberfläche ausgetretene Vergasungsprodukte umgelenkt, zum Teil in die Primärstrahlen eingesaugt und erneut in Richtung Ballenoberfläche getrieben. Für die Erreichung niedriger Luftverhältniszahl und ho-

her Temperatur an der Ballenoberfläche ist dieses Verhalten deutlich vorteilhaft. Im Bereich der Sekundärzone ist die bereits zuvor genannte nicht axisymmetrische Wirbelausbildung in der unteren Düsenebene noch einmal sehr deutlich zu erkennen.

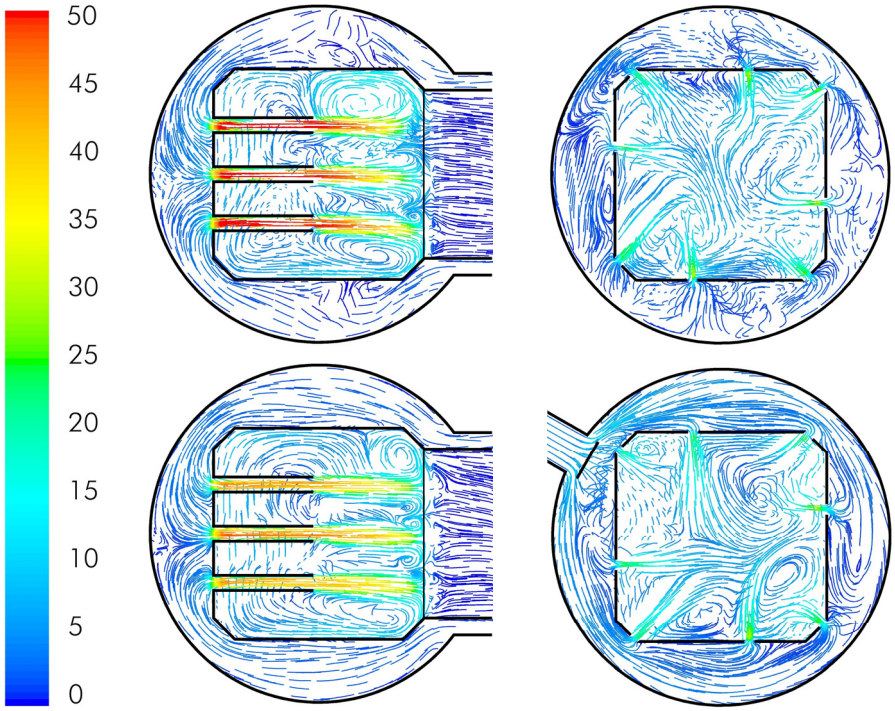


Abbildung 9-4: Strömungspfadlinien eingefärbt nach dem Betrag der Gasgeschwindigkeit (0 – 50 m/s) auf den horizontalen Auswerteebenen (links unten: z=-0,2365; links oben: z=+0,2365; rechts unten: z=0,77; rechts oben: z=1,40)

Abbildung 14-60 und Abbildung 14-61 im Anhang geben noch einen Eindruck der Verteilung der Turbulenzintensität in der Brennkammer. Klar zu erkennen sind die Bereiche mit hoher Turbulenz und damit hoher Reaktantdurchmischung im Randbereich der Freistrahlen der Primärzone und, obwohl deutlich abgeschwächt, auch der Sekundärzone. Eine Steigerung der Turbulenz in diesem Bereich würde zu einer verbesserten Durchmischung der brennbaren Gase aus der Primärzone mit der sekundären Verbrennungsluft führen.

Abbildung 9-5 sowie Abbildung 9-6 stellen die Gastemperatur in der Brennkammer dar. Hier zeigt sich, dass trotz moderater Temperaturen um 1.100 K im Heißgas im Inneren des Verbrennungsapparates ausgeprägte *hot spots* auftreten. Im Bereich der Primärzone sind in den reaktiven Bereichen dabei Temperaturspitzen von 1.400 bis 1.500 K zu erwarten. Aufgrund der geringen Eindringtiefe der primären Freistrahlen und der schlechten Wärmeleitfähigkeit des Primärbrennstoffes nimmt die Gastemperatur im Balleninneren aber relativ rasch ab. Die sehr wirksame Gasvorwärmung in den Windmänteln der Primär- und der Sekundärzone kann deutlich identifiziert werden. Durch die ausmauerungslose Brennkammerseele ist hier eine Steigerung der Temperatur auf bis zu 700 K unter gleichzeitiger Reduktion der thermischen Verluste an die Umgebung zu erzielen. Entsprechend vorgewärmt treten Primär- und Sekundärfreistrahlen mit der inneren Ofenatmosphäre in Kontakt und führen unmittelbar zu höheren Reaktionsraten und besserem Ausbrand. Die experimentelle Erfassung der Vorwärmtemperaturen der einzelnen Verbrennungszonen ist prinzipiell relativ einfach, wurde aber bei den vorliegenden Versuchsläufen leider nicht implementiert. Zukünftige Arbeiten könnten hier wertvolle Daten für eine Modellvalidierung liefern.

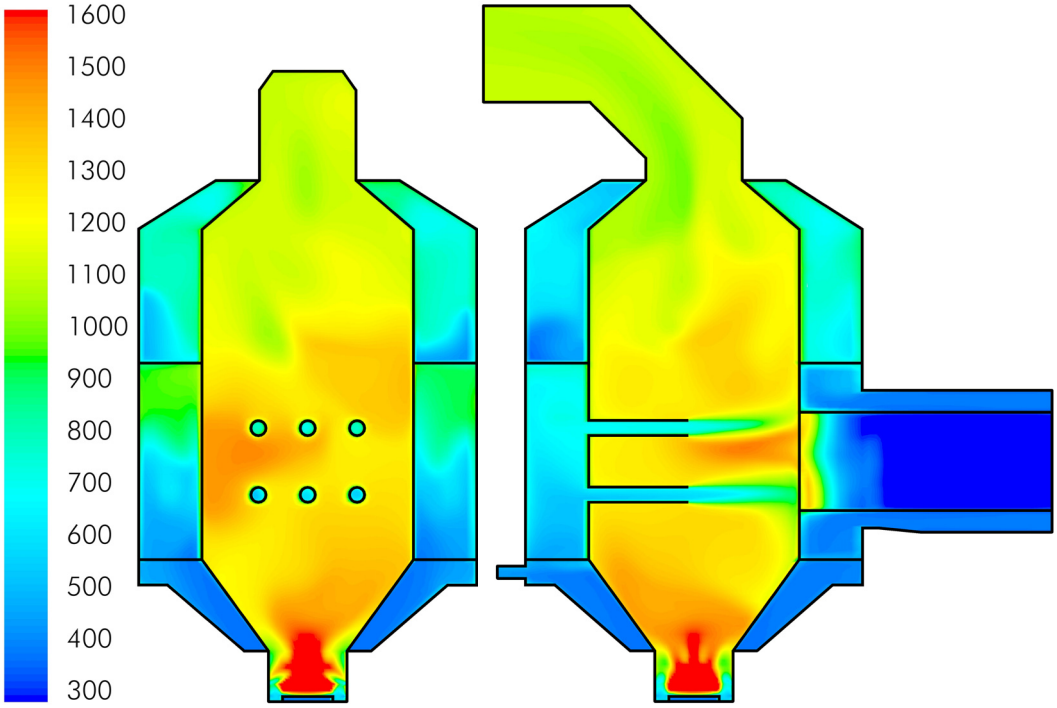


Abbildung 9-5: Contour-Plots der Gastemperatur (300 – 1600 K) auf den vertikalen Auswerteebenen (links: y=0; rechts: x=0)

Im Bereich der Rostzone werden Temperaturspitzen von bis zu 1700 K aus den Simulationsergebnissen erhalten. Dieses Resultat ist jedenfalls zu hinterfragen. Während zahlreicher Versuchsläufe wurde auch ein Temperatursensor in dieser Zone, mittig und knapp oberhalb der geplanten Brennstoffoberfläche, betrieben. Die experimentellen Untersuchungen zeigen, dass im Standardbetrieb etwa eine Temperatur von 1200 K zu erwarten ist (DK_ZF80 bis DK_ZF100 sowie der Dauerbetriebstest DK_ZF104 über 32 Stunden). Dennoch wurden bei zahlreichen Versuchen auch deutlich höhere Temperaturen gemessen (1620 K bei DK_ZF86, 1470 K bei DK_ZF78, 1430 K bei DK_ZF79 und DK_ZF84, 1380 K bei DK_ZF85 und DK_ZF112). Dabei konnte beobachtet werden, dass die Ausdehnung des Brennstoffkörpers auf dem Nachverbrennungsrost großen Einfluss auf die gemessene Temperatur zeigte. Bei hohem Füllstand wurde der Temperatursensor mit Brennstoff überdeckt und maß deutlich geringere Temperaturen als zu Zeiten, als der Sensor rein die Gasphase detektierte. Hinsichtlich der Simulation ist nun zu vermuten, dass das Brennstoffbett auf dem Rost mit zu geringer Schütthöhe implementiert wurde, wodurch die Verbrennungsreaktionen in sehr konzentrierter Form und mit höheren Temperaturspitzen ablaufen. Das verwendete Verbrennungsmodell ist also im Rahmen zukünftiger Arbeiten dahingehend zu erweitern, dass die zu erwartende Schütthöhe des Brennstoffbetts auf dem Nachverbrennungsrost zumindest mit einiger Sicherheit vorhergesagt werden kann. Geht man von einer größeren Schütthöhe bei gleichbleibender Ausbrandqualität der abgezogenen Aschefraktion aus, so ist schlusszufolgern, das die in der Simulation auftretenden Reaktionsraten (sowohl homogene Gasphasen- als auch heterogene Verbrennungsreaktionen) zu hoch sein dürften. Niedrigere Reaktionsgeschwindigkeiten würden zu gleichmäßiger verteilten Temperaturen und kleineren Temperaturspitzen führen. Speziell die Oxidationskinetik sowie der Reaktionsmechanismus der Summenfraktion C_xH_y sind mit Unsicherheiten behaftet und müssten in weiterführenden Arbeiten untersucht werden.

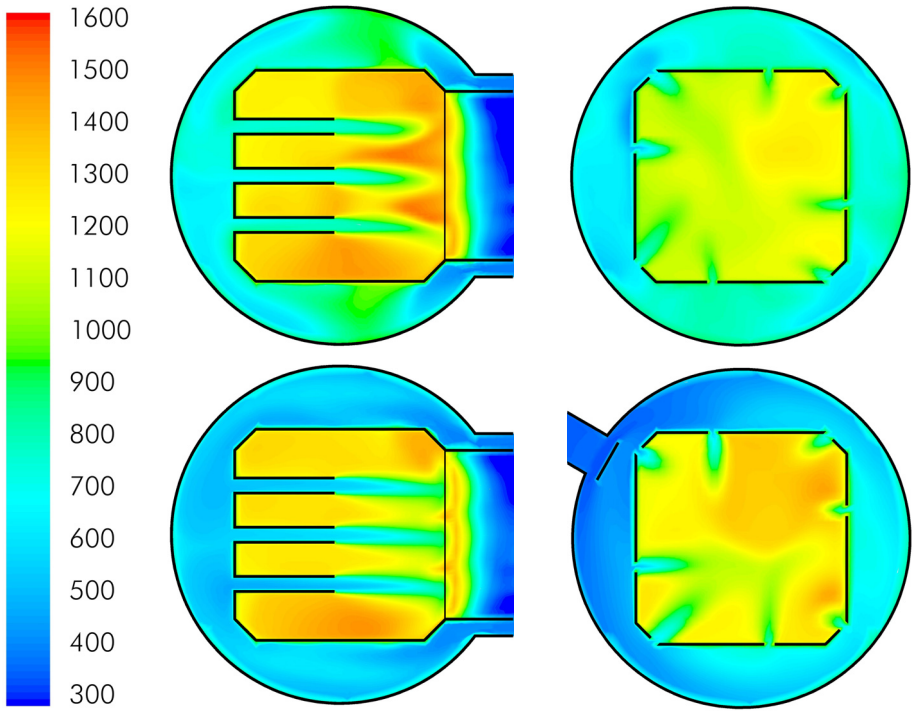


Abbildung 9-6: Contour-Plots der Gastemperatur (300 – 1600 K) auf den horizontalen Auswerteebenen (links unten: z=-0,2365; links oben: z=+0,2365; rechts unten: z=0,77; rechts oben: z=1,40)

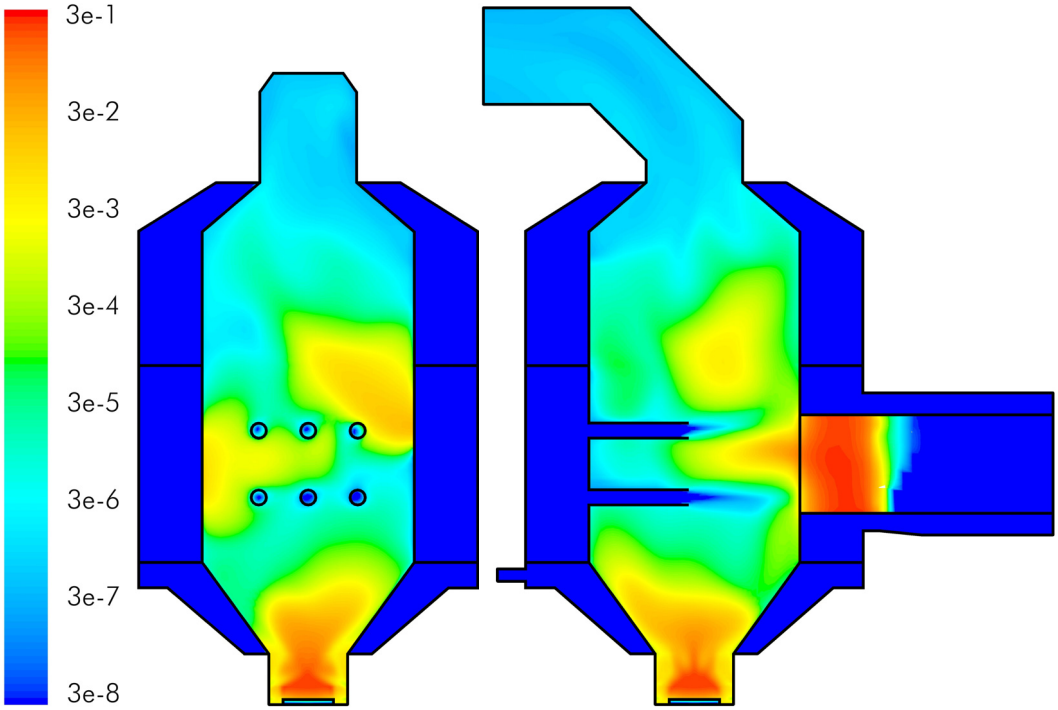


Abbildung 9-7: Contour-Plots des CO-Molenbruchs (logarithmische Darstellung, $3 \cdot 10^{-8}$ – $3 \cdot 10^{-1}$) auf den vertikalen Auswerteebenen (links: y=0; rechts: x=0)

Die beiden Contour-Plots in Abbildung 9-7 und Abbildung 9-8 stellen den Molenbruch von Kohlenmonoxid auf den bekannten Auswerteebenen dar. Klar zu erkennen sind die bei-

den Quellen gasförmiger Komponenten aus dem Brennstoff (Ballen und Rostbett), die zu CO-Gehalten von bis zu 30 % im Gas führen. Aufgrund der Reaktion durch zugeführte Verbrennungsluft werden diese CO-Gehalte rasch aufgebraucht, wobei zu erkennen ist, dass CO aus der Primärzone in einer deutlich ausgebildeten Strähne hoher Konzentration in die Sekundärzone eintritt. Diese Strähne tritt noch einmal in Zusammenhang mit dem NO_x-Gehalt in Kapitel 9.2 auf. In der Sekundärzone wird das Gas durch die Sekundärluftzuführung nahezu vollständig oxidiert; während in der unteren Sekundärdüsenebene noch eine ausgedehnte Region hohen CO-Gehalts vorhanden ist, ist in der oberen Düsenebene ein deutlich reduzierter Gehalt zu erkennen (Austrittsmolenbruch in der Größenordnung 10^{-6}). Die hier stattfindenden Oxidationsreaktionen führen auch zum in Abbildung 9-6 zu beobachteten Anstieg der Gastemperatur.

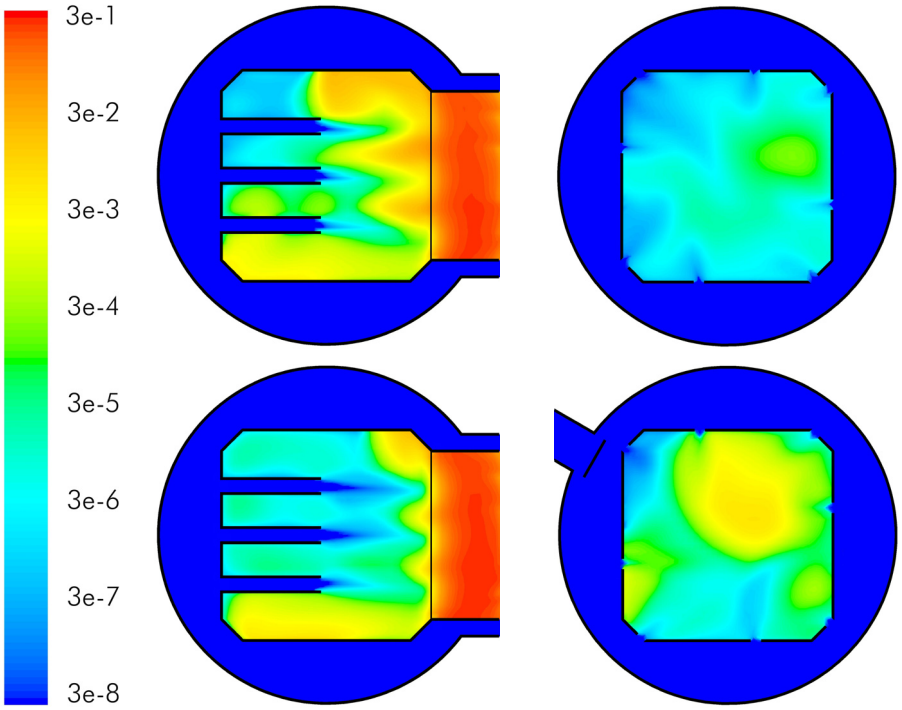


Abbildung 9-8: Contour-Plots des CO-Molenbruchs (logarithmische Darstellung, $3 \cdot 10^{-8}$ – $3 \cdot 10^{-1}$) auf den horizontalen Auswerteebenen (links unten: z=-0,2365; links oben: z=+0,2365; rechts unten: z=0,77; rechts oben: z=1,40)

In engem Zusammenhang mit diesen beiden Abbildungen sind auch Abbildung 9-9 und Abbildung 9-10 zu sehen, die die lokale Reaktionsrate der CO-Oxidationsreaktion darstellen. Die Reaktionsraten sind jeweils vergleichsweise niedrig in den Bereichen „fetter" Gemische (CO-reich) sowie in den Bereichen sehr „magerer" Gemische" (O_2-reich). Jeweils an den Mischungsfronten stellen sich dagegen die Maxima der Reaktionsgeschwindigkeit ein, die sich in einer Größenordnung von 0,1 kmol/m³.s bewegen. Während also im vorderen Drittel des Ballens aufgrund der Temperatur durch Thermolyse große Mengen an CO (und anderer brennbaren Ausgasungsprodukte) entstehen, findet aufgrund mangelnder Eindringtiefe der Primärstrahlen sowie generellen Sauerstoffunterschusses dort noch keine Oxidationsreaktion in nennenswertem Umfang statt. Analoge Vorgänge sind auch im Bereich der Rostzone auszumachen. Die CO-Oxidationsrate kann dabei stellvertretend für alle Oxidationsreaktionen gesehen werden, die örtlich zwar andere Absolutwerte einnehmen, qualitativ aber ähnliches Verhalten zeigen.

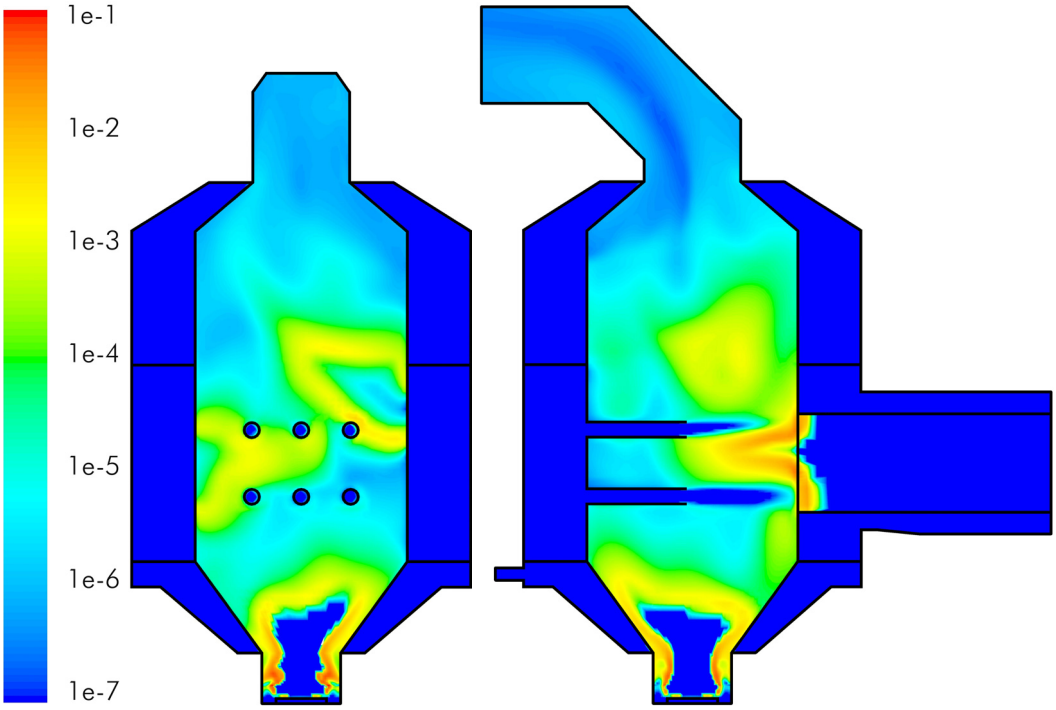


Abbildung 9-9: Contour-Plots der Reaktionsrate der CO-Oxidation (logarithmische Darstellung, $1 \cdot 10^{-7}$ – $1 \cdot 10^{-1}$ kmol/m³.s) auf den vertikalen Auswerteebenen (links: y=0; rechts: x=0)

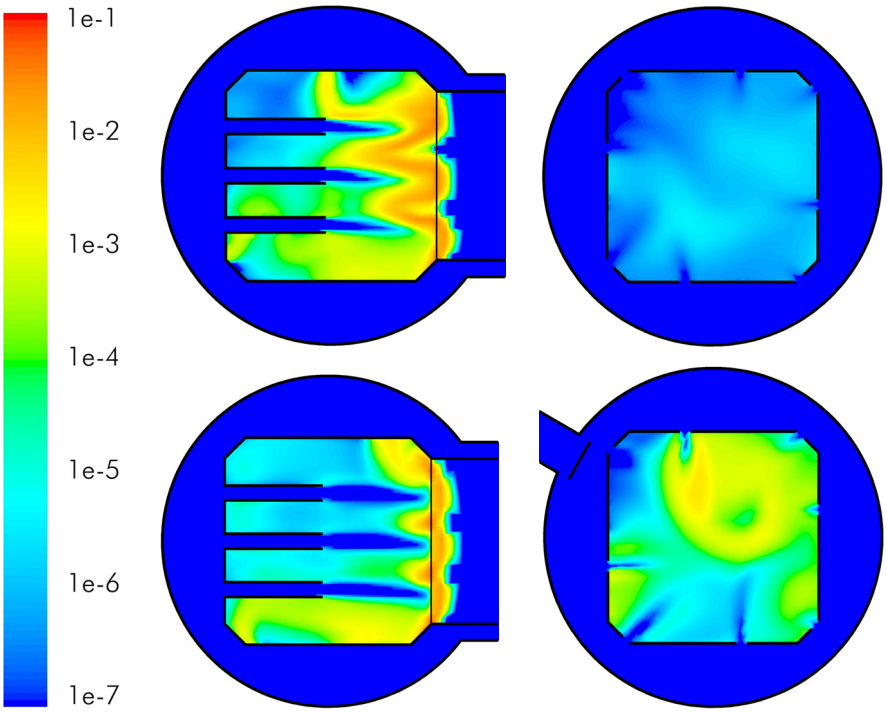


Abbildung 9-10: Contour-Plots der Reaktionsrate der CO-Oxidation (logarithmische Darstellung, $1 \cdot 10^{-7}$ – $1 \cdot 10^{-1}$ kmol/m³.s) auf den horizontalen Auswerteebenen (links unten: z=-0,2365; links oben: z=+0,2365; rechts unten: z=0,77; rechts oben: z=1,40)

Abbildung 9-10 zeigt auch die bereits weiter oben diskutierte wieder einsetzende Oxidationsreaktion im Bereich der Sekundärzone, die schlussendlich nachdem Konzept der gestuften Verbrennung zu dem guten Ausbrand des Verbrennungsapparates führt. Nicht zu vergessen ist allerdings die Tatsache, dass im Vergleich zum Experiment der CO-Ausbrand in der Simulation deutlich überschätzt wird, sodass trotz der guten simulativen Resultate jede Optimierung der Sekundärzone zur Erzielung einer Performance-Steigerung speziell hinsichtlich der Emissionssituation zu ergreifen ist. Hinsichtlich des CO-Ausbrandes wird die reaktionstechnische Optimierung der Sekundärzone als vorteilhafteste Methode angesehen. Eine Möglichkeit einer solchen Verbesserung wurde bereits weiter oben in diesem Abschnitt angesprochen. Sowohl die Simulation als auch der experimentelle Versuchsbetrieb an einer entsprechend adaptierten Anlage zeigten deutliche Verbesserungen beim CO-Restgehalt im Heißgas und aufgrund einer günstigeren Lage innerhalb der CO-NO_x-Schere auch deutlich geringere NO_x-Gehalte (Harasek et al., 2011).

Im Anhang sind noch Contour-Plots der anderen berücksichtigten oxidierbaren Gaskomponenten C_xH_y und H_2 dargestellt (Abbildung 14-62, Abbildung 14-63, Abbildung 14-64 und Abbildung 14-65), für die aber prinzipiell die gleichen Aussagen zutreffen wie für die Leitkomponente CO. Die Verhältnisse liegen ähnlich, lediglich die absoluten Zahlen sind unterschiedlich. Die Kohlenwasserstoff-Summenkomponente liegt dabei in der Ofenatmosphäre fast in der gleichen Größenordnung wie CO vor, während der Wasserstoff-Gehalt um eine ganze Größenordnung niedriger liegt.

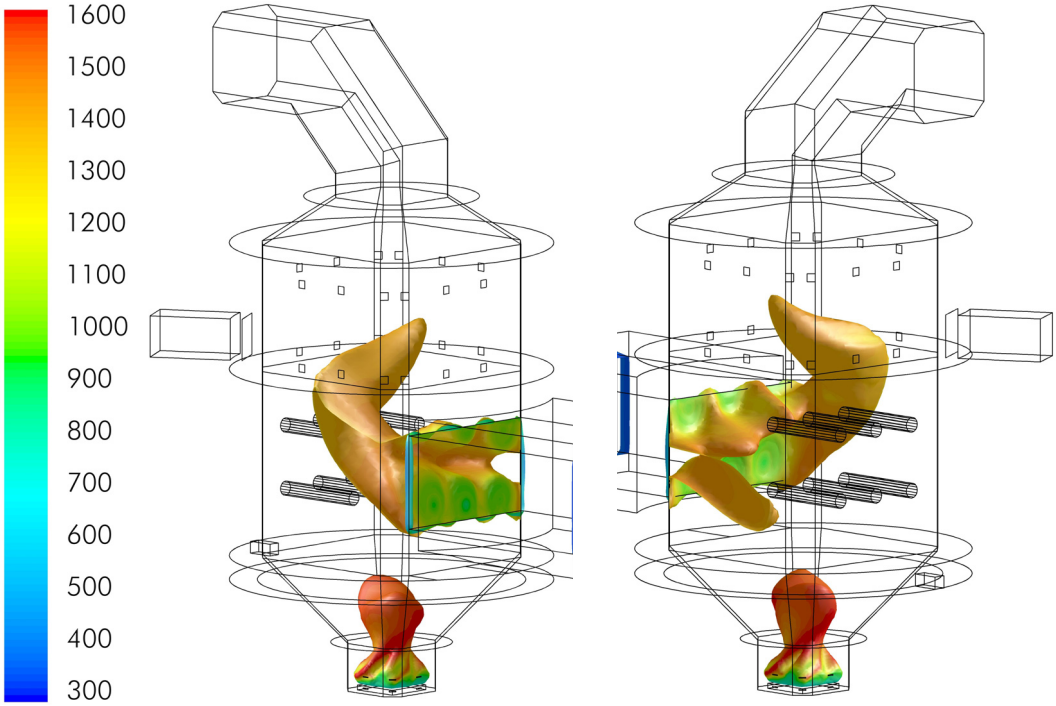


Abbildung 9-11: Fläche mit konstantem Molenbruch brennbarer Gaskomponenten (0,01) eingefärbt nach der Gastemperatur (300 – 1600 K)

Da die Existenz einer Kurzschluss-Strömung zwischen Ballenoberfläche und sekundärer Gasnachverbrennungszone von einiger Bedeutung ist, wird die Aussage von Abbildung 9-7 durch eine zusätzliche Auswertung untermauert. In Abbildung 9-11 ist eine Isofläche des Summengehalts der brennbaren Komponenten H_2, C_xH_y und CO dargestellt, die nach der Gastemperatur eingefärbt wurde. Die auftretende Strähne zwischen Primär- und Sekundär-

zone kann in dieser Darstellung sehr konkret visualisiert werden. Es wird augenscheinlich dass diese Nichtidealität zum Ausgangspunkt einer Geometrieadaptierung werden muss, wenn der Gasausbrand des Verbrennungsapparates optimiert werden soll. Ein einfacher Versuch einer solchen Adaptierung unter Minimierung der erforderlichen Umbaumaßnahmen am Realapparat wird in Kapitel 9.3 vorgestellt.

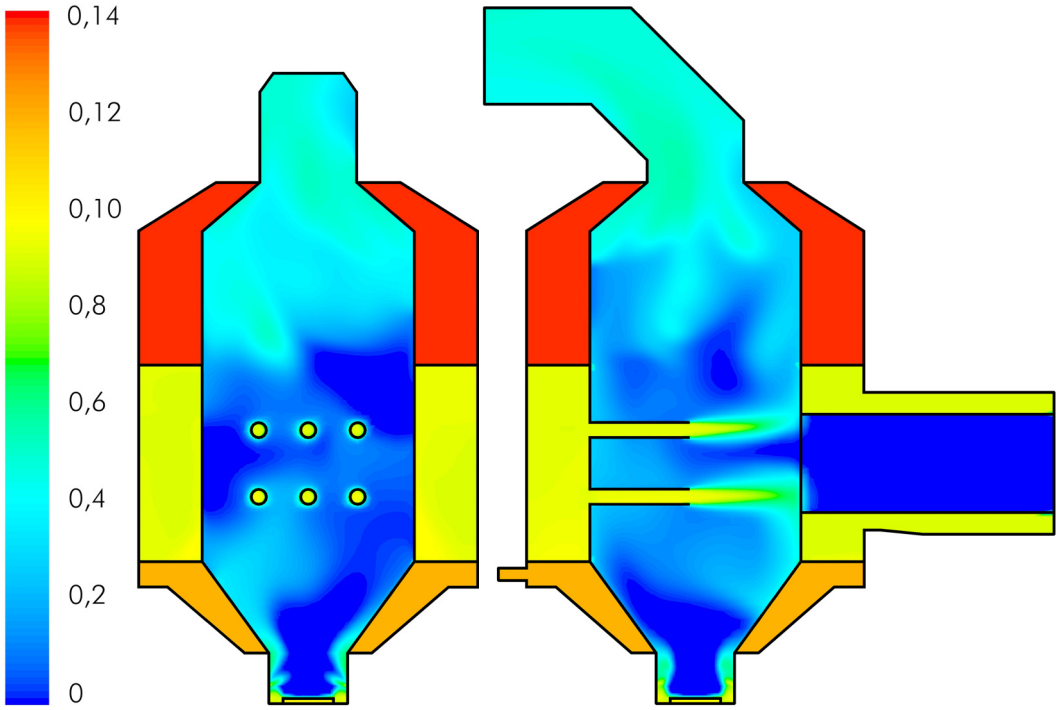


Abbildung 9-12: Contour-Plots des O_2-Molenbruchs (0 – 0,14) auf den vertikalen Auswerteebenen (links: y=0; rechts: x=0)

Komplementär zu den Gehalten brennbarer Gaskomponenten ist in Abbildung 9-12 und Abbildung 9-13 der Molenbruch des Oxidationsmittels Sauerstoff auf den bekannten Auswerteebenen dargestellt. Deutlich zu erkennen sind die unterschiedlichen Sauerstoffgehalte der Frischluft/Rezirkulationsgas-Gemische, die den unterschiedlichen Verbrennungszonen über die getrennten Windmäntel zugeführt werden (Rostzone 11,2 vol% Primärzone 10,4 vol%, Sekundärzone 15,8 vol%). Sehr klar zu sehen sind auch die relativ ausgeprägten Gradienten des Sauerstoffgehalts im Inneren der Brennkammer, die die Zonen intensivster Oxidationsreaktionen markieren. Die Eindringtiefe der Primärstrahlen ist auch hinsichtlich des Sauerstoffgehalts sehr limitiert was einerseits auf den Strömungswiderstand des Ballens und andererseits auf den hohen Volumenstrom der Ausgasungsprodukte zurückzuführen ist. Damit können Oxidationsreaktionen in nennenswertem Umfang nur direkt an der Ballenoberfläche stattfinden (vgl. Abbildung 9-9). Im Bereich der Rostzone ist ebenfalls eine Region extremen Sauerstoffmangels zu erkennen, welche durch die Ausgasungsprodukte des Rostbetts (im Wesentlichen CO und CO_2) dominiert wird. Es zeigt sich, dass die Einmischung von Verbrennungsluft direkt in der Rostzone (sekundäre Rostluft) sehr schwach und die Eindringtiefe der dortigen Freistrahlen in die aufsteigenden Ausgasungsprodukte minimal ist. Diese mangelhafte Eindringtiefe ist ein direktes Resultat des geringen Durchmessers der Luftaustrittsöffnungen (23 mm in der unteren Reihe, 18 mm in der oberen Reihe) und ist ansatzweise schon bei der Auswertung der Gasgeschwindigkeit in Abbildung 9-1 zu erkennen. Wie im Abschnitt über turbulente Freistrahlen zu erläutern sein wird, ist die Eindringtiefe oder Reichweite eines Freistrahles im Wesentlichen durch den Austrittsdüsendurchmessers determiniert

(Kapitel 14.4). Um eine bessere Einmischung sekundärer Rostluft zu erreichen, müssten also größere Austrittsöffnungen und höhere Volumenströme verwendet werden. Um den lokalen Luftüberschuss konstant zu halten ist im Gegenzug die primäre Rostluft, die über den Verteilteller direkt und vertikal in das Rostbett eingebracht wird, entsprechend zu reduzieren. Eine weitere verfolgenswerte Alternative wäre die Anordnung einer Verjüngung im Bereich der Einmischung der sekundären Rostluft („Wespentaille" wie in der Sekundärzone der dritten Brennkammergeneration in Abbildung 4-3) zur Verbesserung der Einmischqualität des Sauerstoffs bei konstantem Düsendurchmesser. Durch solche Adaptierungen ließe sich der Gasausbrand innerhalb der Rostzone deutlich verbessern und die Belastung der Sekundärzone reduzieren. Soll jedoch in der Rostzone gar kein vollständiger Ausbrand realisiert, sondern ebenfalls eine stark gestufte Verbrennung mit Ausbrand erst in der Sekundärzone implementiert werden, so kann die sekundäre Rostluft zumindest deutlich zurückgefahren werden. Dann könnte versucht werden, durch eine Steigerung der primären Rostluft den Feststoffausbrand durch ein erhöhtes Sauerstoffangebot anzuheben und die Gasentstehung (CO/CO_2) im Rostbett zu maximieren. In der jetzigen Konfiguration scheint die Luftverteilung jedenfalls nicht optimal zu sein.

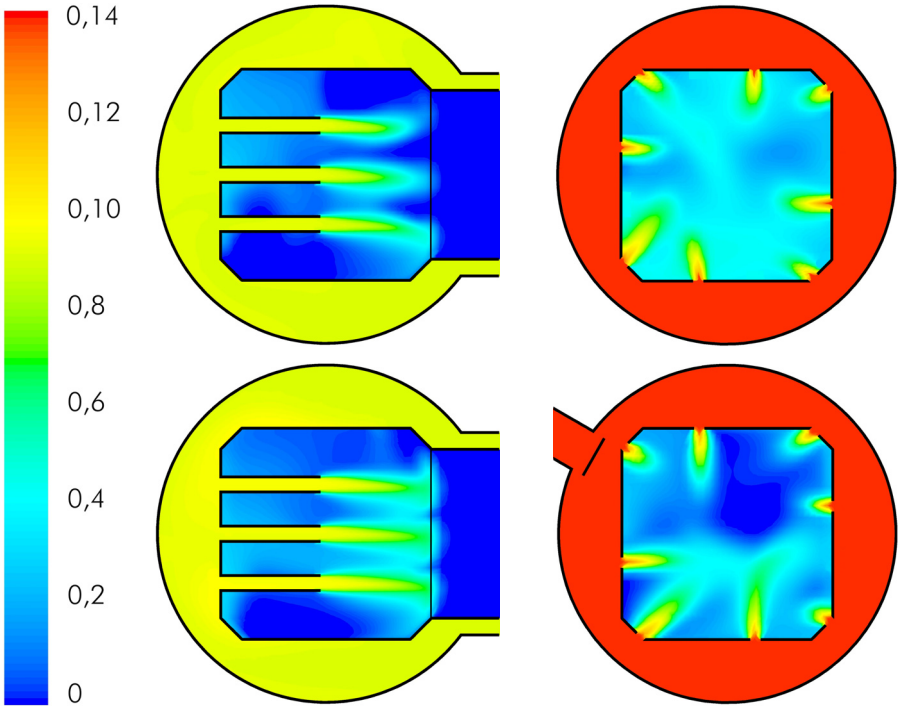


Abbildung 9-13: Contour-Plots des O_2-Molenbruchs (0 – 0,14) auf den horizontalen Auswerteebenen (links unten: z=-0,2365; links oben: z=+0,2365; rechts unten: z=0,77; rechts oben: z=1,40)

Auch die horizontalen Auswerteebenen zeigen interessante Aspekte für den Sauerstoffgehalt. In der Primärzone sind im Gasraum scharf abgegrenzte Regionen mit extremem Sauerstoffunterschuss auszumachen, welche die in Abbildung 9-11 dargestellten Strähnen „fetten" Gasgemisches markieren. Es ist überraschend, dass diese Regionen derart scharf abgegrenzt sind, gleichzeitig ist aber anzumerken, dass die Darstellungen Momentaufnahmen zeitlich fluktuierender Phänomene darstellen. In der Sekundärzone fällt zunächst auf, dass die Reichweite der Sauerstoffeinbringung mittels Freistrahlen deutlich höher als beispielsweise in der Rostzone ist. Dies hängt einerseits mit dem größeren Düsendurchmesser und andererseits

mit dem höheren Sauerstoffgehalt und langsameren Sauerstoffverzehr durch Oxidationsreaktionen in dieser Zone zusammen. Die inhomogene Vermischung von brennbaren Komponenten und Oxidationsmittel, welche bereits in Abbildung 9-8 diskutiert wurde, tritt jedoch auch in dieser Abbildung wieder zu Tage. Interessant ist auch die Tatsache, dass die Beaufschlagung der einzelnen Düsen der jeweiligen Sekundärdüsenebenen offensichtlich ungleichmäßig ist, ein Eindruck, der bereits in Abbildung 9-2 zu erahnen ist. Eine genaue Analyse ist ausständig, aber die Vermutung liegt nahe, dass diese Ungleichmäßigkeit von der asymmetrischen Gasanströmung des Windmantels herrührt. Die Verteilung des statischen Drucks im Windmantel mit relativ geringen örtlichen Unterschieden scheint diese Annahme aber zu bestätigen.

Abbildung 14-66 und Abbildung 14-67 im Anhang stellen schließlich den Gehalt an Stickstoffoxid in der Ofenatmosphäre dar. Zu erkennen sind hier die hohen NO-Anteile in der unmittelbaren Nähe der festen Brennstoffregionen, die relativ rasch durch Verdünnung und Reduktionsreaktionen abgebaut werden. In den sauerstoffreichen Regionen der Sekundärzone steigt der NO-Gehalt durch Oxidationsreaktionen der Vorläuferspezies NH_3 und HCN nur noch marginal an, kaum sichtbar auf den Contourplot-Darstellungen. Damit ist schlusszufolgern, dass die Reduktionsreaktionen der Vorläuferspezies in den sauerstoffarmen Regionen der Brennkammer von deutlich höherer Bedeutung für das globale NO_x-Emissionsverhalten sind als die Oxidationsreaktionen in den sauerstoffreichen Regionen der gestuften Verbrennung. Zusätzlich ist festzuhalten, dass NO selbst die wichtigste reaktionsaktive Stickstoffkomponente in den Ausgasungsprodukten darstellt. Die Freisetzungsraten von NH_3 und HCN betragen in der Primärzone knapp die Hälfte und in der Rostzone nur knapp ein Fünftel jener von NO. Damit liefern diese Vorläuferspezies und ihre Oxidations- und Reduktionsreaktionen nur einen kleinen Beitrag zur Gesamtemission, welche vorwiegend durch die Ausgasung von NO selbst determiniert wird. Dem Freisetzungsverhalten dieser Spezies während der Volatilisierung ist daher modellbildungsmäßig in zukünftigen Arbeiten eine hohe Beachtung zu schenken.

Abschließend in diesem Abschnitt sind in Abbildung 9-14 die Oberflächentemperaturen der inneren Brennkammerwände sowie der Strahlungsschirme der Primär- und der Rostzone dargestellt. Hinter beiden Strahlungsschirmen ist eine etwa 5 cm starke thermische Isolation vorgesehen, die einerseits die tragende Struktur darunter vor zu hoher Temperatur schützt und andererseits zu hohen Temperaturen der Strahlungsschirme führt. Diese Schirme heizen sich auf Temperaturen um 900 bis 1.000 °C auf und führen der Ballenoberfläche die für die Volatilisierung notwendige thermische Energie durch Strahlung zu. Die darunterliegenden Brennkammerwände werden durch die Windmäntel gekühlt und weisen nur noch Temperaturen im Bereich von 300 bis 400 °C auf, wodurch thermische Spannungen und thermisch induzierte Korrosionseffekte deutlich hintangehalten werden. Die innere Brennkammerwand der Sekundärzone verfügt über keinen thermischen Schutz und erreicht im Vergleich Temperaturen von bis zu 700 °C wodurch erhebliche wärmebedingte Spannungen, thermische Erweichung und Materialermüdung hervorgerufen werden. Ein gewisser Kühlungseffekt kann auch hier durch den Windmantel verzeichnet werden; der Vergleich zeigt, dass der adiabat betrachtete Heißgaskanal etwa die Temperatur des Heißgases erreicht.

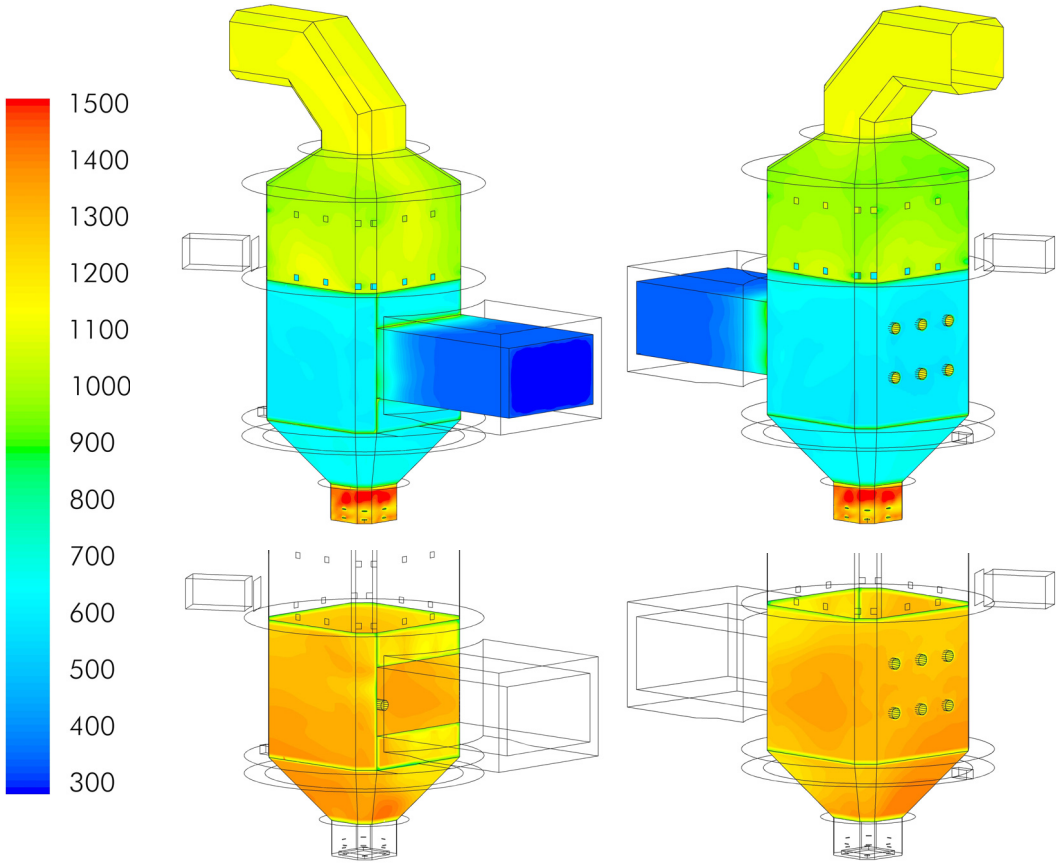


Abbildung 9-14: Blechtemperaturen (300 – 1500 K) der inneren Brennkammerwände (oben) sowie der Strahlungsschirme der Primär- und der Rostzone

Die Temperaturen im Ballenkanal betragen im vorderen Bereich ebenfalls rund 400 °C und fallen zum Brennstoffeintritt hin auf Raumtemperatur ab. Sehr hohe Temperaturen weisen auch die Wände der Rostzone auf, die ebenfalls als adiabat angenommen wurden. Im Realapparat sind diese Wände als Schamottsteine ausgeführt, die von einer stählernen Wandstruktur gestützt werden. Um diesen Bereich ist ebenfalls ein Windmantel zur Gasverteilung angeordnet, der in der vorliegenden CFD-Simulation der Einfachheit halber aber nicht implementiert wurde. Abbildung 14-68 im Anhang zeigt schließlich noch die Temperaturen der äußeren Brennkammerwände und des Mantels mit deutlich gemäßigteren Werten. Jedoch treten auch hier durchaus hot spots im oberen Bereich des sekundären Windmantels auf (600 °C und mehr), die zu thermischer Belastung und Materialermüdung führen. Abschließend sei zur Erläuterung festgehalten, dass alle Außenwände adiabat, also ohne Wärmeverlust, modelliert wurden. Unter Einbeziehung einiger weiterer Annahmen könnte in späteren Arbeiten auch ein Wärmeverlust aller außenluftberührten Wände abgeschätzt und so eine noch genauere Vorhersage der Wandtemperaturen erzielt werden. Dennoch bieten auch die vorliegenden Ergebnisse hervorragenden Einblick in die Verhältnisse innerhalb der Brennkammer und können beispielsweise einen entscheidenden Beitrag zur Materialauswahl für den Verbrennungsapparat liefern.

Da die Entwicklung und Implementierung eines Modellansatzes für die Beschreibung der Verhältnisse im Inneren der porösen Biomasse-Brennstoffbereiche, und hier speziell für den Primärbrennstoff Biomasseballen, zentrales Element in der vorliegenden Arbeit ist, sollen im

folgenden Abschnitt entsprechende Simulationsergebnisse präsentiert werden. Diese Ergebnisse sind mit den Resultaten der vereinfachten, eindimensional aufgelösten Simulationen in Kapitel 7.3 zu vergleichen. Abbildung 9-15 zeigt zunächst noch den Betrag der Gasgeschwindigkeit nach Transformation auf das Ballengitter. Als Auswerteebenen werden in diesem Abschnitt vorwiegend Querschnitte in verschiedenen Abständen von der Ballenfront (0, 6, 12 und 18 cm) sowie vertikale Längsschnitte (beinahe ausschließlich in Ballenmitte) gewählt. Die Darstellung zeigt sehr deutlich das Auftreffen klar separierter Einzelstrahlen auf die Ballenoberfläche, was zu einer sehr inhomogen verteilten Beaufschlagung der brennenden Oberfläche führt. In den Abbildungen sind auch das Ballengitter sowie die Lage der Primärdüsen angedeutet. Durch die Lage der Geschwindigkeitsmaxima ist dadurch auch die Ablenkung der Primärstrahlen erkennbar, die vorwiegend die obenliegende Düsenebene betrifft. Interessant ist auch das Abflachen des Geschwindigkeitsbetrages von jedem Maximumspunkt in radialer Richtung bis zum Nullwert (stagnanter Punkt). Noch weiter vom Zentralpunkt entfernt steigt der Geschwindigkeitsbetrag dann wieder an und markiert den Bereich aus dem Ballen ausströmenden Gasgemisches. Die sehr geringe Eindringtiefe der Freistrahlen in den Ballen wird auch aus diesen Abbildungen deutlich.

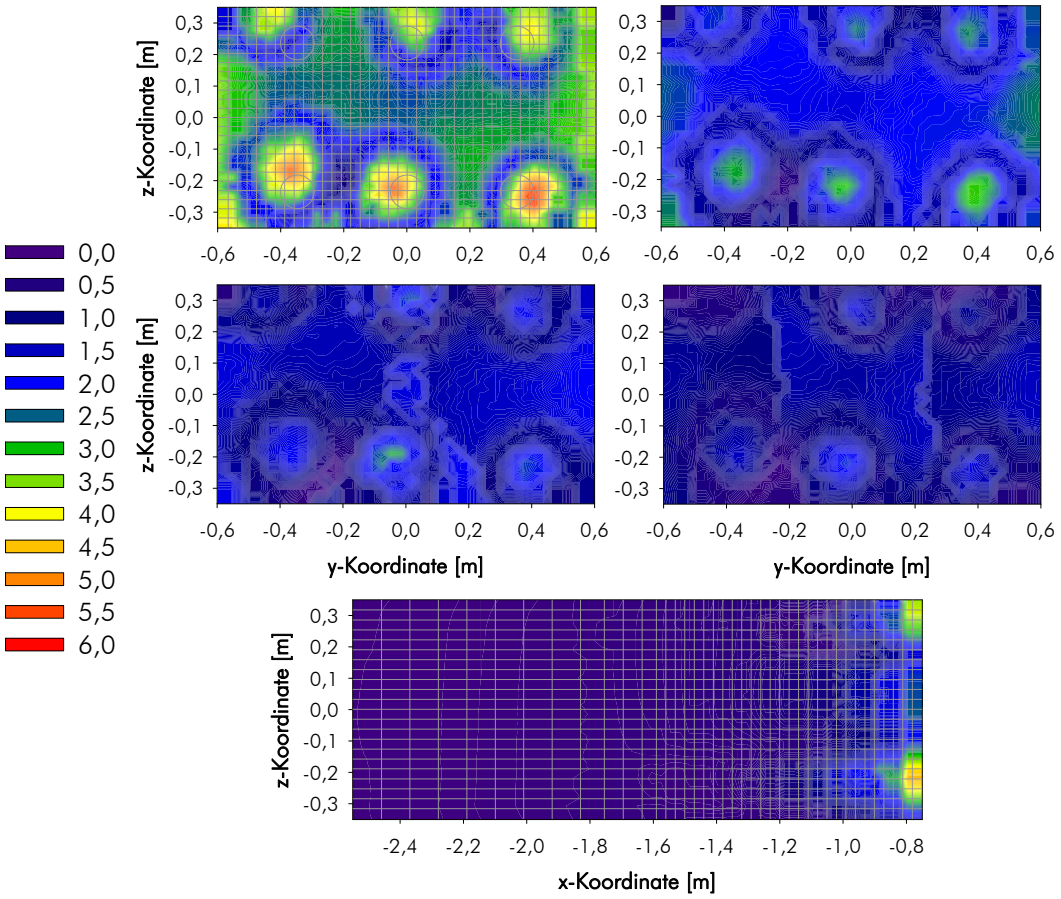


Abbildung 9-15: Contour-Plots des Betrages der Gasgeschwindigkeit (0 – 6 m/s) im porösen Biomasseballen als Querschnitt (links oben: an der Ballenoberfläche; rechts oben: Oberfläche -6 cm; links mitte: Oberfläche -12 cm; rechts mitte: Oberfläche -18 cm) sowie als Längsschnitt (unten: Schnitt durch mittlere Primärdüsenebene)

Die ungleiche Geschwindigkeitsverteilung auf der Ballenoberfläche ist kein instantaner Effekt, sondern scheint systemimmanent zu sein. Eine instationäre Analyse bleibt zwar ausständig, jedoch wurden wie vorher auch hier zu unterschiedlichen „Iterationszeitpunkten“ Analy-

sen durchgeführt. Der Mittelwert der Strömungsgeschwindigkeit auf der Ballenoberfläche während acht solcher Iterationszeitpunkte (Abbildung 14-69) sowie die relative Abweichung des ausgewerteten Iterationszeitunktes von diesem Mittelwert (Abbildung 14-70) zeigen deutlich, dass die Ungleichverteilung auf der Ballenoberfläche bestehen bleibt (siehe Anhang).

Abbildung 9-16 zeigt als weitere Gasphaseneigenschaft den auf das Ballengitter transformierten Sauerstoff-Partialdruck innerhalb der Ballenregion. Auch hier wird die extreme Ungleichverteilung an der Ballenoberfläche sichtbar, die zu deutlichen Sauerstoff-hot-spots im Bereich der Primärdüsenaustritte und ausgeprägten Bereichen mit Sauerstoffmangel zwischen den Düsen führt. Die obere Düsenreihe trägt in diesem Zusammenhang aufgrund ihrer Ablenkung nach oben kaum mehr einen nennenswerten Beitrag zur Sauerstoffversorgung der Ballenoberfläche bei. Es ist davon auszugehen, dass diese ungleichmäßige Gasbeaufschlagung des Ballens nachteilige Effekte bei Volatilisierung und Koksabbrand verursacht. Markant ist die größere Eindringtiefe des Sauerstoffs mit den Primärstrahlen im Vergleich zum Geschwindigkeitsfeld. Da der Sauerstoffgehalt im Ballen klar bedeutsamer für die Verbrennungsverhältnisse ist, ist eine Einschätzung der Eindringtiefe der primären Freistrahlen alleine auf Basis der Strömungsgeschwindigkeit also nicht ausreichend. Aufgrund der Verdünnung sowie des Sauerstoffverbrauchs durch einsetzende homogene Gasphasenreaktionen und heterogene Koksverbrennung verschwindet der Sauerstoffgehalt aber auch relativ rasch mit zunehmender Entfernung von der Ballenoberfläche.

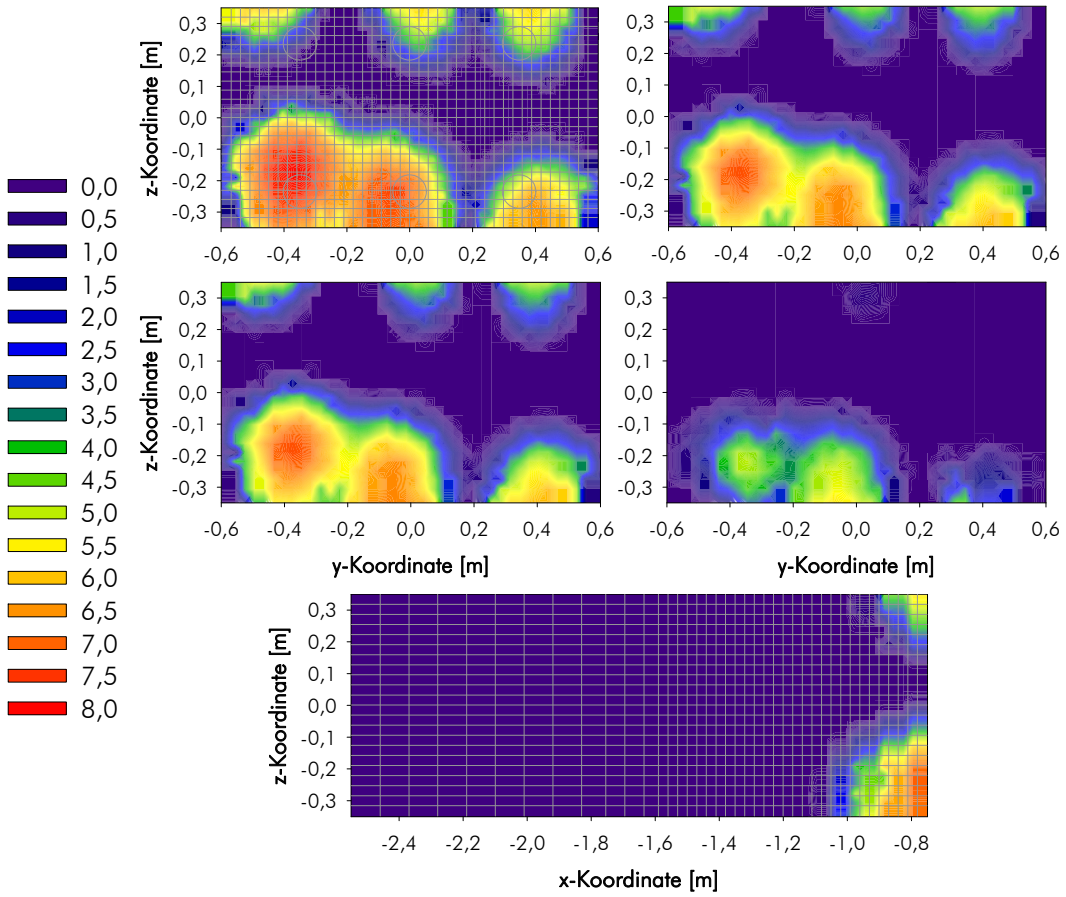


Abbildung 9-16: Contour-Plots des Sauerstoff-Partialdrucks (0 – 8 kPa) im porösen Biomasseballen als Querschnitt (links oben: an der Ballenoberfläche; rechts oben: Oberfläche -6 cm; links mitte: Oberfläche -12 cm; rechts mitte: Oberfläche -18 cm) sowie als Längsschnitt (unten: Schnitt durch mittlere Primärdüsenebene)

Abbildung 9-17 stellt als Kernergebnis die Feststofftemperatur in der Ballenregion dar. Eine ausgeprägte heiße Stelle mit knapp 1300 K ist im Umfeld einer Primärdüse detektierbar und die Auswertung zeigt, dass diese Stelle mit jener der maximalen Sauerstoffkonzentration in der Gasphase zusammenfällt. Diese Tatsache ist dadurch zu erklären, dass die sauerstoffabhängige heterogene Koksverbrennung den weitaus größten Beitrag zur Wärmetönung des Verbrennungsvorgangs der Biomasse liefert. Im Vergleich dazu sind Volatilisierung und Brennstofftrocknung (die an dieser Stelle ohnehin bereits lange abgeschlossen ist) fast zu vernachlässigen. Abgesehen von diesem hot spot ist die Ungleichverteilung der Feststofftemperatur nur mäßig stark ausgeprägt und verschwindet mit zunehmendem Abstand von der Ballenoberfläche. Der Gradient zu den kalten Wänden des Einschubsystems tritt jedoch an allen ausgewerteten Stellen klar hervor. Der Vergleich der dargestellten räumlich aufgelösten Ergebnisse mit den Resultaten der eindimensional aufgelösten Simulation in Kapitel 7.3 zeigt ganz deutlich, dass die komplexen Effekte am inhomogen angeströmten Ballen in der einfachen Simulation nicht abgebildet werden können. Zwar kann durch die vereinfachte Simulation ein repräsentativer Mittelwert über den jeweiligen Ballenquerschnitt ermittelt werden (allerdings nur mit begrenzter Genauigkeit), die ausgeprägten Temperaturspitzen können jedoch nicht erfasst werden. Eine Auslegung und Optimierung erfordert also eine detaillierte und dreidimensionale Betrachtung; die Resultate der eindimensionalen Simulation sind aber hervorragend für die Initialisierung der dreidimensionalen Simulation geeignet.

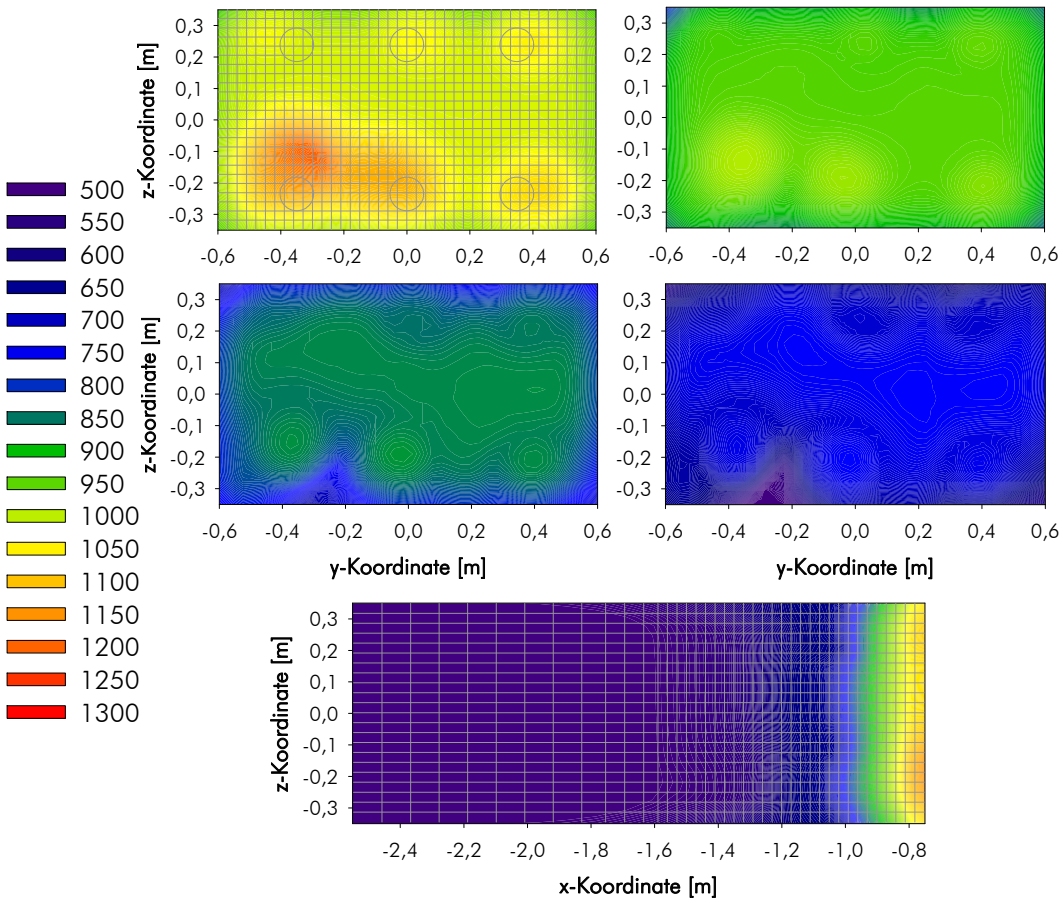


Abbildung 9-17: Contour-Plots der Feststofftemperatur (500 – 1300 K) im porösen Biomasseballen als Querschnitt (links oben: an der Ballenoberfläche; rechts oben: Oberfläche -6 cm; links mitte: Oberfläche -12 cm; rechts mitte: Oberfläche -18 cm) sowie als Längsschnitt (unten: Schnitt durch mittlere Primärdüsenebene)

Die Temperaturmaxima des Feststoffes in einer Größenordnung von 1000 °C sind dazu geeignet, um in nennenswertem Umfang zu Ascheerweichung und Agglomeration zu führen. Dieses für den Prozess nachteilige Verhalten wurde auch bei den experimentellen Arbeiten deutlich, wobei aber prinzipiell nicht unterschieden werden konnte, ob die Verschlackung in der Primärzone oder/und der Rostzone anzulasten ist. Jedenfalls führt Ascheschmelze im Betrieb relativ rasch zu Fehlfunktionen im Ascheaustrag und durch Anbackungen an den Brennkammerwänden auch zu chlorinduzierter Hochtemperaturkorrosion (Miltner et al., 2006). Deshalb ist danach zu trachten, während einer Optimierung des Apparates und der Betriebsparameter die Ascheerweichung und Ascheschmelze aufgrund dieser hohen Feststofftemperaturen weitestgehend zu reduzieren. Es ist davon auszugehen, dass durch eine gleichmäßigere Verteilung des Sauerstoffs auf der Ballenoberfläche deutlich geringere Temperaturspitzen im Feststoff erreicht werden können.

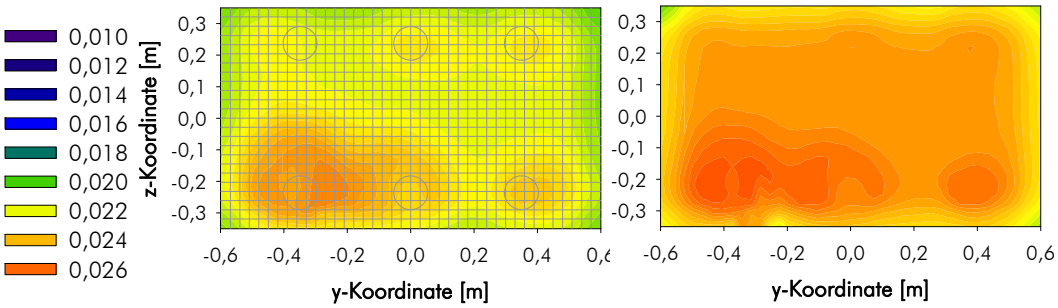


Abbildung 9-18: Contour-Plots der Volatilisierungsrate (0,010 – 0,026 kg/m³.s) im porösen Biomasseballen als Querschnitt (links: an der Ballenoberfläche; rechts: Oberfläche -12 cm)

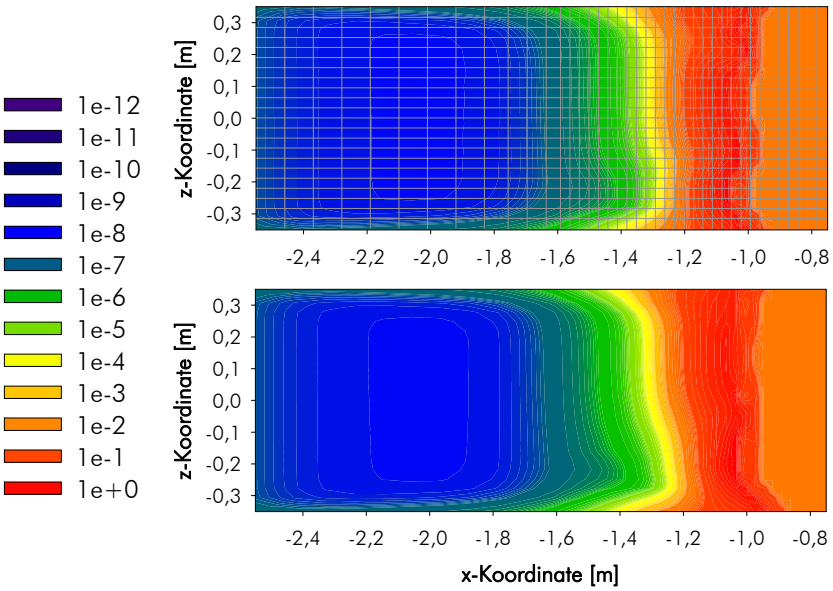


Abbildung 9-19: Contour-Plots der Volatilisierungsrate (logarithmische Darstellung, 10^{-12} – 1 kg/m³.s) im porösen Biomasseballen als Längsschnitt (oben: Schnitt durch mittlere Primärdüsenebene; unten: Schnitt durch die rechte Außendüsenebene)

Als direktes Ergebnis der Feststofftemperatur der Biomasse kann die Freisetzungsrate der flüchtigen Brennstoffbestandteile während der Volatilisierung gesehen werden, da deren einzige Prozesseinflussgröße die Temperatur ist. Abbildung 9-18 und Abbildung 9-19 stellen diese Gasentstehungsrate im Inneren des Ballens auf den bekannten Auswerteebenen gra-

fisch dar (letztere in logarithmischem Maßstab). Die Analyse zeigt, dass das Volatilisierungsmaximum etwa 35 cm unterhalb der Ballenoberfläche zu liegen kommt; in diesem Bereich ist die Feststofftemperatur soweit angestiegen, dass eine sehr plötzliche und räumlich abgegrenzte Freisetzung eines großen Anteils der flüchtigen Brennstoffkomponenten zu verzeichnen ist. Gerade die logarithmische Darstellung zeigt sehr klar, wie die Volatilisierungsrate mit geringer werdendem Abstand zur Ballenoberfläche sehr langsam ansteigt, sich dann ein deutlich ausgeprägtes Maximum ausbildet und dann zur Ballenoberfläche hin wieder abnimmt. Die Gradienten in Längsrichtung sind wie erwartet ausgesprochen hoch. Auch auf den Ballenquerschnitten sind aufgrund der ungleich verteilten Feststofftemperaturen Gradienten der Volatilisierungsrate festzustellen, allerdings in deutlich geringerer Ausprägung.

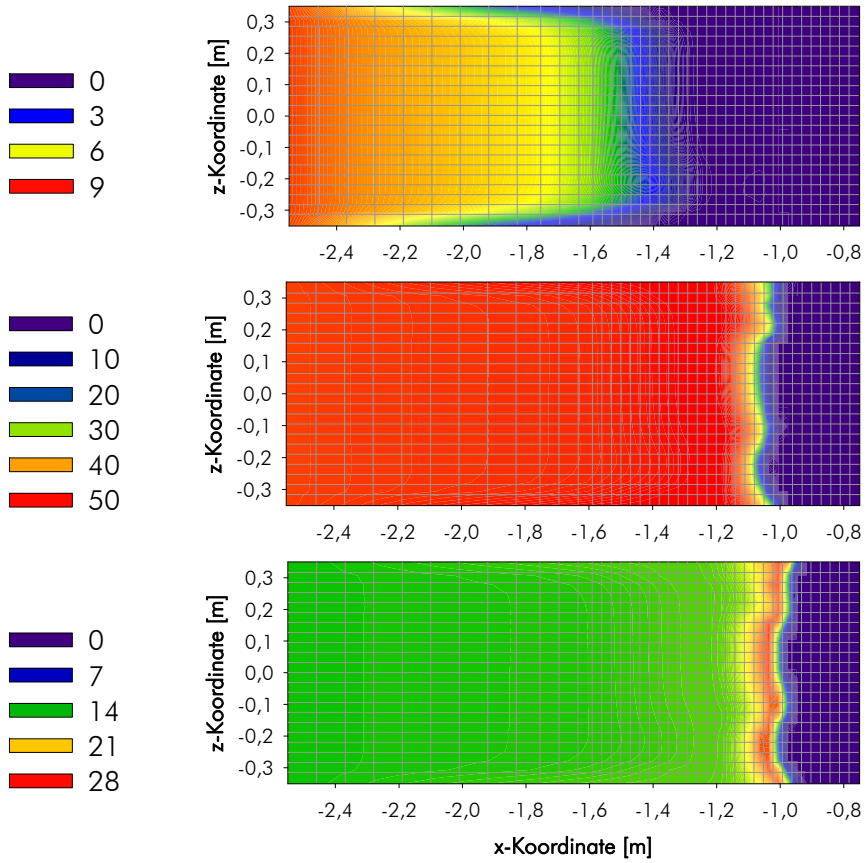


Abbildung 9-20: Contour-Plots der Gehalte an Wasser (oben; 0 – 9 wt%), an Zellulose (mitte; 0 – 50 wt%) sowie an Hemizellulose (unten; 0 – 28 wt%) in der Feststoffphase des porösen Biomasseballens als Längsschnitt durch die mittlere Primärdüsenebene

Eine Analyse der Gehalte der einzelnen Pseudokomponenten in der Feststoffphase liefert wertvolle Informationen zusätzlich zur Volatilisierungsrate. Abbildung 9-20 zeigt die Gehalte an Wasser (Feuchtigkeit), Zellulose und Hemizellulose in einem Ballenlängsschnitt, woraus deren Anteile zur Volatilisierungsrate abgeleitet werden können. Die Brennstofftrocknung erfolgt im Ballen über einen sehr breiten Bereich, da die Feststofftemperatur anfänglich konstant bleibt und dann erst sehr langsam ansteigt. Etwa 70 cm unterhalb der Ballenoberfläche ist die Trocknungsphase abgeschlossen und der Wassergehalt nahe Null. Ein interessantes Detail ist der Feuchtegradient in lateraler Richtung, der deutlich zeigt, dass der Feststoff nach dem Eintritt in die Simulationsdomäne vom warmen Feedgas im Windmantel um den Ballen-einschub vorgewärmt wird. Erst weiter vorne bei einsetzender exothermer Reaktion kehrt sich die Richtung des Wärmestromes um und der heiße Ballen trägt zur Vorwärmung dieses

Feedgases bei. Die Trocknung des Ballens erfolgt also wie zu erwarten aufgrund der Wärmezufuhr von außen nach innen. Die Volatilisierung der Zellulose und Hemizellulose verlaufen an einer ausgeprägt schmalen Front und diese beiden Komponenten sind auch für das Maximum der Volatilisierungsrate in Abbildung 9-19 verantwortlich. Durch die höhere Aktivierungsenergie der Volatilisierungsreaktion von Zellulose ist die Front bei dieser Komponente noch deutlich schmäler als jene der Hemizellulose (siehe Kapitel 6.7.2.2). Am Ende dieser Ausgasungsphasen sind die Gehalte flüchtiger Zellulose und Hemizellulose jeweils Null, die nichtflüchtigen Anteile haben zur Koksbildung beigetragen. Laterale Gradienten der Gehalte von Zellulose und Hemizellulose haben keine Bedeutung.

Eine separat zu analysierende Pseudokomponente des festen Brennstoffes ist Lignin, deren Gehalt im Feststoff in Abbildung 9-21 dargestellt ist. Es ist zu erkennen, dass der Ligningehalt während der Volatilisierung von Zellulose und Hemizellulose vom Startgehalt weg zunächst stark zunimmt und erst im Anschluss durch die Ligninvolatilisierung absinkt. Auch diese Darstellung zeigt, dass die Volatilisierung von Lignin an der Ballenoberfläche noch lange nicht abgeschlossen ist und das Material, welches an die Rostzone weitergegeben wird, noch einen großen Anteil flüchtiger Komponenten enthält (im Bereich von 45 wt%, sehr gut vergleichbar mit dem Resultat in Kapitel 7.3). Aufgrund der sehr langsamen Thermolyse der Ligninfraktion, die in der thermogravimetrischen Analyse des Brennstoffs festgestellt wurde, ist bei dem vorliegenden Verbrennungskonzept davon auszugehen, dass kein Betriebszustand gefunden werden kann, bei dem die Volatilisierung des Ballenbrennstoffs am Ende der Primärzone vollständig abgeschlossen ist. Es ist also bei der Optimierung der Rostverbrennungszone jedenfalls von einem nur teilausgegasten Brennstoff auszugehen, wodurch auch die Auslegung und die Leistungskenndaten dieser Zone adaptiert werden müssen. Die vorliegende Auslegung der Rostzone ist nicht auf einen so hohen Gehalt flüchtiger Brennstoffkomponenten ausgerichtet. Der Dimensionierung des Nachverbrennungsrosts wurde ursprünglich ein Gehalt von 5 wt% zugrunde gelegt (siehe Kapitel 14.1.2.4).

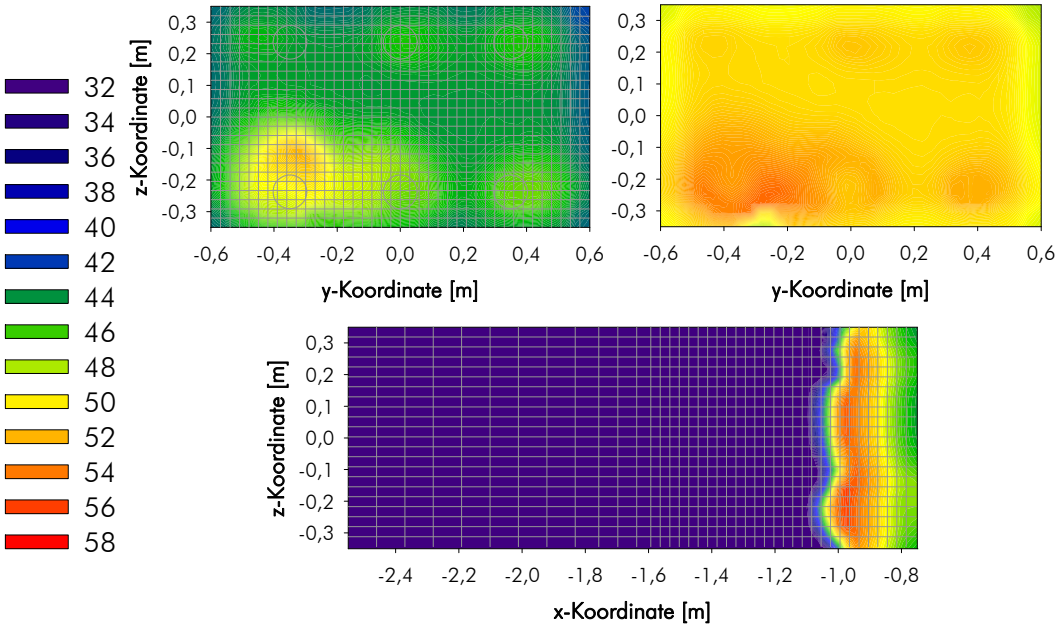


Abbildung 9-21: Contour-Plots des Ligningehalts (32 – 58 wt%) in der Feststoffphase des porösen Biomasseballens als Querschnitt (links oben: an der Ballenoberfläche; rechts oben: Oberfläche -12 cm) sowie als Längsschnitt (unten: Schnitt durch mittlere Primärdüsenebene)

Die untersuchten Ballenquerschnitte zeigen auch für den Ligningehalt deutliche Gradienten, die durch die Positionierung der Primärdüsen hervorgerufen werden. Hier ist es besonders erwähnenswert, dass es in den bereits andiskutierten hot-spots auf der Ballenoberfläche zu steigenden Ligningehalten kommt, während im Durchschnitt im vordersten Bereich des Ballens die Ligningehalte im Feststoff aufgrund der Volatilisierung abnehmen. Der Grund hierfür ist, dass in den hot-spots die Abbrandrate der gebildeten Koksfraktion größer ist als die Volatilisierungsrate des Lignins (vergleiche Abbildung 9-18 mit Abbildung 14-71), der Feststoff also schneller an Koks verarmt als an Lignin, wodurch der Gehalt letztgenannter Komponente ansteigen muss.

Hinsichtlich der reaktiven Koksfraktion ist eine Darstellung der Koks-Abbrandrate der Abbildung 14-71 im Anhang zu entnehmen; der Gehalt an Koks im Feststoff ist in Abbildung 9-22 gegeben. Wie zu erwarten bildet sich während der nahezu instantanen Volatilisierung von Zellulose und Hemizellulose sehr rasch eine große Menge Koks im vorderen Ballenbereich, gefolgt von einem langsameren Anstieg bis zur Ballenfront durch die Thermolyse der Ligninfraktion. In den hot-spot-Bereichen an der Ballenoberfläche mit hohem Sauerstoffgehalt und hoher Partikeltemperatur setzt bereits in der Ballenregion der Koksabbrand ein und führt lokal zu sinkenden Koksgehalten. Dadurch tritt ein Effekt auf, der auch während zahlreicher experimenteller Versuchsfahrten beobachtet werden konnte: durch die Primärstrahlen werden regelrecht Löcher in die Ballenoberfläche eingebrannt. Dazwischen bleibt Material stehen, das von den Luftdüsen nicht erfasst wird; bleibt der Ballen kompakt, dann wird dieses Material durch den Ballenvorschub immer weiter in den freien Ofenraum eingeschoben, wodurch sich Strömungsbild und Abbrand des Feststoffs weiter deutlich verschlechtern. Auch an den Ballenrändern zum kühleren Einschubkanal ist der Koksabbrand durch die dort deutlich niedrigere Feststofftemperatur geringer.

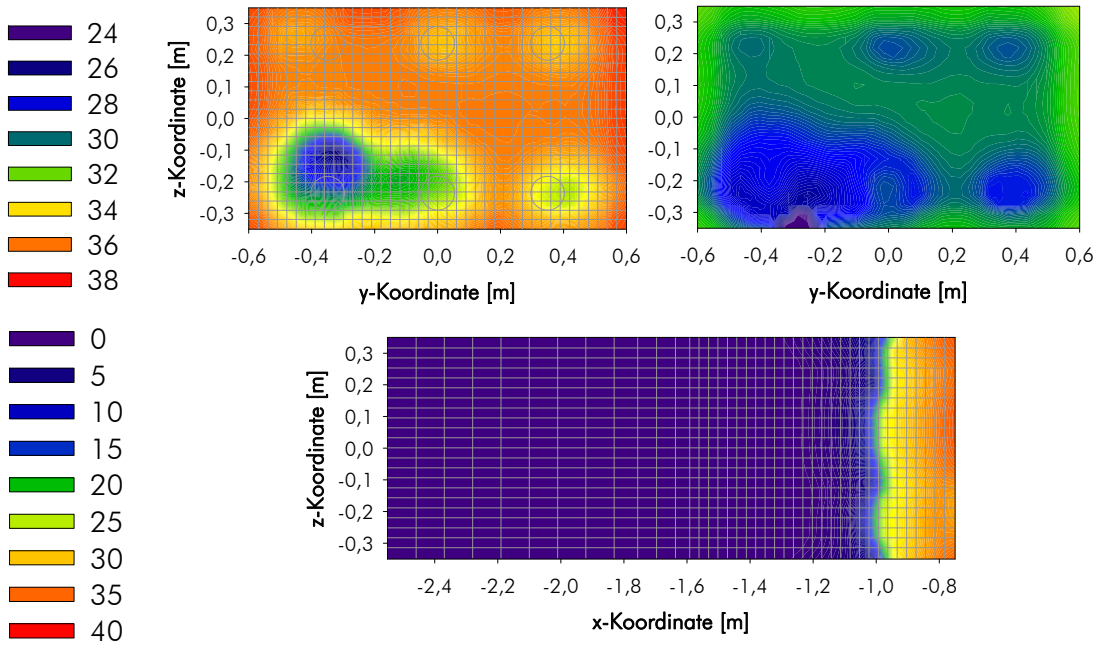


Abbildung 9-22: Contour-Plots des Koksgehalts in der Feststoffphase des porösen Biomasseballens als Querschnitt (links oben: an der Ballenoberfläche; rechts oben: Oberfläche -12 cm; 24 – 38 wt%) sowie als Längsschnitt (unten: Schnitt durch mittlere Primärdüsenebene; 0 – 40 wt%)

Ein quantitativer Vergleich hinsichtlich des ungleichmäßigen Abbrandes der Ballenfront ist wie bereits erwähnt aufgrund der experimentellen Rahmenbedingungen schwierig. Deshalb wird in Abbildung 9-23 versucht, einen qualitativen Vergleich der Feststofftemperatur an der Ballenfront anzustellen. Hierfür wird ein Foto der brennenden Ballenfront, welches während einer repräsentativen Versuchsfahrt durch das Schauglas aufgenommen wurde, dem CFD-Ergebnis für die Feststofftemperatur aus Abbildung 9-17 gegenübergestellt. Klar zu erkennen sind Regionen mit intensiverer Glut und damit höherer Temperatur sowie dunklere Regionen niedrigerer Temperatur. Soweit erkennbar und unter Berücksichtigung zeitlicher Schwankungen decken sich diese Regionen relativ gut mit den Simulationsergebnissen. Es ist davon auszugehen, dass diese qualitative Übereinstimmung ein vielversprechender Indikator für eine gelungene Modellbeschreibung der wesentlichsten Ofencharakteristika ist.

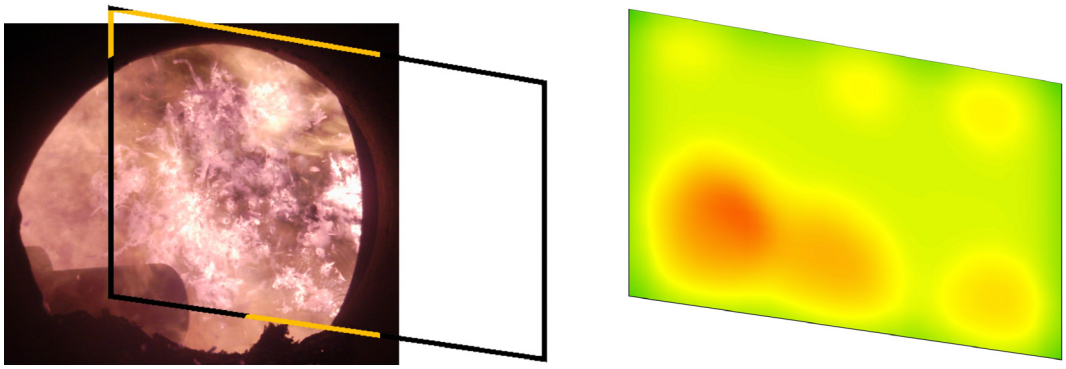


Abbildung 9-23: Qualitativer Vergleich der Temperaturverteilung auf der Ballenoberfläche (links: Blick durch das Schauglas in den realen Ofen, Ballenfront schematisch angedeutet; rechts: Abbildung des CFD-Resultats für die Feststofftemperatur)

Abschließend ist in Abbildung 14-72 im Anhang noch die Verteilung des konvektiven Wärmeübergangs zwischen Feststoff und Gasphase in der Ballenregion dargestellt (ohne Strahlungswärmeübergang). Die Auswertung zeigt nochmals sehr deutlich die Regionen mit Netto-Wärmetransport zur Festphase während der Volatilisierung (negative Werte) sowie die Regionen mit Netto-Wärmetransport zur Gasphase während des Koksabbrandes (positive Werte).

Fasst man die Erkenntnisse der Simulation des Standardbetriebszustandes zusammen, so ist zunächst festzuhalten, dass entgegen der ursprünglichen Erwartung und Apparateauslegung eine vollständige Ausgasung der flüchtigen Brennstoffkomponenten (Volatilisierung) in der primären Verbrennungszone des analysierten Apparates bei weitem nicht zu erreichen ist. Die Rostzone hat aus diesem Grund erhebliche Mengen flüchtiger Brennstoffbestandteile zu bewältigen, auf die die ursprüngliche Auslegung nicht ausgerichtet ist. Damit verbunden sind erhebliche Anteile flüchtiger Komponenten und Restkoks in der ausgetragenen Aschenfraktion, wie sie auch im experimentellen Betrieb dokumentiert sind. Zusätzlich zeigt die Auswertung der dreidimensionalen CFD-Analyse, dass die Positionierung der Primärdüsen nicht optimal gelungen ist und die Ballenoberfläche sehr ungleichmäßig angeströmt wird. Dadurch kommt es zu einem ungleichmäßigen Ballenabbrand, zu hot-spots an der Ballenoberfläche sowie zum regelrechten Einbrennen von Löchern. Unter dem Strich wird das zur Verfügung stehende heiße Brennkammervolumen in der Primärzone reaktionstechnisch nicht ideal ausgenützt, was zu unvollständiger Reaktion, reduzierter thermischer Leistung und gesteigerten Emissionen brennbaren Kohlenstoffs in Heißgas und Rostasche führt. Auch in der sekundären Gasnachverbrennungszone wurden nichtideale Strömungsverhältnisse detektiert, die

zu einer schlechteren Ausnutzung des Verbrennungsraumes im Vergleich zu einem idealen Pfropfenströmungsreaktor führen. Außerdem wurde eine ausgeprägte Kurzschlussströmung von der Ballenfront bis weit in die Sekundärzone festgestellt, die eine Strähne hoher Konzentration brennbarer Gase mit sich führt und im Resultat zu schlechterem Gasausbrand führt. Im Bereich der Rostzone wurde eine mangelhafte Eindringtiefe der Freistrahlen der sekundären Rostluft in die aufsteigenden brennbaren Gase festgestellt. Wird die Temperatur des festen Brennstoffes in der Ballenregion sowie in der Rostzone untersucht, so ist festzustellen, dass Ascheschmelze und Ascheagglomeration in beiden Zonen zu befürchten ist.

Es konnten also zahlreiche Problempunkte definiert werden, die in einem nächsten Schritt durch Variation und Optimierung von Brennkammergeometrie und Betriebsbedingungen zu beheben sind. Eine Verbesserung ist beispielsweise durch die Repositionierung der Primärdüsen zu erwarten, welche im Rahmen der vorliegenden Arbeit jedoch nicht weiter verfolgt wurde. Im folgenden Abschnitt sollen Optimierungsmaßnahmen dargestellt werden, die ohne oder mit nur minimalen Adaptierungen der Geometrie der Simulationsdomäne und der Brennkammergeometrie einhergehen. Das Potential der entwickelten Simulationswerkzeuge kann auf diese Weise sehr gut dargestellt werden; eine endgültige Optimierung des Verbrennungsprozesses und des Apparatedesigns liegt nicht im Fokus der vorliegenden Arbeit.

9.2 Optimierung von Betriebsbedingungen: Ausmaß der Luftstufung

Als Beispiel für eine Optimierung eines Betriebsparameters wird in diesem Abschnitt der Einfluss des Ausmaßes der Luftstufung, also der Verteilung der Sauerstoffzufuhr zwischen primärer und sekundärer Verbrennungszone, bei konstantem globalen Luftüberschuss untersucht. Aus der Theorie geht hervor (siehe Kapitel 3.1.2), dass bei verstärkt gestufter Zufuhr der Verbrennungsluft zu den brennbaren gasförmigen Ausgasungsprodukten stärker unterstöchiometrische Bedingungen in der Ausgasungszone geschaffen werden können, die zu einer Verstärkung der Reduktionsreaktionen der NO_x-Vorläuferkomponenten (NH_3 und HCN) zu N_2 führen. Die Oxidationsreaktionen zu NO stehen entsprechend in stärkerer Konkurrenz zur Oxidation von Kohlenmonoxid und Kohlenwasserstoffen. Aufgrund dieser Tatsache ist bei stärkerer Luftstufung in gewissem Ausmaß auch von einer Erhöhung der Emissionen unverbrannter Komponenten auszugehen. Dieses gegenläufige Verhalten emissionsrelevanter Gaskomponenten wird oft als *CO-NOx-Schere* bezeichnet und kann bei entsprechender Gewichtung der Emissionsfaktoren zu einer Optimierung der Luftstufung herangezogen werden. Das Potential des implementierten Modellansatzes zur Simulation dieses Verhaltens soll an dieser Stelle dargelegt werden.

Ausgehend vom Standardbetriebszustand wurden hierfür sechs weitere Betriebszustände simuliert, bei denen die Verteilung der Frischluftvolumenströme in die primäre und die sekundäre Verbrennungszone variiert wurden. Der Gesamtvolumenstrom in die jeweilige Zone wurde dabei konstant gehalten, weshalb die Rezirkulationsgasströme entsprechend gegenläufig verändert werden mussten. Alle globalen Anlagenparameter (Gesamtluftüberschuss, Brennstoffwärmeleistung, Heißgasvolumenstrom) bleiben damit konstant, lediglich die loka-

len Luftverhältniszahlen in primärer und sekundärer Zone werden variiert; die Verhältnisse in der Rostzone bleiben ebenfalls unverändert. Zur Reduktion des rechentechnischen Aufwands wurden diese Simulationen mit der vereinfachten Geometrie V2b durchgeführt.

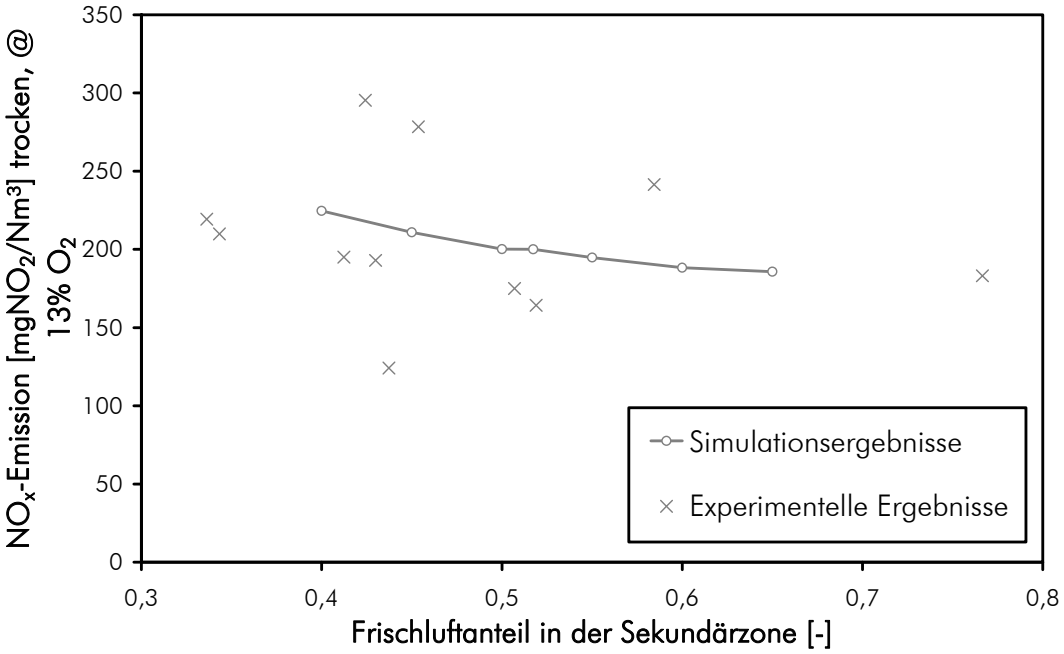


Abbildung 9-24: Auswirkung des Ausmaßes der Luftstufung auf die Stickstoffoxid-Emissionen am Ofenaustritt bei konstantem globalen Luftüberschuss

Abbildung 9-24 stellt den Verlauf der Stickstoffoxid-Emissionen für variierende Luftstufung dar und vergleicht die Simulationsergebnisse mit ausgewählten experimentellen Resultaten. Dabei wurde darauf geachtet, dass die globalen Anlagenparameter sowie die Verhältnisse auf dem Nachverbrennungsrost in etwa mit den Einstellungen in der Simulation übereinstimmten (Gesamtluftüberschuss 1,4 bis 1,7, Lastpunkt 85 bis 105 %, Heißgastemperatur 700 bis 800). Hierbei zeigt sich, dass trotz einer sehr großen Anzahl von Versuchsergebnissen nur relativ wenige genau übereinstimmende Betriebspunkte gefunden werden konnten. Zur Erhöhung der statistischen Relevanz wurde daher ein breiterer Bereich an Betriebsparametern zugelassen. Die Darstellung zeigt eine hervorragende Übereinstimmung von rechnerischen mit experimentellen Ergebnissen, speziell unter Berücksichtigung des immer noch relativ breiten Bereiches an Betriebsparametern, die den Versuchsergebnissen zugrunde liegen (speziell der Bereich des globalen Luftüberschusses bewirkt eine nicht zu vernachlässigende Auffächerung der NO_x-Emissionen). Sowohl die Größenordnung des Stickoxidgehaltes am Apparateaustritt als auch die Tendenz bei unterschiedlicher Luftstufung werden durch die Simulation sehr gut wiedergegeben. Im untersuchten Bereich lassen sich die Stickstoffoxid-Emissionen durch ausgeprägtere Luftstufung um 10 bis 15 % senken. Den größten Erfolg verspricht die Luftstufung im Bereich der Ausgasungszone des Primärbrennstoffes, da hier auch der größte Teil an NO_x-Vorläufersubstanzen freigesetzt wird. In der Feststoffverbrennungszone wird nur ein relativ kleiner Anteil emissionsrelevanter Gaskomponenten freigesetzt (siehe Kapitel 6.7.2.4), weshalb eine Luftstufung hier zwar auch sinnvoll, aber doch deutlich weniger effektiv ist. Kritisch betrachtet lässt sich der Abstand zum einzuhaltenden Emissionsgrenzwert von 250 $mgNO_2/Nm^3$ durch die hier untersuchte primäre Luftstufung dennoch nur in begrenztem Umfang steigern. Festzuhalten ist noch, dass das implementierte Freisetzungsmodell für NO und seine Vorläuferspezies unabhängig von den jewei-

ligen Betriebsbedingungen ist. Für eine wirklich verlässliche Aussage müsste die luftüberschußabhängige Freisetzund der stickstoffhältigen Gaskomponenten während Volatilisierung und Koksabbrand experimentell untersucht und anschließend modelliert werden.

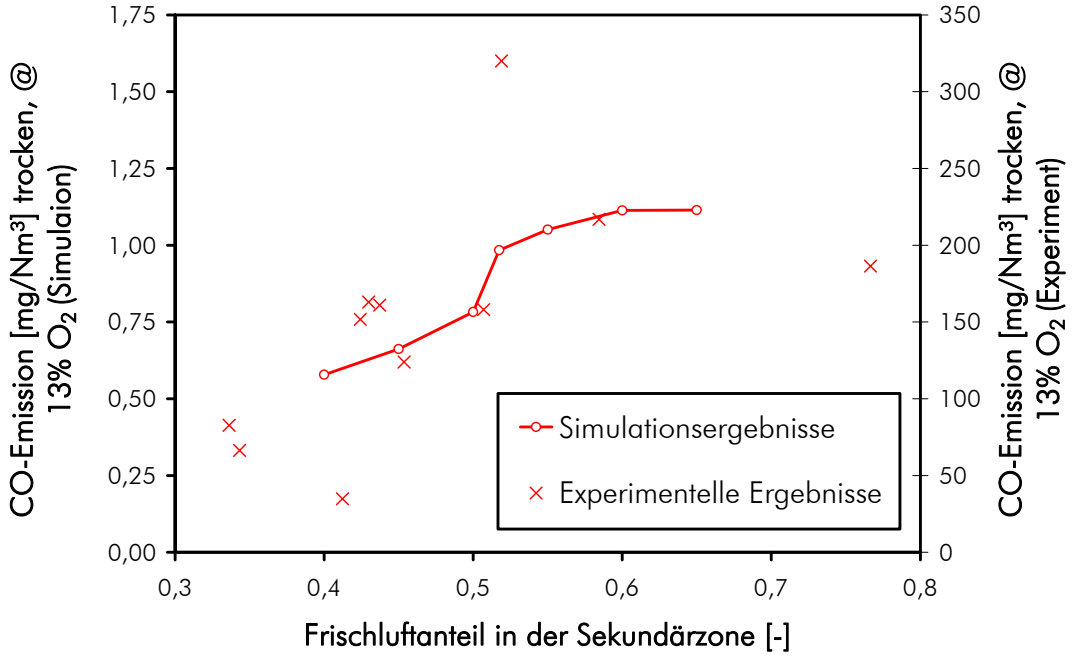


Abbildung 9-25: Auswirkung des Ausmaßes der Luftstufung auf die Kohlenmonoxid-Emissionen am Ofenaustritt bei konstantem globalen Luftüberschuss (unterschiedliche Skalierung für experimentelle und rechnerische Ergebnisse)

Die Auswertung der Auswirkung variierender Luftstufung auf die Kohlenmonoxid-Emissionen ist in Abbildung 9-25 dargestellt. Auch hier sind ausgewählte experimentelle Ergebnisse den rechnerischen Resultaten gegenübergestellt. Aus der Abbildung geht deutlich hervor, dass mit steigender Luftstufung (und damit stärker unterstöchiometrischem Betrieb der Primärzone) mit einem deutlichen Anstieg des CO-Gehaltes im Verbrennungsrauchgas zu rechnen ist. Wie bei den NO_x-Emissionen ist auch hier eine deutliche Streuung der gemessenen Werte zu verzeichnen, die Ausgleichsfunktion liefert aber eine sehr brauchbare Approximation. Der deutliche Unterschied zu den NOx-Emissionen ist an dieser Stelle, dass zwar der Trend in passabler Qualität wiedergegeben wird, die absolute Größenordnung der CO-Emissionen durch die Simulation aber nicht getroffen wird. Gemessene und berechnete Werte unterscheiden sich über den gesamten untersuchten Bereich relativ genau um einen Faktor 200. Es wird angenommen, dass diese Deviation aufgrund des implementierten Reaktionsmechanismus von CO zu CO_2 auftritt. Es ist bekannt, dass die Oxidationsreaktion von CO zu CO_2 als reversibel anzusehen ist, also auch die Rückreaktion von CO_2 zu CO berücksichtigt werden müsste (Howard et al., 1973; Costa et al., 2003). Diese Rückreaktion ist im implementierten Reaktionsmechanismus nicht enthalten und durch ihre Berücksichtigung würde natürlich der simulierte CO-Gehalt im Rauchgas ansteigen. Die Kinetiken beider Reaktionen sind unterschiedlich, sodass das Reaktionsgleichgewicht zwischen CO und CO_2 abhängig von der Temperatur und der globalen Gaszusammensetzung ist. Dass die auftretende Abweichung zwischen Simulations- und Messergebnissen konstant über den gesamten analysierten Bereich ist, ist deshalb wahrscheinlich nur zufällig. Dennoch sind die Vorhersagen der CFD-Simulation bezüglich des Trends der CO-Emissionen bei unterschiedlich ausgeprägter Luftstufung als relevant anzusehen. Im Zuge der Modellentwicklung für die vorliegende Ar-

beit wurde natürlich auch ein Reaktionsmechanismus getestet, der beide Reaktionen berücksichtigt, wobei die Reaktionskinetik der Reduktionsreaktion aus der Datenbank des CFD-Solvers entnommen wurde (FLUENT, 2005). Dieser Mechanismus verursachte im Gesamtmodell aber eine gravierende Instabilität, sodass Gastemperaturen und Zusammensetzungen während des Iterationsverlaufs stark zu schwanken begannen und schlussendlich Modelldivergenz auftrat. Welcher Teil des CO-CO_2-Reaktionsmechanismus genau zur Modellinstabilität führte, konnte nicht evaluiert werden, es bleibt daher ein wichtiger Punkt für nachfolgende Arbeiten, einen geeigneten und stabilen Reaktionsmechanismus zu implementieren, der das Reaktionsgleichgewicht zwischen CO-Oxidation und CO_2-Reduktion für die relevanten Betriebsbereiche in geeigneter Form abzubilden vermag.

Die Reduktion von Stickstoffoxiden bei stärkerer Luftstufung soll im Folgenden noch mit Contour-Plots näher beleuchtet werden. Abbildung 9-26 stellt den Gehalt an Stickstoffmonoxid als Molenbruch auf der Symmetrieebene des Verbrennungsapparates für drei unterschiedliche Luftstufungen dar. Die Grafiken zeigen sehr deutlich, wie der NO_x-Gehalt im Gas mit stärkerer Luftstufung abnimmt. Die höchsten Gehalte an NO_x sowie auch die größten Reaktionsraten für Oxidation und Reduktion sind in den heißen Bereichen der Brennstoffzonen sowie in den Flammenregionen zu finden.

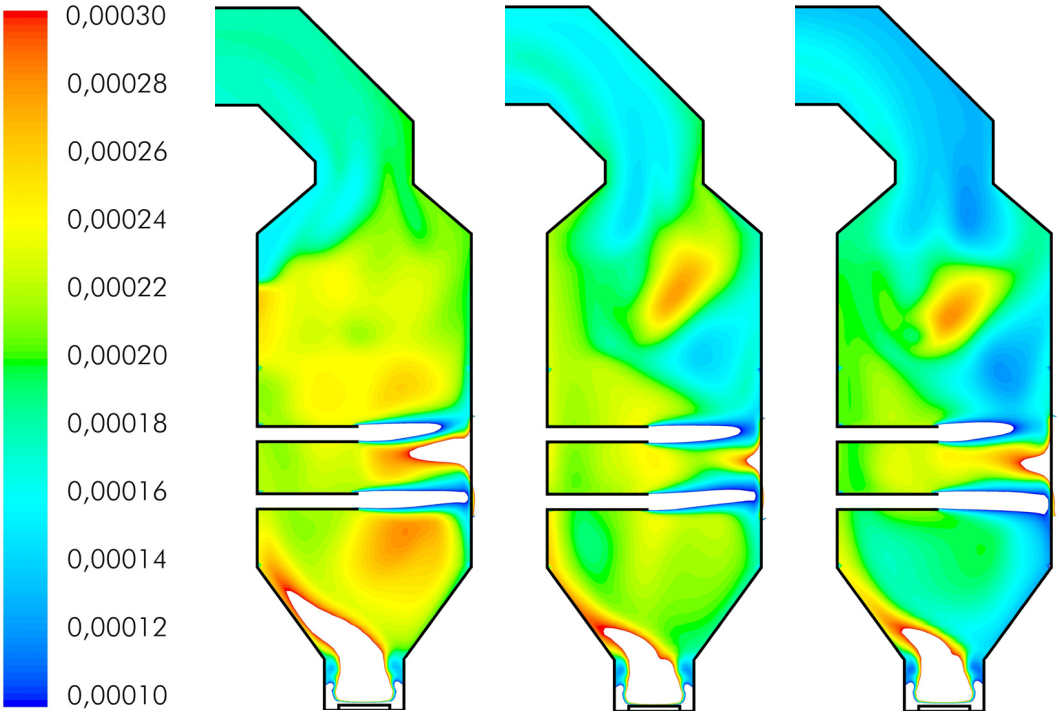


Abbildung 9-26: NO-Molenbruch (0,0001 – 0,0003) auf der Ofensymmetrieebene für drei unterschiedlich ausgeprägte primäre Luftstufungen (Frischluftanteil Sekundärzone: links: 0,4; mitte: 0,5174 - Standardbetriebszustand; rechts: 0,65)

Die beiden Grafiken für die höheren Frischluftanteile in Abbildung 9-26 lassen vermuten, dass in der Sekundärzone ein Hot-Spot der NO_x-Bildung, eventuell aufgrund der Sekundärluftzuführung, auftritt, welcher durch stärker gestufte Luftzuführung oder geometrische Adaptierungen zu verhindern wäre. Zur Auflösung dieser Frage sind in Abbildung 9-27 Isoflächen des NO-Gehalts in dreidimensionaler Form dargestellt, die nach dem Betrag der Gasgeschwindigkeit eingefärbt sind. Hier zeigt sich, dass kein isolierter Hot-Spot, sondern eine Strähne hohen NO_x-Gehalts aus der Feststoff-Nachverbrennungszone sowie von der Ballen-

oberfläche für diesen Effekt verantwortlich ist. Eine Änderung der Geometrie der Sekundärzone lässt deshalb hier keine Verbesserung erwarten, es wären stattdessen konstruktive Maßnahmen in der Primärzone zu treffen, die derartige Kurzschlussströmungen unterbinden können.

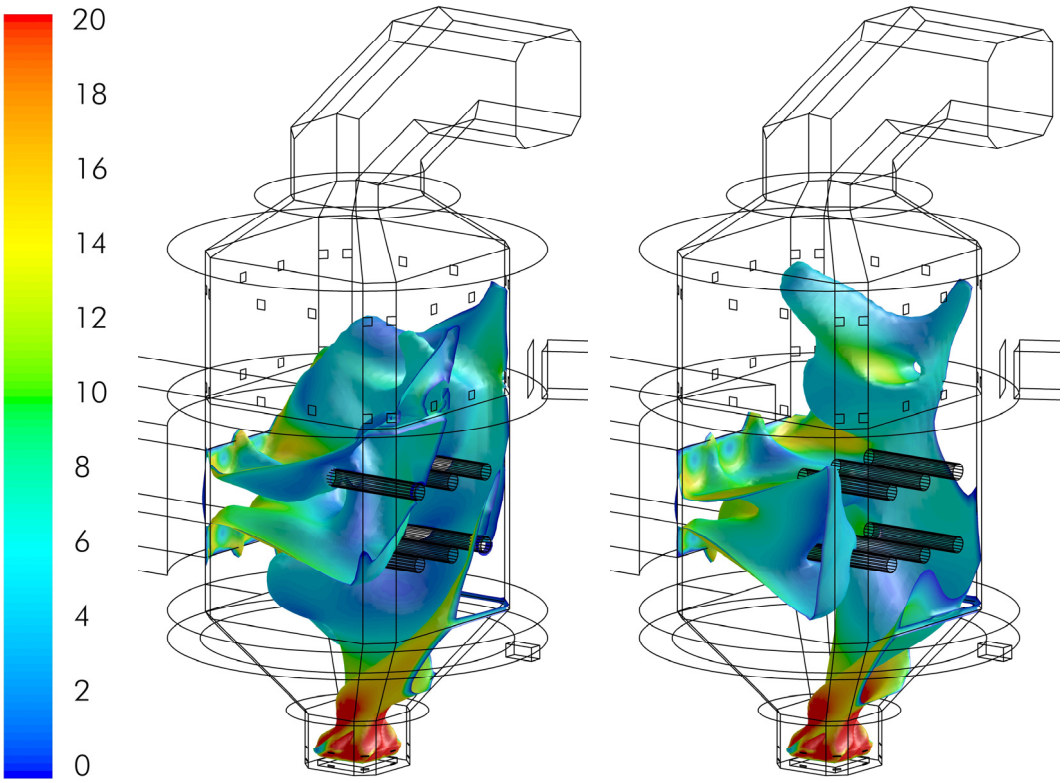


Abbildung 9-27: Fläche mit konstantem NO-Molenbruch (0,00027) eingefärbt nach dem Betrag der Gasgeschwindigkeit (0 – 20 m/s) für zwei unterschiedlich ausgeprägte primäre Luftstufungen (Frischluftanteil Sekundärzone: links: 0,4; mitte: 0,5174 - Standardbetriebszustand)

Soll nun der Grad der primären Luftstufung dahingehend optimiert werden, für CO- und NO_x das gleiche Emissionsniveau zu erreichen (der Emissionsgrenzwert ist für die betrachtete Anlagengröße für beide Schadstoffe gleich hoch), so ist eine geringfügig stärkere Luftstufung empfehlenswert (NO_x sinkt, CO steigt). Die Auswertung der experimentellen Untersuchungen zeigt, dass im gewählten Standardbetriebszustand der NO_x-Gehalt etwas höher als der CO-Gehalt ist (siehe Tabelle 4-2). Soll für beide Schadgase das gleiche Emissionsniveau von 169,8 mg/Nm^3 erreicht werden, so müsste nach der vorliegenden Analyse ein Frischluftanteil in der Sekundärzone von 0,555 (statt 0,5174) gewählt werden. Dieser Wert müsste vor der endgültigen Anwendung jedoch zunächst noch auf experimentellem Weg evaluiert werden.

9.3 Optimierung der Brennkammergeometrie: sekundäre Gasnachverbrennungszone

Als exemplarisches Beispiel für einen Optimierungsschritt der Geometrie der Brennkammer mit den Mitteln der CFD wird an dieser Stelle die Optimierung der sekundären Nachverbrennungszone dargestellt. Während der Durchführung der Verbrennungsversuche wurde deutlich, dass die Emissionsgrenzwerte hinsichtlich CO und NO_x zwar eingehalten werden können, hier aber dennoch Verbesserungspotential besteht.

Konkret sollte der CO-Ausbrand deutlich verbessert und sodann durch geringfügige Anpassung der Betriebsbedingungen unter Ausnutzung der *CO-NOx-Schere* auch die Stickstoffoxid-Emissionen reduziert werden. Als Startpunkt wurde in der Ausgangsgeometrie eine heiße Gassträhne oberhalb der Ballenfront identifiziert, die als Kurzschluss-Strömung mit geringer Verweilzeit in der Nachbrennzone interpretiert wurde. Durch eine teilweise Abdeckung des freien Strömungsquerschnittes in der Nachbrennzone sollte dieser Kurzschluss vermieden und die Gasströmung homogenisiert werden. Zur Verdeutlichung dieses Aspektes sind in Abbildung 9-28 sehr kurze Strömungspfadlinien masseloser Partikel auf der vertikalen Symmetrieebene des Verbrennungsapparates jeweils für die unveränderte sowie für die adaptierte Variante dargestellt. Die Pfadlinien sind nach der jeweiligen lokalen Gastemperatur eingefärbt. In der ursprünglichen Geometrie ist die heiße Gassträhne deutlich zu erkennen, während durch die Anordnung des eingehängten Bleches das Auftreten von Kurzschluss-Strömungen offenbar vermieden werden könnte. Außerdem könnte unterhalb des Bleches eine größere Region mit höherer Gastemperatur etabliert werden, die für einen verbesserten Ausbrand sorgen sollte. Eine genaue geometrische Darstellung der Form und Position des angedachten Einhangbleches ist der Abbildung 14-73 im Anhang zu entnehmen.

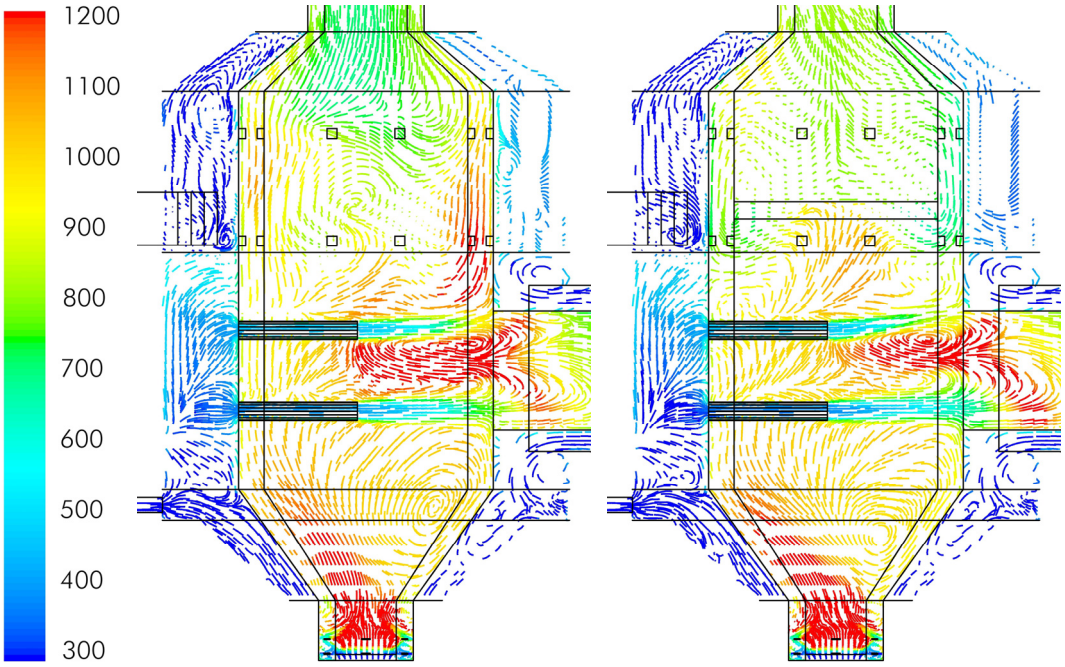


Abbildung 9-28: Strömungspfadlinien eingefärbt nach der Gastemperatur (300 – 1.200 °C) für die unveränderte Geometrie (links) und die adaptierte Geometrie mit Einhang in der Nachbrennzone (rechts)

Die Ergebnisse der mit dem vollen Verbrennungsmodell durchgeführten CFD-Simulationen zeigen im Gegensatz zur ursprünglichen Intention eine klare Verschlechterung der Apparateperformance. Abbildung 9-29 gibt einen Einblick in die Strömungsstruktur der beiden untersuchten Geometrien, wobei sofort die deutlich höhere Gasgeschwindigkeit seitlich und vor allem oberhalb des Einhangbleches ins Auge springt. Damit ist eine deutlich Reduktion der Gasverweilzeit in der sekundären Gasnachverbrennungszone zu erwarten. Eine weitere Verdeutlichung der Aussage kann durch Auswertung der Verweilzeitverteilungen für masselose Partikel innerhalb der Brennkammer erreicht werden.

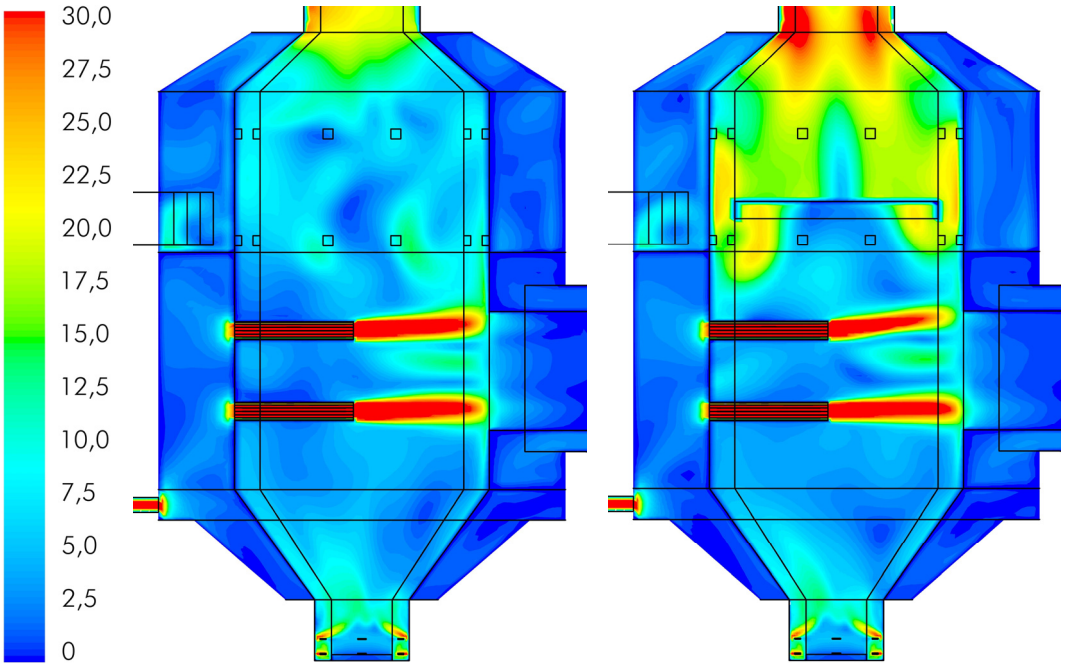


Abbildung 9-29: Contour-Plots des Betrages der Gasgeschwindigkeit (0 – 30 m/s) für die unveränderte Geometrie (links) und die adaptierte Geometrie mit Einhang in der Nachbrennzone (rechts)

Abbildung 9-30 zeigt diese Verweilzeitverteilungen für Partikel, die einerseits von der Ballenoberfläche und andererseits von der Rostbettoberfläche emittiert werden (jeweils verfolgt bis zum Heißgasaustritt der Brennkammer). Zusätzlich zur Verteilung der Verweilzeit ist jeweils auch die mittlere fluiddynamische Verweilzeit als strichlierte Gerade angedeutet, die aufgrund gleicher Volumenströme und gleicher Brennkammervolumina für die beiden untersuchten Geometrien natürlich gleich sein müssen. In Anbetracht der Eingangs erwähnten zeitlichen Fluktuationen des Strömungsfeldes ist die Übereinstimmung der mittleren fluiddynamischen Verweilzeiten sehr gut.

Die Auswertung der Verweilzeitverteilungen macht deutlich, dass bei der adaptierten Brennkammer Pfadlinien mit kurzer Verweilzeit und damit schlechterem Ausbrand häufiger und Pfadlinien mit längerer Verweilzeit deutlich seltener werden. Da der Zeitverlauf der Reaktion aufgrund der Reaktionskinetik nichtlinear ist, haben die kurzen Verweilzeiten deutlich größeren Einfluss als die langen Verweilzeiten, sodass der Ausbrand in Summe schlechter werden muss. Die genaue Auswertung des CO-Gehaltes am Ausgang der Brennkammer ergibt für die mittels Einhangblech adaptierte Geometrie folglich eine mehr als fünffach höhere Emissionsbelastung. Zusätzlich macht sich das Einhangblech durch einen 2,5-fach höheren Druckverlust bemerkbar (siehe Abbildung 14-74 im Anhang), der zu einem höheren

Energieverbrauch des Saugzuggebläses führen würde. Diese Geometrieadaptierung kann deshalb zur Reduktion der Emissionsbelastung nicht empfohlen werden; stattdessen ist ein alternativer Vorschlag zu entwickeln.

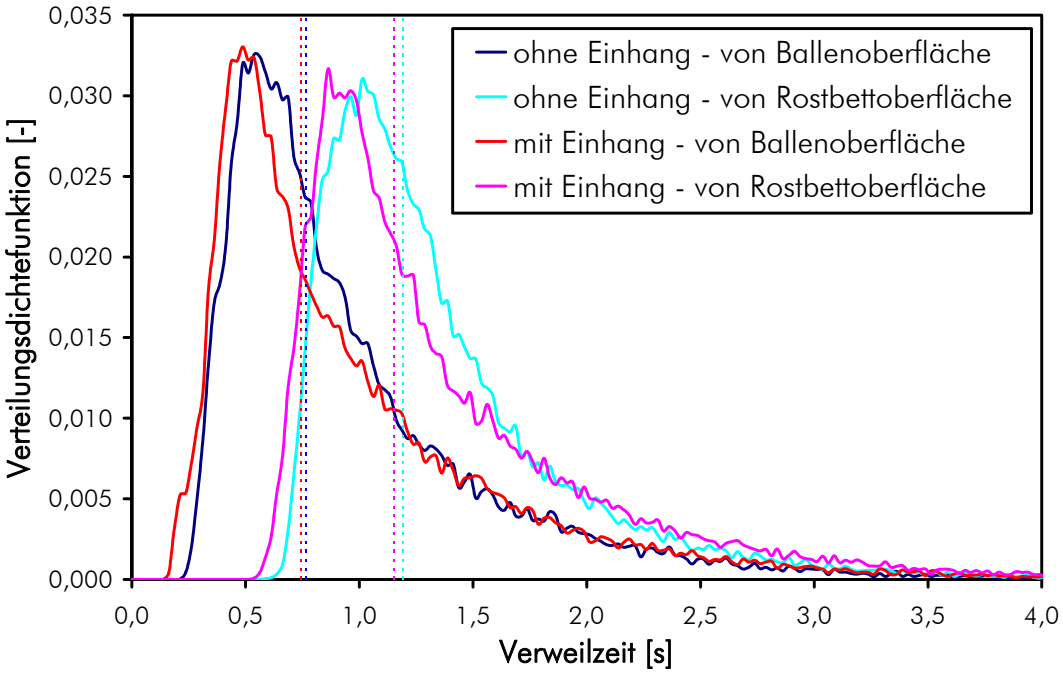


Abbildung 9-30: Verweilzeitverteilung masseloser Partikel emittiert von der Ballenoberfläche sowie der Rostbettoberfläche für die unveränderte Geometrie und die adaptierte Geometrie mit Einhang in der Nachbrennzone

Das größte Verbesserungspotential zur Reduktion der relevanten gasförmigen Schadstoffemissionen liegt in der Länge der sekundären Nachbrennzone. Die aktuelle Geometrie weist eine geometrische Länge von 1,3 m auf, was im Standardbetriebszustand (7,18 Bm^3/s bei 756 °C) eine mittlere fluiddynamische Verweilzeit von etwa 0,53 Sekunden bedingt. Es ist zu erwarten, dass durch eine Verlängerung dieser Zone eine entsprechende Reduktion der CO-Emissionen erzielt werden kann. Zur Abschätzung der erforderlichen Längensteigerung wurden aus Zeitgründen nicht zusätzliche CFD-Simulationen an entsprechend größeren Geometrien durchgeführt, sondern es wurde ein vereinfachter Ansatz gewählt. Zunächst wurde die Verweilzeitverteilung masseloser Partikel in der sekundären Nachverbrennungszone für den Standardbetriebszustand ermittelt (konkret vom Eingang bis zum Heißgas-Austritt) und durch eine Schaltung von Idealreaktoren approximiert. Die kleinste Fehlerquadratsumme weist eine Rührkesselkaskade (n-CSTR) mit 11 volumengleichen Reaktoren mit einer fluiddynamischen Einzelverweilzeit von 0,049 Sekunden auf. Die Verweilzeitspektren der realen Nachbrennzone sowie der idealisierten Reaktorschaltung sind in Abbildung 14-75 im Anhang dargestellt. Für die idealen Reaktoren lässt sich der CO-Ausbrand, an dieser Stelle definiert als Molenbruchverhältnis für CO zwischen Eintritt und Austritt der Gasnachverbrennungszone, mit einer sehr einfachen Gleichung ermitteln (Hofbauer, 1999). Hierfür ist neben der Stufenzahl und der fluiddynamischen Einzelverweilzeit lediglich die beschreibende Kinetik der CO-Oxidation (siehe Tabelle 6-2) einzusetzen. Unter der Annahme, dass das Zeitverhalten der Nachverbrennungszone auch für geringfügig andere Volumenströme mit einer 11-stufigen Rührkesselkaskade approximiert werden kann, kann der CO-Ausbrand unter Anwendung der idealen Gasgleichung auch für andere Betriebsvolumenströme und andere

Gastemperaturen ermittelt werden. Geringere Gastemperaturen bedingen dabei einerseits eine langsamere Kinetik und andererseits aufgrund des geringeren Betriebsvolumenstroms eine etwas längere mittlere Verweilzeit. Wird weiters angenommen, dass auch das Zeitverhalten einer eindimensional verlängerten Gasnachverbrennungszone mit der 11-stufigen Rührkesselkaskade approximiert werden kann (wobei die fluiddynamische Einzelverweilzeit linear mit der Länge hochskaliert wird), so kann der CO-Ausbrandgrad auch für verschiedene längere Sekundärzonen ermittelt werden. Dieser Ansatz ist zwar approximativ, für wenig weitreichende Extrapolationen aber durchaus aussagekräftig und sehr effizient. Grafisch kann die Methode in einem Arbeitsdiagramm dargestellt werden, in dem das Molenbruchverhältnis zwischen Eintritt und Austritt der Nachverbrennungszone für verschiedene Gastemperaturen gegen die mittlere Verweilzeit aufgetragen wird. Diese Darstellung ist Abbildung 9-31 zu entnehmen, wobei neben der Approximation der Sekundärzone als 11-stufige Rührkesselkaskade auch der noch einfachere Fall eines idealen Rohrreaktors (i-PFR) mit entsprechender Verweilzeit berücksichtigt ist.

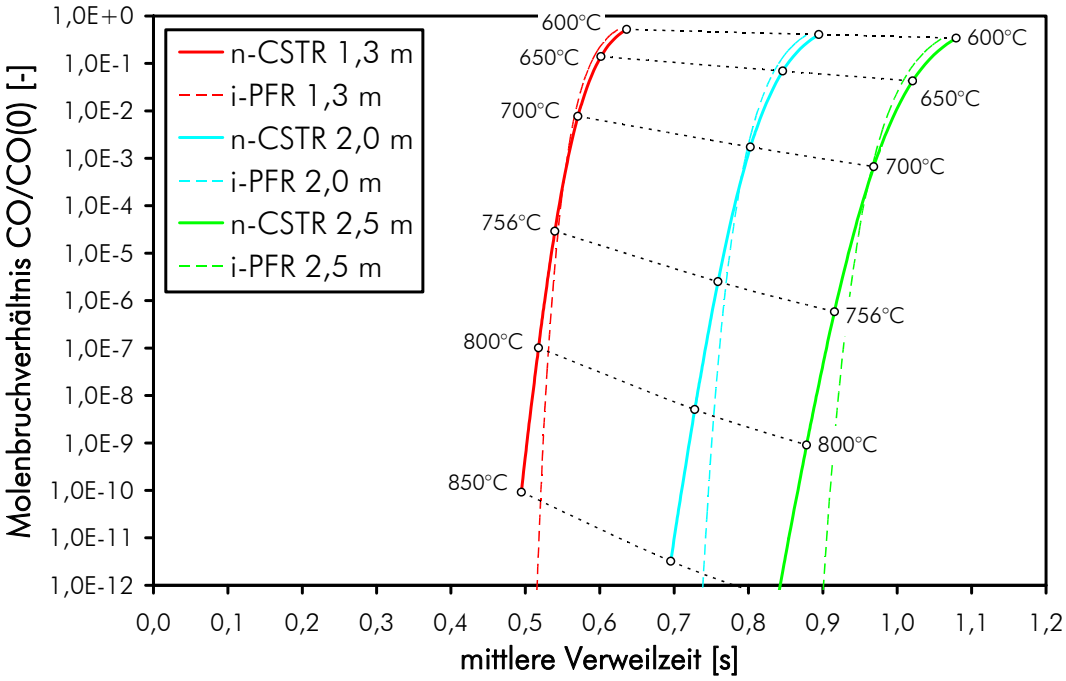


Abbildung 9-31: Arbeitsdiagramm für die sekundäre Verbrennungszone (Molenbruchverhältnis zwischen Eingang und Ausgang bei unterschiedlichen Temperaturen und Verweilzeiten)

Die Grafik zeigt, dass ausgehend vom Auslegungszustand (756 °C, Verweilzeit 0,53 s, Zonenlänge 1,3 m) bei einer Verlängerung der Gasnachverbrennungszone auf 2,0 m eine Reduktion der CO-Emissionen um den Faktor 10 zu erreichen ist. Bei einer Verlängerung auf 2,5 m sogar um den Faktor 50. Durch eine CFD-Simulation an einer entsprechend adaptierten Ofengeometrie kann dieses Ergebnis nachgewiesen werden, was allerdings nicht mehr im Fokus der vorliegenden Arbeit gesehen wird. Die gewonnenen Erkenntnisse aus der dargestellten Analyse flossen direkt in den Entwurf der 3. Brennkammergeneration (siehe Abbildung 4-3) ein.

10 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Die Substitution fossiler Energieträger durch nachhaltige alternative Energieträger zur Deckung des steigenden weltweiten Primärenergiebedarfs ist vor dem Hintergrund des globalen Klimawandels sowie der begrenzten Verfügbarkeit fossiler Ressourcen eine der größten gesellschaftlichen Herausforderungen unserer Zeit. Neben Wind- und Sonnenenergie spielt bei der kommenden Energiewende auch Biomasse eine tragende Rolle. Dabei kommen heute vermehrt auch alternative biogene Brennstoffe, zum Beispiel agrarische Nebenprodukte, zum Einsatz. Trotz zahlreicher Umwandlungstechnologien für die energetische Nutzung von Biomasse bleibt die Verbrennung nach modernen Standards die wichtigste Prozessroute. Die Entwicklung und Optimierung neuer Verfahren in der Prozess- und Energietechnik sind aufgrund der hohen Standards häufig sehr zeit- und kostenintensiv. Moderne Simulationswerkzeuge wie die Prozesssimulation und die numerische Strömungssimulation (CFD) können in dieser Phase wertvolle Unterstützung und Beschleunigungsmaßnahmen sein. Hierfür sind aber physikalisch fundierte und verlässliche Modelle mit hohem Detaillierungsgrad erforderlich. Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Entwicklung von Simulationstechnologie anhand eines innovativen Verbrennungssystems für halmgutartige ballenförmige Biomasse.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Entwicklung von Modellansätzen und Lösungsalgorithmen zur Beschreibung heterogener Biomasseverbrennung sowie deren Anwendung bei der Neuentwicklung und Optimierung eines innovativen Verbrennungskonzepts für ballenförmige biogene Brennstoffe. Computersimulation wird hierbei in zwei unterschiedlichen Ausprägungen verwendet: i.) als global bilanzierte Prozesssimulation mit eindimensional aufgelöster kinetischer Gasverbrennung und ii.) als dreidimensional ortsaufgelöste numerische Strömungssimulation einer gasförmigen sowie einer festen Phase. Es wird ausgeführt, wie aus Eckdaten des Prozesses und relevanten Eigenschaften des jeweiligen Brennstoffes (aus Literatur oder eigenen Experimenten) physikalisch fundierte Modellbeschreibungen entwickelt und deren Anwendbarkeit validiert werden können. Es wird eine allgemeingültige Vorgangsweise skizziert, die für zahlreiche ähnliche Problemstellungen einen vielversprechenden Lösungsweg darstellt. In der vorliegenden Anwendung wird mithilfe der entwickelten Werkzeuge die Basisauslegung des Verbrennungsprozesses sowie die Apparategeometrie analysiert und Schwachstellen aufgezeigt. Dabei zeigt sich, dass speziell die Auswertung experimentell kaum zugänglicher Parameter durch die Simulation zu einem tiefen Erkenntnisgewinn der zahlreichen Aspekte des Verbrennungsvorganges führt. Darauf aufbauend werden Verbesserungsmaßnahmen diskutiert und mittels Variationsanalyse zwei ausgewählte Optimierungsmaßnahmen exemplarisch untersucht. An jeder Stelle dieses Prozesses wird versucht, die Qualität der Simulationsergebnisse durch Vergleich mit experimentellen Resultaten von einer Pilotanlage mit 2 MW thermischer Leistung zu quantifizieren. Dabei kann

gezeigt werden, dass die Vorhersagequalität der entwickelten Modellansätze für eine verlässliche Beschreibung und Optimierung von Apparat und Prozess, zumindest im untersuchten Parameterbereich, geeignet ist.

Zu Beginn der Arbeit werden zunächst mögliche biogene Brennstoffe sowie die der Arbeit zugrunde liegende Verbrennungstechnologie beleuchtet. Dabei wird auf die speziellen Anforderungen von Biomasse an den Feuerungsprozess, die sich aus Zusammensetzung und physikalischen Rahmenbedingungen ergeben, eingegangen. Entsprechend weist der in dieser Arbeit untersuchte Verbrennungsprozess eine gestufte Verbrennung sowie extensive Rauchgasrezirkulation auf. In drei getrennten Zonen der weitgehend ausmauerungslosen Brennkammer werden Brennstofftrocknung und Volatilisation, sekundäre Gasnachverbrennung sowie finaler Rostausbrand realisiert. Die Zielsetzungen und Vorteile des entwickelten Konzepts werden diskutiert und mit dem Stand der Technik verglichen. Durch den langzeitigen experimentellen Versuchsbetrieb an einer Pilotanlage mit einer thermischen Leistung von etwa 2 MW wurde umfangreiches Datenmaterial akquiriert, welches zur Entwicklung, Parametrierung und Validierung der implementierten Modellansätze herangezogen wurde.

In der ersten Stufe der Modellierungs- und Simulationsarbeiten wird ein Prozesssimulationskonzept implementiert, welches auf Verbrennungsrechnung und Globalbilanzierung des Verbrennungsapparates beruht. Da zumindest eine Verbrennungszone im Apparat mit lokalem Sauerstoffmangel betrieben werden muss (primäre Volatilisierungszone), wird das Modell in diesem Abschnitt gegenüber dem üblichen Stand der Technik um eine eindimensional (zeitlich) aufgelöste Gasphasenreaktion brennbarer Gaskomponenten erweitert. Dadurch sind eine Abschätzung der Gaszusammensetzung bei unvollständiger Verbrennung und die Ermittlung einer lokalen Luftverhältniszahl möglich. Zusätzlich wird ein einfaches, auf experimentellen Daten basierendes Modell zur Beschreibung der Stickstoffoxid-Emissionen aus dem Brennstoff-Stickstoff erläutert. Im Anschluss wird die Prozesssimulation zur Analyse des Standardbetriebszustandes sowie eines möglichen Hochfahr-Szenarios verwendet; ein komplexes Anlagenfließbild zeigt alle Stoff- und Energieströme im Prozess. Schließlich wird eine ausgedehnte Parameterstudie durchgeführt, deren Ziel die Bewertung des Einflusses verschiedener Variablen auf den Gesamtprozess sowie die Darstellung der Lage des gewählten Betriebszustandes in einem breiteren Bereich ist. Damit ist das Basic Engineering des Verbrennungsprozesses für den Auslegungszustand komplett durchführbar und auch eine mögliche Anfahrprozedur für den realen Anlagenstart dargestellt. Weiters wird gezeigt, wie durch die durchgeführten Parametervariationen wertvolle Erkenntnisse für die Anlagenautomatisierung und die Parametrierung schneller PID-Regler gewonnen werden können.

Bereits für sich ermöglichen die erhaltenen Ergebnisse damit einen konkreten Einblick in das Verbrennungsverhalten und die grundlegende Auslegung des Prozesses. Darüber hinaus bilden diese Ergebnisse aber eine wesentliche Voraussetzung für die Durchführung numerischer Strömungssimulationen. Da mit den Mitteln der CFD lediglich der Verbrennungsapparat analysiert wird, ist die Vorgabe von Volumenstrom, Temperatur und Zusammensetzung der an den Schnittstellen eintretenden Gasströme erforderlich. Diese Angaben können direkt aus der Globalbilanzierung erhalten werden.

Für die numerische Strömungssimulation wurde zunächst ein kommerziell verfügbarer CFD-Solver gewählt. Dieser Solver verfügt bereits über ausreichende Kapazitäten zur hochwertigen Simulation der Gasphase (Bilanzierung von Masse, Impuls und Energie, Turbulenzmodellierung, homogene Gasphasenreaktionen) sowie leistungsfähige Ansätze zur Modellie-

rung von Strahlung und Mehrphasenströmungen. Aufgrund unzureichender Funktionalität dieses Solvers in Hinblick auf die Beschreibung der heterogenen Biomasseverbrennung war jedoch in diesem Bereich eine umfangreiche Modellerweiterung über externe Subroutinen erforderlich. Dieser Teil ist der eigentliche Kern der vorliegenden Arbeit. Es wird gezeigt, wie die Modellierung der heterogenen Reaktionsschritte Trocknung, Volatilisierung und Ausbrand der residuellen Koksfraktion basierend auf thermogravimetrischen Untersuchungen des eingesetzten Brennstoffes abgewickelt werden kann. Weiters wird eine externe Simulationsumgebung erstellt, mittels derer eine dreidimensional ortsaufgelöste Modellierung der festen Brennstoffphase, der ablaufenden Verbrennungsvorgänge sowie der Interaktionsterme für Stoff- und Energieaustausch mit der Gasphase durchgeführt werden kann. Durch iteratives Zusammenspiel des kommerziellen Solvers und des externen Feststoff-Solvers kann eine geschlossene Simulation des komplexen Mehrphasen-Reaktionssystems realisiert werden. Die Anwendung auf die vorliegende Verbrennungstechnologie erfordert die Verwendung von Eintrittsrandbedingungen, die aus den Ergebnissen der Globalbilanzierung abgeleitet werden können. Die ortsaufgelöste numerische Simulation eröffnet dabei wertvolle Einblicke zu messtechnisch nicht zugänglichen Vorgängen und Parametern, die zu einem tiefergehenden Verständnis für die Verbrennungstechnologie führen. Wo immer möglich werden die Ergebnisse der Simulationsarbeiten mit experimentellen Daten verglichen. Dieser Vergleich wird zur Validierung und Parametrierung der verwendeten Modelle herangezogen. Da aber speziell die numerische Strömungssimulation Ergebnisse liefern kann, die in realen Anlagen industrieller Größenordnung mit vertretbaren Mitteln nicht erfassbar sind, bleiben zur Validierung oftmals nur globale Parameter oder deutlich vereinfachte Versuchsaufbauten.

Da für das im Rahmen der vorliegenden Arbeit untersuchte Verbrennungskonzept die Beschreibung turbulenter Effekte von ausschlaggebender Wichtigkeit ist, wird am Rande dieser Arbeit eine umfangreiche Untersuchung hierzu durchgeführt. Dabei werden die Strömungs- und Turbulenzfelder eines geraden turbulenten Freistrahls sowie eines leicht verdrallten turbulenten Freistrahls mit Prallplatte numerisch und experimentell untersucht. Diese beiden Testfälle wurden jeweils mit allen im kommerziellen CFD-Solver verfügbaren Turbulenzmodellen simuliert und die Ergebnisse mit Literaturdaten sowie mit eigenen Messergebnissen verglichen. Aus diesen Arbeiten lässt sich das für die konkrete Problemstellung geeignetste Turbulenzmodell ableiten, welches in weiterer Folge auch für die komplexe Simulation des Verbrennungsapparates herangezogen wird.

Die Ergebnisse der CFD-Simulationen zeigen sehr deutlich einige Schwachstellen im Detail Engineering des Verbrennungsapparates und geben auch Hinweise für potentielle Verbesserungsmaßnahmen. Es stellt sich heraus, dass aufgrund der langsamen Ligninthermolyse eine vollständige Volatilisierung in der Primärzone nicht zu erreichen ist und die Rostzone mit erheblichen Anteilen flüchtiger Brennstoffkomponenten zurechtkommen muss. Die Auslegung der Rostzone ist darauf nicht ausgerichtet, sodass es zu einem Rückstau festen Brennstoffs auf dem Nachverbrennungsrost sowie zu einer Verschlechterung des Ausbrandgrades der ausgetragenen Aschefraktion (flüchtige und brennbarer Koks) kommt. Im Bereich der sekundären Rostluftdosierung kann schwache Sauerstoffeinmischung in die brennbaren Gase detektiert werden, die in weiterer Folge lokal zu hohen Konzentrationen von CO und VOCs führt. Eine Anpassung der Volumenströme für primäre und sekundäre Rostluft wird vorgeschlagen. Eine weitere große Schwachstelle bei der aktuellen Brennkammergeometrie ist die nichtideale Abdeckung der Ballenoberfläche durch die Primärstrahlen. Einerseits findet eine deutliche Ablenkung der Freistrahlen speziell der oberen Düsenreihe statt, andererseits bilden die

sechs Düsen klar separierte hot spots hinsichtlich Gasgeschwindigkeit und Sauerstoffgehalt auf der Ballenoberfläche. Die auftretenden großen Gradienten aller wesentlichen Einflussparameter führen zu einem stark ungleichmäßigen Ballenabbrand und damit zu einer schlechten reaktionstechnischen Ausnutzung des heißen Brennkammervolumens. Ausgeprägte lokale Temperaturspitzen in Primärzone und auf dem Nachverbrennungsrost führen zur Ascheschmelze und Verschlackung. Die Analyse des Strömungsfelds liefert weiters Hinweise auf eine Kurzschlussströmung zwischen Ballenoberfläche und Sekundärzone, die aufgrund sehr geringer Verweilzeit zu erhöhter Emission unverbrannten gasförmigen Kohlenstoffs führt. Die Strömungsform innerhalb der Sekundärzone weicht außerdem nennenswert von der idealen Pfropfenströmung ab, sodass auch hier von einer mangelhaften Ausnutzung des vorhandenen heißen Ofenvolumens ausgegangen werden kann. Sowohl für die Sekundärzone als auch für die sekundäre Rostlufteindüsung wird eine Einschnürung („Wespentaille") zur Verbesserung der Sauerstoffeinmischung vorgeschlagen. Schließlich wurde noch eine ungleichmäßige Beaufschlagung der Sekundärluftdüsen festgestellt, die sich auf die asymmetrische Anströmung im Windmantel zurückführen lässt. Abschließend liefert die Auswertung der Oberflächentemperaturen der festen Brennkammerwände wertvolle Informationen zur Materialauswahl und zur Detektion thermischer Problemstellen.

In Summe zeigt die Arbeit, dass mit den Mitteln der Simulation Werkzeuge zur Verfügung stehen, die die Analyse, Auslegung und Optimierung von innovativen Prozessen und verfahrenstechnischen Apparaten in beeindruckender Weise unterstützen und erweitern können. Die IngenieurIn erhält Einblick in Vorgänge und Parameter, die messtechnisch nicht zugänglich sind und zu einem tieferen Verständnis einer Technologie führen können. Grundlage hierfür ist allerdings der Einsatz leistungsfähiger Modellansätze und flexibler Simulationsumgebungen. Eine Reihe solcher Ansätze, die für eine aussagekräftige Simulation eines heterogenen Biomasseverbrennungsprozesses herangezogen werden können, wird in der vorliegenden Arbeit vorgestellt. Verbesserungs- und Optimierungspotentiale am Prozess und am Apparat werden aufgezeigt und erörtert. Die entwickelten Modelle und die implementierten Systeme sind hinsichtlich anderer Brennstoffe und anderer Prozessbedingungen flexibel gestaltet und erlauben eine Anpassung an andere prozesstechnische Gegebenheiten.

Die Simulation kann damit bei der Entwicklung innovativer Verfahren und Prozesse maßgebliche Beiträge leisten. Zeit- und kostenintensive experimentelle Untersuchungen in der Entwicklungsphase können reduziert und auf das Wesentliche fokussiert werden. Damit erschließt sich ein Potential für kürzere Entwicklungszeit, reduzierter Entwicklungskosten und tiefergehend optimierte Verfahren. Dem ist natürlich entgegenzuhalten, dass die in der vorliegenden Arbeit dargestellten Simulationsprozeduren rechnerintensiv und mit heutiger Computertechnologie auch zeitaufwändig sind. Die rasante Entwicklung im Bereich rechnergestützter Datenverarbeitung stellt jedoch immer höhere Kapazitäten für Simulationen bereit, sodass hochwertige Simulationen komplexer Apparate und Prozesse immer mehr in den Fokus der Ingenieurswissenschaften treten. Auch die Durchführung hochaufgelöster transienter Untersuchungen mit komplexen Modellen wird in absehbarer Zeit in der verfahrenstechnischen Ingenieurspraxis angekommen sein.

11 Ausblick auf zukünftige Arbeiten

Obwohl die durch die vorliegende Arbeit dokumentierte Forschungstätigkeit relativ umfangreich war und die Dissertation entsprechend voluminös ist, bleibt dennoch genug Potential für zukünftige Verbesserungsmaßnahmen. Im Wesentlichen sind hierunter Modellerweiterungen und Validierungsmaßnahmen zu verstehen, die die Qualität und das Vertrauen in die zu erhaltenden Ergebnisse maßgeblich steigern können. Die wesentlichsten dieser Punkte sollen im Folgenden kurz angesprochen werden. Dem Entwickler sei aber dringend empfohlen, den möglichen Erkenntnisgewinn durch weiterführende Modellierung stets ins Verhältnis zu den Unsicherheiten und Variabilitäten eines heterogenen, in seiner Gesamtheit zeitlich stark schwankenden Brennstoffs zu setzen.

Generell ist anzumerken, dass aufgrund der fehlenden experimentellen Ausstattung die Analyse mehrerer, einschlägiger Literatur entnommener, Modellalgorithmen in der vorliegenden Arbeit nicht im Detail sondern nur global geschehen konnte. Die Tatsache, dass Prozessgrößen an den Apparateschnittstellen sowie das qualitative Brennkammerverhalten der Realanlage sehr gut mit den entwickelten Simulationswerkzeugen abgebildet werden können, lässt nicht den Schluss auf eine generelle Anwendbarkeit aller Modellansätze zu. Einzelne Modelle der vorliegenden Arbeit bedürfen also einer weiterführenden Analyse. Um einen belastbaren Nachweis der Anwendbarkeit dieser Literaturansätze zu führen, müssten spezielle Experimente durchgeführt werden, die eine Erfassung einzelner physikalischer Aspekte der komplexen Biomasseverbrennung ohne Überlagerungen ermöglichen. Die erforderlichen Versuchsaufbauten sind teilweise relativ aufwändig, können aber in den meisten Fällen der Literatur entnommen werden. Schritt für Schritt könnten auf diese Weise alle Modellansätze untersucht und deren Validität für den konkreten Anwendungsfall nachgewiesen, Modellparameter eventuell geschärft werden. Durch diese Arbeiten könnte die Zuverlässigkeit der Simulation auch im Extrapolationsfall deutlich gesteigert werden.

Im Rahmen der Globalbilanzierung ist eine Detaillierung des Ausgasungsmodells für die Dreizonenformulierung erforderlich. Die Zusammensetzung der freigesetzten gasförmigen Ausgasungsprodukte sowie deren individuelle Freisetzungsraten sind Abhängig von Betriebsbedingungen wie Luftüberschuss, Gas- und Partikeltemperatur sowie zusätzlich noch eine Funktion des Volatilisierungsgrades. Die Implementierung eines entsprechenden Modells würde zu einem deutlichen Informationszuwachs und einer genaueren Verbrennungsrechnung führen (dies gilt analog auch für das Verbrennungsmodell in der numerischen Strömungssimulation). Zur Erfassung dieser Effekte sind umfangreiche TGA-DSC-Messungen mit integrierter Gasabsaugung und Online-Gasanalyse erforderlich. Parallel hierzu ist auch das Modell der NO_x-Bildung in der Globalbilanzierung hinsichtlich einer Abhängigkeit vom loka-

len Luftüberschuss (momentan nur globaler Luftüberschuss) und von Gas- und Partikeltemperaturen zu erweitern. Weiters ist auch die Berechnung der Enthalpieströme, die momentan auf der Integration eines stückweise linearen Verlaufes beruht, dadurch zu verbessern, dass eine polynomische Beschreibung der Temperaturfunktionen der spezifischen Wärmekapazitäten der einzelnen Gaskomponenten erarbeitet wird. Eine Abschätzung des Verbesserungspotentials durch diese Maßnahme wird beispielsweise bei Kerschbaum et al. (Kerschbaum et al., 2004) gegeben. Bei der Einführung eines polynomischen Verlaufs ist aber speziell auf den Gültigkeitsbereich zu achten und eine untere und obere Temperaturgrenze für die Modellergebnisse zu implementieren, da ansonsten schwerwiegende Modellinstabilitäten und falsche Ergebnisse zu erwarten sind.

Im Rahmen der numerischen Strömungssimulation wäre zunächst eine Fortführung der Analyse von Freistrahlen und Drallstrahlen auf wesentlich größeren Simulationsdomänen wünschenswert. Speziell das Reynolds-Stress-Modell für die Turbulenzmodellierung scheint durch zu nahe Domänenbegrenzungen negativ beeinflusst zu werden. Wie gezeigt werden konnte, werden die in dieser Arbeit interessierenden Strahlbereiche auch auf den verwendeten kleineren Gittern korrekt abgebildet, für eine genaue Analyse des Strahles auf seiner „gesamten" Lauflänge ist aber ein größeres Simulationsgebiet erforderlich.

Erwartungsgemäß ist das größte Verbesserungspotential aber im heterogenen Verbrennungsmodell für die CFD-Applikation zu sehen. Hier wäre wie bereits erwähnt eine genauere Aufklärung des Einflusses von Luftüberschuss, Temperatur, Verweilzeit, Heizrate und dergleichen auf das Trocknungs-, Volatilisierungs- und Koksabbrandverhalten erforderlich. Vertiefende TGA-DSC-Untersuchungen zur Abschätzung der Reaktionsordnungen der Koksoxidation hinsichtlich Sauerstoff und Restkoks aber auch zur Bestimmung der Arrhenius-Parameter sowie der thermischen Koksdeaktivierung sind hierbei unumgänglich. Hier ist herauszuarbeiten, ob ein einfaches Potenzgesetz mit Ordnungen ungleich eins ausreichend ist, oder ob höhere Funktionen zur Beschreibung des Reaktionsverlaufes erforderlich sind. Die Literatur ist hier, wohl aufgrund der Vielzahl untersuchter Biomassen, relativ unschlüssig. Auch der Einfluss von Porosität und spezifischer Oberfläche auf die heterogenen Reaktionsschritte sowie deren Veränderungen mit dem Konversionsgrad sollten tiefergehend untersucht werden. Weiters kann die Auswertung von DSC-Ergebnissen zur genaueren Bestimmung von Umwandlungsenthalpien (v. a. Volatilisierungsenthalpie) herangezogen werden. Schlussendlich wäre die Durchführung von Experimenten an einer Makro-TGA-Apparatur zweckmäßig, womit das komplexe Wechselspiel aus Stoffübergang und chemischer Reaktion anhand deutlich größerer Probemengen sehr „realitätsnah" nachempfunden werden könnte. Wichtig wäre hier speziell die Aussage, bei welchen Bedingungen eine kinetikdominierte Reaktion vorliegt und wann Wärme- und Stoffübergangseffekte dominant werden. Die vorliegende Arbeit zeigt, dass die Betriebsbedingungen des untersuchten Verbrennungsprozesses unter Verwendung der Biot-Zahl in einem Übergangsgebiet zwischen thermisch dünnen und thermisch dicken Regime liegen. Es ist also damit zu rechnen, dass auch für die vorliegende Arbeit Temperaturgradienten in den Feststoffpartikel von gewisser Bedeutung sind. Verlässt man die Annahme eines homogenen Zustandes der einzelnen Feststoffpartikel, so können zahlreiche zusätzliche Effekte abgebildet und Details des Verbrennungsvorgangs aufgelöst werden, der erforderliche Rechenaufwand steigt damit aber beträchtlich. Die Modellierung der Verbrennung thermisch dicker Partikel könnte für die verschiedenen Regime mit dem bekannten *shrinking-core*-Ansatz durchgeführt werden. In diesem Zusammenhang ist auch zu prüfen, ob ein nennenswerter Anteil der Feststoffverbrennung während des fluiddynamischen Transports

der Staubfraktion zu beobachten ist. Wenn hier ein Einfluss auf das Betriebsverhalten des Gesamtapparates zu erwarten ist, so sind einerseits ein Modell der Staubfreisetzung aus den Brennstoff-Schüttschichten und andererseits ein heterogenes Verbrennungsmodell für die disperse Staubfraktion zu entwickeln. Hier sind zur Unterstützung Arbeiten aus der Literatur verwendbar, die auch eine qualitativ hochwertige Vorhersage der Präzipitation und Agglomeration von Staub nachweisen konnten (Kær, 2004a; Kær et al., 2004).

Auch das NO_x-Modell für die numerische Strömungssimulation kann deutlich leistungsfähiger gemacht werden, wenn das betriebsparameterabhängige Ausgasungsverhalten der einzelnen Vorläufersubstanzen analysiert und modelliert werden kann. Zusätzlich sollten die aus der Literatur bekannten Phänomene des NO_x-Reburning und der NO_x-Reduktion an fester Koksoberfläche reaktionstechnisch in das Modell integriert werden. Doch nicht nur die heterogenen sondern auch die homogenen Gasphasenreaktionsmechanismen können verbessert werden. Die Literatur kennt zahlreiche, teils sehr umfangreiche Reaktionsmechanismen, mit denen eine genauere und verlässlichere Vorhersage der zu erwartenden NO_x-Emissionen aus dem Brennstoff-Stickstoff auch unter Verwendung sehr weniger Vorläufersubstanzen möglich wird. Teilweise sind Mechanismen mit über 300 Reaktionen dokumentiert, die für eine sinnvolle praktische Anwendung auf etwa 50 reduziert werden können. Das norwegische Forschungsinstitut SINTEF hat zahlreiche Arbeiten in diesem Bereich durchgeführt und publiziert. Auch reduzierte Mechanismen mit 50 Reaktionen können nicht mehr wie in der vorliegenden Arbeit parallel zum Strömungsfeld gelöst werden, sondern wären als *post-processing*-Schritt nach der Erreichung eines konvergenten Lösungsfeldes abzuwickeln. Da die gesamte Stickstoffchemie vernachlässigbaren Einfluss auf das Strömungsfeld, Verbrennungsvorgänge oder Wärmetransportphänomene hat, stellt dieser vielfach angewandte Ansatz keine Einschränkung dar.

Der Reaktionsmechanismus der homogenen Gasphasenreaktionen ist, wie bereits in Kapitel 9.2 erwähnt, hinsichtlich der Berücksichtigung der Reduktionsreaktion von CO_2 zu CO und des auftretenden Reaktionsgleichgewichts bei den auftretenden Betriebsbedingungen zu erweitern. Hierdurch ist eine deutliche Verbesserung der Vorhersagequalität der zu erwartenden CO-Emissionen zu erwarten. Weiters ist zu überlegen, ob ein detaillierterer Reaktionsmechanismus speziell für die CO- und C_xH_y-Oxidation implementierbar wäre. Die Literatur hält auch hierfür zahlreiche mehr oder weniger detaillierte Modelle (meist über radikalische Temporärkomponenten) bereit. Verbrennungsreaktionen können aufgrund ihres großen Einflusses auf das Strömungsfeld aber nicht mehr in einem *post-processing*-Schritt simuliert, sondern müssen parallel zum Strömungsfeld gelöst werden. Aufgrund des damit verbundenen stark steigenden Berechnungsaufwandes ist jedenfalls eine sinnvolle und wohl durchdachte Einschränkung der Anzahl an Gaskomponenten und Gasreaktionen unumgänglich.

Das Modell des Wärmetransports im porösen Feststoff basiert ausschließlich auf Literaturarbeiten und konnte bislang nicht empirisch validiert werden. Hier wären weiterführende Arbeiten besonders hilfreich. Eigene Messungen des effektiven Wärmeübergangs und der effektiven Wärmeleitfähigkeit an den interessierenden Biomassematerialien wären hier besonders wesentlich; in der Literatur sind umfangreiche Informationen zum Versuchsaufbau und zur Versuchsdurchführung verfügbar. Auch der Einfluss von Porosität oder Packungsdichte sowie des Konversionsgrades während Volatilisierung und Koksabbrand könnten auf diese Weise analysiert werden.

Auch das Modell für den Strömungsdruckverlust der porösen Schüttungen verdient weiterführende Betrachtung. Die verwendeten Druckverlustparameter müssten in Abhängigkeit von Porosität, Feuchte und Konversionsgrad (bis hin zum Koks) modelliert werden. Um hochwertige Eingangsparameter für eine solche Modellierung zu generieren sind auch hier umfangreiche experimentelle Arbeiten anzustellen wie sie auch im Ansatz in der vorliegenden Arbeit bereits durchgeführt wurden.

Eine zusätzliche wesentliche Erweiterungsmöglichkeit des Verbrennungsmodells für die CFD umfasst die Vorhersage der zu erwartenden Schütthöhe des Brennstoffbettes auf dem Nachverbrennungsrost. Geht man davon aus, dass vom Ascheaustrag nur Partikel unterhalb einer gewissen Größe ausgetragen werden können, so könnte mit einem fundierten Modell zur Beschreibung der aktuellen Partikelgröße im Bett auch die Betthöhe abgeleitet werden. Die Modellimplementierung der vorliegenden Arbeit beinhaltet bereits alle strukturellen Erfordernisse zur Behandlung unterschiedlicher Schütthöhen in der Rostzone. Das verwendete Partikelgrößenmodell beruht aber auf einem vereinfachten linearen Zusammenhang mit dem lokalen Ausbrandgrad des Brennstoffes. Ein erweitertes Modell müsste Faktoren wie beispielsweise die Partikelvergrößerung aufgrund Agglomeration und Versinterung berücksichtigen.

Das entwickelte Modell der heterogenen Biomasseverbrennung ist von der Struktur her so flexibel gehalten, dass prinzipiell auch die dreidimensionalen Inhomogenitäten eines realen Biomasseballens abgebildet werden könnten (Kolben, Stängel, Blätter). Hierfür können ortsaufgelöste Parameter für den Wassergehalt, die chemische Zusammensetzung und das Verbrennungsverhalten, den Strömungsdruckverlust und dergleichen angesetzt werden. Eine Untersuchung der Auswirkungen solcher Brennstoffinhomogenitäten auf das Betriebsverhalten der Brennkammer und die Stabilität der Verbrennung würde wertvolles Detailwissen zur Technologie liefern. Sollen dreidimensionale Inhomogenitäten berücksichtigt werden, so wird allerdings eine instationäre Simulation sowohl mit dem Verbrennungsmodell als auch mit dem Fluidphasen-Solver erforderlich. Die damit verbundene deutliche Erhöhung des Rechenaufwands ist dem Nutzen durch Wissenszuwachs gegenüberzustellen. Eine instationäre Simulation mit der schwach aufgelösten vereinfachten Ofengeometrie mit etwa 600.000 Zellen für die Gasdomäne und etwa 5.000 Zellen für die Feststoffdomäne wäre mit heutiger Hardware durchaus in technisch akzeptablem Zeitrahmen abzuwickeln. Zielführend wären hier die Simulation einiger wohldefinierter Szenarien und die anschließende Analyse des zeitlichen Verlaufs der wesentlichsten Zielparameter sowie deren Mittelwertbildung. Eine instationäre Simulation wäre auch aufgrund des zu erwartenden instationären Strömungsfelds im Verbrennungsapparat von einiger Bedeutung.

Hinsichtlich der Modellimplementierung der heterogenen Verbrennung wäre eine direkte Einbindung im kommerziellen CFD-Solver FLUENT© anzustreben. Auf diese Weise könnten die Leistungseinbußen aufgrund des Datentransfers vermieden und die leistungsfähigen Lösungsalgorithmen des kommerziellen Systems verwendet werden. Der kommerzielle Solver erlaubt eine solche Erweiterung; als Schnittstellen sind hier benutzerdefinierbare Subroutinen (*udf, user-defined functions*) und benutzerdefinierbare Skalare (*udm, user-defined memory*) vorgesehen. Sollen die Vorteile des Mehrgitter-Ansatzes erhalten bleiben und weiter zwei separate Solver verwendet werden, so empfiehlt sich jedenfalls die Implementierung des heterogenen Verbrennungsmodells in einer deutlich leistungsfähigeren Umgebung. Nachdem das Lösungsverhalten und die Eigenheiten des Modells in der vorliegenden Arbeit ausführlich

erarbeitet wurden, ist eine Implementierung mit einem weniger grafikorientierten Werkzeug zu empfehlen. Stattdessen ist auf hohe Rechnereffizienz und gute Speicherauslastung zu achten. Dazu gehört auch eine Verbesserung und Beschleunigung des Datenaustauschs zwischen den beiden Solver-Systemen. Die erzielbare Leistungssteigerung eines solchen Simulationssystems würde dann die Durchführung weitreichender Parameterstudien sowie instationärer komplexerer Simulationen ermöglichen.

Die Durchführung weiterer experimenteller Arbeiten an einer realen und komplexen Brennkammer könnte wichtige zusätzliche Daten für die Valiierung des CFD-Gesamtmodells liefern. Dabei müsste angestrebt werden, möglichst detaillierte Messinformationen aus dem Brennkammerinneren zu erfassen und einen Vergleich mit Simulationsergebnissen durchzuführen. Sehr wertvolle Informationen sind dabei beispielsweise aus Gas- und Wandtemperaturen sowie Gaszusammensetzungen an ausgewählten Positionen im Verbrennungsapparat zu ziehen. Die punktgenaue Messung beziehungsweise Gasextraktion ist zwar relativ schwierig, die zu erwartenden Daten würden aber den Aufwand lohnen.

Abschließend sei noch erwähnt, dass die Simulation der Verbrennung anderer Biomassen (beispielsweise verschiedene agrarische Reststoffe und Energiepflanzen, Holzhackschnitzel udgl.) sowie eines breiteren Betriebsbereiches beziehungsweise die Anwendung der entwickelten Modelle auf gänzlich andere Biomasseverbrennungssysteme (z.B. Rostfeuerung) einen deutlichen Wissenszuwachs generieren würde. Die Verwendbarkeit des Modellkomplexes bei anderen Energiekonversionsprozessen wie Pyrolyse, schnelle Pyrolyse und Vergasung wäre darüber hinaus zu überprüfen.

12 Formelverzeichnis

Lateinische Buchstaben

a	Absorptionskoeffizient	1/m
c_i	Konzentration der Komponente i	mol/m³
c_p	Spezifische isobare Wärmekapazität	J/g.K
$c_{p,m}$	Mittlere spezifische isobare Wärmekapazität	J/g.K
d	Normalabstand	m
d_D	Düsendurchmesser für den Freistrahl	m
d_p	Partikeldurchmesser	m
$\mathbf{g}$	Vektor der Gravitationsbeschleunigung	m/s²
h	Spezifische Enthalpie	J/g
h_i	Spezifische Enthalpie der Komponente *i*	J/g
k	Spezifische turbulente kinetische Energie	m²/s²
k_B	Boltzmann-Konstante ($1{,}3805 \cdot 10^{-23}$)	J/K
$k_{H_o,\mathrm{Prim}}$	Skalierungsfaktor für den oberen Heizwert des Brennstoffes bei unvollständiger Verbrennung	-
$k_{\mathrm{Koks,effektiv}}$	Effektiver Stoffübergangskoeffizient der Koksverbrennung	m/s
$k_{\mathrm{Koks,Kinetik}}$	Kinetische Reaktionsrate der Koksverbrennung im kinetiklimitierten Regime	1/Pa.s
$k_{\mathrm{Koks,Diffusion}}$	Stoffübergangskoeffizient der Koksverbrennung im diffusionslimitierten Regime	m/s
$k_{\mathrm{nonvolatile,Prim}}$	Anteil Verbrennung Nichtflüchtige in Primärzone	-
$k_{\mathrm{volatile,Rost}}$	Anteil Verbrennung Flüchtige in Rostzone	-

l	Charakteristische Länge	m
l_p	Partikeldruchmesser in einer porösen Schüttung	m
l_V	Äquivalente Dicke einer Fluidschicht mit gleichem thermischen Widerstand wie die Fluidgrenzschicht an einem Partikel einer porösen Schüttung	m
$\dot{m}$	Massenstrom	g/s
$\dot{m}^0$	Massenstrom bei Reaktionsstart	g/s
$\dot{m}^\infty$	Massenstrom nach unendlich langer Reaktion	g/s
m_i	Masse der Komponente i	kg
n	Brechungsindex	-
n_i	Molzahl der Komponente i	mol
n_k	Komponente der Flächennormalen in Raumrichtung x_k	-
p	Druck	Pa
$p_{O2,Bulk}$	Sauerstoffpartialdruck in der Kernströmung	Pa
$p_{O2,Surface}$	Sauerstoffpartialdruck an der Partikeloberfläche	Pa
$\dot{q}$	Allgemeine Wärmestromdichte	W/m^2
$\dot{q}_{eff}$	Effektive Wärmestromdichte für den Wärmeübergang zwischen einer porösen Schüttung und dem umgebenden Fluid	W/m^2
$\mathbf{r}$	Positionsvektor	-
r_C	Verhältnis CO/CO_2 bei der Koksverbrennung	mol/mol
$r_{i,j}$	Reaktionsrate der Komponente i in der Reaktion j	$mol/m^3.s$, $kg/m^3.s$
$\mathbf{s}$	Richtungsvektor	-
$\mathbf{s}'$	Richtungsvektor der Streustrahlung	-
t	Zeit	s
u	Spezifische innere Energie	J/m^3
v	Geschwindigkeit	m/s
$\mathbf{v}$	Geschwindigkeitsvektor	m/s
$\bar{\mathbf{v}}$	Vektor der mittleren Geschwindigkeit	m/s
$\mathbf{v}'$	Vektor der turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen	m/s

v^+	Logarithmischer Geschwindigkeitsverlauf in Wandnähe (Funktion von y^+)	m/s
v^*	Logarithmischer Geschwindigkeitsverlauf in Wandnähe (Funktion von y^*)	m/s
v_i	Geschwindigkeitskomponente in Richtung *i*	m/s
$v_{s,Gas}$	Leerrohrgeschwindigkeit Gas	m/s
w_i	Massenbruch der Komponente i	-
w_i^0	Gehalt der Komponente i im rohen Brennstoff	wt%, waf
w_i^∞	Nichtflüchtiger Anteil der Komponente i	wt%
$\mathbf{x}$	Ortsvektor	m
x_i , x_j , x_k	Komponenten der Raumrichtung	m
x_i	Molenbruch der Komponente i	-
y	Wandabstand im Turbulenzmodell	m
y_P	Normalabstand der wandnächsten Gitterstützstelle	m
y^+	Normierter Wandabstand	-
y^*	Normierter Wandabstand	-
A_i	Präexponentieller Faktor (Arrhenius-Ansatz)	1/s
A_{spez}	(Volumen-)spezifische Oberfläche	m^2/m^3
D_i	Diffusionskoeffizient der Komponente i	m^2/s
D_t	Turbulenter Diffusionskoeffizient	m^2/s
D_k	Dissipationsterm der spezifischen turbulenten kinetischen Energie	$kg/m.s^3$
D_ω	Dissipationsterm der spezifischen Dissipationsrate pro Einheit turbulenter kinetischer Energie	$kg/m^3.s^2$
$E_{A,i}$	Aktivierungsenergie (Arrhenius-Ansatz)	J/mol
F_1 , F_2	Blendingfunktionen im SST-k-ω-Modell	-
H_o	Ober Heizwert (Brennwert)	J/g
H_u	(Unterer) Heizwert	J/g
I	Gesamtstrahldichte	$W/m^2.sr$

I_t	Turbulenzintensität	%
J	Colburn-Faktor	-
$\mathbf{J}_i$	Massendiffusionsstromvektor der Komponente *i*	$g/m^2.s$
K_1	Viskositätsparameter in der Forchheimer-Gleichung für den Druckverlust einer porösen Schüttung	m^2
K_2	Trägheitsparameter in der Forchheimer-Gleichung für den Druckverlust einer porösen Schüttung	1/m
$K_{NO_2,Konversion}$	Konversionsfaktor für Brennstoff-NO_x	-
M_i	Molmasse der Komponente i	g/mol
N_{DNS}	Approximation der Stützstellenzahl für die direkte numerische Simulation	-
N_{Koks}	Anteil des beim Koksabbrand freigesetzten Stickstoffs bezogen auf den gesamten Brennstoff-Stickstoff	kg/kg
N_{Vol}	Anteil des bei der Volatilisierung freigesetzten Stickstoffs bezogen auf den gesamten Brennstoff-Stickstoff	kg/kg
$\dot{Q}$	Allgermeiner Wärmestrom	W
$\dot{Q}_{eff}$	Effektiver Wärmestrom für den Wärmeübergang zwischen einer porösen Schüttung und dem umgebenden Fluid	W
$\dot{Q}_{Nutz}$	Nutzwärmestrom	W
$\dot{Q}_V$	Verlustwärmestrom	W
$\dot{Q}_\lambda$	Wärmestrom aufgrund von Wärmeleitung in einer porösen Schüttung	W
P_k	Produktionsterm der spezifischen turbulenten kinetischen Energie aus den Geschwindigkeitsgradienten	$kg/m.s^3$
P_A	Produktionsterm der spezifischen turbulenten kinetischen Energie aufgrund des thermischen Auftriebs	$kg/m.s^3$
P_ω	Produktionsterm der spezifischen Dissipationsrate pro Einheit turbulenter kinetischer Energie	$kg/m^3.s^2$
R	Allgemeine Gaskonstante (8,314472)	J/mol.K
R_m	Massenbezogenes Rezirkulationsverhältnis	-
R_v	Volumetrisches Rezirkulationsverhältnis	-

S	Betrag der Scherrate	1/s
S_c	Quellterm in der Speziesbilanz	mol/m³.s
S_{ij}	Tensor der Scherrate	1/s
S_p	Quellterm in der Impulsbilanz	g/m².s²
S_u	Quellterm in der Energiebilanz	W/m³
T	Temperatur	K
T^*	Temperatur für die Neufield-Approximation	K
$T_{b,i}$	Siedetemperatur der Komponente i bei Normaldruck	K
T_{Vol}	Chrakteristische Temperatur der Volatilisierung	K
V	Volumen, Reaktionsvolumen	m³
$\dot{V}$	Volumenstrom	m³/s
$V_{b,i}$	Molares Volumen der Komponente i im flüssigen Zustand bei Siedetemperatur und Normaldruck	cm³/mol
$V_{c,i}$	kritisches Volumen der Komponente i	cm³/mol
X_{Koks}	Konversionsgrad der Koksverbrennung	kg/kg

Griechische Buchstaben

α_{rv}	Effektiver Wärmeübergangskoeffizient für Strahlung in den Leerräumen einer porösen Schüttung	W/m².K
α_{rs}	Effektiver Wärmeübergangskoeffizient für Strahlung an den Kontaktstellen einer porösen Schüttung	W/m².K
β	Thermischer Ausdehnungskoeffizient	1/K
$\boldsymbol{\delta}$	Einheitstensor	-
δ_{ij}	Kronecker-Funktion	-
δ_0	Anstellwinkel der Leitschaufeln im Drallapparat	°
ΔH_f^0	Standardbildungsenthalpie einer Komponente	J/mol
$\Delta H_{r,j}$	Molare Reaktionsenthalpie der Reaktion j	J/mol
ΔH_{Koks}	Reaktionsenthalpie der Koksverbrennung	J/mol , kJ/kg
ΔH_{vap}	Verdampfungsenthalpie (von Wasser)	J/mol ,

		kJ/kg
ΔH_{vol}	Volatilisierungsenthalpie	J/mol , kJ/kg
Δl_p	Charakeristischer Abstand zweier Partikel in einer porösen Schüttung	m
Δt_{Zelle}	Verweilzeit für eine diskrete Volumenzelle	s
ε	Dissipationsrate der spezifischen turbulenten kinetischen Energie	m^2/s^3
ε_{Bett}	Porosität eines Bettes (Lückenvolumen)	m^3/m^3
ε_{rad}	Emissionsfaktor einer strahlenden festen Oberfläche	-
ε_i	Charakteristische Lennard-Jones-Energie der Gaskomponente i	J
Γ_k , Γ_ω	Effektive Diffusivitäten	Pa.s
Φ	Phasenfunktion	-
Φ	beliebige Bilanzgröße	variabel
$\overline{\Phi}$	Mittelwert einer beliebigen Bilanzgröße	variabel
Φ'	Turbulente Schwankungsbreite einer beliebigen Bilanzgröße	variabel
Φ_C	Stöchiometrischer Faktor der Koksverbrennung	-
η	Dynamische Viskosität	Pa.s
η_{eff}	Effektive dynamische Viskosität	Pa.s
η_{th}	Thermischer Anlagenwirkungsgrad	%
$\eta_{Kolmogoroff}$	Kolmogoroff-Mikrolängenmaß	m
η_t	Wirbelviskosität, turbulente Viskosität	Pa.s
λ	Wärmeleitfähigkeit	W/m.K
$\lambda_{Bett,eff}$	Effektive Wärmeleitfähigkeit einer porösen Schüttung	W/m.K
$\lambda_{Bett,eff,0}$	Effektive Wärmeleitfähigkeit einer porösen Schüttung unter stagnanten Bedingungen	W/m.K
λ_G	Globale Luftverhältniszahl	-
λ_L	Lokale Luftverhältniszahl	-
λ_t	Turbulente Wärmeleitfähigkeit	W/m.K

ν	Kinematische Viskosität	m^2/s
ϑ	Vereinfachte Drallzahl	-
ρ	Dichte	g/m^3
σ	Stefan-Boltzmann-Konstante ($5{,}67804 \cdot 10^{-8}$)	$W/m^2.K^4$
σ_i	Charakteristischer Längenparameter der Komponente i	Å
σ_s	Streuungskoeffizient	1/m
$\boldsymbol{\tau}$	Spannungstensor	N/m^2
$\tau_{Kolmogoroff}$	Kolmogoroff-Mikrozeitmaß	s
$\boldsymbol{\tau}_{Newton}$	Newtonscher Schubspannungstensor	N/m^2
$\boldsymbol{\tau}_{Reynolds}$	Reynolds-Spannungstensor	N/m^2
τ_w	Schubspannung an der festen Wand	N/m^2
ω	Spezifische Dissipationsrate pro Einheit der turbulenten kinetischen Energie	1/s
Ω	Raumwinkel	sr
Ω	Betrag der Rotationsrate	1/s
Ω_D	Kollisionsintegral für Diffusion	-
Ω_{ij}	Tensor der Rotationsrate	1/s

Indizes

AUS	eine Zelle oder Domäne verlassend
BS	Brennstoff
Cell	Zellulose
EIN	in eine Zelle oder Domäne eintretend
FL	Frischluft
g , GAS	Gas
G	Gesamt
Hcell	Hemizellulose
HG	Heißgas
i, j, k	Variable Raumrichtungen
IN	Eintretender roher Brennstoff

KG	Kaltgas
Koks	Reaktive residuelle Kokskomponente
Lign	Lignin
m	Mittelwert, charakteristischer beschreibender Wert
min	Minimum
nonvol	Nichtflüchtiger Anteil
p	Partikel
P	Am Punkt P (wandnächste Gitterstützstelle)
Prim	Primäre Verbrennungszone
Ref	Referenzzustand
RG	Rauchgas
Rost	Verbrennungszone Rost
RZ	Rezirkulationsgas
Sek	Sekundäre Verbrennungszone
STP	Normzustand (standard temperature and pressure) 273,15K und 101325Pa
TS	Trockensubstanz
vol	Flüchtiger Anteil
w	An der Wand
Wind	Wind = Mischung aus Frischluft und Rezirkulationsgas
x, *y*, *z*	Raumrichtungen
Zelle	Rechenzelle, Kontrollvolumen

Sonstiges

Bi	Biot-Zahl	$Bi = \frac{\alpha l}{2\lambda}$
J	Colburn-Faktor	$J = \frac{Sh_d}{Sc^{1/3} Re_d}$
Nu	Nusselt-Zahl	$Nu = \frac{\alpha l}{\lambda}$
Pr	Prandtlzahl	$Pr = \frac{\eta c_p}{\lambda}$

Pr_t	Turbulente Prandtlzahl	$Pr_t = \frac{\eta_t c_p}{\lambda_t}$
Re	Reynoldszahl	$Re = \frac{vl}{\nu}$
Sc	Schmidtzahl	$Sc = \frac{\eta}{\rho D_i}$
Sc_t	Turbulente Schmidtzahl	$Sc_t = \frac{\eta_t}{\rho D_t}$
Sh_d	Sherwoodzahl	$Sh_d = \frac{k_{Diffusion} d_p}{D}$
∇	Nabla-Operator	$\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$
∇^2	Laplace-Operator	$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

13 Literaturverzeichnis

Aarna, I., Suuberg, E. M.; A review of the kinetics of the nitric oxide-carbon reaction; Fuel, 1997, **76**(6), 475-491.

Aarna, I., Suuberg, E. M.; The Role of Carbon Monoxide in the NO-Carbon Reaction; Energy & Fuels, 1999, **13**(6), 1145-1153.

Aboumahboub, T., Schaber, K., Wagner, U., Hamacher, T.; On the CO2 emissions of the global electricity supply sector and the influence of renewable power-modeling and optimization; Energy Policy, 2012, **42**(0), 297-314.

Adanez, J., de Diego, L. F., Garcia-Labiano, F., Abad, A., Abanades, J. C.; Determination of Biomass Char Combustion Reactivities for FBC Applications by a Combined Method; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2001, **40**(20), 4317-4323.

Adanez, J., Gayan, P., de Diego, L. F., Garcia-Labiano, F., Abad, A.; Combustion of Wood Chips in a CFBC. Modeling and Validation; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2003, **42**(5), 987-999.

Akashi, O., Hanaoka, T., Matsuoka, Y., Kainuma, M.; A projection for global CO2 emissions from the industrial sector through 2030 based on activity level and technology changes; Energy, 2011, **36**(4), 1855-1867.

Anderson, J. D.; Computational Fluid Dynamics - The Basics With Applications; McGraw-Hill, Inc., New York, USA, 1995.

Anderson, J. D., Degrez, G., Dick, E., Grundmann, R.; Computational Fluid Dynamics - An Introduction; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 1992.

Antal, M. J., Jr., Varhegyi, G.; Cellulose Pyrolysis Kinetics: The Current State of Knowledge; Industrial & Engineering Chemistry Research, 1995, **34**(3), 703-717.

Arenillas, A., Rubiera, F., Pevida, C., Pis, J. J.; A comparison of different methods for predicting coal devolatilisation kinetics; Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2001, **58-59**, 685-701.

Ashforth-Frost, S., Jambunathan, K.; Effect of nozzle geometry and semi-confinement on the potential core of a turbulent axisymmetric free jet; International Communications in Heat and Mass Transfer, 1996, **23**(2), 155-162.

Aslam Bhutta, M. M., Hayat, N., Bashir, M. H., Khan, A. R., Ahmad, K. N., Khan, S.; CFD applications in various heat exchangers design: A review; Applied Thermal Engineering, 2012, **32**, 1-12.

Athanasios, N., Nikolaos, N., Nikolaos, M., Panagiotis, G., Kakaras, E.; Optimization of a log wood boiler through CFD simulation methods; Fuel Processing Technology, 2015, **137**, 75-92.

Awosope, I. O., Lockwood, F. C.; Prediction of Combustion and NOx Emission Characteristics of Flameless Oxidation Combustion; IFRF Combustion Journal, 2005, **2005, June**(200501), 1-28.

Babu, B. V., Chaurasia, A. S.; Modeling for pyrolysis of solid particle: kinetics and heat transfer effects; Energy Conversion and Management, 2003a, **44**(14), 2251-2275.

Babu, B. V., Chaurasia, A. S.; Modeling, simulation and estimation of optimum parameters in pyrolysis of biomass; Energy Conversion and Management, 2003b, **44**(13), 2135-2158.

Babu, B. V., Chaurasia, A. S.; Parametric study of thermal and thermodynamic properties on pyrolysis of biomass in thermally thick regime; Energy Conversion and Management, 2004a, **45**(1), 53-72.

Babu, B. V., Chaurasia, A. S.; Pyrolysis of biomass: improved models for simultaneous kinetics and transport of heat, mass and momentum; Energy Conversion and Management, 2004b, **45**(9-10), 1297-1327.

Babu, B. V., Sheth, P. N.; Modeling and simulation of reduction zone of downdraft biomass gasifier: Effect of char reactivity factor; Energy Conversion and Management, 2006, **47**(15-16), 2602-2611.

Backreedy, R. I., Habib, R., Jones, J. M., Pourkashanian, M., Williams, A.; An extended coal combustion model; Fuel, 1999, **78**(14), 1745-1754.

Baehr, H. D., Kabelac, S.; Thermodynamik, 13. Auflage; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2006.

Baerns, M., Hofmann, H., Renken, A.; Chemische Reaktionstechnik, 2. Auflage; Georg Thieme Verlag, Stuttgart, Deutschland, 1999.

Bahner, F.; Prallstrahlwärmeübertragung; Babcock BSH GmbH, 2001.

Bain, R. L., Overend, R. P., Craig, K. R.; Biomass-fired power generation; Fuel Processing Technology, 1998, **54**(1-3), 1-16.

Bakker, R. R., Jenkins, B. M., Williams, R. B.; Fluidized Bed Combustion of Leached Rice Straw; Energy & Fuels, 2002, **16**(2), 356-365.

Balabel, A., El-Askary, W. A.; On the performance of linear and nonlinear turbulence models in various jet flow applications; European Journal of Mechanics - B/Fluids, 2011, **30**(3), 325-340.

Balsara, D.; Fast and accurate discrete ordinates methods for multidimensional radiative transfer. Part I, basic methods; Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2001, **69**(6), 671-707.

Bassilakis, R., Carangelo, R. M., Wójtowicz, M. A.; TG-FTIR analysis of biomass pyrolysis; Fuel, 2001, **80**(12), 1765-1786.

Basu, P., Kaushal, P.; (2009) Modeling of Pyrolysis and Gasification of Biomass in Fluidized Beds: A Review; Chemical Product and Process Modeling, 4, Stand:

Beaumont, O., Schwob, Y.; Influence of physical and chemical parameters on wood pyrolysis; Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development, 1984, **23**(4), 637-641.

Bech, N., Wolff, L., Germann, L.; Mathematical Modeling of Straw Bale Combustion in Cigar Burners; Energy & Fuels, 1996, **10**(2), 276-283.

Becidan, M., Skreiberg, O., Hustad, J. E.; NOx and N2O Precursors (NH3 and HCN) in Pyrolysis of Biomass Residues; Energy & Fuels, 2007a, **21**(2), 1173-1180.

Becidan, M., Varhegyi, G., Hustad, J. E., Skreiberg, O.; Thermal Decomposition of Biomass Wastes. A Kinetic Study; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2007b, **46**(8), 2428-2437.

Berger, P., Beiglböck, J.; (2002) AlphaServer SC45 - Der neue Server für Finite Elemente und Strömungsdynamik; ZIDline, 7, Stand: 22.01.2014.

Bharadwaj, A., Baxter, L. L., Robinson, A. L.; Effects of Intraparticle Heat and Mass Transfer on Biomass Devolatilization: Experimental Results and Model Predictions; Energy & Fuels, 2004, **18**(4), 1021-1031.

Biagini, E., Lippi, F., Petarca, L., Tognotti, L.; Devolatilization rate of biomasses and coal-biomass blends: an experimental investigation; Fuel, 2002, **81**(8), 1041-1050.

Biagini, E., Tognotti, L.; Comparison of Devolatilization/Char Oxidation and Direct Oxidation of Solid Fuels at Low Heating Rate; Energy & Fuels, 2006, **20**(3), 986-992.

Bjorkman, E., Stromberg, B.; Release of Chlorine from Biomass at Pyrolysis and Gasification Conditions; Energy & Fuels, 1997, **11**(5), 1026-1032.

Blanco López, M. C., Blanco, C. G., Martínez-Alonso, A., Tascón, J. M. D.; Composition of gases released during olive stones pyrolysis; Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2002, **65**(2), 313-322.

Blazek, J.; Computational Fluid Dynamics - Principles And Applications, 2nd Edition; Elsevier Ltd., Oxford, Grossbritannien, 2007.

Blocken, B., Stathopoulos, T., Carmeliet, J., Hensen, J.; Application of CFD in building performance simulation for the outdoor environment: an overview; Journal of Building Performance Simulation, 2011, **4**(2), 157-184.

Boateng, A. A., Jung, H. G., Adler, P. R.; Pyrolysis of energy crops including alfalfa stems, reed canarygrass, and eastern gamagrass; Fuel, 2006, **85**(17-18), 2450-2457.

Böhmer, S., Schindler, I., Szednyj, I., Winter, B.; Stand der Technik bei kalorischen Kraftwerken und Referenzanlagen in Österreich; Umweltbundesamt, Wien, Österreich, 2003.

Bordbar, M. H., Hyppänen, T.; Predicting Radiative Heat Transfer in Arbitrary Two and Three-Dimensional Participating Media; World Academy of Science, Engineering and Technology, 2008, **47**(1), 403-408.

Borean, J. L., Huilier, D., Burnage, H.; On the effect of a co-flowing stream on the structure of an axisymmetric turbulent jet; Experimental Thermal and Fluid Science, 1998, **17**(1-2), 10-17.

BP; Statistical Review of World Energy 2011; In: Wikipedia, Webseite, Stand: 07.07.2015, https://de.wikipedia.org/wiki/Weltenergiebedarf.

Branca, C., Di Blasi, C.; Global Kinetics of Wood Char Devolatilization and Combustion; Energy & Fuels, 2003, **17**(6), 1609-1615.

Branca, C., Iannace, A., Di Blasi, C.; Devolatilization and Combustion Kinetics of Quercus cerris Bark; Energy & Fuels, 2007, **21**(2), 1078-1084.

Bridgeman, T. G., Darvell, L. I., Jones, J. M., Williams, P. T., Fahmi, R., Bridgwater, A. V., Barraclough, T., Shield, I., Yates, N., Thain, S. C., Donnison, I. S.; Influence of particle size on the analytical and chemical properties of two energy crops; Fuel, 2007, **86**(1-2), 60-72.

Bridgwater, A. V., Elliott, D. C., Fagernäs, L., Gifford, J. S., Mackie, K. L., Toft, A. J.; The nature and control of solid, liquid and gaseous emissions from the thermochemical processing of biomass; Biomass and Bioenergy, 1995, **9**(1-5), 325-341.

Brink, A., Hupa, M., Kurkela, E., Suomalainen, M.; Minimizing NOx Emission from a Waste Derived Fuel Gasifier Gas Combustor using CFD Combined with Detailed Chemistry; IFRF Combustion Journal, 2005, **2005, September**(200505), 1-16.

Brink, A., Kilpinen, P., Hupa, M.; A Simplified Kinetic Rate Expression for Describing the Oxidation of Volatile Fuel-N in Biomass Combustion; Energy & Fuels, 2001, **15**(5), 1094-1099.

Bruch, C., Peters, B., Nussbaumer, T.; Modelling wood combustion under fixed bed conditions; Fuel, 2003, **82**(6), 729-738.

Bryden, K. M., Hagge, M. J.; Modeling the combined impact of moisture and char shrinkage on the pyrolysis of a biomass particle; Fuel, 2003, **82**(13), 1633-1644.

Bryden, K. M., Ragland, K. W.; Numerical Modeling of a Deep, Fixed Bed Combustor; Energy & Fuels, 1996, **10**(2), 269-275.

Bryden, K. M., Ragland, K. W., Rutland, C. J.; Modeling thermally thick pyrolysis of wood; Biomass and Bioenergy, 2002, **22**(1), 41-53.

Buhre, B. J. P., Hinkley, J. T., Gupta, R. P., Nelson, P. F., Wall, T. F.; Fine ash formation during combustion of pulverised coal-coal property impacts; Fuel, 2006, **85**(2), 185-193.

Cai, J., Liu, R.; Research on Water Evaporation in the Process of Biomass Pyrolysis; Energy & Fuels, 2007, **21**(6), 3695-3697.

Calvo, L. F., Otero, M., Jenkins, B. M., Morán, A., García, A. I.; Heating process characteristics and kinetics of rice straw in different atmospheres; Fuel Processing Technology, 2004, **85**(4), 279-291.

Cebeci, T., Shao, J. P., Kafyeke, F., Laurendeau, E.; Computational Fluid Dynamics for Engineers; Springer Verlag, Berlin, Deuschland, 2005.

Çelik, C., Arisoy, A., Genceli, O. F.; Modelling of turbulent reacting flows with gaseous fuels in a combustion chamber; Fuel, 1996, **75**(4), 431-436.

Chaney, J., Liu, H., Li, J.; An overview of CFD modelling of small-scale fixed-bed biomass pellet boilers with preliminary results from a simplified approach; Energy Conversion and Management, 2012, **63**, 149-156.

Chang, L., Xie, Z., Xie, K.-C., Pratt, K. C., Hayashi, J.-i., Chiba, T., Li, C.-Z.; Formation of NOx precursors during the pyrolysis of coal and biomass. Part VI. Effects of gas atmosphere on the formation of NH3 and HCN[small star, filled]; Fuel, 2003, **82**(10), 1159-1166.

Channiwala, S. A., Parikh, P. P.; A unified correlation for estimating HHV of solid, liquid and gaseous fuels; Fuel, 2002, **81**(8), 1051-1063.

Cherubini, F., Bird, N. D., Cowie, A., Jungmeier, G., Schlamadinger, B., Woess-Gallasch, S.; Energy- and greenhouse gas-based LCA of biofuel and bioenergy systems: Key issues, ranges and recommendations; Resources, Conservation and Recycling, 2009, **53**(8), 434-447.

Christensen, K. A., Stenholm, M., Livbjerg, H.; The formation of submicron aerosol particles, HCl and SO2 in straw-fired boilers; Journal of Aerosol Science, 1998, **29**(4), 421-444.

Chung, T. J.; Computational Fluid Dynamics; Cambridge University Press, Cambridge, Grossbritannien, 2002.

Coda Zabetta, E., Kilpinen, P.; Gas-phase conversion of NH3 to N2 in gasification; IFRF Combustion Journal, 2001, **2001, March**(200104), 1-41.

Coelho, L. M. R., Azevedo, J. L. T., Faravelli, T., Hesselmann, G.; Integrated study of Reburn technology by means of detailed Chemical Kinetics, CFD modelling and Pilot Scale Testing; IFRF Combustion Journal, 2001, **2001, November**(200108), 1-34.

Conesa, J. A., Marcilla, A., Caballero, J. A., Font, R.; Comments on the validity and utility of the different methods for kinetic analysis of thermogravimetric data; Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2001, **58-59**, 617-633.

Cordero, T., Marquez, F., Rodriguez-Mirasol, J., Rodriguez, J. J.; Predicting heating values of lignocellulosics and carbonaceous materials from proximate analysis; Fuel, 2001, **80**(11), 1567-1571.

Costa, F. d. S., Cardoso, J., Villela, T. E. A., Veras, C. A. G.; Effects of wet CO oxidation on the operation of engines and power generators; Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, 2003, **25**(4), 341-346.

Craft, T. J., Kidger, J. W., Launder, B. E.; Second-moment modelling of developing and self-similar 3D turbulent free-surface jets; International Journal of Heat and Fluid Flow, 2000, **21**(3), 338-344.

Crowe, C., Sommerfeld, M., Tsuji, Y.; Multiphase Flows with Droplets and Particles; CRC Press, Boca Raton, USA, 1998.

Curtis, L. J., Miller, D. J.; Transport model with radiative heat transfer for rapid cellulose pyrolysis; Industrial & Engineering Chemistry Research, 1988, **27**(10), 1775-1783.

Dagaut, P., Glarborg, P., Alzueta, M. U.; The oxidation of hydrogen cyanide and related chemistry; Progress in Energy and Combustion Science, 2008, **34**(1), 1-46.

Dagaut, P., Lecomte, F.; Experiments and Kinetic Modeling Study of NO-Reburning by Gases from Biomass Pyrolysis in a JSR; Energy & Fuels, 2003, **17**(3), 608-613.

Dare, P., Gifford, J., Hooper, R. J., Clemens, A. H., Damiano, L. F., Gong, D., Matheson, T. W.; Combustion performance of biomass residue and purpose grown species; Biomass and Bioenergy, 2001, **21**(4), 277-287.

Date, A. W.; Introduction to Computational Fluid Dynamics; Cambridge University Press, Cambridge, Grossbritannien, 2005.

Daugaard, D. E., Brown, R. C.; Enthalpy for Pyrolysis for Several Types of Biomass; Energy & Fuels, 2003, **17**(4), 934-939.

Dayton, D. C., Jenkins, B. M., Turn, S. Q., Bakker, R. R., Williams, R. B., Belle-Oudry, D., Hill, L. M.; Release of Inorganic Constituents from Leached Biomass during Thermal Conversion; Energy & Fuels, 1999, **13**(4), 860-870.

de Diego, L. F., Garcia-Labiano, F., Abad, A., Gayan, P., Adanez, J.; Modeling of the Devolatilization of Nonspherical Wet Pine Wood Particles in Fluidized Beds; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2002, **41**(15), 3642-3650.

de Diego, L. F., Garcia-Labiano, F., Abad, A., Gayan, P., Adanez, J.; Effect of Moisture Content on Devolatilization Times of Pine Wood Particles in a Fluidized Bed; Energy & Fuels, 2003, **17**(2), 285-290.

Demirbas, A.; Calculation of higher heating values of biomass fuels; Fuel, 1997, **76**(5), 431-434.

Demirbas, A.; Mechanisms of liquefaction and pyrolysis reactions of biomass; Energy Conversion and Management, 2000, **41**(6), 633-646.

Demirbas, A.; Biomass resource facilities and biomass conversion processing for fuels and chemicals; Energy Conversion and Management, 2001a, **42**(11), 1357-1378.

Demirbas, A.; Carbonization ranking of selected biomass for charcoal, liquid and gaseous products; Energy Conversion and Management, 2001b, **42**(10), 1229-1238.

Demirbas, A.; Sustainable cofiring of biomass with coal; Energy Conversion and Management, 2003, **44**(9), 1465-1479.

Demirbas, A.; Combustion characteristics of different biomass fuels; Progress in Energy and Combustion Science, 2004, **30**(2), 219-230.

Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt; Laser-Doppler-Anemometrie (LDA); Webseite, Stand: 12.10.2012, http://messtec.dlr.de/de/technologie/dlr-antriebstechnik/laser-doppler-anemometry-lda/index.php.

Di Blasi, C.; Influences of physical properties on biomass devolatilization characteristics; Fuel, 1997, **76**(10), 957-964.

Di Blasi, C., Branca, C.; The Effects of Water Leaching on the Isothermal Degradation Kinetics of Straw; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2000, **39**(7), 2169-2174.

Di Blasi, C., Branca, C.; Kinetics of Primary Product Formation from Wood Pyrolysis; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2001a, **40**(23), 5547-5556.

Di Blasi, C., Branca, C., Santoro, A., Gonzalez Hernandez, E.; Pyrolytic behavior and products of some wood varieties; Combustion and Flame, 2001b, **124**(1–2), 165-177.

Di Blasi, C., Buonanno, F., Branca, C.; Reactivities of some biomass chars in air; Carbon, 1999a, **37**(8), 1227-1238.

Di Blasi, C., Portoricco, G., Borrelli, M., Branca, C.; Oxidative degradation and ignition of loose-packed straw beds; Fuel, 1999b, **78**(13), 1591-1598.

Di Blasi, C., Signorelli, G., Di Russo, C., Rea, G.; Product Distribution from Pyrolysis of Wood and Agricultural Residues; Industrial & Engineering Chemistry Research, 1999c, **38**(6), 2216-2224.

Dixon, A. G.; Thermal Resistance Models of Packed-Bed Effective Heat Transfer Parameters; AIChE Journal, 1985, **31**(5), 826-834.

Dixon, T. F., Mann, A. P., Plaza, F., Gilfillan, W. N.; Development of advanced technology for biomass combustion - CFD as an essential tool; Fuel, 2005, **84**(10), 1303-1311.

Dong, L., Gao, S., Song, W., Xu, G.; Experimental study of NO reduction over biomass char; Fuel Processing Technology, 2007, **88**(7), 707-715.

Du Sautoy, M.; The Number Mysteries; C.H. Beck oHG, München, Deutschland, 2011.

Ducoste, J.; An Overview of Computational Fluid Dynamics; North Carolina State University, MBR Training Seminar at Ghent University; 2008.

Dwivedi, P. N., Upadhyay, S. N.; Particle-Fluid Mass Transfer in Fixed and Fluidized Beds; Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development, 1977, **16**(2), 157-165.

Easterly, J. L., Burnham, M.; Overview of biomass and waste fuel resources for power production; Biomass and Bioenergy, 1996, **10**(2-3), 79-92.

Eck, B.; Technische Strömungslehre - Band 1 Grundlagen, 9. Auflage; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 1988.

Eck, B.; Technische Strömungslehre - Band 2 Anwendungen, 9. Auflage; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 1991.

EIA; Prognose zum weltweiten Energieverbrauch bis zum Jahr 2040; In: Statista - Das Statistik-Portal, Webseite, Stand: 07.07.2015, http://de.statista.com/statistik/daten/studie/28941/umfrage/prognose-zum-energieverbrauch-weltweit-betrachtet-von-1980-bis-2030/.

Emig, G., Klemm, E.; Technische Chemie: Einführung in die Chemische Reaktionstechnik, 5. Auflage; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2005.

Epple, B., Leithner, R., Linzer, W., Walter, H.; Simulation von Kraftwerken und wärmetechnischen Anlagen; Springer Verlag, Wien, Österreich, 2009.

Ergüdenler, A., Ghaly, A. E.; Quality of gas produced from wheat straw in a dual-distributor type fluidized bed gasifier; Biomass and Bioenergy, 1992, **3**(6), 419-430.

Ergüdenler, A., Ghaly, A. E.; A comparative study on the thermal decomposition of four cereal straws in an oxidizing atmosphere; Bioresource Technology, 1994, **50**(3), 201-208.

Eric, A., Dakic, D., Nemoda, S., Komatina, M., Repic, B.; Experimental determination thermo physical characteristics of balled biomass; Energy, 2012, **45**(1), 350-357.

Ertesvag, I. S., Magnussen, B. F.; The Eddy Dissipation Turbulence Energy Cascade Model; Combustion Science and Technology, 2000, **159**(1), 213-235.

Evans, R. J., Milne, T. A.; Molecular characterization of the pyrolysis of biomass. 1. Fundamentals; Energy & Fuels, 1987a, **1**(2), 123-137.

Evans, R. J., Milne, T. A.; Molecular characterization of the pyrolysis of biomass. 2. Applications; Energy & Fuels, 1987b, **1**(4), 311-319.

Farrashkhalvat, M., Miles, J. P.; Basic Structured Grid Generation with an introduction to unstructured grid generation; Butterworth-Heinemann, Burlington MA, USA, 2003.

Feng, J., Li, W.-Y., Xie, K.-C., Liu, M.-R., Li, C.-Z.; Studies of the release rule of NOx precursors during gasification of coal and its char; Fuel Processing Technology, 2003, **84**(1-3), 243-254.

Fenimore, C. P., Jones, G. W.; The Water-Catalyzed Oxidation of Carbon Monoxide by Oxygen at High Temperature; Journal of Physical Chemistry, 1957, **61**(5), 651-654.

Fenimore, C. P., Jones, G. W.; Oxidation of Ammonia in Flames; Journal of Physical Chemistry, 1961, **65**(2), 298-303.

Ferziger, J. H., Peric, M.; Computational Methods for Fluid Dynamics, 3rd Edition; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2002.

Fjellerup, J., Henriksen, U., Jensen, A. D., Jensen, P. A., Glarborg, P.; Heat Transfer in a Fixed Bed of Straw Char; Energy & Fuels, 2003, **17**(5), 1251-1258.

Fleck, B. A., Matović, M. D., Grandmaison, E. W., Sobiesiak, A.; Modelling of the Near Field of a Multi-jet Burner; IFRF Combustion Journal, 2003(06), 1-15.

Fletcher, D. F., Haynes, B. S., Chen, J., Joseph, S. D.; Computational fluid dynamics modelling of an entrained flow biomass gasifier; Applied Mathematical Modelling, 1998, **22**(10), 747-757.

FLUENT Inc., FLUENT 6.1 Users Guide; 2005.

Font, R., Martín-Gullón, I., Esperanza, M., Fullana, A.; Kinetic law for solids decomposition. Application to thermal degradation of heterogeneous materials; Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2001, **58-59**, 703-731.

Frandsen, F., Hansen, J., Jensen, P. A., Dam-Johansen, K., Montgomery, M., Feneger, L. D., Jensen, J. N., Karlsson, A., Henriksen, N., Jensen, J. P.; Deposit formation and corrosion in the Air Pre-Heater of a Straw-fired Combined Heat and Power Production Boiler; IFRF Combustion Journal, 2002(4), 1-23.

Friebel, J., Köpsel, R. F. W.; The fate of nitrogen during pyrolysis of German low rank coals -- a parameter study; Fuel, 1999, **78**(8), 923-932.

Fukuyo, K.; Application of computational fluid dynamics and pedestrian-behavior simulations to the design of task-ambient air-conditioning systems of a subway station; Energy, 2006, **31**(5), 706-718.

Furimsky, E., Zheng, L.; Quantification of chlorine and alkali emissions from fluid bed combustion of coal by equilibrium calculations; Fuel Processing Technology, 2003, **81**(1), 7-21.

Gaderer, M., Spliethoff, H.; Thermische Nutzung von Biomasse und Reststoffen in Deutschland

Thermal Use of Biomass and Residual Materials in Germany; Chemie Ingenieur Technik, 2011, **83**(11), 1897-1911.

Galgano, A., Blasi, C. D.; Modeling Wood Degradation by the Unreacted-Core-Shrinking Approximation; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2003, **42**(10), 2101-2111.

Galgano, A., Di Blasi, C.; Modeling the propagation of drying and decomposition fronts in wood; Combustion and Flame, 2004, **139**(1-2), 16-27.

Garijo, E. G., Jensen, A. D., Glarborg, P.; Kinetic Study of NO Reduction over Biomass Char under Dynamic Conditions; Energy & Fuels, 2003, **17**(6), 1429-1436.

Gazzah, M. H., Sassi, M., Sarh, B., Gökalp, I.; Numerical simulation of variable density subsonic turbulent jets by using the k-ε model; International Journal of Thermal Sciences, 2002, **41**(1), 51-62.

Ghaly, A. E., Ergüdenler, A., Al Taweel, A. M.; Determination of the kinetic parameters of oat straw using thermogravimetric analysis; Biomass and Bioenergy, 1993, **5**(6), 457-465.

Glarborg, P., Alzueta, M. U., Dam-Johansen, K., Miller, J. A.; Kinetic Modeling of Hydrocarbon/Nitric Oxide Interactions in a Flow Reactor; Combustion and Flame, 1998, **115**(1-2), 1-27.

Glarborg, P., Jensen, A. D., Johnsson, J. E.; Fuel nitrogen conversion in solid fuel fired systems; Progress in Energy and Combustion Science, 2003, **29**(2), 89-113.

Glassman, I.; Combustion, 3rd Edition; Academic Press, San Diego, USA, 1996.

Glassman, I.; Combustion, 4th Edition; Academic Press, San Diego, USA, 2008.

Golovitchev, V. I., Chomiak, J.; Analysis of main assumptions underlying Extended Eddy Dissipation Model of Turbulent Combustion; in: Proceedings of the 3rd Topical meeting of the Scandinavian-Nordic Section of the Combustion Institute, Trondheim, Norwegen, 2002.

Gómez-Barea, A., Ollero, P., Arjona, R.; Reaction-diffusion model of TGA gasification experiments for estimating diffusional effects; Fuel, 2005, **84**(12-13), 1695-1704.

Gomez, C. J., Varhegy, G., Puigjaner, L.; Slow Pyrolysis of Woody Residues and an Herbaceous Biomass Crop: A Kinetic Study; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2005, **44**(17), 6650-6660.

Görner, K.; Technische Verbrennungssysteme - Grundlagen, Modellbildung, Simulation; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 1991.

Grammelis, P.; Solid Biofuels for Energy; Springer Verlag, London, Großbritannien, 2011.

Grammelis, P., Kakaras, E.; Biomass Combustion Modeling in Fluidized Beds; Energy & Fuels, 2005, **19**(1), 292-297.

Gran, I. R., Ertesvag, I. S., Magnussen, B. F.; Influence of Turbulence Modeling on Predictions of Turbulent Combustion; AIAA journal, 1997, **35**(1), 106-110.

Gran, I. R., Melaaen, M. C., Magnussen, B. F.; Numerical simulation of local extinction effects in turbulent combustor flows of methane and air; Symposium (International) on Combustion, 1994, **25**(1), 1283-1291.

Gronli, M. G., Varhegyi, G., Di Blasi, C.; Thermogravimetric Analysis and Devolatilization Kinetics of Wood; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2002, **41**(17), 4201-4208.

Grotkjær, T., Dam-Johansen, K., Jensen, A. D., Glarborg, P.; An experimental study of biomass ignition; Fuel, 2003, **82**(7), 825-833.

Guardo, A., Coussirat, M., Recasens, F., Larrayoz, M. A., Escaler, X.; CFD study on particle-to-fluid heat transfer in fixed bed reactors: Convective heat transfer at low and high pressure; Chemical Engineering Science, 2006, **61**(13), 4341-4353.

Günther, R.; Verbrennung und Feuerungen; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 1984.

Habibi, A., De Wilde, J.; (2007) Kinetic Modeling of the Thermal Degradation of Methacrylate Copolymers by Thermogravimetric Methods; International Journal of Chemical Reactor Engineering, 5, Stand:

Hagge, M. J., Bryden, K. M.; Modeling the impact of shrinkage on the pyrolysis of dry biomass; Chemical Engineering Science, 2002, **57**(14), 2811-2823.

Hajek, J., Petr, P., Sarlej, M., Piskovsky, M., Parizek, T., Bebar, L., Stehlik, P.; Computational Analysis of Secondary Combustion Chamber in Hazardous Waste Incinerator; in: Proceedings of the 17th International Congress of Chemical and Process Engineering CHISA2006, Prag, Tschechische Republik, 2006.

Hallbäck, M., Henningson, D. S., Johansson, A. V., Alfredsson, P. H.; Turbulence and Transition Modelling; Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Niederlande, 1995.

Hämäläinen, J. P., Aho, M. J.; Effect of fuel composition on the conversion of volatile solid fuel-N to N2O and NO; Fuel, 1995, **74**(12), 1922-1924.

Hämäläinen, J. P., Aho, M. J., Tummavuori, J. L.; Formation of nitrogen oxides from fuel-N through HCN and NH3: a model-compound study; Fuel, 1994, **73**(12), 1894-1898.

Hammad, K. J., Shekarriz, A.; Turbulence in confined Axisymmetric Jets of Newtonian and Non-Newtonian Fluids; in: Proceedings of the ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting (FEDSM'98), Washington D.C., USA, 1998.

Hänel, D.; Molekulare Gasdynamik - Einführung in die kinetische Theorie der Gase und Lattice-Boltzmann-Methoden; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2004.

Hansen, L. A., Frandsen, F. J., Dam-Johansen, K., Henning Sund, S.; Quantification of fusion in ashes from solid fuel combustion; Thermochimica Acta, 1999, **326**(1-2), 105-117.

Hansen, L. A., Nielsen, H. P., Frandsen, F. J., Dam-Johansen, K., Hørlyck, S., Karlsson, A.; Influence of deposit formation on corrosion at a straw-fired boiler; Fuel Processing Technology, 2000, **64**(1-3), 189-209.

Hansson, K.-M., Samuelsson, J., Tullin, C., Åmand, L.-E.; Formation of HNCO, HCN, and NH3 from the pyrolysis of bark and nitrogen-containing model compounds; Combustion and Flame, 2004, **137**(3), 265-277.

Harasek, M., Jordan, C., Horvath, A.; www.cfd.at, Stand: 22.01.2014.

Harasek, M., Miltner, M., Kuttner, C., Federspiel, H., Dötzl, H., Leisch, K.; Endbericht Marktreife Weiterentwicklung einer neuartigen Verbrennungstechnologie für biogene Reststoffe; Projekt EnergyRest, FFG 818597, protectNET in COIN, Wien, Österreich, 2011.

Hartmann, H., Böhm, T., Maier, L.; Naturbelassene biogene Festbrennstoffe - umweltrelevante Eigenschaften und Einflussmöglichkeiten; Bayerisches Staatsministerium für Landesentwicklung und Umweltfragen, München, Deutschland, 2000.

Hartmann, H., Schneider, C.; Analysenergebnisse Ascheschmelzpunkte Maisganzpflanze; Technologie - und Förderzentrum im Kompetenzzentrum für Nachwachsende Rohstoffe (TFZ), Freising - Weihenstephan, Deutschland, 2003a.

Hartmann, H., Schneider, C.; Interner Analysenbericht über die Analyse von Brennstoffproben; Technologie - und Förderzentrum im Kompetenzzentrum für Nachwachsende Rohstoffe (TFZ), Freising - Weihenstephan, Deutschland, 2003b.

Heikkinen, J. M., Venneker, B. C. H., di Nola, G., de Jong, W., Spliethoff, H.; CFD simulation and experimental validation of co-combustion of chicken litter and MBM with pulverized coal in a flow reactor; Fuel Processing Technology, 2008, **89**(9), 874-889.

Henne, S.; Untersuchungen zum Einfluß fahrzeugerzeugter Turbulenz auf das Ausbreitungsverhalten von Luftschadstoffen in Straßenschluchten; 2001, Diplomarbeit, Universität Hamburg, Hamburg, Deutschland.

Henrich, E., Bürkle, S., Meza-Renken, Z. I., Rumpel, S.; Combustion and gasification kinetics of pyrolysis chars from waste and biomass; Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 1999, **49**(1-2), 221-241.

Hill, D. P.; The Computer Simulation of Dispersed Two-Phase Flows; 1998, Dissertation, Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London, England.

Hill, S. C., Douglas Smoot, L.; Modeling of nitrogen oxides formation and destruction in combustion systems; Progress in Energy and Combustion Science, 2000, **26**(4-6), 417-458.

Hjertager, L. K., Hjertager, B. H., Solberg, T.; CFD modelling of fast chemical reactions in turbulent liquid flows; Computers & Chemical Engineering, 2002, **26**(4-5), 507-515.

Hjertager, L. K., Osenbroch, J., Hjertager, B. H., Solberg, T.; Validation of the Eddy Dissipation Concept for fast chemical reactions in turbulent flows; 2000.

Hofbauer, H.; BIOBIB - A database for biofuels; Technische Universität Wien, Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften, http://www.vt.tuwien.ac.at/Biobib/biobib.html, Stand: 19. Februar 2009.

Hofbauer, H.; Vorlesung: "Chemische Verfahrenstechnik"; TU Wien, Mitschrift von Martin Miltner; 1999.

Hölling, M., Herwig, H.; CFD-TODAY: Anmerkungen zum kritischen Umgang mit kommerziellen Software-Programmpaketen; Forschung im Ingenieurwesen, 2004, **68**(3), 150-154.

Horne, P. A., Williams, P. T.; Influence of temperature on the products from the flash pyrolysis of biomass; Fuel, 1996, **75**(9), 1051-1059.

Howard, J. B., Williams, G. C., Fine, D. H.; Kinetics of carbon monoxide oxidation in postflame gases; in: Proceedings of the 14th International Symposium on Combustion, Pitsburgh, USA, 1973.

Hui, H., Kobayashi, T., Wu, S., Shen, G.; Changes to the vortical and turbulent structure of jet flows due to mechanical tabs; Proceedings of the I MECH E Part C Journal of Mechanical Engineering Science, 1999, **213**(4), 321-329.

Hulgaard, T., Dam-Johansen, K.; Homogeneous nitrous oxide formation and destruction under combustion conditions; AIChE Journal, 1993, **39**(8), 1342-1354.

Huttunen, M., Kjäldman, L., Saastamoinen, J. J.; Analysis of Grate Firing of Wood with Numerical Flow Simulation; IFRF Combustion Journal, 2004, **2004, March**(200401), 1-18.

Hwang, R. R., Jaw, S.-Y.; Second-Order Closure Turbulence Models: Their Achievements and Limitations; Proceedings of the National Science Council ROC(A), 1998, **22**(6), 703-722.

Ibsen, C. H., Helland, E., Hjertager, B. H., Solberg, T., Tadrist, L., Occelli, R.; Comparison of multifluid and discrete particle modelling in numerical predictions of gas particle flow in circulating fluidised beds; Powder Technology, 2004, **149**(1), 29-41.

Jäger, W., Rannacher, R., Warnatz, J.; Reactive Flows, Diffusion and Transport; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2007.

Jahnke, S., Kornev, N., Leder, A., Hassel, E.; LES simulation of jet mixing processes with heat transfer in turbulent pipe flow; Chemical Engineering & Technology, 2004, **27**(3), 243-248.

Jalan, R. K., Srivastava, V. K.; Studies on pyrolysis of a single biomass cylindrical pellet--kinetic and heat transfer effects; Energy Conversion and Management, 1999, **40**(5), 467-494.

Janse, A. M. C., de Jonge, H. G., Prins, W., van Swaaij, W. P. M.; Combustion Kinetics of Char Obtained by Flash Pyrolysis of Pine Wood; Industrial & Engineering Chemistry Research, 1998, **37**(10), 3909-3918.

Jenkins, B. M., Bakker, R. R., Wei, J. B.; On the properties of washed straw; Biomass and Bioenergy, 1996, **10**(4), 177-200.

Jenkins, B. M., Baxter, L. L., Miles, T. R., Miles, T. R.; Combustion properties of biomass; Fuel Processing Technology, 1998, **54**(1-3), 17-46.

Jensen, P. A., Frandsen, F. J., Dam-Johansen, K., Sander, B.; Experimental Investigation of the Transformation and Release to Gas Phase of Potassium and Chlorine during Straw Pyrolysis; Energy & Fuels, 2000, **14**(6), 1280-1285.

Jensen, P. A., Sander, B., Dam-Johansen, K.; Removal of K and Cl by leaching of straw char; Biomass and Bioenergy, 2001, **20**(6), 447-457.

Jensen, P. A., Stenholm, M., Hald, P.; Deposition Investigation in Straw-Fired Boilers; Energy & Fuels, 1997, **11**(5), 1048-1055.

Jimenez, S., Ballester, J.; Influence of operating conditions and the role of sulfur in the formation of aerosols from biomass combustion; Combustion and Flame, 2005, **140**(4), 346-358.

Johansson, R., Thunman, H., Leckner, B.; Sensitivity Analysis of a Fixed Bed Combustion Model; Energy & Fuels, 2007, **21**(3), 1493-1503.

Jones, J. M., Patterson, P. M., Pourkashanian, M., Williams, A., Arenillas, A., Rubiera, F., Pis, J. J.; Modelling NOx formation in coal particle combustion at high temperature: an investigation of the devolatilisation kinetic factors; Fuel, 1999, **78**(10), 1171-1179.

Jones, J. M., Pourkashanian, M., Williams, A., Hainsworth, D.; A comprehensive biomass combustion model; Renewable Energy, 2000, **19**(1-2), 229-234.

Jones, W. P., Launder, B. E.; The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence; International Journal of Heat and Mass Transfer, 1972, **15**(2), 301-314.

Joos, F.; Technische Verbrennung; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2006.

Jurena, T., Recman, M., Hajek, J.; Simulation of biomass drying in fixed bed of experimental grate combustion reactor; Chemical Engineering Transactions, 2009, **18**, 599-604.

Kær, S. K.; Numerical investigation of ash deposition in straw-fired boilers; 2004a, Dissertation, Institute of Energy Technology, Aalborg University, Aalborg, Dänemark.

Kær, S. K.; Numerical modelling of a straw-fired grate boiler; Fuel, 2004b, **83**(9), 1183-1190.

Kær, S. K.; Straw combustion on slow-moving grates--a comparison of model predictions with experimental data; Biomass and Bioenergy, 2005, **28**(3), 307-320.

Kær, S. K., Rosendahl, L.; Extending the Modelling Capacity of CFD Codes applied to Biomass-Fired Boilers; in: Proceedings of the 16th International Conference on

Efficiency, Costs, Optimization, Simulation and Environmental Impact of Energy Systems (ECOS), Kopenhagen, Dänemark, 2003.

Kær, S. K., Rosendahl, L., Baxter, L.; Extending the Capability of CFD Codes to Assess Ash Related Problems in Biomass Fired Boilers; in: Proceedings of the 227th ACS Annual Meeting, Division of Fuel Chemistry, Anaheim California, USA, 2004.

Kær, S. K., Rosendahl, L., Overgaard, P.; Numerical Analysis of Co-firing Coal and Straw in Utility Boiler at MIDTKRAFT ENERGY COMPANY, Denmark; in: Proceedings of the 4th ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference, Athen, Griechenland, 1998.

Kaltschmitt, M., Hartmann, H.; Energie aus Biomasse - Grundlagen, Techniken und Verfahren; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2001.

Kantorovich, I. I., Bar-Ziv, E.; Heat transfer within highly porous chars: a review; Fuel, 1999, **78**(3), 279-299.

Karl, J.; Dezentrale Energiesysteme, 2. Auflage; Oldenburg Wissenschaftsverlag, München, Deutschland, 2006.

Kaufmann, H.; Chlorine-Compounds in Emissions And Residues From The Combustion Of Herbaceous Biomass; 1994, Dissertation, Institute of Energy Technology, Eidgenössische Technische Hochschule ETH, Zürich, Schweiz.

Keating, E. L.; Applied Combustion, 2nd Edition; CRC Press, Boca Raton, USA, 2007.

Keller, R.; Primärmassnahmen zur NOx-Minderung bei der Holzverbrennung mit dem Schwerpunkt der Luftstufung; 1994a, Dissertation, Institute of Energy Technology, Eidgenössische Technische Hochschule ETH, Zürich, Schweiz.

Keller, R.; Primärseitige NOx-Minderung mittels Luftstufung bei der Holzverbrennung; BWK - Brennstoff, Wärme, Kraft, 1994b, **46**(11/12), 483-488.

Keramida, E. P., Liakos, H. H., Founti, M. A., Boudouvis, A. G., Markatos, N. C.; Radiative heat transfer in natural gas-fired furnaces; International Journal of Heat and Mass Transfer, 2000, **43**(10), 1801-1809.

Kerschbaum, A., Friedl, A., Pfeffer, M., Beckmann, G.; Comparison of Process-Simulation Programs for the Simulation of a Biomass-Fired Combustion-System; in: Proceedings of the 2nd World Conference on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection, Rom, Italien, 2004.

Khan, W. Z., Gibbs, B. M.; SOX emissions from a fluidized-bed combustor with and without limestone addition; Energy, 1996, **21**(2), 105-113.

Khor, A., Ryu, C., Yang, Y.-b., Sharifi, V. N., Swithenbank, J.; Straw combustion in a fixed bed combustor; Fuel, 2007, **86**(1-2), 152-160.

Kicherer, A., Spliethoff, H., Maier, H., Hein, K. R. G.; The effect of different reburning fuels on NOx-reduction; Fuel, 1994, **73**(9), 1443-1446.

Kiesewetter, F., Hirsch, C., Fritz, J., Kröner, M., Sattelmayer, T.; Two-dimensional Flashback Simulation in Strongly Swirling Flows; in: Proceedings of the ASME Turbo Expo 2003: Power for Land, Sea, and Air, Atlanta Georgia, USA, 2003.

Kilpinen, P., Leppalahti, J., Coda Zabetta, E., Hupa, M.; Gas-Phase Conversion of NH3 to N2 in Gasification; IFRF Combustion Journal, 1999, **1999, September**(199901), 1-35.

Kim, O. J., Song, T. H.; Data base of WSGGM-based spectral model for radiation properties of combustion products; Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2000, **64**(4), 379-394.

Klason, T.; Modelling of Biomass Combustion in Furnaces; 2006, Dissertation, Division of Fluid Mechanics, Department of Energy Science, Lund Institute of Technology, Lund, Schweden.

Klason, T., Bai, X. S.; Computational study of the combustion process and NO formation in a small-scale wood pellet furnace; Fuel, 2007, **86**(10-11), 1465-1474.

Klason, T., Bai, X. S., Bahador, M., Nilsson, T. K., Sundén, B.; Investigation of radiative heat transfer in fixed bed biomass furnaces; Fuel, 2008, **87**(10-11), 2141-2153.

Klein, M. T., Virk, P. S.; Modeling of Lignin Thermolysis; Energy & Fuels, 2008, **22**(4), 2175-2182.

Knaus, H., Schneider, R., Han, X., Ströhle, J., Schnell, U., Hein, K. R. G.; Comparison of Different Radiative Heat Transfer Models and their Applicability to Coal-Fired Utility Boiler Simulations; in: Proceedings of the 4th International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment, Lissabon, Portugal, 1997.

Kolmogorov, A. N.; Equations of turbulent motion of an incompressible fluid; Izv. Akad. Nauk SSSR, Seria fizicheska VI, 1942, **6**(1-2), 56-58.

Koóš, M., Repáš, M., Košík, M., Reiser, V., Mihálov, V., Čiha, M.; Thermal degradation of corncobs and straw; Chemical Papers, 1983, **37**(3), 399-408.

Koppatz, S., Pfeifer, C., Rauch, R., Hofbauer, H., Marquard-Moellenstedt, T., Specht, M.; H2 rich product gas by steam gasification of biomass with in situ CO2 absorption in a dual fluidized bed system of 8 MW fuel input; Fuel Processing Technology, 2009, **90**(7–8), 914-921.

Koufopanos, C. A., Papayannakos, N., Maschio, G., Lucchesi, A.; Modelling of the Pyrolysis of Biomass Particles. Studies on Kinetics, Thermal and Heat Transfer Effects.; The Canadian journal of Chemical Engineering, 1991, **69**, 907-915.

Kristensen, E. F., Kristensen, J. K.; Development and test of small-scale batch-fired straw boilers in Denmark; Biomass and Bioenergy, 2004, **26**(6), 561-569.

Kristensen, P. G., Glarborg, P., Dam-Johansen, K.; Nitrogen chemistry during burnout in fuel-staged combustion; Combustion and Flame, 1996, **107**(3), 211-222.

Kumar, B., Prasad, B.; Computational flow and heat transfer of a row of circular jets impinging on a concave surface; Heat and Mass Transfer, 2008, **44**(6), 667-678.

Kunii, D., Smith, J. M.; Heat Transfer Characteristics of Porous Rocks; AIChE Journal, 1960, **6**(1), 71-78.

Kuttner, C., Miltner, M., Harasek, M., Friedl, A.; Process-Simulation and Computational Fluid Dynamics for the Development of a Novel Solid Biomass-Fired Combustor; Chemical Engineering Transactions, 2010, **21**, 1093-1098.

Lancet; Global CO2 emissions: time to mitigate and adapt; The Lancet, 2011, **377**(9782), 1978.

Langrish, T., Kashinath, K.; (2007) Assessing the Deposition of a Water Spray on a Plate in a Simple Box Configuration Using Computational Fluid Dynamics (CFD); Chemical Product and Process Modeling, 2, Stand:

Larfeldt, J., Leckner, B., Melaaen, M. C.; Modelling and measurements of heat transfer in charcoal from pyrolysis of large wood particles; Biomass and Bioenergy, 2000a, **18**(6), 507-514.

Larfeldt, J., Leckner, B., Melaaen, M. C.; Modelling and measurements of the pyrolysis of large wood particles; Fuel, 2000b, **79**(13), 1637-1643.

Larsson, J.; A Note on Numerical Error; Chalmers University of Technology, Department of Thermo and Fluid Dynamics, Göteborg, Schweden, 2001.

Launder, B. E., Reece, G. J., Rodi, W.; Progress in the development of a Reynolds-stress turbulence closure; Journal of Fluid Mechanics, 1975, **68**(03), 537-566.

Launder, B. E., Spalding, D. B.; Lectures in Mathematical Models of Turbulence; Academic Press, London, Grossbritannien, 1972.

Launder, B. E., Spalding, D. B.; The numerical computation of turbulent flows; Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1974, **3**(2), 269-289.

Lázaro, M. J., Ibarra, J., Moliner, R., González de Andrés, A., Thomas, K. M.; The release of nitrogen during the combustion of coal chars: the role of volatile matter and surface area; Fuel, 1996, **75**(8), 1014-1024.

Lee, D. H., Yang, H., Yan, R., Liang, D. T.; Prediction of gaseous products from biomass pyrolysis through combined kinetic and thermodynamic simulations; Fuel, 2007, **86**(3), 410-417.

Leppälahti, J., Koljonen, T.; Nitrogen evolution from coal, peat and wood during gasification: Literature review; Fuel Processing Technology, 1995, **43**(1), 1-45.

Lesieur, M., Metais, O., Comte, P.; Large-Eddy Simulations of Turbulence; Cambridge University Press, Cambridge, Grossbritannien, 2005.

Leuckel, W., Römer, R.; Schadstoffe aus Verbrennungsprozessen; VDI-Berichte, 1979, **346**, 323-347.

Leveque, R. J.; Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems; Cambridge University Press, Cambridge, Grossbritannien, 2004.

Lewandowski, I., Kicherer, A.; Combustion quality of biomass: practical relevance and experiments to modify the biomass quality of Miscanthus x giganteus; European Journal of Agronomy, 1997, **6**(3-4), 163-177.

Li, S., Lyons-Hart, J., Banyasz, J., Shafer, K.; Real-time evolved gas analysis by FTIR method: an experimental study of cellulose pyrolysis; Fuel, 2001, **80**(12), 1809-1817.

Li, Z., Zeng, L., Zhao, G., Shen, S., Zhang, F.; Particle sticking behavior near the throat of a low-NOx axial-swirl coal burner; Applied Energy, 2011, **88**(3), 650-658.

Liang, H., Maxworthy, T.; Experimental investigations of a swirling jet in both stationary and rotating surroundings; Experiments in Fluids, 2008, **45**(2), 283-293.

Liang, X. H., Kozinski, J. A.; Numerical modeling of combustion and pyrolysis of cellulosic biomass in thermogravimetric systems; Fuel, 2000, **79**(12), 1477-1486.

Lide, D. R.; Handbook of Chemistry and Physics, 84th Edition; CRC Press, Boca Raton, USA, 2004.

Lionta, G. D., Christoforou, S. C., Efthimiadis, E. A., Vasalos, I. A.; Selective Catalytic Reduction of NO with Hydrocarbons: Experimental and Simulation Results; Industrial & Engineering Chemistry Research, 1996, **35**(8), 2508-2515.

Liu, H., Gibbs, B. M.; Modelling of NO and N2O emissions from biomass-fired circulating fluidized bed combustors; Fuel, 2002a, **81**(3), 271-280.

Liu, H., Gibbs, B. M.; Modeling NH3 and HCN emissions from biomass circulating fluidized bed gasifiers; Fuel, 2003, **82**(13), 1591-1604.

Liu, K., Pan, W. P., Riley, J. T.; A study of chlorine behavior in a simulated fluidized bed combustion system; Fuel, 2000, **79**(9), 1115-1124.

Liu, N. A., Fan, W., Dobashi, R., Huang, L.; Kinetic modeling of thermal decomposition of natural cellulosic materials in air atmosphere; Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2002b, **63**(2), 303-325.

Loeffler, G., Wartha, C., Winter, F., Hofbauer, H.; Study on NO and N2O Formation and Destruction Mechanisms in a Laboratory-Scale Fluidized Bed; Energy & Fuels, 2002, **16**(5), 1024-1032.

Löffler, G., Winter, F., Hofbauer, H.; Parametric Modeling Study of Volatile Nitrogen Conversion to NO and N2O During Biomass Combustion; in Progress in Thermochemical Biomass Conversion, Blackwell Science Ltd, 641-655, 2008.

Löhner, R.; Applied Computational Fluid Dynamics Techniques; John Wiley & Sons, Chichester, England, 2001.

Lomax, H., Pulliam, T. H., Zingg, D. W.; Fundamentals of Computational Fluid Dynamics; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2003.

Loos, T., Mollekopf, N.; CFD-Simulation der chemischen Absorption im Strahlwäscher; Chemie Ingenieur Technik, 2004, **76**(11), 1644-1649.

Lu, H., Robert, W., Peirce, G., Ripa, B., Baxter, L. L.; Comprehensive Study of Biomass Particle Combustion; Energy & Fuels, 2008, **22**(4), 2826-2839.

Ma, F., Satish, M., Islam, M. R.; Large Eddy Simulation of Thermal Jets in Cross Flow; Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics, 2007, **1**(1), 25-35.

Magel, H. C., Greul, U., Schnell, U., Spliethoff, H., Hein, K. R. G.; NOx- reduction with staged combustion - comparison of experimental and modelling results; in: Proceedings of the Joint Meeting of the Portuguese, British, Spanish and Swedish Section of the Combustion Institute, Madeira, Portugal, 1996a.

Magel, H. C., Schnell, U., Hein, K. R. G.; Modelling of Hydrocarbon and Nitrogen Chemistry in Turbulent Combustor Flows using detailed Reaction Mechanisms; in: Proceedings of the 3rd Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems, Heidelberg, Deutschland, 1996b.

Magel, H. C., Schnell, U., Hein, K. R. G.; Simulation of Detailed Chemistry in a Turbulent Combustor Flow; in: Proceedings of the 26th International Symposium on Combustion, Neapel, Italien, 1996c.

Magnussen, B. F.; On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow; in: Proceedings of the 19th American Institute of Aeronautics and Astronautics Aerospace Science Meeting, St. Louis, Missouri, USA, 1981.

Magnussen, B. F.; Modeling of Pollutant formation in Gas Turbine Combustors Based on the Eddy Dissipation Concept; in: Proceedings of the 18th International Congress on Combustion Engines, Tianjin, China, 1989.

Magnussen, B. F.; The Eddy Dissipation Concept. A Bridge between Science and Technology; in: Proceedings of the ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion, Lissabon, Portugal, 2005.

Magnussen, B. F., Hjertager, B. H.; On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion; Symposium (International) on Combustion, 1977, **16**(1), 719-729.

Magnussen, B. F., Hjertager, B. H., Olsen, J. G., Bhaduri, D.; Effects of turbulent structure and local concentrations on soot formation and combustion in C2H2 diffusion flames; Symposium (International) on Combustion, 1979, **17**(1), 1383-1393.

Maiti, S., Purakayastha, S., Ghosh, B.; Thermal characterization of mustard straw and stalk in nitrogen at different heating rates; Fuel, 2007, **86**(10-11), 1513-1518.

Manickam, M., Schwarz, M. P., Perry, J.; CFD modelling of waste heat recovery boiler; Applied Mathematical Modelling, 1998, **22**(10), 823-840.

Mansaray, K. G., Ghaly, A. E.; Determination of kinetic parameters of rice husks in oxygen using thermogravimetric analysis; Biomass and Bioenergy, 1999, **17**(1), 19-31.

Marutzky, R., Seeger, K.; Energie aus Holz und anderer Biomasse; DRW-Verlag Weinbrenner, Leinfelden-Echterdingen, Deutschland, 1999.

McKendry, P.; Energy production from biomass (part 1): overview of biomass; Bioresource Technology, 2002a, **83**(1), 37-46.

McKendry, P.; Energy production from biomass (part 2): conversion technologies; Bioresource Technology, 2002b, **83**(1), 47-54.

Menter, F. R.; Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications; AIAA journal, 1994, **32**(8), 1598-1605.

Mészáros, E., Várhegyi, G., Jakab, E., Marosvölgyi, B.; Thermogravimetric and Reaction Kinetic Analysis of Biomass Samples from an Energy Plantation; Energy & Fuels, 2004, **18**(2), 497-507.

Michelsen, H. P., Frandsen, F., Dam-Johansen, K., Larsen, O. H.; Deposition and high temperature corrosion in a 10 MW straw fired boiler; Fuel Processing Technology, 1998, **54**(1-3), 95-108.

Micklow, G. J., Gong, W.; A multistage combustion model and soot formation model for direct-injection diesel engines; Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering, 2002, **216**, 495-504.

Migliavacca, G., Parodi, E., Bonfanti, L., Faravelli, T., Pierucci, S., Ranzi, E.; A general mathematical model of solid fuels pyrolysis; Energy, 2005, **30**(8), 1453-1468.

Miller, B., Tillman, D. A.; Combustion Engineering Issues for Solid Fuels; Academic Press, San Diego, USA, 2008.

Miltner, A., Beckmann, G., Friedl, A.; Preventing the chlorine-induced high temperature corrosion in power boilers without loss of electrical efficiency in steam cycles; Applied Thermal Engineering, 2006, **26**(16), 2005-2011.

Miltner, M., Harasek, M.; CFD-Berechnungen für die Entwicklung und den Prototyp eines Schacht-Rieseltrockner-Moduls; Technische Universität Wien, Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften, Wien, Österreich, 2007.

Miltner, M., Harasek, M.; Optimierung einer innovativen Trocknungsanlage für rieselfähige HolzHackgüter mittels numerischer Strömungssimulation; Chemie Ingenieur Technik, 2008, **80**(9), 1318-1318.

Mishra, S. C., Prasad, M.; Radiative heat transfer in participating media - A review; Sadhana, 1998, **23**(2), 213-232.

Mitchell, J. W., Tarbell, J. M.; A Kinetic Model of Nitric Oxide Formation During Pulverized Coal Combustion; AIChE Journal, 1982, **28**(2), 302-311.

Miyanami, K., Fan, L.-S., Fan, L. T., Walawender, W. P.; A Mathematical Model for Pyrolysis of a Solid Particle - Effects of the Heat of Reaction; The Canadian journal of Chemical Engineering, 1977, **55**, 317-325.

Möbus, H., Kaufmann, D.; Koppelung von CFD und Prozesssimulation zur industriellen Auslegung von Spaltöfen für Olefinanlagen; Chemie Ingenieur Technik, 2003, **75**(1-2), 41-52.

Mousquès, P., Dirion, J. L., Grouset, D.; Modeling of solid particles pyrolysis; Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2001, **58-59**, 733-745.

Mueller, C., Brink, A., Hupa, M.; Numerical Simulation of the Combustion Behavior of Different Biomasses in a Bubbling Fluidized Bed Boiler; in: Proceedings of the 18th International Conference on Fluidized Bed Combustion (FBC2005), Toronto, Kanada, 2005.

Mueller, M. A., Yetter, R. A., Dryer, F. L.; Flow Reactor Studies and Kinetic Modeling of the H2 /O2 /NOx and CO/H2O/O2 /NOx Reactions; International Journal of Chemical Kinetics, 1999, **31**(10), 705-724.

Murty Kanury, A.; Thermal decomposition kinetics of wood pyrolysis; Combustion and Flame, 1972, **18**(1), 75-83.

Murugan, P., Mahinpey, N., Johnson, K. E., Wilson, M.; Kinetics of the Pyrolysis of Lignin Using Thermogravimetric and Differential Scanning Calorimetry Methods; Energy & Fuels, 2008, **22**(4), 2720-2724.

Narayan, R., Antal, M. J.; Thermal Lag, Fusion, and the Compensation Effect during Biomass Pyrolysis†; Industrial & Engineering Chemistry Research, 1996, **35**(5), 1711-1721.

Naser, J.; Industrial Application of CFD - a Review of few Examples; in: Proceedings of the 7th International Conference on CFD in the Process Industries CSIRO, Melbourne, Australien, 2009.

Nejat, P., Jomehzadeh, F., Taheri, M. M., Gohari, M., Abd. Majid, M. Z.; A global review of energy consumption, CO2 emissions and policy in the residential sector (with an overview of the top ten CO2 emitting countries); Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2015, **43**(0), 843-862.

Nellasamy, M.; Survey of Turbulence Models for the Computation of Turbulent Jet Flow and Noise; NASA, Brook Park Ohio, USA, 1999.

Neubarth, J., Brauner, G., Faninger, G., Goldbrunner, J., Hofbauer, H., Kaltschmitt, M., Mairitsch, K., Streicher, W., Wilk, H.; Erneuerbare Energien in Österreich; Springer Verlag, Wien, Österreich, 2000.

Neubauer, Y.; Nutzung von Biomasse zur Energiegewinnung; Chemie Ingenieur Technik, 2011, **83**(11), 1880-1889.

Nielsen, C., Larsen, M. G., Nielsen, V., Zielke, U., Kristensen, J. K., Holm-Christensen, B.; Stroh als Energieträger: Technik - Umwelt - Ökonomie; Centre for Biomass Technology, Arhus, Dänemark, 1998.

Nielsen, H. P., Baxter, L. L., Sclippab, G., Morey, C., Frandsen, F. J., Dam-Johansen, K.; Deposition of potassium salts on heat transfer surfaces in straw-fired boilers: a pilot-scale study; Fuel, 2000, **79**(2), 131-139.

Nirmolo, A., Woche, H., Specht, E.; Temperature Homogenization of Reactive and Non-Reactive Flows after Radial Jet Injections in Confined Cross-Flow; Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics, 2008, **2**(1), 85-94.

NIST; Thermophysical Properties of Fluid Systems; National Institute of Standards and Technology, http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/, Stand: 16. März 2009.

Norstrom, T., Kilpinen, P., Brink, A., Vakkilainen, E., Hupa, M.; Comparisons of the Validity of Different Simplified NH3-Oxidation Mechanisms for Combustion of Biomass; Energy & Fuels, 2000, **14**(5), 947-952.

Novozhilov, V.; Computational fluid dynamics modeling of compartment fires; Progress in Energy and Combustion Science, 2001, **27**(6), 611-666.

Nunn, T. R., Howard, J. B., Longwell, J. P., Peters, W. A.; Product compositions and kinetics in the rapid pyrolysis of milled wood lignin; Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development, 1985a, **24**(3), 844-852.

Nunn, T. R., Howard, J. B., Longwell, J. P., Peters, W. A.; Product compositions and kinetics in the rapid pyrolysis of sweet gum hardwood; Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development, 1985b, **24**(3), 836-844.

Nussbaumer, T.; Primärmaßnahmen zur Stickoxidminderung bei Holzfeuerungen. Teil 1: Bildungswege von Stickoxiden; BWK - Brennstoff, Wärme, Kraft, 1997a, **49**(1/2), 46-49.

Nussbaumer, T.; Primärmaßnahmen zur Stickoxidminderung bei Holzfeuerungen. Teil 2: Luft- und Brennstoffstufung; BWK - Brennstoff, Wärme, Kraft, 1997b, **49**(3), 59-62.

Nussbaumer, T.; Combustion and Co-combustion of Biomass: Fundamentals, Technologies, and Primary Measures for Emission Reduction; Energy & Fuels, 2003, **17**(6), 1510-1521.

Obernberger, I.; Decentralized biomass combustion: state of the art and future development; Biomass and Bioenergy, 1998, **14**(1), 33-56.

Obernberger, I.; Abbrand- und NOx-Simulation für Biomassefeuerungen; Bundesministerium für Verkehr, Innovation und Technologie, Wien, Österreich, 2003.

Obernberger, I., Brunner, T., Bärnthaler, G.; Chemical properties of solid biofuels - significance and impact; Biomass and Bioenergy, 2006, **30**(11), 973-982.

OMV; Lieferspezifikation Heizöl schwer 1% LoNi, PdNr. 710220; OMV AG, Wien, 2003.

Oran, E. S., Boris, J. P.; Numerical Simulation of Reactive Flow, 2nd Edition; Cambridge University Press, Cambridge, Grossbritannien, 2001.

Orfão, J. J. M., Antunes, F. J. A., Figueiredo, J. L.; Pyrolysis kinetics of lignocellulosic materials--three independent reactions model; Fuel, 1999, **78**(3), 349-358.

Oser, M., Nussbaumer, T., Müller, P., Mohr, M., Figi, R.; Grundlagen der Aerosolbildung in Holzfeuerungen; Bundesamt für Energie, Bern, Schweiz, 2003.

Oser, M., Nussbaumer, T., Müller, P., Mohr, M., Figi, R.; Mechanisms of particle formation in biomass combustion; in: Proceedings of the 2nd World Conference on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection, Rom, Italien, 2004.

Padouvas, E.; Analysenbericht über die Analyse von Brennstoffproben; Prüflabor für Feuerungsanlagen am Institut für Verfahrenstechnik TU-Wien, Wien, 2003a.

Padouvas, E.; Interner Analysenbericht über die Analyse von Brennstoffproben; Prüflabor für Feuerungsanlagen am Institut für Verfahrenstechnik TU-Wien, Wien, 2003b.

Padouvas, E.; Interner Analysenbericht über die Analyse von Brennstoffproben (Energiegras); Prüflabor für Feuerungsanlagen am Institut für Verfahrenstechnik TU-Wien, Wien, 2004.

Pagels, J., Strand, M., Rissler, J., Szpila, A., Gudmundsson, A., Bohgard, M., Lillieblad, L., Sanati, M., Swietlicki, E.; Characteristics of aerosol particles formed during grate combustion of moist forest residue; Journal of Aerosol Science, 2003, **34**(8), 1043-1059.

Parikh, J., Channiwala, S. A., Ghosal, G. K.; A correlation for calculating HHV from proximate analysis of solid fuels; Fuel, 2005, **84**(5), 487-494.

Parikh, J., Channiwala, S. A., Ghosal, G. K.; A correlation for calculating elemental composition from proximate analysis of biomass materials; Fuel, 2007, **86**(12-13), 1710-1719.

Paschedag, A. R.; CFD in der Verfahrenstechnik - Allgemeine Grundlagen und mehrphasige Anwendungen; Wiley-VCH Verlag, Weinheim, Deutschland, 2004.

Paul, M.; On the effects of high-order scattering in 3D cubical and rectangular furnaces; Heat and Mass Transfer, 2008, **44**(11), 1337-1344.

Pedersen, L. S., Nielsen, H. P., Kiil, S., Hansen, L. A., Dam-Johansen, K., Kildsig, F., Christensen, J., Jespersen, P.; Full-scale co-firing of straw and coal; Fuel, 1996, **75**(13), 1584-1590.

Perry, S. T., Fletcher, T. H., Solum, M. S., Pugmire, R. J.; Modeling Nitrogen Evolution during Coal Pyrolysis Based on a Global Free-Radical Mechanism; Energy & Fuels, 2000, **14**(5), 1094-1102.

Pershing, D. W., Wendt, J. O. L.; Relative Contributions of Volatile Nitrogen and Char Nitrogen to NOx Emissions from Pulverized Coal Flames; Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development, 1979, **18**(1), 60-67.

Persson, M.; Predictive Tools for Turbulent Reacting Flows; 2001, Diplomarbeit, Department of Mechanical Engineering, Division of Fluid Mechanics, Lulea University of Technology, Lulea, Schweden.

Peters, B., Bruch, C.; Drying and pyrolysis of wood particles: experiments and simulation; Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2003a, **70**(2), 233-250.

Peters, B., Schröder, E., Bruch, C.; Measurements and particle resolved modelling of the thermo- and fluid dynamics of a packed bed; Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2003b, **70**(2), 211-231.

Peters, B., Schröder, E., Bruch, C., Nussbaumer, T.; Measurements and particle resolved modelling of heat-up and drying of a packed bed; Biomass and Bioenergy, 2002, **23**(4), 291-306.

Peters, N.; Turbulent Combustion; Cambridge University Press, Cambridge, Großbritannien, 2004.

Poling, B. E., Prausnitz, J. M., O´Connell, J. P.; The Properties of Gases and Liquids, 5th Edition; McGraw-Hill, New York, USA, 2001.

Prazak-Reisinger, H.; Gasbeschaffenheit bei OMV-ÜMS Auersthal; OMV AG, 2013.

Pronobis, M.; Evaluation of the influence of biomass co-combustion on boiler furnace slagging by means of fusibility correlations; Biomass and Bioenergy, 2005, **28**(4), 375-383.

Purvis, M. R. I., Tadulan, E. L., Tariq, A. S.; NOx control by air staging in a small biomass fuelled underfeed stoker; International Journal of Energy Research, 2000, **24**(10), 917-933.

Pyle, D. L., Zaror, C. A.; Heat transfer and kinetics in the low temperature pyrolysis of solids; Chemical Engineering Science, 1984, **39**(1), 147-158.

Pyykönen, J., Jokiniemi, J.; Modelling alkali chloride superheater deposition and its implications; Fuel Processing Technology, 2003, **80**(3), 225-262.

Qi, G., Yang, R. T.; Low-temperature selective catalytic reduction of NO with NH3 over iron and manganese oxides supported on titania; Applied Catalysis B: Environmental, 2003a, **44**(3), 217-225.

Qi, G., Yang, R. T.; Performance and kinetics study for low-temperature SCR of NO with NH3 over MnOx-CeO2 catalyst; Journal of Catalysis, 2003b, **217**(2), 434-441.

Radmanesh, R., Courbariaux, Y., Chaouki, J., Guy, C.; A unified lumped approach in kinetic modeling of biomass pyrolysis; Fuel, 2006, **85**(9), 1211-1220.

Rauch, R., Kiennemann, A., Sauciuc, A.; Chapter 12 - Fischer-Tropsch Synthesis to Biofuels (BtL Process); in The Role of Catalysis for the Sustainable Production of Bio-fuels and Bio-chemicals, Elsevier, Amsterdam, 397-443, 2013.

Ravary, B., Johansen, S. T.; 2D Modeling of the Combustion and NOx Formation in Furnaces producing FeSi; in: Proceedings of the 2nd International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries (CSIRO), Melbourne, Australien, 1999.

Raveendran, K., Ganesh, A.; Heating value of biomass and biomass pyrolysis products; Fuel, 1996a, **75**(15), 1715-1720.

Raveendran, K., Ganesh, A.; Adsorption characteristics and pore-development of biomass-pyrolysis char; Fuel, 1998, **77**(7), 769-781.

Raveendran, K., Ganesh, A., Khilar, K. C.; Influence of mineral matter on biomass pyrolysis characteristics; Fuel, 1995, **74**(12), 1812-1822.

Raveendran, K., Ganesh, A., Khilar, K. C.; Pyrolysis characteristics of biomass and biomass components; Fuel, 1996b, **75**(8), 987-998.

Rehm, M., Seifert, P., Meyer, B.; Theoretical and numerical investigation on the EDC-model for turbulence-chemistry interaction at gasification conditions; Computers & Chemical Engineering, 2009, **33**(2), 402-407.

Reina, J., Velo, E., Puigjaner, L.; Kinetic Study of the Pyrolysis of Waste Wood; Industrial & Engineering Chemistry Research, 1998, **37**(11), 4290-4295.

Repić, B. S., Dakić, D. V., Erić, A. M., Djurović, D. M., Marinković, A. D., Nemoda, S. D.; Investigation of the cigar burner combustion system for baled biomass; Biomass and Bioenergy, 2013, **58**(0), 10-19.

Reynolds, O.; On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids and the Determination of the Criterion; Philosophical Transactions of the Royal Society of London. A, 1895, **186**(ArticleType: research-article / Full publication date: 1895 / Copyright © 1895 The Royal Society), 123-164.

Roberts, A. F.; A review of kinetics data for the pyrolysis of wood and related substances; Combustion and Flame, 1970, **14**(2), 261-272.

Robinson, A. L., Buckley, S. G., Yang, N., Baxter, L. L.; Experimental Measurements of the Thermal Conductivity of Ash Deposits: Part 2. Effects of Sintering and Deposit Microstructure; Energy & Fuels, 2001, **15**(1), 75-84.

Rocca, P. A. D., Cerrella, E. G., Bonelli, P. R., Cukierman, A. L.; Pyrolysis of hardwoods residues: on kinetics and chars characterization; Biomass and Bioenergy, 1999, **16**(1), 79-88.

Rosa, L. P., Ribeiro, S. K.; The Present, Past, and Future Contributions to Global Warming of CO2 Emissions from Fuels; Climatic Change, 2001, **48**(2), 289-307.

Rostami, A. A., Hajaligol, M. R., Wrenn, S. E.; A biomass pyrolysis sub-model for CFD applications; Fuel, 2004, **83**(11-12), 1519-1525.

Russell, N. V., Beeley, T. J., Man, C. K., Gibbins, J. R., Williamson, J.; Development of TG measurements of intrinsic char combustion reactivity for industrial and research purposes; Fuel Processing Technology, 1998, **57**(2), 113-130.

Saario, A., Rebola, A., Coelho, P. J., Costa, M., Oksanen, A.; Heavy fuel oil combustion in a cylindrical laboratory furnace: measurements and modeling; Fuel, 2005, **84**(4), 359-369.

Saastamoinen, J., Richard, J.-R.; Simultaneous drying and pyrolysis of solid fuel particles; Combustion and Flame, 1996, **106**(3), 288-300.

Saastamoinen, J. J., Kilpinen, P. T., Norstrom, T. N.; New Simplified Rate Equation for Gas-Phase CO Oxidation at Combustion; Energy & Fuels, 2000, **14**(6), 1156-1160.

Saenger, M., Hartge, E. U., Werther, J., Ogada, T., Siagi, Z.; Combustion of coffee husks; Renewable Energy, 2001, **23**(1), 103-121.

Salzmann, R., Nussbaumer, T.; Fuel Staging for NOx Reduction in Biomass Combustion: Experiments and Modeling; Energy & Fuels, 2001, **15**(3), 575-582.

Sazhin, S. S., Sazhina, E. M.; The effective-emissivity approximation for the thermal radiation transfer problem; Fuel, 1996a, **75**(14), 1646-1654.

Sazhin, S. S., Sazhina, E. M., Faltsi-Saravelou, O., Wild, P.; The P-1 model for thermal radiation transfer: advantages and limitations; Fuel, 1996b, **75**(3), 289-294.

Scharler, R.; Entwicklung und Optimierung von Biomasse-Rostfeuerungen durch CFD-Analyse; 2001, Dissertation, Institut für Grundlagen der Verfahrenstechnik und Anlagentechnik, Technische Universität Graz, Graz, Österreich.

Scharler, R., Obernberger, I.; Numerical Modelling of Biomass Grate Furnaces; in: Proceedings of the 5th European Conference on Industrial Furnaces and Boilers, Porto, Portugal, 2000a.

Scharler, R., Obernberger, I., Längle, G., Heinzle, J.; CFD Analysis of Air Staging and Flue Gas Recirculation in Biomass Grate Furnaces; in: Proceedings of the 1st World Conference on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection, Sevilla, Spanien, 2000b.

Schlichting, H., Gersten, K.; Grenzschicht-Theorie, 9. Auflage; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 1997.

Schmidt, U., Cremer, I., Schroth, G.; Neue Trends in der Verbrennungssimulation; VDI-Berichte, 2003, **1750**, 233-240.

Schmidt, U., Rexroth, C.-H., Scharler, R., Cremer, I.; New Trends in Combustion Simulation; in: Proceedings of the 2nd International SBF568-Workshop in collaboration with ERCOFTAC group SIG 28 and DGLR group "Propulsion", Heidelberg, Deutschland, 2004.

Schneider, C., Hartmann, H.; Maize as energy crop for combustion - Optimisation of fuel supply; in: Proceedings of the 14th European Biomass Conference and Exhibition, Paris, Frankreich, 2005.

Schneider, U., McCarl, B.; Economic Potential of Biomass Based Fuels for Greenhouse Gas Emission Mitigation; Environmental and Resource Economics, 2003, **24**(4), 291-312.

Schneider, W.; Vorlesung: "Turbulente Strömungen"; TU Wien, Mitschrift von Martin Miltner; 2003.

Schulz, C., Klein, L., Weihing, P., Lutz, T., Krämer, E.; CFD Studies on Wind Turbines in Complex Terrain under Atmospheric Inflow Conditions; Journal of Physics: Conference Series, 2014, **524**, 1-10.

Senneca, O., Chirone, R., Masi, S., Salatino, P.; A Thermogravimetric Study of Nonfossil Solid Fuels. 1. Inert Pyrolysis; Energy & Fuels, 2002a, **16**(3), 653-660.

Senneca, O., Chirone, R., Salatino, P.; A Thermogravimetric Study of Nonfossil Solid Fuels. 2. Oxidative Pyrolysis and Char Combustion; Energy & Fuels, 2002b, **16**(3), 661-668.

Sharma, R. K., Wooten, J. B., Baliga, V. L., Hajaligol, M. R.; Characterization of chars from biomass-derived materials: pectin chars; Fuel, 2001, **80**(12), 1825-1836.

Sharma, R. K., Wooten, J. B., Baliga, V. L., Lin, X., Geoffrey Chan, W., Hajaligol, M. R.; Characterization of chars from pyrolysis of lignin; Fuel, 2004, **83**(11-12), 1469-1482.

Sharma, R. K., Wooten, J. B., Baliga, V. L., Martoglio-Smith, P. A., Hajaligol, M. R.; Characterization of Char from the Pyrolysis of Tobacco; Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2002, **50**(4), 771-783.

Sheng, C., Moghtaderi, B., Gupta, R., Wall, T. F.; A computational fluid dynamics based study of the combustion characteristics of coal blends in pulverised coal-fired furnace; Fuel, 2004, **83**(11-12), 1543-1552.

Shih, T.-H., Lumley, J. L., Chen, J.-Y.; Second-Order Modeling of a Passive Scalar in a Turbulent Shear Flow; AIAA journal, 1990, **28**(4), 610-617.

Shim, H.-S., Hajaligol, M. R., Baliga, V. L.; Oxidation behavior of biomass chars: pectin and Populus deltoides; Fuel, 2004, **83**(11-12), 1495-1503.

Shin, D., Choi, S.; The combustion of simulated waste particles in a fixed bed; Combustion and Flame, 2000, **121**(1-2), 167-180.

Siekmann, H. E., Thamsen, P. U.; Strömungslehre Grundlagen, 2. Auflage; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2007.

Sigloch, H.; Technische Fluidmechanik, 7. Auflage; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2009.

Skodras, G., Grammelis, P., Basinas, P., Kakaras, E., Sakellaropoulos, G.; Pyrolysis and Combustion Characteristics of Biomass and Waste-Derived Feedstock; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2006, **45**(11), 3791-3799.

Skott, T., Hansen, M. T.; Danish Biomass Solutions - reliable and efficient; Centre for Biomass Technology, Arhus, Dänemark, 2000.

Sommerfeld, M.; Modellierung und numerische Berechnung von partikelbeladenen turbulenten Strömungen mit Hilfe des Euler/Lagrange-Verfahrens; Shaker Verlag, Aachen, Deutschland, 1996.

Sonobe, T., Worasuwannarak, N.; Kinetic analyses of biomass pyrolysis using the distributed activation energy model; Fuel, 2008, **87**(3), 414-421.

Sorensen, C. O., Johnsson, J. E., Jensen, A.; Reduction of NO over Wheat Straw Char; Energy & Fuels, 2001, **15**(6), 1359-1368.

Spalart, P. R., Allmaras, S. R.; A one equation turbulence model for aerodynamic flows; AIAA-Paper, 1992, **94-439**.

Spliethoff, H.; Power Generation from Solid Fuels; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2010.

Spurk, J. H., Aksel, N.; Strömungslehre Einführung in die Therorie der Strömungen, 7. Auflage; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2006.

Srivastava, V. K., Jalan, R. K.; Predictions of Concentration in the Pyrolysis of Biomass Materials - I; Energy Conversion and Management, 1994, **35**(12), 1031-1040.

Srivastava, V. K., Sushil, Jalan, R. K.; Prediction of Concentration in the Pyrolysis of Biomass Material - II; Energy Conversion and Management, 1996, **37**(4), 473-483.

Staiger, B., Unterberger, S., Berger, R., Hein, K. R. G.; Development of an air staging technology to reduce NOx emissions in grate fired boilers; Energy, 2005, **30**(8), 1429-1438.

Statistik Austria; Feldfrucht- und Dauerwiesenproduktion, endgültiges Ergebnis 2014; http://www.statistik.at, 2015.

Steeb, W. H., Wilhelm, F.; Non-linear autonomous systems of differential equations and Carleman linearization procedure; Journal of Mathematical Analysis and Applications, 1980, **77**(2), 601-611.

Stenseng, M., Jensen, A., Dam-Johansen, K.; Investigation of biomass pyrolysis by thermogravimetric analysis and differential scanning calorimetry; Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2001a, **58-59**, 765-780.

Stenseng, M., Zolin, A., Cenni, R., Frandsen, F., Jensen, A., Dam-Johansen, K.; Thermal Analysis in Combustion Research; Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2001b, **64**(3), 1325-1334.

Stephenson, P. L.; Mathematical modelling of semi-anthracite combustion in a single burner furnace; Fuel, 2003, **82**(15-17), 2069-2073.

Stoifl, B., Simon, O.; Energetische Nutzung von Stroh in kalorischen Kraftwerken anhand eines konkreten Beispiels - Wärmekraftwerk Dürnrohr; Österrreichische Elektrizitätswirtschafts-Aktiengesellschaft (Verbund), Wien, Österreich, 2001.

Stopford, P. J.; Recent applications of CFD modelling in the power generation and combustion industries; Applied Mathematical Modelling, 2002, **26**(2), 351-374.

Strezov, V., Moghtaderi, B., Lucas, J. A.; Computational calorimetric investigation of the reactions during thermal conversion of wood biomass; Biomass and Bioenergy, 2004, **27**(5), 459-465.

Su, L. K.; Lectures on Mixing & Combustion; Applied Fluid Imaging Laboratory, Johns HopkinsUniversity, http://www.imaging.me.jhu.edu/courses635.html, 2005.

Sugiyama, S., Arai, N., Hasatani, M., Kawamura, S., Kudou, I., Matsuhiro, N.; Reducing fuel nitrogen oxides (NOx) emission: molecular nitrogen formation from fuel nitrogen; Environmental Science & Technology, 1978, **12**(2), 175-180.

Svoboda, K., Pohorely, M.; Influence of operating conditions and coal properties on NOx and N2O emissions in pressurized fluidized bed combustion of subbituminous coals; Fuel, 2004, **83**(7-8), 1095-1103.

Sweeney, A. J., Liu, Y. A.; Use of Simulation To Optimize NOx Abatement by Absorption and Selective Catalytic Reduction; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2001, **40**(12), 2618-2627.

Syred, N., Kurniawan, K., Griffiths, T., Gralton, T., Ray, R.; Development of fragmentation models for solid fuel combustion and gasification as subroutines for inclusion in CFD codes; Fuel, 2007, **86**(14), 2221-2231.

Thevenin, D., Janiga, G.; Optimization and Computational Fluid Dynamics; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2008.

Thibaut, D., Candel, S.; Numerical Study of Unsteady Turbulent Premixed Combustion: Application to Flashback Simulation; Combustion and Flame, 1998, **113**(1-2), 53-65.

Thomas, K. M.; The release of nitrogen oxides during char combustion; Fuel, 1997, **76**(6), 457-473.

Thunman, H., Davidsson, K., Leckner, B.; Separation of drying and devolatilization during conversion of solid fuels; Combustion and Flame, 2004, **137**(1-2), 242-250.

Thunman, H., Leckner, B.; Co-current and counter-current fixed bed combustion of biofuel--a comparison; Fuel, 2003, **82**(3), 275-283.

Thunman, H., Leckner, B., Niklasson, F., Johnsson, F.; Combustion of wood particles - a particle model for eulerian calculations; Combustion and Flame, 2002, **129**(1-2), 30-46.

Thunman, H., Niklasson, F., Johnsson, F., Leckner, B.; Composition of Volatile Gases and thermo-chemical properties of wood for modeling of fixed or fluidized beds;

Thunman, H., Niklasson, F., Johnsson, F., Leckner, B.; Composition of Volatile Gases and Thermochemical Properties of Wood for Modeling of Fixed or Fluidized Beds; Energy & Fuels, 2001, **15**(6), 1488-1497.

Tilton, J. N.; Perry´s Chemical Engineers´ Handbook, 7th edition; McGraw-Hill, Inc., New York, USA, 1997.

Tobiasen, L., Skytte, R., Pedersen, L. S., Pedersen, S. T., Lindberg, M. A.; Deposit characteristic after injection of additives to a Danish straw-fired suspension boiler; Fuel Processing Technology, 2007, **88**(11-12), 1108-1117.

Trninić, M., Wang, L., Várhegyi, G., Grønli, M., Skreiberg, Ø.; Kinetics of Corncob Pyrolysis; Energy & Fuels, 2012, **26**(4), 2005-2013.

Tu, J., Yeoh, G. H., Liu, C.; Computational Fluid Dynamics - A Practical Approach; Elsevier Inc., Burlington, USA, 2008.

Umweltbundesamt; Austria´s National Inventory Report 2013 - Submission under the United Nations Framework Convention on Climate Change and under the Kyoto Protocol; 2013.

Unger, J.; Strohballenbau; in: Proceedings of the Strohbau Symposium, Illmitz, Österreich, 2001.

Vamvuka, D., Kakaras, E., Kastanaki, E., Grammelis, P.; Pyrolysis characteristics and kinetics of biomass residuals mixtures with lignite; Fuel, 2003, **82**(15-17), 1949-1960.

van den Broek, R., Faaij, A., van Wijk, A.; Biomass combustion for power generation; Biomass and Bioenergy, 1996, **11**(4), 271-281.

van der Lans, R. P., Pedersen, L. T., Jensen, A., Glarborg, P., Dam-Johansen, K.; Modelling and experiments of straw combustion in a grate furnace; Biomass and Bioenergy, 2000, **19**(3), 199-208.

van Wachem, B. G. M., Schouten, J. C., van den Bleek, C. M.; Comparative Analysis of CFD Models of Dense Gas–Solid Systems; AIChE Journal, 2001, **47**(5), 1035-1051.

Várhegyi, G., Antal, M. J., Szekely, T., Szabo, P.; Kinetics of the thermal decomposition of cellulose, hemicellulose, and sugarcane bagasse; Energy & Fuels, 1989a, **3**(3), 329-335.

Várhegyi, G., Bobaly, B., Jakab, E., Chen, H.; Thermogravimetric Study of Biomass Pyrolysis Kinetics. A Distributed Activation Energy Model with Prediction Tests; Energy & Fuels, 2011a, **25**(1), 24-32.

Várhegyi, G., Jakab, E., Antal, M. J.; Is the Broido-Shafizadeh Model for Cellulose Pyrolysis True?; Energy & Fuels, 1994, **8**(6), 1345-1352.

Várhegyi, G., Jakab, E., Till, F., Szekely, T.; Thermogravimetric-mass spectrometric characterization of the thermal decomposition of sunflower stem; Energy & Fuels, 1989b, **3**(6), 755-760.

Várhegyi, G., Mészáros, E., Antal, M. J., Bourke, J., Jakab, E.; Combustion Kinetics of Corncob Charcoal and Partially Demineralized Corncob Charcoal in the Kinetic Regime; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2006, **45**(14), 4962-4970.

Várhegyi, G., Sebestyén, Z., Czégény, Z., Lezsovits, F., Könczöl, S.; Combustion Kinetics of Biomass Materials in the Kinetic Regime; Energy & Fuels, 2011b, **26**(2), 1323-1335.

Várhegyi, G., Szabó, P., Antal, M. J.; Kinetics of Charcoal Devolatilization; Energy & Fuels, 2002, **16**(3), 724-731.

Várhegyi, G. b., Chen, H., Godoy, S.; Thermal Decomposition of Wheat, Oat, Barley, and Brassica carinata Straws. A Kinetic Study; Energy & Fuels, 2009, **23**(2), 646-652.

Várhegyi, G. b., Czégény, Z., Liu, C., McAdam, K.; Thermogravimetric Analysis of Tobacco Combustion Assuming DAEM Devolatilization and Empirical Char-Burnoff Kinetics; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2010, **49**(4), 1591-1599.

VDI; VDI-Wärmeatlas, 10. Auflage; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2006.

Venema, H., Rehman, I.; Decentralized renewable energy and the climate change mitigation-adaptation nexus; Mitigation and Adaptation Strategies for Global Change, 2007, **12**(5), 875-900.

Veynante, D., Vervisch, L.; Turbulent combustion modeling; Progress in Energy and Combustion Science, 2002, **28**(3), 193-266.

Vieser, W., Esch, T., Menter, F. R.; Heat Transfer Predictions using Advanced Two-Equation Turbulence Models; CFX, Darmstadt, Deutschland, 2002.

Viskanta, R.; Computation of radiative transfer in combustion systems; International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, 2008, **18**(3/4), 415-442.

Wagenaar, B. M., Prins, W., van Swaaij, W. P. M.; Pyrolysis of Biomass in the Rotating Cone Reactor: Modelling and Experimental Justification; Chemical Engineering Science, 1994, **49**(24B), 5109-5126.

Wakao, N.; Particle-to-fluid transfer coefficients and fluid diffusivities at low flow rate in packed beds; Chemical Engineering Science, 1976, **31**(12), 1115-1122.

Wakao, N., Kaguei, S., Funazkri, T.; Effect of fluid dispersion coefficients on particle-to-fluid heat transfer coefficients in packed beds: Correlation of nusselt numbers; Chemical Engineering Science, 1979, **34**(3), 325-336.

Wang, W. X., Thomas, K. M., Cai, H. Y., Dugwell, D. R., Kandiyoti, R.; NO Release and Reactivity of Chars during Combustion: The Effect of Devolatilization Temperature and Heating Rate; Energy & Fuels, 1996, **10**(2), 409-416.

Wang, Z., He, P., Lv, Y., Zhou, J., Fan, J., Cen, K.; Direct Numerical Simulation of Subsonic Round Turbulent Jet; Flow, Turbulence and Combustion, 2010, **84**(4), 669-686.

Warda, H. A., Kassab, S. Z., Elshorbagy, K. A., Elsaadawy, E. A.; An experimental investigation of the near-field region of free turbulent round central and annular jets; Flow Measurement and Instrumentation, 1999, **10**(1), 1-14.

Wargadalam, V. J., Löffler, G., Winter, F., Hofbauer, H.; Homogeneous formation of NO and N2O from the oxidation of HCN and NH3 at 600-1000°C; Combustion and Flame, 2000, **120**(4), 465-478.

Warnatz, J., Maas, U., Dibble, R. W.; Verbrennung, 3. Auflage; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2001.

Warnecke, R.; Gasification of biomass: comparison of fixed bed and fluidized bed gasifier; Biomass and Bioenergy, 2000, **18**(6), 489-497.

Wei, X., Schnell, U., Hein, K. R. G.; Behaviour of gaseous chlorine and alkali metals during biomass thermal utilisation; Fuel, 2005, **84**(7-8), 841-848.

Weihong, Y., Wlodzimierz, B.; CFD as applied to high temperature air combustion in industrial furnaces; IFRF Combustion Journal, 2006, **2006, November**(200603), 1-22.

Wen, J. X., Huang, L. Y.; CFD modelling of confined jet fires under ventilation-controlled conditions; Fire Safety Journal, 2000, **34**(1), 1-24.

Wennerberg, D.; Entwicklung eines vorhersagefähigen Berechnungsmodells für stark verdrallte Strömungen mit Verbrennung; 1995, Dissertation, Lehrstuhl für Strömungsmechanik, Universität Erlangen–Nürnberg, Erlangen, Deutschland.

Werther, J., Saenger, M., Hartge, E. U., Ogada, T., Siagi, Z.; Combustion of agricultural residues; Progress in Energy and Combustion Science, 2000, **26**(1), 1-27.

Wesselak, V., Schabbach, T.; Regenerative Energietechnik; Springer Verlag, Berlin, Deutschland, 2009.

Westbrook, C. K., Mizobuchi, Y., Poinsot, T. J., Smith, P. J., Warnatz, J.; Computational Combustion; in: Proceedings of the 30th International Symposium on Combustion, Chicago, USA, 2004.

Westerweel, J., Hofmann, T., Fukushima, C., Hunt, J. C. R.; The turbulent/non-turbulent interface at the outer boundary of a self-similar turbulent jet; Experiments in Fluids, 2002, **33**(6), 873-878.

Wilcox, D. C.; Tubulence Modeling for CFD, 2nd Edition; DCW Industries, La Canada, California, USA, 1994.

Williams, A., Pourkashanian, M., Jones, J. M.; Combustion of pulverised coal and biomass; Progress in Energy and Combustion Science, 2001, **27**(6), 587-610.

Williams, P. T., Besler, S.; The influence of temperature and heating rate on the slow pyrolysis of biomass; Renewable Energy, 1996, **7**(3), 233-250.

Winter, F., Wartha, C., Hofbauer, H.; NO and N2O formation during the combustion of wood, straw, malt waste and peat; Bioresource Technology, 1999, **70**(1), 39-49.

Woodwell, G. M., Mackenzie, F. T., Houghton, R. A., Apps, M., Gorham, E., Davidson, E.; Biotic Feedbacks in the Warming of the Earth; Climatic Change, 1998, **40**(3), 495-518.

Wornat, M. J., Hurt, R. H., Yang, N. Y. C., Headley, T. J.; Structural and compositional transformations of biomass chars during combustion; Combustion and Flame, 1995, **100**(1-2), 131-143.

Wurzenberger, J. C., Wallner, S., Raupenstrauch, H., Khinast, J. G.; Thermal Conversion of Biomass: Comprehensive Reactor and Particle Modeling; AIChE Journal, 2002, **48**(10), 2398-2411.

Xia, B., Sun, D.-W.; Applications of computational fluid dynamics (CFD) in the food industry: a review; Computers and Electronics in Agriculture, 2002, **34**, 5-24.

Xia, J. L., Smith, B. L., Benim, A. C., Schmidli, J., Yadigaroglu, G.; Effect of inlet and outlet boundary conditions on swirling flows; Computers & Fluids, 1997, **26**(8), 811-823.

Xu, H., Smoot, L. D., Tree, D. R., Hill, S. C.; Prediction of Nitric Oxide Destruction by Advanced Reburning; Energy & Fuels, 2001, **15**(3), 541-551.

Xu, M., Azevedo, J. L. T., Carvalho, M. G.; Modelling of the combustion process and NOx emission in a utility boiler; Fuel, 2000, **79**(13), 1611-1619.

Xue, H., Ho, J. C., Cheng, Y. M.; Comparison of different combustion models in enclosure fire simulation; Fire Safety Journal, 2001, **36**(1), 37-54.

Yagi, S., Kunii, D.; Studies on Effective Thermal Conductivities in Packed Beds; AIChE Journal, 1957, **3**(3), 373-381.

Yang, H., Yan, R., Chen, H., Lee, D. H., Zheng, C.; Characteristics of hemicellulose, cellulose and lignin pyrolysis; Fuel, 2007, **86**(12-13), 1781-1788.

Yang, H., Yan, R., Chen, H., Zheng, C., Lee, D. H., Liang, D. T.; In-Depth Investigation of Biomass Pyrolysis Based on Three Major Components: Hemicellulose, Cellulose and Lignin; Energy & Fuels, 2006, **20**(1), 388-393.

Yaras, M. I., Grosvenor, A. D.; Evaluation of one- and two-equation low-Re turbulence models. Part I - Axisymmetric separating and swirling flows; International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2003a, **42**(12), 1293-1319.

Yaras, M. I., Grosvenor, A. D.; Evaluation of one- and two-equation low-Re turbulence models. Part II - Vortex-generator jet and diffusing S-duct flows; International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2003b, **42**(12), 1321-1343.

Yee, H. C., Torczynski, J. R., Morton, S. A., Visbal, M. R., Sweby, P. K.; On spurious behavior of CFD Simulations; International Journal for Numerical Methods in Fluids, 1999, **30**(6), 675-711.

Yin, C., Rosendahl, L., K. Kær, S., J. Condra, T.; Use of numerical modeling in design for co-firing biomass in wall-fired burners; Chemical Engineering Science, 2004, **59**(16), 3281-3292.

Yin, C., Rosendahl, L., Kær, S. K., Clausen, S., Hvid, S. L., Hille, T.; Mathematical Modeling and Experimental Study of Biomass Combustion in a Thermal 108 MW Grate-Fired Boiler; Energy & Fuels, 2008, **22**(2), 1380-1390.

Yin, C., Rosendahl, L., Knudsen Kær, S., Sørensen, H.; Modelling the motion of cylindrical particles in a nonuniform flow; Chemical Engineering Science, 2003, **58**(15), 3489-3498.

Younsi, R., Kocaefe, D., Poncsak, S., Kocaefe, Y., Gastonguay, L.; CFD modeling and experimental validation of heat and mass transfer in wood poles subjected to high temperatures: a conjugate approach; Heat and Mass Transfer, 2008, **44**(12), 1497-1509.

Yuu, S., Ikeda, K., Umekage, T.; Flow-field prediction and experimental verification of low Reynolds number gas-particle turbulent jets; Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 1996, **109**, 13-27.

Zabetta, E. C., Hupa, M., Saviharju, K.; Reducing NOx Emissions Using Fuel Staging, Air Staging, and Selective Noncatalytic Reduction in Synergy; Industrial & Engineering Chemistry Research, 2005, **44**(13), 4552-4561.

Zarnescu, V., Pisupati, S. V.; An Integrative Approach for Combustor Design Using CFD Methods; Energy & Fuels, 2002, **16**(3), 622-633.

Zbogar, A., Jensen, P. A., Frandsen, F. J., Hansen, J., Glarborg, P.; Experimental Investigation of Ash Deposit Shedding in a Straw-Fired Boiler; Energy & Fuels, 2006, **20**(2), 512-519.

Zevenhoven, R., Hupa, M.; The reactivity of chars from coal, peat and wood towards NO, with and without CO; Fuel, 1998, **77**(11), 1169-1176.

Zhang, H., Fletcher, T. H.; Nitrogen Transformations during Secondary Coal Pyrolysis; Energy & Fuels, 2001, **15**(6), 1512-1522.

Zhou, H., Jensen, A. D., Glarborg, P., Jensen, P. A., Kavaliauskas, A.; Numerical modeling of straw combustion in a fixed bed; Fuel, 2005, **84**(4), 389-403.

Zhou, H., Jensen, A. D., Glarborg, P., Kavaliauskas, A.; Formation and reduction of nitric oxide in fixed-bed combustion of straw; Fuel, 2006, **85**(5-6), 705-716.

Zhovmir, M., Geletukha, G., Chaplygin, S., Oliynik, Y.; Energy Efficiency and Pollutants Emission at Whole Straw Bales Combustion; in: Proceedings of the 15th European Biomass Conference and Exhibition, Berlin, Deutschland, 2007.

Zinser, W.; Zur Entwicklung mathematischer Flammenmodelle für die Verfeuerung technischer Brennstoffe; Fortschritt-Berichte, VDI-Verlag, Düsseldorf, Deutschland, 1985.

Zolin, A., Jensen, A., Dam-Johansen, K.; Kinetic analysis of char thermal deactivation; Proceedings of the Combustion Institute, 2000, **28**(2), 2181-2188.

Zolin, A., Jensen, A., Jensen, P. A., Frandsen, F., Dam-Johansen, K.; The Influence of Inorganic Materials on the Thermal Deactivation of Fuel Chars; Energy & Fuels, 2001, **15**(5), 1110-1122.

Zolin, A., Jensen, A. D., Jensen, P. A., Dam-Johansen, K.; Experimental study of char thermal deactivation; Fuel, 2002, **81**(8), 1065-1075.

Zuberbühler, U.; Maßnahmen zur feuerungsseitigen Emissionsminderung bei der Holzverbrennung in gewerblichen Feuerungsanlagen; 2002, Dissertation, Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen, Universität Stuttgart, Stuttgart, Deutschland.

14 Anhang

14.1 Stoffdaten und Materialeigenschaften

14.1.1 Stoffeigenschaften gasförmiger Komponenten

14.1.1.1 Allgemeine Stoffeigenschaften gasförmiger Komponenten

Dichte

Alle Gase werden als ideale Mischung der konstituierenden Gaskomponenten aufgefasst. Die Dichte der einzelnen Gaskomponenten wird mithilfe der idealen Gasgleichung ermittelt. Die verwendeten Molekulargewichte sind in Tabelle 14-1 zusammengefasst.

Tabelle 14-1: Molekulargewichte der berücksichtigten Gaskomponenten (FLUENT, 2005)

Gaskomponente	Molekulargewicht [g/mol]
C_xH_y	26,6593
CO	28,0106
CO_2	44,0100
H_2	2,0159
H_2O	18,0153
O_2	31,9988
N_2	28,0134
NH_3	17,0306
HCN	27,0258
NO	30,0061

Spezifische Wärmekapazität

Die Wärmekapazität der Gasmischung wird aus den Einzelkomponenten durch massengewichtete Mittelwertbildung berechnet (FLUENT, 2005). Für alle Gase ist die spezifische Wärmekapzität stark abhängig von der Gastemperatur. Für die jeweils zitierten Daten aus der Literatur wurden Regressionspolynome 3. bis 7. Ordnung erstellt, mithilfe derer spezifische Wärmekapazitäten für ganzzahlige Temperatur-Stützstellen ermittelt wurden. Die so ermittelten spezifischen Wärmekapazitäten sind Tabelle 14-2 und Tabelle 14-3 zu entnehmen. Diese Stützstellen wurden den jeweiligen Simulationsumgebungen als Stoffdaten übergeben. Zwischen den Stützstellen erfolgt lineare Interpolation für beliebige Temperaturen. Diese

umständliche Vorgangsweise wurde zur Erhöhung der Lösungsstabilität der ersten Iterationsschritte bei der numerischen Simulation eingeführt; die Verwendung von Polynomen ausserhalb ihres Gültigkeitsbereiches würde teilweise zu physikalisch unmöglichen Ergebnissen führen.

Tabelle 14-2: Spezifische Wärmekapazität c_p [J/kg.K] der Gaskomponenten C_xH_y, CO, CO_2, H_2 und H_2O (VDI, 2006; NIST, 2009)

Temperatur [K]	C_xH_y	CO	CO_2	H_2	H_2O
200	1.623,6	1.044,6	738,0	13.748	1.840,7
250	1.905,5	1.039,8	795,5	14.108	1.850,1
300	2.177,0	1.039,1	847,8	14.314	1.864,1
350	2.437,7	1.041,9	895,3	14.423	1.882,1
400	2.687,3	1.047,5	938,5	14.477	1.903,5
450	2.925,6	1.055,4	977,8	14.502	1.928,0
500	3.152,5	1.065,0	1.013,4	14.516	1.955,0
600	3.572,5	1.087,7	1.075,3	14.547	2.015,0
700	3.948,6	1.112,7	1.126,5	14.605	2.080,8
800	4.283,0	1.138,1	1.169,0	14.696	2.150,1
900	4.579,1	1.162,3	1.204,4	14.824	2.220,8
1.000	4.840,4	1.184,4	1.234,1	14.982	2.291,5
1.100	5.070,9	1.204,1	1.259,0	15.170	2.361,0
1.200	5.274,7	1.221,0	1.280,1	15.375	2.428,4
1.300	5.455,7	1.235,4	1.298,1	15.589	2.493,0
1.400	5.617,6	1.247,5	1.313,5	15.806	2.554,2
1.500	5.763,6	1.257,7	1.326,8	16.022	2.611,9
1.600	5.896,8	1.266,3	1.338,3	16.234	2.665,8
1.700	6.019,3	1.273,8	1.348,2	16.440	2.715,9
1.800	6.133,2	1.280,4	1.356,9	16.637	2.762,1
1.900	6.239,7	1.286,4	1.364,5	16.826	2.804,6
2.000	6.339,7	1.292,0	1.371,3	17.005	2.843,4
2.500	6.748,6	1.314,8	1.396,4	17.781	2.991,2
3.000	7.053,3	1.327,4	1.413,8	18.399	3.094,7

Tabelle 14-3: Spezifische Wärmekapazität c_p [J/kg.K] der Gaskomponenten O_2, N_2, NH_3, HCN und NO (VDI, 2006; NIST, 2009)

Temperatur [K]	O_2	N_2	NH_3	HCN	NO
200	893,8	1.044,6	1.919,2	1.185,2	998,1
250	905,3	1.041,4	2.006,7	1.260,7	993,0
300	918,1	1.041,2	2.097,0	1.328,7	992,3
350	931,9	1.043,6	2.189,1	1.390,0	995,1
400	946,2	1.048,2	2.282,4	1.445,4	1.000,8
450	960,7	1.054,5	2.376,2	1.495,9	1.008,8
500	975,3	1.062,2	2.469,9	1.541,9	1.018,4
600	1.003,6	1.080,9	2.655,0	1.623,0	1.041,0
700	1.029,9	1.102,1	2.834,5	1.692,8	1.065,4
800	1.053,4	1.124,2	3.005,9	1.753,9	1.089,6

Temperatur [K]	O_2	N_2	NH_3	HCN	NO
900	1.073,9	1.146,2	3.167,5	1.808,5	1.112,2
1.000	1.091,3	1.167,2	3.318,5	1.858,0	1.132,3
1.100	1.105,9	1.186,6	3.458,3	1.903,2	1.149,6
1.200	1.118,0	1.204,3	3.586,9	1.944,6	1.164,1
1.300	1.128,2	1.220,0	3.704,6	1.982,5	1.175,9
1.400	1.137,0	1.233,8	3.811,7	2.017,0	1.185,6
1.500	1.144,7	1.245,8	3.909,1	2.048,2	1.193,4
1.600	1.152,0	1.256,1	3.997,4	2.076,0	1.200,0
1.700	1.159,1	1.265,1	4.077,5	2.100,6	1.205,6
1.800	1.166,2	1.272,9	4.150,0	2.122,0	1.210,7
1.900	1.173,6	1.279,8	4.215,7	2.140,7	1.215,5
2.000	1.181,2	1.285,9	4.275,3	2.156,9	1.220,2
2.500	1.218,9	1.309,3	4.498,6	2.217,8	1.238,7
3.000	1.251,6	1.325,0	4.635,3	2.261,9	1.249,4

Wärmeleitfähigkeit

Die Wärmeleitfähigkeit der Gasmischung wird aus den Einzelkomponenten durch Mittelwertbildung basierend auf der molaren Zusammensetzung berechnet, wobei der kommerzielle CFD-Solver einen zusätzlichen Korrekturterm auf Basis der kinetischen Gastheorie einführt (FLUENT, 2005). Für die Ermittlung der Wärmeleitfähigkeit der einzelnen Gaskomponenten wurde die exakt gleiche Vorgangsweise wie für die Ermittlung der Wärmekapazitäten angewandt (siehe oben). Die Wärmeleitfähigkeiten der einzelnen Gaskomponenten bei den verwendeten Temperatur-Stützstellen sind in Tabelle 14-4 und Tabelle 14-5 angegeben.

Tabelle 14-4: Wärmeleitfähigkeit λ [W/m.K] der Gaskomponenten C_xH_y, CO, CO_2, H_2 und H_2O (VDI, 2006; NIST, 2009)

Temperatur [K]	C_xH_y	CO	CO_2	H_2	H_2O
200	0,00704	0,02191	0,00827	0,14158	0,00821
250	0,01439	0,02474	0,01265	0,16245	0,01250
300	0,02193	0,02751	0,01697	0,18312	0,01696
350	0,02967	0,03024	0,02122	0,20358	0,02160
400	0,03760	0,03292	0,02541	0,22384	0,02641
450	0,04571	0,03555	0,02953	0,24392	0,03140
500	0,05401	0,03813	0,03359	0,26379	0,03655
600	0,07114	0,04316	0,04151	0,30298	0,04735
700	0,08896	0,04802	0,04918	0,34144	0,05880
800	0,10741	0,05272	0,05658	0,37919	0,07087
900	0,12649	0,05725	0,06373	0,41625	0,08356
1.000	0,14614	0,06164	0,07061	0,45264	0,09684
1.100	0,16634	0,06589	0,07724	0,48840	0,11069
1.200	0,18705	0,07001	0,08361	0,52354	0,12510
1.300	0,20824	0,07401	0,08972	0,55808	0,14004
1.400	0,22988	0,07788	0,09557	0,59205	0,15550
1.500	0,25192	0,08166	0,10117	0,62548	0,17147
1.600	0,27435	0,08533	0,10650	0,65838	0,18791
1.700	0,29713	0,08891	0,11158	0,69078	0,20482

Temperatur [K]	C_xH_y	CO	CO_2	H_2	H_2O
1.800	0,32021	0,09242	0,11639	0,72270	0,22217
1.900	0,34358	0,09584	0,12095	0,75417	0,23995
2.000	0,36718	0,09921	0,12525	0,78521	0,25814
2.500	0,48773	0,11532	0,14286	0,93474	0,35455
3.000	0,60936	0,13104	0,15399	1,07699	0,45842

Tabelle 14-5: Wärmeleitfähigkeit λ [W/m.K] der Gaskomponenten O_2, N_2, NH_3, HCN und NO (VDI, 2006; NIST, 2009)

Temperatur [K]	O_2	N_2	NH_3	HCN	NO
200	0,01956	0,02090	0,01984	0,00461	0,00344
250	0,02303	0,02405	0,02147	0,00799	0,00566
300	0,02646	0,02716	0,02510	0,01148	0,01470
350	0,02986	0,03023	0,03047	0,01505	0,02105
400	0,03322	0,03325	0,03722	0,01872	0,02563
450	0,03655	0,03622	0,04493	0,02248	0,02920
500	0,03984	0,03916	0,05312	0,02633	0,03237
600	0,04634	0,04490	0,06861	0,03427	0,03925
700	0,05270	0,05049	0,07831	0,04253	0,04830
800	0,05894	0,05593	0,08285	0,05110	0,05918
900	0,06507	0,06123	0,08666	0,05994	0,06922
1.000	0,07109	0,06639	0,08986	0,06904	0,07358
1.100	0,07701	0,07142	0,09256	0,07839	0,07496
1.200	0,08282	0,07633	0,09483	0,08796	0,07613
1.300	0,08855	0,08113	0,09673	0,09774	0,07714
1.400	0,09419	0,08582	0,09834	0,10769	0,07803
1.500	0,09974	0,09041	0,09970	0,11782	0,07883
1.600	0,10522	0,09491	0,10089	0,12809	0,07959
1.700	0,11063	0,09933	0,10192	0,13849	0,08032
1.800	0,11598	0,10367	0,10285	0,14900	0,08105
1.900	0,12127	0,10794	0,10371	0,15959	0,08181
2.000	0,12650	0,11214	0,10451	0,17026	0,08259
2.500	0,15209	0,13249	0,10809	0,22396	0,08704
3.000	0,17719	0,15237	0,10998	0,27653	0,09113

Dynamische Viskosität

Die betrachtete Gasmischung wird bei allen Zuständen als newtonsches Fluid betrachtet. Die Viskosität der Mischung wird dabei aus den Einzelkomponenten durch Mittelwertbildung basierend auf der molaren Zusammensetzung berechnet, wobei auch hier der kommerzielle CFD-Solver einen zusätzlichen Korrekturterm auf Basis der kinetischen Gastheorie einführt (FLUENT, 2005). Für die Ermittlung der dynamischen Viskosität der einzelnen Gaskomponenten wurde wieder die exakt gleiche Vorgangsweise wie für die Ermittlung der Wärmekapazitäten angewandt (siehe oben). Die dynamischen Viskositäten der einzelnen Gaskomponenten bei den verwendeten Temperatur-Stützstellen sind Tabelle 14-6 und Tabelle 14-7 zu entnehmen.

Tabelle 14-6: Dynamische Viskosität η [10^{-5}Pa.s] der Gaskomponenten C_xH_y, CO, CO_2, H_2 und H_2O (VDI, 2006; NIST, 2009)

Temperatur [K]	C_xH_y	CO	CO_2	H_2	H_2O
200	0,73921	1,50039	1,10267	0,68686	0,70962
250	0,87382	1,68233	1,32171	0,79157	0,83782
300	1,00661	1,86082	1,53620	0,89278	0,98670
350	1,13761	2,03590	1,74624	0,99069	1,15263
400	1,26685	2,20767	1,95196	1,08551	1,33234
450	1,39439	2,37618	2,15345	1,17743	1,52289
500	1,52024	2,54152	2,35083	1,26663	1,72166
600	1,76708	2,86293	2,73363	1,43760	2,13475
700	2,00768	3,17249	3,10124	1,59974	2,55609
800	2,24234	3,47076	3,45449	1,75427	2,97400
900	2,47137	3,75831	3,79423	1,90230	3,38007
1.000	2,69508	4,03572	4,12132	2,04479	3,76866
1.100	2,91376	4,30356	4,43660	2,18261	4,13646
1.200	3,12772	4,56241	4,74093	2,31650	4,48202
1.300	3,33728	4,81282	5,03515	2,44709	4,80537
1.400	3,54273	5,05539	5,32012	2,57489	5,10761
1.500	3,74437	5,29067	5,59668	2,70027	5,39060
1.600	3,94253	5,51924	5,86568	2,82353	5,65662
1.700	4,13749	5,74168	6,12798	2,94480	5,90812
1.800	4,32957	5,95856	6,38442	3,06412	6,14744
1.900	4,51906	6,17044	6,63585	3,18141	6,37662
2.000	4,70629	6,37790	6,88312	3,29647	6,59720
2.500	5,61897	7,36897	8,08687	3,82299	7,57400
3.000	6,52059	8,33540	9,31415	4,19566	8,10665

Tabelle 14-7: Dynamische Viskosität η [10^{-5}Pa.s] der Gaskomponenten O_2, N_2, NH_3, HCN und NO (VDI, 2006; NIST, 2009)

Temperatur [K]	O_2	N_2	NH_3	HCN	NO
200	1,71115	1,51949	0,65228	0,73358	1,40991
250	1,93905	1,71049	0,84004	0,87208	1,67646
300	2,16303	1,89756	1,02773	1,00836	1,92943
350	2,38317	2,08078	1,21535	1,14243	2,16971
400	2,59954	2,26024	1,40290	1,27434	2,39818
450	2,81224	2,43602	1,59039	1,40411	2,61567
500	3,02133	2,60822	1,77781	1,53177	2,82301
600	3,42902	2,94216	2,15245	1,78089	3,21034
700	3,82327	3,26274	2,52682	2,02194	3,56612
800	4,20470	3,57065	2,90092	2,25515	3,89588
900	4,57396	3,86656	3,27476	2,48079	4,20468
1.000	4,93168	4,15114	3,64832	2,69908	4,49714
1.100	5,27850	4,42507	4,02162	2,91026	4,77744
1.200	5,61507	4,68904	4,39464	3,11459	5,04931

Temperatur [K]	O_2	N_2	NH_3	HCN	NO
1.300	5,94202	4,94371	4,76740	3,31230	5,31602
1.400	6,25998	5,18976	5,13989	3,50364	5,58041
1.500	6,56961	5,42787	5,51212	3,68884	5,84486
1.600	6,87153	5,65872	5,88407	3,86816	6,11131
1.700	7,16638	5,88299	6,25576	4,04182	6,38126
1.800	7,45481	6,10134	6,62717	4,21008	6,65575
1.900	7,73745	6,31446	6,99832	4,37317	6,93537
2.000	8,01494	6,52303	7,36920	4,53134	7,22027
2.500	9,34751	7,52125	9,21957	5,25685	8,69797
3.000	10,6471	8,50714	11,0632	5,89565	10,0731

Laminarer Diffusionskoeffizient

Für die laminare (oder molekulare) Diffusion wird das Fick´sche Gesetz zugrundegelegt, für das ein Diffusionskoeffizient angegeben werden muss. Bei turbulenter Strömung ist die laminare Diffusion, wie bereits erwähnt, um mehrere Größenordnungen kleiner als die turbulente Durchmischung (siehe Kapitel 6.7). Aus diesem Grund bedeutet die Annahme eines konstanten Diffusionskoeffizienten von 5.10^{-5} m^2/s keine maßgebliche Einschränkung. Dieser Wert basiert auf einer Approximation der Diffusion einer Gaskomponente in einer Hintergrundmatrix bei unendlicher Verdünnung (FLUENT, 2005).

14.1.1.2 Binärer Diffusionskoeffizient von Sauerstoff in Luft für das Koksabbrandmodell

Bei Poling et al. (Poling et al., 2001) werden zwei Modelle zur Berechnung binärer Diffusionskoeffizienten auf Basis empirischer Korrelationen vorgestellt. In der vorliegenden Arbeit wurde das Modell nach Wilke und Lee angewendet, jenes von Fuller et al. wird aufgrund des limitierten Temperaturbereiches nicht empfohlen. Für einen Druck von 1 bar errechnet sich der binäre Diffusionskoeffizient von Sauerstoff in Luft nach Wilke und Lee gemäß Gleichung 14.1.

$$D_{\mathrm{O2/Luft}} = \frac{\left[3{,}03 - \left(\frac{0{,}98}{M_{\mathrm{O2/Luft}}^{1/2}}\right)\right] \cdot \left(10^{-3}\right) \cdot T_{\mathrm{Gas}}^{3/2}}{M_{\mathrm{O2/Luft}}^{1/2} \cdot \sigma_{\mathrm{O2/Luft}}^{2} \cdot \Omega_D} \tag{14.1}$$

Die Molmasse der Mischung in dieser Gleichung errechnet sich nach Gleichung 14.2, der charakteristische Längenparameter der Mischung nach Gleichung 14.3.

$$M_{\mathrm{O2/Luft}} = \frac{2}{1/M_{\mathrm{O2}} + 1/M_{Luft}} \tag{14.2}$$

$$\sigma_{\mathrm{O2/Luft}} \frac{\sigma_{\mathrm{O2}} + \sigma_{Luft}}{2} \tag{14.3}$$

Als Molmasse für Luft wurde an dieser Stelle ein Wert von 28,857 g/mol eingesetzt, als charakteristischer Längenparameter für Luft σ_{Luft} ist laut Poling et al. (Poling et al., 2001) ein Wert von 3,62 Å zu verwenden. Der Längenparameter des Sauerstoffs wird nach Gleichung 14.4 berechnet.

$$\sigma_{O2} = 1{,}18 \cdot V_{b,O2}^{1/3} \tag{14.4}$$

Das in dieser Gleichung erforderliche molare Volumen des flüssigen Sauerstoffs bei Siedetemperatur (90,2 K) und Normaldruck kann mit der Methode nach Tyn und Calus (Poling et al., 2001) ermittelt werden:

$$V_{b,O2} = 0{,}285 \cdot V_{c,O2}^{1{,}048} \tag{14.5}$$

Das kritische Volumen von Sauerstoff beträgt hierbei 73,37 cm^3/mol (Poling et al., 2001).

Das bislang noch unbekannte Kollisionsintegral für Diffusion Ω_D aus Gleichung 14.1 kann mit der sehr akkuraten Methode von Neufield et al. (Poling et al., 2001) bestimmt werden:

$$\Omega_D = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(D \cdot T^*)} + \frac{E}{\exp(F \cdot T^*)} + \frac{G}{\exp(H \cdot T^*)}$$

$$\text{mit} \quad A = 1{,}06036 \quad B = 0{,}15610 \quad C = 0{,}19300 \quad D = 0{,}47635 \quad E = 1{,}03587 \quad F = 1{,}52996 \quad G = 1{,}76474 \quad H = 3{,}89411 \tag{14.6}$$

Die Temperatur für die Neufield-Approximation errechnet sich aus der Gastemperatur wie folgt:

$$T^* = \frac{k_B \cdot T_{Gas}}{\varepsilon_{O2/Luft}} \tag{14.7}$$

Der Nenner in Gleichung 14.7 bezeichnet die charakteristische Lennard-Jones-Energie der Gasmischung und berechnet sich aus den jeweiligen Werten für die Gaskomponenten nach den Gleichungen 14.8 und 14.9. Für die Siedetemperatur des Sauerstoffs wird ein Wert von 90,2 K angesetzt (Poling et al., 2001).

$$\varepsilon_{O2/Luft} = (\varepsilon_{O2} \cdot \varepsilon_{Luft})^{1/2} \tag{14.8}$$

$$\varepsilon_{O2} = 1{,}15 \cdot T_{b,O2} \cdot k_B \qquad \varepsilon_{Luft} = 97 \cdot k_B \tag{14.9}$$

Mit der hier ausgeführten Methode wurden auch die binären molekularen Diffusionskoeffizienten aller anderen Gaskomponenten ermittelt, wobei teilweise statt der Methode von Tyn und Calus je nach Vorhersagequalität die Methode nach de Bas (Poling et al., 2001) angewandt wurde. Diese Daten könnten durch Implementierung in den verwendeten CFD-Solver theoretisch auch in die Beschreibung der Gasphasenströmung einfliessen, was über die Programmierung eigener *udfs* (*user-defined functions*) zu erfolgen hätte. Aufgrund des ver-

schwindend geringen Einflusses des molekularen Diffusionskoeffizienten bei hochturbulenten Strömungen (turbulenter Diffusionskoeffizienten ist um Zehnerpotenzen größer) wurde hiervon aber abgesehen. Da im Gegensatz hierzu aber für die Betrachtung der Filmdiffusion grenzschichtnahe laminare Strömung zu erwarten ist, muss zur korrekten Beschreibung der Diffusion durch die Partikelgrenzschicht die molekulare Diffusion möglichst exakt erfasst werden können. Dies ist mit der dargestellten Methode in sehr weiten Bereichen möglich.

14.1.2 Stoffeigenschaften festphasiger Komponenten

14.1.2.1 Stoffeigenschaften von Stahl (für feste Wände)

Es wird ein durchschnittlich legierter Cr-Ni-Stahl für alle festen Wände in der Brennkammer angesetzt (FLUENT, 2005). Die verwendeten Daten entsprechen dabei sehr gut den Werten aus dem VDI-Wärmeatlas (VDI, 2006) für einen Stahl der Güteklasse 1.48xx.

Dichte: $(\rho)_{\text{Stahl}} = 7.900$ kg/m³

Wärmekapazität: $(c_P)_{\text{Stahl}} = 477.000$ J/g.K

Wärmeleitfähigkeit: $(\lambda_P)_{\text{Stahl}} = 14{,}5$ W/m.K

Emissionsfaktor für oberflächlich leicht korrodierten Stahl mit technischer Rauhigkeit: $(\varepsilon_{\text{rad}})_{\text{Stahl}} = 0{,}65$ (Lide, 2004; Joos, 2006)

14.1.2.2 Brennstoffanalysen

Tabelle 14-8: Immediat- und Elementaranalyse von Maisganzpflanzen sowie thermisches Ascheverhalten aus der Literatur (Hofbauer, 1992)

Parameter	Einheit	Wert
Wassergehalt	wt%, roh	Keine Angabe
Flüchtige Bestandteile	wt%, TS	Keine Angabe
Nichtflüchtige Bestandteile	wt%, TS	Keine Angabe
Koksgehalt (reaktiv)	wt%, TS	Keine Angabe
Aschegehalt (inert)	wt%, TS	8,50
Oberer Heizwert	kJ/kg, TS	17.690
Unterer Heizwert	kJ/kg, TS	16.509
C	wt%, TS	44,62
H	wt%, TS	5,37
O	wt%, TS	39,57
N	wt%, TS	0,41
Rest (S, Cl, Mg, Ca, …)	wt%, TS	1,53
Thermisches Ascheverhalten		
Spezifische Wärmekapazität	kJ/kgK	Keine Angabe
Sinterbeginn	°C	920
Erweichungspunkt	°C	1.040
Halbkugelpunkt	°C	1.140
Fließpunkt	°C	1.200

Tabelle 14-9: Immediat- und Elementaranalyse des tatsächlich verwendeten Maisganzpflanzen-Brennstoffes sowie thermisches Ascheverhalten (Hartmann et al., 2003b; Padouvas, 2003a; Padouvas, 2003b)

Parameter	Einheit	Wert
Wassergehalt	wt%, roh	8,18 – 20,00
Flüchtige Bestandteile	wt%, TS	74,87
Nichtflüchtige Bestandteile	wt%, TS	25,13
Koksgehalt (reaktiv)	wt%, TS	15,60 – 19,42
Aschegehalt (inert)	wt%, TS	5,71 – 9,53
Oberer Heizwert	kJ/kg, TS	18.166
Unterer Heizwert	kJ/kg, TS	16.700 – 16.781
C	wt%, TS	45,94
H	wt%, TS	6,08
O	wt%, TS	Keine Angabe
N	wt%, TS	1,05
Rest (S, Cl, Mg, Ca, …)	wt%, TS	Keine Angabe
Thermisches Ascheverhalten		
Spezifische Wärmekapazität	kJ/kgK	Keine Angabe
Sinterbeginn	°C	907 – 909
Erweichungspunkt	°C	1.049 – 1.050
Halbkugelpunkt	°C	1.070 – 1.071
Fließpunkt	°C	1.097 – 1.100

Tabelle 14-10: Immediat- und Elementaranalyse von ungarischem Energiegras sowie thermisches Ascheverhalten (Padouvas, 2004)

Parameter	Einheit	Wert
Wassergehalt	wt%, roh	5,70
Flüchtige Bestandteile	wt%, TS	72,12
Nichtflüchtige Bestandteile	wt%, TS	27,88
Koksgehalt (reaktiv)	wt%, TS	23,68
Aschegehalt (inert)	wt%, TS	4,20
Oberer Heizwert	kJ/kg, TS	17.411
Unterer Heizwert	kJ/kg, TS	15.889
C	wt%, TS	44,60
H	wt%, TS	4,30
O	wt%, TS	46,40
N	wt%, TS	0,40
Rest (S, Cl, Mg, Ca, …)	wt%, TS	Keine Angabe
Thermisches Ascheverhalten		
Spezifische Wärmekapazität	kJ/kgK	Keine Angabe
Sinterbeginn	°C	650
Erweichungspunkt	°C	908
Halbkugelpunkt	°C	1.217
Fließpunkt	°C	1.259

Tabelle 14-11: Immediat- und Elementaranalyse von Weizenstroh sowie thermisches Ascheverhalten aus der Literatur (Hofbauer, 1992)

Parameter	Einheit	Wert
Wassergehalt	wt%, roh	15,00
Flüchtige Bestandteile	wt%, TS	77,00
Nichtflüchtige Bestandteile	wt%, TS	23,00
Koksgehalt (reaktiv)	wt%, TS	16,79
Aschegehalt (inert)	wt%, TS	6,21
Oberer Heizwert	kJ/kg, TS	1.7821
Unterer Heizwert	kJ/kg, TS	16.534
C	wt%, TS	44,33
H	wt%, TS	5,32
O	wt%, TS	42,93
N	wt%, TS	0,57
Rest (S, Cl, Mg, Ca, …)	wt%, TS	0,64
Thermisches Ascheverhalten		
Spezifische Wärmekapazität	kJ/kgK	Keine Angabe
Sinterbeginn	°C	848
Erweichungspunkt	°C	956
Halbkugelpunkt	°C	1.107
Fließpunkt	°C	1.241

14.1.2.3 Physikalische Brennstoffeigenschaften

Primärbrennstoff Maisganzpflanze

Material-Wärmekapazität (TGL 35424/2 nach Unger, 2001): $(c_P)_{Stroh} = 2{,}0$ J/g.K

Material-Wärmeleitfähigkeit (Bech et al., 1996): $(\lambda_P)_{Stroh} = 0{,}32$ W/m.K

Emissionsfaktor (Fjellerup et al., 2003): $(\varepsilon_{rad})_{Stroh} = 0{,}92$

Materialdichte (trocken): $(\rho)_{Stroh} = 600$ kg/m³

Packungsdichte Ballen (bei 8,65 wt% Wassergehalt): $(\rho)_{Ballen} = 191$ kg/m³

Porosität Ballen: $\varepsilon_{Ballen} = 0{,}699$

Rostbrennstoff Tiegelkoks

Material-Wärmekapazität (Bruch et al., 2003), Funktion der Partikeltemperatur:

$$(c_P)_{Koks} = 420{,}0 + 2{,}09(T_P)_{Koks} + 6{,}85 \cdot 10^{-4} \cdot (T_P^2)_{Koks} \qquad [c_p] = \text{J/g.K}$$

Material-Wärmeleitfähigkeit (Fjellerup et al., 2003): $(\lambda_P)_{Koks} = 0{,}05$ W/m.K

Emissionsfaktor (): $(\varepsilon_{rad})_{Koks} = 0{,}92$

Materialdichte (trocken): $(\rho)_{Koks} = 800$ kg/m³

Packungsdichte Rostbett (trocken): $(\rho)_{Rostbett} = 300$ kg/m³

Porosität Rostbett (Koks): $\varepsilon_{Rostbett} = 0{,}625$

Es wird angenommen, dass sich im Zuge der Volatilisierung und des Koksabbrandes die Porosität nicht wesentlich ändert. Diese Annahme sowie die absolute Größe der Porosität

decken sich sehr gut mit der Arbeit von Fjellerup et al. (Fjellerup et al., 2003) zur Modellierung einer Schüttschicht aus Weizenstroh-Koks.

Zur Ermittlung der spezifischen Oberfläche im Ballen wird von der rohen Biomasse ausgegangen (volumetrische Zusammensetzung etwa 20 % Kolben, 55 % Stängeln und 25 % Blättern), die auftretenden geometrischen Formen werden durch ideale Körper ersetzt (Kolben und Stängel durch Zylinder, Blätter durch ebene Platten) und ein gewichteter Mittelwert der spezifischen Oberflächen dieser idealen Körper wird errechnet. Es wird angenommen, dass die mittlere spezifische Oberfläche im Ballen konstant bleibt (nur Volatilisierung, vernachlässigbarer Koksabbrand).

$$\left(A_{\text{spez}}\right)_{\text{Zylinder}} = \frac{A_{\text{Zylinder}}}{V_{\text{Zylinder}}} = \frac{2 \cdot r_{\text{Zylinder}} \cdot \pi \cdot l_{\text{Zylinder}}}{r_{\text{Zylinder}}^2 \cdot \pi \cdot l_{\text{Zylinder}}} = \frac{2}{r}$$

$$\left(A_{\text{spez}}\right)_{\text{Platte}} = \frac{A_{\text{Platte}}}{V_{\text{Platte}}} = \frac{2 \cdot b_{\text{Platte}} \cdot l_{\text{Platte}} + 2 \cdot d_{\text{Platte}}\left(b_{\text{Platte}} + l_{\text{Platte}}\right)}{b_{\text{Platte}} \cdot d_{\text{Platte}} \cdot l_{\text{Platte}}}$$

$$r_{\text{Kolben}} = 0{,}03\text{m} \quad \left(A_{\text{spez}}\right)_{\text{Kolben}} = 66{,}7\text{m}^{-1} \quad \psi_{\text{Kolben}} = 0{,}20$$

$$r_{\text{Stängel}} = 0{,}01\text{m} \quad \left(A_{\text{spez}}\right)_{\text{Stängel}} = 200{,}0\text{m}^{-1} \quad \psi_{\text{Stängel}} = 0{,}55$$

$$b_{\text{Blatt}} = 0{,}02\text{m} \quad l_{\text{Blatt}} = 0{,}10\text{m} \quad d_{\text{Blatt}} = 0{,}003\text{m} \quad \left(A_{\text{spez}}\right)_{\text{Blatt}} = 786{,}7\text{m}^{-1}$$
$$\psi_{\text{Blatt}} = 0{,}25$$

$$\left(A_{\text{spez}}\right)_{\text{m,Ballen}} = \left(1 - \varepsilon_{\text{Ballen}}\right) \cdot \left[\left(A_{\text{spez}}\right)_{\text{Kolben}} \psi_{\text{Kolben}} + \left(A_{\text{spez}}\right)_{\text{Stängel}} \psi_{\text{Stängel}} + \left(A_{\text{spez}}\right)_{\text{Blatt}} \psi_{\text{Blatt}}\right] =$$
$$= 96{,}4\text{m}^{-1}$$

Es wird angenommen, dass die Partikelgröße am oberen Rand des Rostbetts etwa jener des Ballens entspricht (Durchmesser 0,04 m), sich aber mit dem Ausbrandgrad des Kokses bis zum unteren Rand des Bettes (Ascheaustrag) auf 0,01 m reduziert. Die Partikelgröße und die spezifische Oberfläche hängen also vom Konversionsgrad der Koksoxidation X_{Koks} ab. Zwischen der spezifischen Oberfläche von 37,5 m^2/m^3 am oberen Rand des Rostbettes (monodisperse Kugelpackung mit 0,04 m Durchmesser) mit einem bestimmten Koks-Konversionsgrad größer als Null (Koksoxidation bereits in gewissem Umfang an der Ballenoberfläche) und einer spezifischen Oberfläche von 400 m^2/m^3 (monodisperse Kugelpackung mit 0,01 m Durchmesser) bei vollständigem Koksumsatz (Koks-Konversionsgrad gleich Eins) wird mit dem Konversionsgrad der jeweiligen Volumenzelle die aktuelle spezifische Oberfläche durch lineare Interpolation ermittelt.

14.1.2.4 Zusammensetzung der Pseudobrennstoffströme aus dem Dreizonenmodell der Globalbilanzierung

Die wesentlichen Parameter im Dreizonenmodell wie sie für die durchgeführten Simulationen in dieser Arbeit angenommen wurden, sind im folgenden angeführt.

Anteil Verbrennung nichtflüchtiger Komponenten in der Primärzone:

$k_{nonvolatile,Prim} = 0{,}1$ (10 %)

Anteil Verbrennung flüchtiger Komponenten in der Rostzone:

$k_{volatile,Rost} = 0{,}05$ (5 %)

Mit diesen Parametern und den nachfolgend angeführten Heizwerten ergibt sich eine Verteilung der Heizleistung wie folgt:

Primärzone: 1.336 kW, entspricht 61,3 %
Rostzone: 844 kW, entspricht 38,7 %

Immediatanalyse Primärzonen-Brennstoff

Wassergehalt: 19,33 wt%, roh
Flüchtige Bestandteile: 96,59 wt%, TS
Nichtflüchtige Bestandteile: 3,41 wt%, TS
Koksgehalt (reaktiv): 3,41 wt%, TS
Aschegehalt (inert): 0,00 wt%, TS
Oberer Heizwert: 15.706 kJ/kg, TS

Immediatanalyse Rostzonen-Brennstoff

Wassergehalt: 0,00 wt%, roh
Flüchtige Bestandteile: 14,20 wt%, TS
Nichtflüchtige Bestandteile: 85,80 wt%, TS
Koksgehalt (reaktiv): 64,14 wt%, TS
Aschegehalt (inert): 21,66 wt%, TS
Oberer Heizwert: 24.937 kJ/kg, TS

Elementaranalyse Primärzonen-Brennstoff

C: 45,78 wt%, TS
H: 6,80 wt%, TS
O: 45,99 wt%, TS
Rest (Asche): 0,00 wt%, TS

Elementaranalyse Rostzonen-Brennstoff

C: 47,65 wt%, TS
H: 4,25 wt%, TS
O: 26,44 wt%, TS
Rest (Asche): 21,66 wt%, TS

14.2 Theorie der Turbulenzmodellierung

Nachdem die Methode der RANS-Turbulenzmodellierung in der vorliegenden Arbeit intensiv angewendet wurde, wird sie an dieser Stelle ausführlicher dargestellt. Der generelle Ansatz der Reynolds-Mittelwertbildung, die Modellierung der Turbulenzphänomäne im Rahmen von RANS, die Beschreibung der Turbulenzverhältnisse in Wandnähe sowie der Rückschluss vom turbulenten Impulstransport zum turbulenten Transport von Masse und Wärme sind dem folgenden Kapitel zu entnehmen.

14.2.1 Ansatz der Reynolds-Mittelung zur Turbulenzbeschreibung

Nachdem Turbulenz durch instationäre Fluktuationen aller Strömungsparameter gekennzeichnet ist, führt der Weg zur Beschreibung der Hauptströmung über einen statistischen Ansatz. Den Arbeiten Reynolds folgend (Reynolds, 1895) werden alle Bilanzgrößen als Summe eines zeitlichen Mittelwertes und einer Schwankungsgröße ausgedrückt (Gleichung 14.10). Unterscheiden sich nun die Zeitskalen der Turbulenz von jenen der Hauptströmung sehr stark, so kann eine Formulierung gefunden werden, in jener eventuelle zeitliche Schwankungen der Hauptströmung durch den Mittelwert abgebildet werden, während alle turbulenten Schwankungen durch die Schwankungsgrößen wiedergegeben werden (Wilcox, 1994; Paschedag, 2004; Tu et al., 2008).

$$\Phi(\mathbf{x},t) = \overline{\Phi}(\mathbf{x}) + \Phi'(\mathbf{x},t) \tag{14.10}$$

Die so zerlegten Bilanzgrößen werden nun in die Kontinuitätsgleichung und die Impulsbilanz eingesetzt und die Gleichungen werden zeitlich gemittelt. Der Zeitraum über den diese Mittelung durchgeführt wird, ist gegenüber der maximalen Periode der turbulenten Schwankungen sehr groß zu wählen. Auf diese Weise sind auch instationäre turbulente Strömungen beschreibbar, deren Hauptströmung (Mittelwerte) sich unabhängig von der turbulenten Schwankung auf langsamerer Zeitskala ebenfalls ändert. Die zeitliche Mittelung ist eine lineare Operation, für die gilt, dass der Mittelwert der Schwankungsgröße Null ist. Im Gegensatz dazu ist der Mittelwert des Produktes zweier Schwankungsgrößen nicht Null, wodurch bei der Mittelung der nichtlinearen Impulsbilanz (vereinfacht Navier-Stokes-Gleichung) zusätzliche, von vorneherein unbekannte Terme auftreten. Bei Strömungen mit sich ändernder Dichte (aufgrund von Temperatur oder chemischer Zusammensetzung) sind massenbruchgemittelte Geschwindigkeitskomponenten anzusetzen (Favre-gemittelte Gleichungen, siehe Blazek, 2007 und FLUENT, 2005). Die Reynolds-gemittelte Kontinuitätsgleichung und die Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichung stellen sich wie folgt dar (Gleichungen 14.11 und 14.12):

$$\nabla \overline{\mathbf{v}} = 0 \tag{14.11}$$

$$\rho\frac{\partial\overline{\mathbf{v}}}{\partial t} = -\rho\overline{\mathbf{v}}\nabla\overline{\mathbf{v}} + \eta\nabla^2\overline{\mathbf{v}} - \nabla\overline{p} + \rho\mathbf{g} + S_p - \nabla\boldsymbol{\tau}_{\text{Reynolds}} \tag{14.12}$$

Die Massenerhaltung gilt analog, es wird lediglich der Momentanwert durch den zeitlichen Mittelwert des Geschwindigkeitsvektors ersetzt. Gleichung 14.12 wird als Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichung (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*, *RANS*) bezeichnet und weist auf das Hauptproblem der Turbulenzbeschreibung für die Ingenieurswissenschaft hin (Wilcox, 1994). Im Zuge der Mittelung der Gleichung verbleibt ein zusätzlicher Term, der Reynolds-Spannungstensor (*Reynolds-stress tensor*), der unbekannt ist und für die vollständige Problembeschreibung modelliert werden muss. Dieser Spannungstensor repräsentiert den turbulenten Impulsaustausch, der bei hohen Reynoldszahlen wesentlich größer als der laminare Impulsaustausch aufgrund der molekularen Viskosität ist. Der Tensor ist symmetrisch (siehe Gleichung 14.13) und beinhaltet sechs unbekannte Komponenten. Um das Gleichungssystem zu schließen, müssen diese Komponenten als Funktion der gemittelten Geschwindigkeiten oder anderer bekannter System- oder Stoffgrößen ausgedrückt werden (Paschedag, 2004).

$$\nabla\boldsymbol{\tau}_{\text{Reynolds}} = \rho\overline{\mathbf{v}'\times\mathbf{v}'} = \begin{pmatrix} \rho\overline{v'_x v'_x} & \rho\overline{v'_x v'_y} & \rho\overline{v'_x v'_z} \\ \rho\overline{v'_y v'_x} & \rho\overline{v'_y v'_y} & \rho\overline{v'_y v'_z} \\ \rho\overline{v'_z v'_x} & \rho\overline{v'_z v'_y} & \rho\overline{v'_z v'_z} \end{pmatrix} \tag{14.13}$$

Die Ermittlung des Reynolds-Spannungs-Tensors ist also die grundlegende Aufgabe bei der *RANS*-Turbulenzmodellierung, wobei zwei grundlegend unterschiedliche Ansätze zu unterscheiden sind. Einerseits können für alle Komponenten des Spannungstensors Transportgleichungen aufgestellt und gelöst werden. Dieser Ansatz wird als Reynolds-Spannungs-Modell (*Reynolds-Stress-Modell*) bezeichnet und ist bei Strömungen mit stark anisotroper Turbulenz sowie hohen Drallzahlen empfehlenswert (Kiesewetter et al., 2003; Paschedag, 2004; FLUENT, 2005). Dieses Modell wird am Ende des Kapitels etwas genauer vorgestellt.

Der zweite Ansatz basiert auf dem sogenannten Wirbelviskositätskonzept und wird heute bei der CFD für verfahrenstechnische Aufgabenstellungen vorwiegend eingesetzt. Ein Überblick über gängige Modellansätze sowie deren Grenzen wird bei Hwang et al. und Wilcox gegeben (Wilcox, 1994; Hwang et al., 1998). Die Wirkung des Reynolds-Spannungs-Tensors auf die Strömung als zusätzlicher Impulsquelle kann mit der molekularen Viskosität und damit dem newtonschen Schubspannungstensor (Gleichung 6.4) verglichen werden. Unter der Annahme isotroper Turbulenz kann eine turbulente Scheinviskosität (Wirbelviskosität) η_t definiert werden, die, ähnlich dem newtonschen Schubspannungsansatz, die Impulsquelle (oder Senke) mit den Gradienten des Geschwindigkeitsvektors verknüpft. Dieser Ansatz wird als Boussinesq-Approximation (siehe Gleichung 14.14) bezeichnet (Wilcox, 1994; Paschedag, 2004; FLUENT, 2005; Tu et al., 2008).

$$\nabla\boldsymbol{\tau}_{\text{Reynolds}} = \eta_t\left[\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^{\mathsf{T}}\right] - \frac{2}{3}\rho k\boldsymbol{\delta} \tag{14.14}$$

In den Diagonalelementen des Tensors tritt hierbei die spezifische turbulente kinetische Energie k auf, die gemäß Gleichung 14.15 definiert ist (Wilcox, 1994; Paschedag, 2004; Blazek, 2007).

$$k = \frac{1}{2}\left(\overline{v'_x v'_x} + \overline{v'_y v'_y} + \overline{v'_z v'_z}\right) \tag{14.15}$$

Zusätzlich zur spezifischen turbulenten kinetischen Energie kann auch noch die *Dissipationsrate der spezifischen turbulenten kinetischen Energie* ε definiert werden (siehe Gleichung 14.16). Sie beschreibt die dissipative Umsetzung der turbulenten kinetischen Energie in thermische innere Energie (Wilcox, 1994).

$$\varepsilon = \frac{\nu}{2}\overline{\left|\nabla \mathbf{v}' + \left(\nabla \mathbf{v}'\right)^{\mathrm{T}}\right|^2} \tag{14.16}$$

Im Gegensatz zur molekularen Viskosität ist die Wirbelviskosität keine Stoffgröße, sondern eine Systemgröße, die von den anderen Strömungsgrößen abhängig ist. Bei ausgebildeter turbulenter Strömung ist die Wirbelviskosität um Größenordnungen größer als die molekulare Viskosität, die in vereinfachenden Betrachtungen dann oft vernachlässigt werden kann (Paschedag, 2004). Zur Berechnung der Wirbelviskosität ist heute eine Vielzahl von Modellen mit unterschiedlicher Komplexität und Genauigkeit verfügbar. Vergleiche über die Zuverlässigkeit, mit der diese Modelle verschiedene turbulente Strömungen vorhersagen können, finden sich in der Literatur (z.B. Vieser et al., 2002; Yaras et al., 2003a; Yaras et al., 2003b). Im folgenden Abschnitt werden jene Modelle beschrieben, die in der vorliegenden Arbeit anhand eines einfachen Strömungs-Testfalls (turbulenter Freistrahl) auf ihre Eignung untersucht wurden. Das Modell, welches für diesen Testfall die besten Ergebnisse lieferte, wurde im Anschluss für die komplexe Simulation des Verbrennungsvorganges in der Ofengeometrie herangezogen.

14.2.2 Das Spalart-Allmaras-Modell (sa)

Dieses Modell ist ein sehr einfaches Ein-Gleichungs-Modell zur Turbulenzbeschreibung, bei dem eine modellierte Transportgleichung für die Wirbelviskosität aufgestellt und gelöst wird. Die Transportgleichung enthält neben den klassischen Termen für Transport und Akkumulation einen Term zur Modellierung der Turbulenzproduktion (abhängig von der Wirbelstärke und der Deformation von Fluidelementen) sowie einen Term zur Modellierung der Turbulenzdissipation (ebenfalls abhängig von Wirbelstärke und Deformation). Bei der Anwendung des Spalart-Allmaras-Modells wird die turbulente kinetische Energie nicht berechnet, weshalb der letzte Term auf der rechten Seite der Boussinesq-Approximation (Gleichung 14.14) vernachlässigt werden muss. Das komplette Gleichungssystem dieses Modells ist den Übersichtsarbeiten von Blazek (Blazek, 2007), Cebeci (Cebeci et al., 2005) oder Wilcox (Wilcox, 1994) beziehungsweise der Originalarbeit von Spalart und Allmaras (Spalart et al., 1992) zu entnehmen. Obwohl das Modell prinzipiell auch die viskose und turbulente Strömungsgrenzschicht an einer festen Wand korrekt beschreiben kann, wurde aus rechentechnischen Gründen die Anwendung von sogenannten *Wandfunktionen* gewählt (siehe Kapitel 14.2.6).

Ursprünglich für Anwendungen in der Luftfahrt entwickelt (wandgebundene Scherströmungen und Grenzschichten) wurde das Modell auch für allgemeinere Strömungsformen weiterentwickelt. Es enthält eine Reihe von Modellparametern, die basierend auf experimentellen Ergebnissen angepasst worden sind.

Aufgrund der einfachen Struktur verspricht das Modell Robustheit und geringe Anfälligkeit für numerische Fehler oder numerische Instabilität. Andererseits ist in der Literatur bekannt, dass das Modell signifikante Schwierigkeiten bei der Vorhersage von Strömungsabrissen beziehungsweise beim Übergang einer wandgebundenen zu einer freien Scherströmung hat (Wilcox, 1994; FLUENT, 2005).

14.2.3 Die k-ε-Modellfamilie

Die k-ε-Turbulenzmodelle sind Zwei-Gleichungs-Modelle die je eine Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie und die Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie verwenden. Die Unterschiede bei den einzelnen Modellen dieser Gruppe finden sich im Wesentlichen bei der Methode zur Berechnung der Wirbelviskosität sowie bei den Termen betreffend Turbulenzproduktion und Turbulenzdissipation. Im folgenden Abschnitt werden das Standard-k-ε-, das RNG-k-ε- („*renormalization group*") sowie das Realizable-k-ε-Modell beschrieben.

14.2.3.1 Das Standard-k-ε-Modell (ske)

Das Standard-k-ε-Modell basiert im Wesentlichen auf den Arbeiten von Jones, Launder und Spalding (Jones et al., 1972; Launder et al., 1972) wobei die wichtigsten Modellparameter in den nachfolgenden Jahren verfeinert und neuen experimentellen Ergebnissen angepasst wurden (eine komplette Bibliographie zum Modell findet sich bei FLUENT, 2005 und Wilcox, 1994).

Obwohl bekannt ist, dass die Vorhersagequalität des Modells bei Strömungsablösungen unzureichend ist (Wilcox, 1994), ist dieses Modell heute bei der numerischen Strömungssimulation von verfahrenstechnischen Problemstellungen weit verbreitet (Paschedag, 2004; FLUENT, 2005). Wilcox (Wilcox, 1994) berichtet auch von einer relativ schlechten Performance bei der Behandlung planarer sowie axisymmetrischer turbulenter Freistrahlen. Als Grund für die im Vergleich zur Beschreibung planarer Freistrahlen schlechte Performance des Modells für axisymmetrische Freistrahlen (Aufweitungswinkel) wird heute die relativ einfache Modellierung der Transportgleichung für die Dissipationsrate gesehen (FLUENT, 2005). Für eine Reihe von technisch interessanten Strömungen ist das Modell aber aufgrund seiner Verlässlichkeit und Robustheit durchaus erfolgversprechend einsetzbar (siehe beispielsweise Xia et al., 1997; Fletcher et al., 1998; Hjertager et al., 2002; Stephenson, 2003; Awosope et al., 2005; Brink et al., 2005; Fukuyo, 2006; Weihong et al., 2006; Heikkinen et al., 2008; Nirmolo et al., 2008; Younsi et al., 2008). Die beiden Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie sowie deren Dissipationsrate sind den Gleichungen 14.17 und 14.18 zu entnehmen (Wilcox, 1994; Paschedag, 2004; FLUENT, 2005; Tu et al., 2008).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) = -\nabla(\bar{\mathbf{v}}\rho k) + \nabla\left[\left(\eta + \frac{\eta_t}{1{,}0}\right)\nabla k\right] + P_k + P_A - \rho\varepsilon \tag{14.17}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) = -\nabla(\bar{\mathbf{v}}\rho \varepsilon) + \nabla\left[\left(\eta + \frac{\eta_t}{1{,}3}\right)\nabla \varepsilon\right] + 1{,}44\frac{\varepsilon}{k}\left(P_k + C_{\varepsilon 3}P_A\right) - 1{,}92\rho\frac{\varepsilon^2}{k} \tag{14.18}$$

Die Gleichungen weisen die typische Struktur von Transportgleichungen auf: die linke Seite bildet jeweils den Speicherterm, die rechte Seite besteht jeweils aus einem konvektiven und einem diffusiven (Summe aus molekularem und turbulentem) Transportterm, zwei Quellterm sowie einem Dissipationsterm. Das Modell berücksichtigt sowohl die Produktion turbulenter kinetischer Energie aus den Gradienten der Geschwindigkeitsterme P_k (Gleichung 14.19) als auch aufgrund des thermischen Auftriebs P_A (Gleichung 14.22).

$$P_k = -\rho \overline{v_i' v_j'} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \tag{14.19}$$

Den Ausführungen in FLUENT (FLUENT, 2005) folgend kann P_k aus der Boussinesq-Hypothese approximiert werden, sodass Gleichung 14.20 angesetzt werden kann. S bezeichnet hierbei den Betrag des Scherraten-Tensors, der aus den Geschwindigkeitsmittelwerten der Hauptströmung berechnet wird. Der Tensor der Scherrate selbst ist gemäß Gleichung 14.21 zu ermitteln (FLUENT, 2005).

$$P_k = \eta_t S^2 \qquad \text{mit} \quad S \equiv \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \tag{14.20}$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j}\right) \tag{14.21}$$

Die Literatur zeigt, dass auch der thermische Auftrieb einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf den Zuwachs der turbulenten kinetischen Energie hat (FLUENT, 2005), der resultierende Quellterm für die Transportgleichungen ist Gleichung 14.22 zu entnehmen. Der Gewichtungsfaktor für die Berücksichtigung in der ε-Transportgleichung $C_{\varepsilon 3}$ wird trigonometrisch aus der Lage des Geschwindigkeitsvektors zum Vektor der Gravitationsbeschleunigung ermittelt (siehe Gleichung 14.23). Dabei ist v_i die Geschwindigkeitskomponente parallel zur Richtung des Gravitationsvektors und v_j die Komponente normal dazu.

$$P_A = -\mathbf{g} \frac{\eta_t}{\rho \mathrm{Pr}_t} \nabla \rho \tag{14.22}$$

$$C_{\varepsilon 3} = \tanh\left|\frac{v_i}{v_j}\right| \tag{14.23}$$

Die Quellen und Senken in der ε-Transportgleichung hängen dabei jeweils von den gleichen Größen wie jene in der k-Transportgleichung ab, da postuliert wird, dass ein Zuwachs an turbulenter kinetischer Energie auch zu einem Zuwachs an deren Dissipation führt (Paschedag, 2004).

Die Berechnung der Wirbelviskosität aus der turbulenten kinetischen Energie und der Dissipation erfolgt schließlich gemäß Gleichung 14.24 (FLUENT, 2005; Tu et al., 2008).

$$\eta_t = 0{,}09 \cdot \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{14.24}$$

Für die Beschreibung wandnaher Gebiete, speziell für die laminare Unterschicht an der Grenzschicht zu einer festen Wand ist das k-ε-Modell nicht geeignet, Randbedingungen der Art $k=0$ und $\varepsilon=0$ sind nicht sinnvoll und liefern keine physikalischen Ergebnisse (Paschedag, 2004). Aus diesem Grund wurden in Wandnähe statt dem Turbulenzmodell vereinfachte Wandfunktionen verwendet (siehe Kapitel 14.2.6). Bei diesem Ansatz wird die gesamte Wandgrenzschicht in einer einzelnen wandnahen Gitterschicht untergebracht und der Verlauf der Strömungsgeschwindigkeit in Abhängigkeit vom Wandabstand mit einer konstanten logarithmischen Funktion angenähert. Dieser Ansatz ist für alle k-ε-Modelle, also auch das RNG- und das Realizable-k-ε-Modell, erforderlich.

14.2.3.2 Das RNG-k-ε-Modell (rngke)

Das *Renormalisation-Group-k-ε-Modell* unterscheidet sich vom Standardmodell durch modifizierte Quell- und Viskositätsterme für die Transportgleichungen von k und ε sowie durch die Anzahl der erforderlichen Modellkonstanten (Paschedag, 2004). Es erweitert die Fähigkeiten des Standardmodells in Richtung niedrigere Reynoldszahlen, stärker gekrümmte Stromlinien sowie große Spannungsgradienten. Ein Vergleich des RNG-k-ε-Modells mit dem Standardmodell ist bei Ravary ausgeführt (Ravary et al., 1999), Kær und auch Pyykönen zeigen einfache Anwendungen des Modells im Bereich Verbrennungstechnik (Pyykönen et al., 2003; Kær, 2004a; Kær, 2004b). Die beiden relevanten Transportgleichungen sind in den Gleichungen 14.25 und 14.26 dargestellt (FLUENT, 2005), die Ähnlichkeit zum Standardmodell (Gleichungen 14.17 und 14.18) sind offensichtlich.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) = -\nabla(\bar{\mathbf{v}}\rho k) + \nabla\left[\alpha_k \eta_{\text{eff}} \nabla k\right] + P_k + P_A - \rho\varepsilon \tag{14.25}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) = -\nabla(\bar{\mathbf{v}}\rho \varepsilon) + \nabla\left[\alpha_\varepsilon \eta_{\text{eff}} \nabla \varepsilon\right] + 1{,}42\frac{\varepsilon}{k}\left(P_k + C_{\varepsilon 3} P_A\right) - 1{,}68\rho\frac{\varepsilon^2}{k} - R_\varepsilon \tag{14.26}$$

Die Produktionsterme P_k und P_A sowie der Gewichtungsfaktor $C_{\varepsilon 3}$ werden wie im Standard-k-ε-Modell ermittelt. Im Viskositätsterm beider Gleichungen wird nun eine effektive Viskosität η_{eff} eingeführt, die eine verbesserte Beschreibung des turbulenten Transports mit unterschiedlichen und speziell niedrigen Reynoldszahlen ermöglicht. Für hohe Reynoldszahlen wird für die Wirbelviskosität dieselbe Gleichung wie im Standardmodell verwendet, nur mit geringfügig angepasster Modellkonstante (Gleichung 14.27). Für niedrige Reynoldszahlen wird eine andere Formulierung verwendet; hier enthält das Modell eine Differentialgleichung für die effektive Viskosität (Gleichung 14.28), die im Zuge der Lösung des Gesamtproblems integriert werden muss (FLUENT, 2005).

$$\eta_t = 0{,}0845 \cdot \rho\frac{k^2}{\varepsilon} \tag{14.27}$$

$$d\left(\frac{\rho^2 k}{\sqrt{\varepsilon\eta}}\right) = 1{,}72\frac{\hat{\nu}}{\sqrt{\hat{\nu}^3 - 99}}\,d\hat{\nu} \qquad \text{mit } \hat{\nu} \equiv \frac{\eta_{\text{eff}}}{\eta} \tag{14.28}$$

Für stark rotierende Strömungen mit hohen Drallzahlen bietet das RNG- k-ε-Modell eine Korrekturfunktion für die Wirbelviskosität an, die jeweils als Funktion der lokalen Drallzahl ermittelt wird (siehe FLUENT, 2005).

Die beiden Proportionalitätsfaktoren α_k und α_ε in den Gleichungen 14.25 und 14.26 stellen die inversen effektiven Prandtl-Zahlen dar und genügen laut RNG-Theorie der Gleichung 14.29 jeweils mit $\alpha=\alpha_k$ und $\alpha=\alpha_\varepsilon$. Für große Reynoldszahlen geht das Verhältnis von molekularer Viskosität η zu effektiver Viskosität η_{eff} gegen Null, sodass $\alpha_k=\alpha_\varepsilon \approx 1{,}393$ (FLUENT, 2005).

$$\left|\frac{\alpha-1{,}3929}{0{,}3929}\right|^{0{,}6321}\cdot\left|\frac{\alpha+2{,}3929}{3{,}3929}\right|^{0{,}3679}=\frac{\eta}{\eta_{eff}} \tag{14.29}$$

Der wesentlichste Unterschied des RNG-k-ε-Modells gegenüber dem Standardmodell ist der zusätzliche Quellterm R_ε in der ε-Transportgleichung (14.26). Dieser Term wird gemäß Gleichung 14.30 ermittelt.

$$R_\varepsilon=\frac{0{,}0845\rho\xi^3\left(1-\frac{\xi}{4{,}38}\right)}{1+0{,}012\xi^3}\frac{\varepsilon^2}{k} \qquad \text{mit } \xi\equiv S\frac{k}{\varepsilon} \tag{14.30}$$

S in dieser Gleichung bezeichnet den Betrag des Scherraten-Tensors aus Gleichung 14.20. In Regionen mit niedrigen oder moderaten Spannungen liefert der Quellterm R_ε einen positiven Beitrag zur Bildung von ε und FLUENT (FLUENT, 2005) zeigt, dass das RNG-Modell in diesem Fall ähnliche Ergebnisse liefert wie das Standardmodell. In Regionen mit hohen Scherspannungen liefert der Quellterm einen negativen Beitrag wodurch die Dissipation von ε reduziert und ε selbst damit gegenüber dem Standardmodell erhöht wird. Damit ist auch die turbulente kinetische Energie sowie die Wirbelviskosität in diesen Strömungsregionen beim RNG-Modell geringer als mit dem Standardmodell vorhergesagt (siehe FLUENT, 2005). Da dies der realen turbulenten Strömung besser entspricht, ist das RNG-Modell für solche Strömungsformen (große räumliche Geschwindigkeitsgradienten, stark gekrümmte Stromlinien) dem Standardmodell überlegen.

14.2.3.3 Das Realizable-k-ε-Modell (rke)

Ein oft kritisierte Schwäche des Standard-k-ε-Modells ist die relativ schwache Modellierung der Transportgleichung für die Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie ε. Speziell bei der Simulation von Freistrahlen macht sich dieses Manko bemerkbar (FLUENT, 2005). Um dem Abhilfe zu leisten wurde im *Realizable-k-ε-Modell* die Modellierung dieser wesentlichen Gleichung erheblich verbessert. Einerseits wurde der Produktionsterm für die Dissipationsrate unabhängig von jener für die turbulente kinetische Energie gemacht, und andererseits wurde der Dissipationsterm signifikant überarbeitet. Darüber hinaus wurde auch noch die Modellgleichung für die Wirbelviskosität adaptiert (FLUENT, 2005). Das Modell wurde für einen weiten Bereich unterschiedlicher Strömungsformen validiert und zeigt in allen Fällen eine bessere Leistung als das Standard-k-ε-Modell (siehe hierzu auch Scharler et al., 2000a; Scharler et al., 2000b; Loos et al., 2004; Yin et al., 2008; Li et al., 2011). Speziell im Bereich der Beschreibung axisymmetrischer turbulenter Freistrahlen berichtet die Literatur

von signifikanten Verbesserungen (FLUENT, 2005). Als realisierbar (*realizable*) wurde dieses Modell deshalb bezeichnet, weil es bestimmte physikalisch/mathematische Gesetzmäßigkeiten betreffend der Normalspannungen auf Fluidelemente in turbulenter Strömung erfüllen kann. Im speziellen ist nur mit diesem Modell sichergestellt, dass die auf ein Fluidelement wirkenden Normalspannungen auch bei schwierigen Strömungssituationen nie negative Werte annehmen können. Die grundlegenden Transportgleichungen sind in den Gleichungen 14.31, 14.32 und 14.33 dargestellt (FLUENT, 2005).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) = -\nabla(\bar{\mathbf{v}}\rho k) + \nabla\left[\left(\eta + \frac{\eta_t}{1{,}0}\right)\nabla k\right] + P_k + P_A - \rho\varepsilon \tag{14.31}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) = -\nabla(\bar{\mathbf{v}}\rho\varepsilon) + \nabla\left[\left(\eta + \frac{\eta_t}{1{,}2}\right)\nabla\varepsilon\right] + C_1\rho S\varepsilon - 1{,}9\rho\frac{\varepsilon^2}{k+\sqrt{\nu\varepsilon}} + 1{,}44\frac{\varepsilon}{k}C_{\varepsilon 3}P_A \tag{14.32}$$

$$C_1 = \max\left[0{,}43\,,\,\frac{\xi}{\xi+5}\right] \qquad \text{mit } \xi \equiv S\frac{k}{\varepsilon} \tag{14.33}$$

In diesen Gleichungen bezeichnet P_k die Produktion turbulenter kinetischer Energie aufgrund der Geschwindigkeitsgradienten (Berechnung siehe Gleichung 14.20) und P_A bezeichnet die Produktion aufgrund des thermischen Auftriebs (Berechnung siehe Gleichung 14.22). Der Gewichtungsfaktor für den thermischen Auftrieb $C_{\varepsilon 3}$ in Gleichung 14.32 wird genauso wie beim Standard-k-ε-Modell ermittelt (Gleichung 14.23). Auch hier bezeichnet S den Betrag des Scherraten-Tensors aus der mittleren Geschwindigkeit der Hauptströmung.

$$\eta_t = C_\eta \cdot \rho\frac{k^2}{\varepsilon} \tag{14.34}$$

Die Bestimmungsgleichung für die Wirbelviskosität (Gleichung 14.34) stellt sich ähnlich dar wie in den beiden anderen k-ε-Modellen, wobei der verwendete Proportionalitätsfaktor (C_η) in diesem Fall eine Funktion und keine Konstante mehr ist. Der Proportionalitätsfaktor ist dabei eine relativ komplexe Funktion der Scherspannung, der Rotationsgeschwindigkeit großskaliger Wirbelstrukturen und der Felder der turbulenten Kenngrößen k und ε (die Bestimmungsgleichungen sind FLUENT (FLUENT, 2005) zu entnehmen). Rotatorische Bewegungen der Hauptströmung werden also in die Modellierung miteinbezogen, wodurch der Anwendungsbereich der k-ε-Modelle nochmals erweitert werden kann.

14.2.4 Die k-ω-Modellfamilie

Auch die k-ω-Turbulenzmodelle sind Zwei-Gleichungs-Modelle, die aber im Vergleich zu den k-ε-Modellen je eine Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie und die *spezifische Dissipationsrate pro Einheit der turbulenten kinetischen Energie* ω verwenden (Wilcox, 1994). Einige deutschsprachige Autoren verwenden für diese Dissipationsrate auch den Terminus *Wirbelstärke* (Paschedag, 2004), was aber missverständlich ist, da sich auch für den Rotationsraten-Tensor Ω dieser Begriff eingebürgert hat. Die spezifische Dissipationsrate lässt sich als Verhältnis von ε zu k auffassen (FLUENT, 2005). Im Anschluss werden das Standard-k-ω- sowie das SST-k-ω-Modell (*Shear Stress Transport*) beschrieben. Diese beiden

Modelle unterscheiden sich durch die Berechnung der Wirbelviskosität sowie durch die verschiedenartige Behandlung turbulenter Grenzschichten voneinander. Die Erweiterungen im SST-k-ω-Modell bringen speziell für turbulente Freistrahlen eine entscheidende Verbesserung.

14.2.4.1 Das Standard-k-ω-Modell (skw)

Das Standard-k-ω-Modell wurde als erstes Zwei-Gleichungs-Modell von Kolmogorov (Kolmogorov, 1942) entwickelt und auch dieses Modell wurde über die Jahre hinweg laufend erweitert (Einführung von Produktionstermen) und neu parametriert (auch hier sind alle wichtigen Veröffentlichungen zum Modell bei FLUENT (FLUENT, 2005) und Wilcox (Wilcox, 1994) aufgelistet). Wilcox zeigt in einem großen Vergleich mit experimentellen Ergebnissen sowie DNS-Ergebnissen (Wilcox, 1994), dass das Standard-k-ω-Modell bei den meisten Strömungsformen wesentlich bessere Vorhersagen liefern kann als das Standard-k-ε-Modell (untersucht wurden Nachlaufströmungen, Trennschichten, ebene und runde Freistrahlen sowie Rohr- und Kanalströmungen). Auch dieses Modell wird heute in der verfahrenstechnischen Praxis relativ häufig eingesetzt, wenngleich es nicht annähernd die Popularität des Standard-k-ε-Modells genießt. Die beiden Transportgleichungen für k und ω, die in diesem Modell verwendet werden, sind in den Gleichungen 14.35 und 14.36 dargestellt.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) = -\nabla(\bar{\mathbf{v}}\rho k) + \nabla(\Gamma_k \nabla k) + P_k - D_k \tag{14.35}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) = -\nabla(\bar{\mathbf{v}}\rho \omega) + \nabla(\Gamma_\omega \nabla \omega) + P_\omega - D_\omega \tag{14.36}$$

Auch diese Gleichungen weisen die typische Struktur von Transportgleichungen auf: die linke Seite steht für den Speicherterm, die rechte Seite setzt sich aus einem konvektiven und einem diffusiven Transportterm sowie einem Produktions- und einem Dissipationsterm zusammen. Die Diffusionsterme in beiden Transportgleichungen verwenden als Proportionalitätsfaktor jeweils eine *effektive Diffusivität* Γ_k und Γ_ω, die sich aus der molekularen Viskosität und der Wirbelviskosität gemäß den Gleichungen 14.37 und 14.38 zusammensetzen.

$$\Gamma_k = \eta + \frac{\eta_t}{2{,}0} \tag{14.37}$$

$$\Gamma_\omega = \eta + \frac{\eta_t}{2{,}0} \tag{14.38}$$

Die Berechnung der Wirbelviskosität erfolgt sehr einfach aus k und ω nach Gleichung 14.39. Der Faktor α^* stellt dabei eine Dämpfungsfunktion für kleine Reynoldszahlen dar und ist eine der bereits erwähnten Ergänzungen zum ursprünglichen Modell wie es bei Wilcox (Wilcox, 1994) dargestellt ist. Für große Reynoldszahlen geht dieser Faktor gegen 1.

$$\eta_t = \alpha^* \frac{\rho k}{\omega} \qquad \text{mit } \alpha^* = \frac{0{,}024 + \frac{\rho k}{6\eta\omega}}{1 + \frac{\rho k}{6\eta\omega}} \tag{14.39}$$

Die Berechnung des Produktionsterms für die turbulente kinetische Energie P_k wird analog zum k-ε-Modell durchgeführt (siehe Gleichung 14.19 bis 14.21). Die Berechnung des Produktionsterms für ω erfolgt aus dem Produktionsterm P_k nach Gleichung 14.40 wobei auch hier wie in Gleichung 14.39 eine Dämpfungsfunktion für kleine Reynoldszahlen vorgesehen ist ($\alpha_\omega \rightarrow 1$ für $Re >> 1$).

$$P_\omega = \alpha_\omega \frac{\omega}{k} P_k \qquad \text{mit } \alpha_\omega = \frac{0{,}52}{\alpha^*}\left(\frac{\frac{1}{9}+\frac{\rho k}{2{,}95\eta\omega}}{1+\frac{\rho k}{2{,}95\eta\omega}}\right) \tag{14.40}$$

Die Dissipationsterme für k und ω sind jeweils komplexere Funktionen von k und ω selbst. Unter Vernachlässigung von Kompressibilitätseffekten können der Dissipationsterm für k gemäß Gleichungen 14.41 und 14.42 und der Dissipationsterm für ω gemäß Gleichung 14.43 berechnet werden. In letztgenannter Gleichung bezeichnet Ω_{ij} den Rotationsraten-Tensor der Geschwindigkeitsmittelwerte der Hauptströmung (Wirbelstärke, *vorticity*).

$$D_k = 0{,}09\left(\frac{\frac{4}{15}+\left(\frac{\rho k}{8\eta\omega}\right)^4}{1+\left(\frac{\rho k}{8\eta\omega}\right)^4}\right)\rho f_{\beta^*} k\omega \tag{14.41}$$

$$f_{\beta^*} = \begin{cases} 1 & \text{für } \Phi_k \le 0 \\ \dfrac{1+680\Phi_k^2}{1+400\Phi_k^2} & \text{für } \Phi_k > 0 \end{cases} \qquad \text{mit } \Phi_k = \frac{1}{\omega^3}\frac{\partial k}{\partial x_j}\frac{\partial \omega}{\partial x_j} \tag{14.42}$$

$$D_\omega = 0{,}072\rho \frac{1+70\left|\frac{\Omega_{ij}\Omega_{jk}S_{ki}}{(0{,}09\omega)^3}\right|}{1+80\left|\frac{\Omega_{ij}\Omega_{jk}S_{ki}}{(0{,}09\omega)^3}\right|}\omega^2 \qquad \text{mit } \Omega_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j}-\frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right) \tag{14.43}$$

Im Gegensatz zu den k-ε-Modellen sind beide k-ω-Modelle bei ausreichender Gitterauflösung in der Lage, auch die Strömungsgrenzschicht nahe einer festen Wand zu beschreiben (FLUENT, 2005). Da hierfür aber (in Abhängigkeit von der lokalen Reynoldszahl) ein relativ feines Gitter erforderlich ist, würde der rechentechnische Aufwand einer Simulation stark steigen. Deshalb wurde in der vorliegenden Arbeit auch für diese Modelle der Ansatz der Wandfunktionen (siehe Kapitel 14.2.6) verwendet.

14.2.4.2 Das Shear-Stress-Transport-k-ω-Modell (sstkw)

Das SST-k-ω-Modell ist eine Weiterentwicklung des Standard-k-ω-Modells, welche im Wesentlichen auf die Arbeiten von Menter zurückzuführen ist (Menter, 1994; Vieser et al., 2002). Die Benennung des Modells beruht auf einem hinzugefügten Term bei der Berech-

nung der Wirbelviskosität zur Berücksichtigung des Transportes der turbulenten Scherspannung (FLUENT, 2005). Das wesentlichste Feature des Modells ist aber eine sogenannte *Blendingfunktion*, die in den inneren Bereichen von Wandgrenzschichten das Standard-k-ω-Modell nach Wilcox (Wilcox, 1994) verwendet, in den Außenbereichen sowie im unbehinderten freien Scherstrom graduell auf das Standard-k-ε-Modell umschaltet (*blending*). Letzteres wurde mit dem bereits erwähnten Zusatzterm zur Berücksichtigung des Scherspannungstransportes erweitert (Menter, 1994). Die beiden Transportgleichungen für k und ω entsprechen genau dem Standard-k-ω-Modell (siehe Gleichungen 14.35 und 14.36). Die Berechnung der in diesen Gleichungen verwendeten effektiven Diffusivitäten geschieht hier aber anders (FLUENT, 2005; Blazek, 2007):

$$\Gamma_k = \eta + \frac{\eta_t}{2{,}0} \tag{14.44}$$

$$\Gamma_\omega = \eta + \frac{\eta_t}{\sigma_\omega} \tag{14.45}$$

wobei die verwendeten Unbekannten nach den Gleichungen 14.46, 14.47, und 14.48 zu ermitteln sind (Vieser et al., 2002; FLUENT, 2005).

$$\eta_t = \frac{\rho k}{\omega}\left(\frac{1}{\max\left[\frac{1}{\alpha^*}, \frac{\Omega F_2}{0{,}31\omega}\right]}\right) \quad \text{mit } \Omega \equiv \sqrt{2\Omega_{ij}\Omega_{ij}} \quad \text{und } \Omega_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right) \tag{14.46}$$

$$\sigma_k = \frac{1}{\frac{F_1}{1{,}176} + \frac{(1-F_1)}{1{,}0}} \tag{14.47}$$

$$\sigma_\omega = \frac{1}{\frac{F_1}{2{,}0} + \frac{(1-F_1)}{1{,}168}} \tag{14.48}$$

Die in Gleichung 14.46 verwendete Dämpfungsfunktion α^* ist hierbei nach Gleichung 14.39 zu berechnen; Ω_{ij} bezeichnet auch hier den Rotationsraten-Tensor. F_1 und F_2 in diesen Gleichungen sind die besagten Blendingfunktionen, die nach Menter (Menter, 1994) und Vieser et al. (Vieser et al., 2002) wie folgt definiert sind:

$$F_1 = \tanh\left(\Phi_1^4\right) \qquad \text{mit} \quad \Phi_1 = \min\left[\max\left(\frac{\sqrt{k}}{0{,}09y\omega}, \frac{500\eta}{\rho y^2\omega}\right), \frac{4{,}672\rho k}{y^2 D_\omega^+}\right] \tag{14.49}$$

$$F_2 = \tanh\left(\Phi_2^2\right) \qquad \text{mit} \quad \Phi_2 = \max\left[\frac{2\sqrt{k}}{0{,}09y\omega}, \frac{500\eta}{\rho y^2\omega}\right] \tag{14.50}$$

Die beiden Gleichungen 14.49 und 14.50 enthalten den Abstand zur nächstgelegenen Wand als Parameter, der mit y bezeichnet wird. Darüber hinaus tritt auch noch die Funktion

D_ω^+ auf, die den positiven Anteil der sogenannten *Cross-Diffusion-Modifikation* darstellt. Da das SST-k-ω-Modell neben dem Standard-k-ω-Modell auch auf dem Standard-k-ω-Modell beruht, muss letzteres in eine Form übergeführt werden, die nicht k und ε sondern k und ω enthält, um das *blending* korrekt durchführen zu können. Aus dieser Operation bleibt ein zusätzlicher Term im Modell bestehen, dessen positiver Anteil in Gleichung 14.49 eingesetzt werden muss und der wie folgt definiert ist (Menter, 1994; Vieser et al., 2002):

$$D_\omega^+ = \max\left[\frac{2{,}336\rho}{\omega}\frac{\partial k}{\partial x_i}\frac{\partial \omega}{\partial x_i}, 10^{-20}\right] \tag{14.51}$$

Gleichung 14.46 zeigt eine zusätzliche Erweiterung des SST-k-ω-Modells: es wird eine obere Schranke für die Wirbelviskosität eingeführt, wodurch die Vorhersage extensiv hoher Scherspannungen verhindert wird, die typisch für Boussinesq-Wirbelviskositäts-Modelle sind (Vieser et al., 2002).

Die Berechnung des Produktionsterms für die turbulente kinetische Energie P_k wird wiederum analog zum k-ε-Modell durchgeführt (siehe Gleichungen 14.19 bis 14.21). Die Berechnung des Produktionsterms für ω erfolgt unterschiedlich zum Standardmodell aus dem Produktionsterm P_k nach Gleichung 14.52 wobei α^* dem Standardmodell in Gleichung 14.39 zu entnehmen ist.

$$P_\omega = \frac{\alpha_\omega}{\eta_t}\rho P_k \qquad \text{mit } \alpha_\omega = \frac{0{,}5532F_1 + 0{,}4403(1-F_1)}{\alpha^*}\left(\frac{\frac{1}{9}+\frac{\rho k}{2{,}95\eta\omega}}{1+\frac{\rho k}{2{,}95\eta\omega}}\right) \tag{14.52}$$

Der Dissipationsterm für k wird ähnlich wie im Standardmodell, allerdings etwas vereinfacht ermittelt und ist Gleichung 14.53 zu entnehmen. Auch die Berechnung des Dissipationstermes für ω gestaltet sich vergleichsweise einfach, die Bestimmungsgleichung ist in Gleichung 14.54 angeführt.

$$D_k = 0{,}09\left(\frac{\frac{4}{15}+\left(\frac{\rho k}{8\eta\omega}\right)^4}{1+\left(\frac{\rho k}{8\eta\omega}\right)^4}\right)\rho k\omega \tag{14.53}$$

$$D_\omega = \rho\left(0{,}075F_1 + 0{,}0828(1-F_1)\right)\omega^2 \tag{14.54}$$

In der Literatur wird dem SST-k-ω-Modell gute Vorhersagequalität für verschiedenste Strömungsformen attestiert (Langrish et al., 2007; Kumar et al., 2008), auch die vorliegende Arbeit zeigt die gute Performance des Modells für die, den betrachteten Verbrennungsapparat charakterisierenden, Strömungsformen.

14.2.5 Das Reynolds-Stress-Modell (rsm)

Die bisher diskutierten Turbulenzmodelle, die alle auf der Boussinesq-Approximation beruhen, haben bereits für eine ganze Reihe ingenieurstechnischer Problemstellungen zufriedenstellende Lösungen liefern können. Die Modelle sind einfach, mathematisch robust und rechentechnisch effizient implementiert. Es gibt aber in der technischen Praxis vereinzelte Strömungsprobleme, für die die hierbei getroffenen Vereinfachungen zu schwerwiegend sind und mit diesen Modellen keine sinnvollen oder physikalisch plausiblen Resultate mehr erzielt werden können. Das Reynolds-Stress-Modell unterscheidet sich von den bisher vorgestellten Modellen grundlegend dadurch, dass hier nicht der Boussinesq-Ansatz zur Ermittlung einer turbulenten Wirbelviskosität als Hilfsgröße verwendet wird, sondern die die Turbulenz grundlegender und unmittelbarer beschreibenden Reynoldsschen Spannungskomponenten bilanziert werden. Im Fachjargon der CFD spricht man hierbei von einer Problemschließung zweiter Ordnung. Dieses Modell ist wahrscheinlich das leistungsfähigste im Portfolio des verwendeten kommerziellen CFD-Solvers und erfordert die Lösung von 7 zusätzlichen partiellen Differentialgleichungen (Transportgleichungen). Diese Gleichungen beinhalten 6 Transportgleichungen für die Reynoldsspannungen (der 3x3-Tensor der Reynolds-Spannungen ist symmetrisch, siehe Blazek, 2007) und eine Transportgleichung für die Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie. Daraus folgt, dass das Reynolds-Stress-Modell rechentechnisch wesentlich aufwändiger als die bisher diskutierten Modelle ist, für komplexe Strömungen aber ein höheres Potential hat, genaue Lösungen zu liefern. Dennoch bleibt die Vorhersagekapazität auch dieses Modells aufgrund der zahlreichen getroffenen Schließungs-Approximationen rund um die exakten Transportgleichungen der Reynoldsspannungen in gewissem Ausmaß limitiert (FLUENT, 2005).

Beinhaltet das betrachtete Problem stark rotierende Strömungen oder Strömungen über stark gekrümmte Oberflächen, oder werden Sekundärströmungen bei der Durchströmung von Rohrleitungen oder Kanälen untersucht, so empfiehlt die Literatur dem Ingenieur, ein Reynolds-Spannungs-Modell zumindest in Betracht zu ziehen (Launder et al., 1975; Wilcox, 1994; Hallbäck et al., 1995). Kiesewetter (Kiesewetter et al., 2003) demonstriert die erfolgreiche Anwendung des Modells für eine stark rotierende Strömung in einer Gasturbine, Wennerberg (Wennerberg, 1995) setzt das Modell für die Beschreibung eines Drallbrenners ein. Wennerberg und auch Saario (Saario et al., 2005) führen dabei für ihre Anwendungen einen Vergleich mit dem k-ε-Modell durch. Wilcox (Wilcox, 1994) zeigt die gute Anwendbarkeit des Modells auf wandgebundene Strömungen (Grenzschichten, Kanal- und Rohrströmung), Ablösungseffekte und verschiedene komplexere Strömungsformen, berichtet aber auch von einer mangelnden Vorhersagequalität betreffend den Aufweitungswinkel eines Freistrahls (im Vergleich zum Standard-k-ε-Modell).

Die Grundlage des Reynolds-Stress-Modells ist die exakte Transportgleichung für den Reynolds-Spannungs-Tensor $\tau_{ij} = \rho \overline{v_i' v_j'}$ so wie sie in Gleichung 14.55 dargestellt ist (Wilcox, 1994; FLUENT, 2005; Blazek, 2007). Die Terme C_{ij}, $D_{L,ij}$, P_{ij} und F_{ij} sind direkt berechenbar, während die Terme $D_{T,ij}$, Φ_{ij}, G_{ij} und ε_{ij} für die Schließung des Gleichungssystems modelliert werden müssen (FLUENT, 2005).

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\overline{v_i'v_j'}\right)}_{\text{Speicherterm}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho v_k\overline{v_i'v_j'}\right)}_{C_{ij}\equiv\text{Konvektion}} = \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k}\left[\rho\overline{v_i'v_j'v_k'} + \overline{p\left(\delta_{kj}v_i' + \delta_{ik}v_j'\right)}\right]}_{D_{T,ij}\equiv\text{Turbulente Diffusion}}$$

$$+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k}\left[\eta\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{v_i'v_j'}\right)\right]}_{D_{L,ij}\equiv\text{Molekulare Diffusion}} + \underbrace{\overline{p\left(\frac{\partial v_i'}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j'}{\partial x_i}\right)}}_{\Phi_{ij}\equiv\text{Druckspannung}} - \underbrace{2\eta\overline{\frac{\partial v_i'}{\partial x_k}\frac{\partial v_j'}{\partial x_k}}}_{\varepsilon_{ij}\equiv\text{Dissipation}} \tag{14.55}$$

$$- \underbrace{\rho\beta\left(g_i\overline{u_j'\Theta} + g_j\overline{u_i'\Theta}\right)}_{G_{ij}\equiv\text{Produktion durch Auftrieb}} - \underbrace{2\rho\Omega_k\left(\overline{v_j'v_m'}\varepsilon_{ikm} + \overline{v_i'v_m'}\varepsilon_{jkm}\right)}_{F_{ij}\equiv\text{Produktion durch Rotation}}$$

$$- \underbrace{\rho\left(\overline{v_i'v_k'}\frac{\partial v_j}{\partial x_k} + \overline{v_j'v_k'}\frac{\partial v_i}{\partial x_k}\right)}_{P_{ij}\equiv\text{Produktion durch Geschwindigkeitsgradienten}}$$

Modellierung der turbulenten Diffusion

Zur Berücksichtigung der turbulenten Diffusion der Reynolds-Spannungen wird der bekannte Gradienten-Diffusionsansatz (FLUENT, 2005) mit einem skalaren Diffusionskoeffizienten verwendet (siehe Gleichung 14.56). Hierbei wird die Wirbelviskosität verwendet, die gemäß Gleichung 14.67 berechnet werden kann.

$$D_{T,ij} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\eta_t}{0{,}82}\frac{\partial\overline{v_i'v_j'}}{\partial x_k}\right) \tag{14.56}$$

Modellierung der Druckspannung

Der Modellierung des Druckspannungs-Terms (*Pressure-Strain redistribution*) wird unter Turbulenzforschern besondere Aufmerksamkeit geschenkt, da dieser Terme einerseits größenordnungsmäßig in den meisten technischen Anwendungen eine kritische Rolle spielt und andererseits die experimentell-messtechnische Erfassung der zu modellierenden Größen schwierig oder unmöglich ist (Wilcox, 1994).

Die klassische Herangehensweise ist die Zerlegung des Gesamtterms in die drei Teile, die einen wesentlichen Beitrag liefern und die getrennte Modellierung dieser drei Anteile (Wilcox, 1994; FLUENT, 2005). Diese drei Teile sind der *langsame Druckspannungsterm*, der *schnelle Druckspannungsterm* und der *Wandreflexionsterm* (siehe Gleichung 14.57).

$$\Phi_{ij} = \Phi_{ij,slow} + \Phi_{ij,fast} + \Phi_{ij,wall} \tag{14.57}$$

Der langsame Druckspannungsterm resultiert im Wesentlichen aus den langsamen turbulenten Druckschwankungen, während der schnelle Druckspannungsterm aus den schnellen turbulenten Fluktuationen resultiert. Laut Wilcox (Wilcox, 1994) ist diese Definition allerdings nicht zu wörtlich zu verstehen. Der langsame Druckspannungsterm, oft auch *return-to-isotropy*-Term, errechnet sich nach Gleichung 14.58 (Wilcox, 1994; FLUENT, 2005).

$$\Phi_{ij,slow} = -1{,}8\rho\frac{\varepsilon}{k}\left(\overline{v_i'v_j'} - \frac{2}{3}\delta_{ij}k\right) \tag{14.58}$$

Der schnelle Druckspannungsterm wird im sogenannten LRR-Modell gemäß Gleichung 14.59 ermittelt (Wilcox, 1994; FLUENT, 2005).

$$\Phi_{ij,fast} = -0{,}6\left[\left(P_{ij} + F_{ij} + G_{ij} - C_{ij}\right) - \frac{1}{3}\delta_{ij}\left(P_{ij} + G_{ij} - C_{ij}\right)\right] \tag{14.59}$$

Dieses Modell verwendet einige der konstitutionellen Terme der Transportgleichung der Reynoldsspannungen, namentlich die Produktion aus Geschwindigkeitsgradienten, die Produktion aus der Systemrotation, die Produktion durch thermischen Auftrieb und die Konvektion. Als letzter Druckspannungsterm wird der Wandreflexionsterm, oft auch *wall-reflection-effect*, modelliert. Dieser Anteil sorgt dafür, dass in wandnahen Gebieten die Spannungsterme in Richtung der Flächennormalen gedämpft und die Spannungskomponenten parallel zur Wandfläche verstärkt werden. Der Modellansatz ist Gleichung 14.60 zu entnehmen (Wilcox, 1994; FLUENT, 2005). Die in dieser Gleichung enthaltene Variable d entspricht dem Normalabstand zur nächstgelegenen festen Wand, n_k ist die Komponente der Flächennormalen in Richtung x_k.

$$\begin{aligned}\Phi_{ij,wall} &= 1{,}2741\frac{k^{0,5}}{d}\left(\overline{v_k'v_m'}n_kn_m\delta_{ij} - \frac{3}{2}\overline{v_i'v_k'}n_in_k - \frac{3}{2}\overline{v_j'v_k'}n_in_k\right)\\ &+ 0{,}7644\frac{k^{1,5}}{\varepsilon d}\left(\Phi_{km,fast}n_kn_m\delta_{ij} - \frac{3}{2}\Phi_{ik,fast}n_jn_k - \frac{3}{2}\Phi_{jk}n_in_k\right)\end{aligned} \tag{14.60}$$

Für die Berechnung von Strömungen mit niedrigen Reynoldszahlen, speziell in wandnahen Schichten, bietet das Reynolds-Stress-Modell die Möglichkeit der Anpassung der in den Gleichungen 14.58 bis 14.60 enthaltenen Modellkonstanten in Abhängigkeit der lokalen Reynoldszahl (siehe hierzu FLUENT, 2005).

Modellierung der Produktion durch thermische Auftriebskräfte

Unter der Annahme idealer Gase geschieht die Modellierung des Produktionsterms aufgrund thermischer Auftriebskräfte im verwendeten CFD-Solver gemäß Gleichung 14.61 (FLUENT, 2005).

$$G_{ij} = -\frac{\eta_t}{0{,}85\rho}\left(g_i\frac{\partial\rho}{\partial x_j} + g_j\frac{\partial\rho}{\partial x_i}\right) \tag{14.61}$$

Modellierung der Dissipationsrate

Der Term in der Transportgleichung der Reynolds-Spannungen, der die Dissipation beschreibt wird unter Vernachlässigung etwaiger Kompressibilitätseffekte gemäß Gleichung 14.62 berechnet (Wilcox, 1994; FLUENT, 2005). Die Gleichung zeigt, dass die Dissipation in diesem Ansatz als lokal isotrop angenommen wird, eine Vereinfachung die die Anwendung in der vorliegenden Arbeit aber nicht signifikant einschränkt. Dennoch sei hier auch auf weiterentwickelte Modelle verwiesen, der die Anisotropie der Dissipation speziell in Wandnähe Rechnung tragen (siehe Wilcox, 1994).

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3}\delta_{ij}(\rho\varepsilon) \tag{14.62}$$

In dieser Gleichung ist die bereits bekannte Dissipationsrate der spezifischen turbulenten kinetischen Energie enthalten, welche ähnlich wie im Standard-k-ε-Modell durch Lösung einer Transportgleichung ermittelt wird (siehe Gleichung 14.18). Die im Reynolds-Stress-Modell verwendete Variante ist in Gleichung 14.63 gegeben (FLUENT, 2005). Der Gewichtungsfaktor für das Verhältnis zwischen Strömungsrichtung und Gravitationsrichtung $C_{\varepsilon 3}$ wird genau wie bei Verwendung des Standard-k-ε-Modells ermittelt (siehe Gleichung 14.23).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) = -\nabla(\bar{\mathbf{v}}\rho\varepsilon) + \nabla\left[\left(\eta + \frac{\eta_t}{1{,}0}\right)\nabla\varepsilon\right] + 0{,}72\frac{\varepsilon}{k}(P_{ii} + C_{\varepsilon 3}G_{ii}) - 1{,}92\rho\frac{\varepsilon^2}{k} \tag{14.63}$$

Modellierung der spezifischen turbulenten kinetischen Energie

An verschiedenen Stellen im Reynolds-Stress-Modell wird die spezifische turbulente kinetische Energie zur Ermittlung weiterer Größen benötigt. Für die unbeeinflusste freie Strömung kann diese Größe gemäß Gleichung 14.64 berechnet werden (FLUENT, 2005).

$$k = \frac{1}{2}\overline{v_i' v_i'} \tag{14.64}$$

Für die Strömung in der Nähe fester Wände wird dieser Ansatz nicht gewählt, da hier Randbedingungen für die Reynolds-Spannungen vorgegeben werden können und müssen. Aus diesem Grund wird für den wandnahen Bereich die Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie angesetzt und gelöst. Diese ist der Grundgleichung des Standard-k-ε-Modells sehr ähnlich (Gleichung 14.17); der Ansatz für inkompressible Strömungen ist in Gleichung 14.65 dargestellt (FLUENT, 2005).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) = -\nabla(\bar{\mathbf{v}}\rho k) + \nabla\left[\left(\eta + \frac{\eta_t}{0{,}82}\right)\nabla k\right] + \frac{1}{2}(P_{ii} + G_{ii}) - \rho\varepsilon \tag{14.65}$$

Zur Lösung der Differentialgleichung 14.65 werden für k bzw. die Reynolds-Spannungen die in Gleichung angegebenen Randbedingungen verwendet. Hierbei kommt ein lokales Koordinatensystem zum Einsatz, bei dem τ die Tangentialrichtung, η die Normalrichtung und λ die Binormalrichtung in Bezug auf die Hauptströmung bezeichnet (FLUENT, 2005).

$$\frac{\overline{v_\tau'^2}}{k} = 1{,}098 \qquad \frac{\overline{v_\eta'^2}}{k} = 0{,}247 \qquad \frac{\overline{v_\lambda'^2}}{k} = 0{,}655 \qquad \frac{\overline{v_\tau' v_\eta'}}{k} = -0{,}255 \tag{14.66}$$

Modellierung der Wirbelviskosität

Obwohl die Wirbelviskosität in der Transportgleichung der Reynolds-Spannungen nicht explizit vorkommt, so wird sie doch zur Modellierung einzelner Quellterme benötigt. Die Berechnung erfolgt genauso wie bei den k-ε-Modellen gemäß Gleichung 14.67 (FLUENT, 2005).

$$\eta_t = 0{,}09\rho\frac{k^2}{\varepsilon} \tag{14.67}$$

14.2.6 Wandfunktionen

Turbulente Strömungen werden durch das Vorhandensein fester Wende maßgeblich beeinflusst. Das Feld der mittleren Strömungsgeschwindigkeit muss an der Wand die Haftbedingung erfüllen; im Kern der Strömung ergibt sich das Geschwindigkeitsfeld aufgrund der freien Scherströmung. Auch die Turbulenzkenngrößen werden durch die feste Wand beeinflusst. Tangentiale Geschwindigkeitsfluktuationen werden nahe der Wand durch viskose Dämpfung reduziert, Fluktuationen normal zur Wand werden durch den Blockadeeffekt abgeschwächt. Mit zunehmendem Wandabstand nähert sich die mittlere Geschwindigkeit jener der Kernströmung, die großen Geschwindigkeitsgradienten sorgen für eine starke Zunahme der Turbulenzproduktion (FLUENT, 2005).

Die Beschreibung des Verlaufes der mittleren Geschwindigkeit sowie jener der Turbulenzkenngrößen innerhalb wandnaher Grenzschichten ist deshalb für die gesamte numerische Strömungssimulation von großer Wichtigkeit. Darüber hinaus zeigen fast alle Bilanzgrößen innerhalb der Wandgrenzschicht große Gradienten, die für eine numerische Analyse ein kritisches Element darstellen können. Da feste Wände oft auch Auslöser für großskalige Wirbel und Turbulenz sind, ist eine adäquate Beschreibung der Wandgrenzschicht für eine verlässliche CFD-Simulation unerlässlich.

Die k-ε-Turbulenzmodelle und das RSM-Modell erlauben nur in der turbulenten Kernströmung eine verlässliche Beschreibung, während die k-ω-Modelle und das einfache Modell nach Spalart-Allmaras bei ausreichender Gitterauflösung auch für die Beschreibung der gesamten Grenzschicht einsetzbar sind. Da bei komplexeren Geometrien diese erhöhte Gitterauflösung in Wandnähe den Rechenaufwand signifikant erhöht, wurde in der vorliegenden Arbeit für alle Turbulenzmodelle der Ansatz der Wandfunktionen herangezogen (FLUENT, 2005), der prinzipiell auf die Arbeiten von Launder und Spalding (Launder et al., 1974) zurückzuführen ist. Dieser Ansatz ist bei der Simulation industrieller und praktisch relevanter Strömungsprobleme sehr populär, das er robust, ökonomisch und bei korrekter Problemdefinition auch verlässlich ist. Speziell bei Strömungen mit hohen Reynoldszahlen oder großer räumlicher Ausdehnung ist der Einsatz dieser Methode vorteilhaft (Paschedag, 2004).

Bei diesem Ansatz wird die wandnächste Zellschicht so dick gewählt, dass die gesamte laminare Unterschicht und der Übergangsbereich (die Definitionen der einzelnen Schichten innerhalb einer Wandgrenzschicht sind Paschedag (Paschedag, 2004) oder Schlichting et al. (Schlichting et al., 1997) zu entnehmen) darin enthalten sind. Innerhalb dieser Zellschicht werden die Verläufe des Geschwindigkeitsfeldes und der Turbulenzkenngrößen mit semiempirischen Gleichungen beschrieben, den sogenannten Wandfunktionen. Damit die betreffenden Verläufe mit diesen Funktionen beschrieben werden können, darf die wandnächste Zellschicht nicht zu klein und nicht zu groß sein. Als Kriterium für die korrekte Wahl der Dicke dieser wandnächsten Zellschicht kommt in der Regel der y^+-Parameter zur Anwendung, der in dieser Arbeit herangezogene CFD-Solver verwendet den y^*-Parameter. Bei im Gleichgewicht befindlichen turbulenten Wandgrenzschichten sind beide Parameter etwa gleich (FLUENT, 2005) und austauschbar, zur Veranschaulichung werden hier die Wandfunktionen für beide Parameter präsentiert. Die Definitionen dieser Größen sind in Gleichung 14.68 gegeben (Paschedag, 2004; FLUENT, 2005).

$$y^+ = \frac{y_P}{\nu}\sqrt{\frac{|\tau_w|}{\rho}} \qquad y^* = \frac{y_P}{\nu} C_\mu^{0,25}\sqrt{k_P} \tag{14.68}$$

C_μ ist dabei ein Modellparameter, der je nach verwendetem Turbulenzmodell für turbulente Wandgrenzschichten in der Größenordnung 0,09 anzusetzen ist. Wird nun der Wandabstand der ersten Stützstelle y_P so gewählt, dass $30 \leq y^+ \leq 100$ beziehungsweise $30 \leq y^* \leq 60$, so gilt für die mittlere Strömungsgeschwindigkeit das logarithmische Wandgesetz nach Gleichung 14.69 (Cebeci et al., 2005; FLUENT, 2005).

$$v^+ = 2{,}3883 \cdot \ln\left(y^+\right) + C_v \qquad v^* = 2{,}3883 \cdot \ln\left(y^*\right) + 5{,}4493 \tag{14.69}$$

Die Konstante C_v zur Berechnung von v^+ nimmt nach Cebeci (Cebeci et al., 2005) dabei einen Wert zwischen 5,0 und 5,2 an. Mit dem logarithmischen Geschwindigkeitsverlauf errechnet sich dann die lokale Geschwindigkeit auf der Stützstelle der wandnächsten Zellschicht nach Gleichung 14.70 (Cebeci et al., 2005; FLUENT, 2005).

$$v_P = v^+\sqrt{\frac{|\tau_w|}{\rho}} \qquad v_P = v^* \frac{|\tau_w|}{\rho}\frac{1}{C_\mu^{0,25}\sqrt{k_P}} \tag{14.70}$$

Wird bei der Erstellung des Gitters, speziell bei der Festlegung der wandnächsten Zellschicht das y^+- beziehungsweise das y^*-Kriterium beachtet, kann also der Geschwindigkeitsverlauf in der Grenzschicht und der Wert auf der ersten Stützstelle in guter Näherung beschrieben werden. Wird die wandnächste Schicht zu klein gewählt ($y^+ \leq 11{,}225$), so wird im verwendeten CFD-Solver ein linearer Zusammenhang nach Gleichung 14.71 angewandt (FLUENT, 2005).

$$v^* = y^* \tag{14.71}$$

Auch die turbulenten Kenngrößen, im konkreten die spezifische turbulente kinetische Energie k sowie deren Dissipationsrate ε, können mit diesem Ansatz ermittelt werden. Die Transportgleichung für k ist allgemein gültig und wird auch in der wandnächsten Zelle gelöst, wobei als Randbedingung gilt, dass die erste Ableitung von k in Richtung der Flächennormalen verschwinden muss. Für den Produktionsterm von k in der wandnächsten Zellschicht gilt Gleichung 14.72 (FLUENT, 2005).

$$P_k = \frac{\tau_w^2}{0{,}4187 y_P \rho C_\mu^{0,25}\sqrt{k_P}} \tag{14.72}$$

Die Transportgleichung für ε wird in der wandnächsten Zellschicht nicht gelöst, sondern ε wird hier durch Gleichung 14.73 direkt berechnet (FLUENT, 2005).

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{0,75} k_P^{1,5}}{0{,}4187 y_P} \tag{14.73}$$

Auch für den Temperaturverlauf in der wandnächsten Zellschicht wird eine Wandfunktion verwendet, wobei ein linearer Verlauf für Bereiche verwendet wird, die von Wärmeleitung

dominiert werden und ein logarithmischer Verlauf für Bereiche verwendet wird, die durch turbulenten Transport dominiert werden (die genauen Berechnungsgleichungen sind FLUENT (FLUENT, 2005) zu entnehmen). Hierbei ist zu berücksichtigen, dass die Dicke der Wandgrenzschicht für die Geschwindigkeit und den Impulstransport nicht unbedingt gleich sein muss wie jene für den Energietransport. Aus diesem Grund ist die Berechnung des Temperaturverlaufes in Wandnähe etwas komplexer als die Berechnung des Geschwindigkeitsverlaufes (FLUENT, 2005).

Da zur Einhaltung des y^+- beziehungsweise des y^*-Kriteriums während der Gittererstellung die Lösung bereits bekannt sein muss, ist bei der Anwendung von Wandfunktionen meist ein iterativer Prozess erforderlich. Es wird ein erstes Gitter erstellt, dessen wandnächste Zellschicht geeignet erscheint und mit diesem wird die CFD-Simulation durchgeführt. Mit der erhaltenen Lösung werden die Werte für y^+ beziehungsweise für y^* ermittelt und die Einhaltung der Kriterien evaluiert. Bei Bedarf ist danach das Gitter entsprechend zu korrigieren (Paschedag, 2004).

In Abhängigkeit des jeweils verwendeten Turbulenzmodells bietet der in dieser Arbeit verwendete CFD-Solver die Möglichkeit, auch weiterentwickelte Wandfunktionen anzuwenden. Die erste dieser erweiterten Funktionen bietet die Möglichkeit, auch Strömungen mit nicht im Gleichgewicht befindlichen Turbulenzkenngrößen (Turbulenzproduktion ist ungleich Turbulenzdissipation) zu beschreiben (*Non-equilibrium wall functions*). Solche treten bei komplexen Strömungen auf, die (speziell in den Grenzschichten) von großen Druckgradienten geprägt sind und Phänomene wie Grenzschichtablösung und Wiederanlegung aufweisen. Die zweite dieser erweiterten Wandfunktionen verbindet eine größere Unabhängigkeit hinsichtlich der Gittergröße in Wandnähe mit einem Zweischichtmodell für die Wandgrenzschicht (*Enhanced wall functions*). Dieses Zweischichtmodell berücksichtigt einerseits die viskositätsdominierte laminare Unterschicht und andererseits die vollturbulente Wandgrenzschicht. Dadurch ist die Beschreibung der gesamten Grenzschicht komplexer und für ein weiters Anwendungsspektrum geeignet. Details über diese beiden weiterentwickelten Wandfunktionen sind FLUENT, 2005 zu entnehmen.

14.2.7 Turbulenter Transport von Masse und Wärme

Nachdem der turbulente Impulstransport durch die klassischen Turbulenzmodelle hinreichend abgedeckt ist, stellt sich die Frage nach dem Transport von Masse und Wärme durch die turbulenten Fluktuationen. Auch bei diesen beiden Transportphänomenen kann der Weg der Reynolds-Mittelung beschritten werden, wobei dann wie beim Reynolds-Spannungs-Tensor a priori unbekannte Produkte von Schwankungsgrößen verbleiben, für die Schließungsansätze gefunden werden müssen (Paschedag, 2004). Ähnlich wie beim turbulenten Impulstransport als Proportionalitätsfaktor im Gradientengesetz die Wirbelviskosität (turbulente Viskosität) η_t eingeführt wird (siehe Boussinesq-Approximation in Gleichung 14.14), können auch für den turbulenten Massen- sowie den Wärmetransport solche Hilfsgrößen eingeführt werden. Für den Massentransport wird der *turbulente Diffusionskoeffizient* D_t definiert, für den Wärmetransport die *turbulente Wärmeleitfähigkeit* λ_t (Paschedag, 2004). Diese beiden Parameter beschreiben jeweils die Erhöhung des molekularen Massen- und Wärmetransportes durch die turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen.

Eigene Modelle für diese turbulenten Austauschparameter sind kaum geläufig (Paschedag, 2004), stattdessen wird eine gut bekannte Approximation verwendet, die *Reynoldssche Analogie zum turbulenten Impulstransport*. Diese Approximation postuliert eine Proportionalität zwischen turbulentem Diffusionskoeffizienten bzw. turbulenter Wärmeleitfähigkeit und der Wirbelviskosität (siehe Gleichung 14.74) und ist streng nur bei isotroper Turbulenz zulässig (Schlichting et al., 1997; Paschedag, 2004).

$$Sc_t = \frac{\eta_t}{\rho D_t} \qquad Pr_t \frac{\eta_t c_p}{\lambda_t} \tag{14.74}$$

Als Proportionalitätsfaktoren werden an dieser Stelle die *turbulente Schmidtzahl* Sc_t und die *turbulente Prandtlzahl* Pr_t eingeführt. Sind die Wirbelspektren, welche für den turbulenten Impulsaustausch zuständig sind nun ähnlich groß wie jene, die den turbulenten Massen- sowie den turbulenten Energieaustausch realisieren, so sind turbulente Schmidtzahl und turbulente Prandtlzahl beide von der Größenordnung 1 (Paschedag, 2004). Im verwendeten CFD-Solver wird für die turbulente Schmidtzahl ein Wert von 0,70 und für die turbulente Prandtlzahl ein Wert von 0,85 angesetzt (FLUENT, 2005). Aus diesen Beziehungen können nun der turbulente Diffusionskoeffizient und die turbulente Wärmeleitfähigkeit berechnet und damit die Speziesbilanz (Gleichung 6.2) sowie die Energiebilanz (Gleichung 6.7) entsprechend erweitert werden, wodurch deren turbulente Versionen gebildet werden können (Gleichungen 14.75 und 14.76).

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\mathbf{v}\nabla c_i + \nabla\left[\left(D_i + \frac{\eta_t}{\rho Sc_t}\right)\nabla c_i\right] + S_c \tag{14.75}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\rho\mathbf{v}^2 + \rho u\right) &= -\nabla\left(\frac{1}{2}\rho\mathbf{v}^2 + \rho u\right)\mathbf{v} + \left(\lambda + \frac{\eta_t c_p}{Pr_t}\right)\nabla^2 T - \nabla p\mathbf{v} - \nabla(\boldsymbol{\tau}\cdot\mathbf{v}) \\ &+ \rho(\mathbf{v}\cdot\mathbf{g}) + \sum_i h_i \mathbf{J}_i + S_u\end{aligned} \tag{14.76}$$

Durch diese beiden Gleichungen kann dem, bei turbulenter Strömung beobachteten, wesentlich verstärkten Austausch von Masse (Spezies) und Energie (Wärme) Rechnung getragen werden.

14.3 Heterogene Reaktionsschritte im Rahmen der CFD-Modellierung

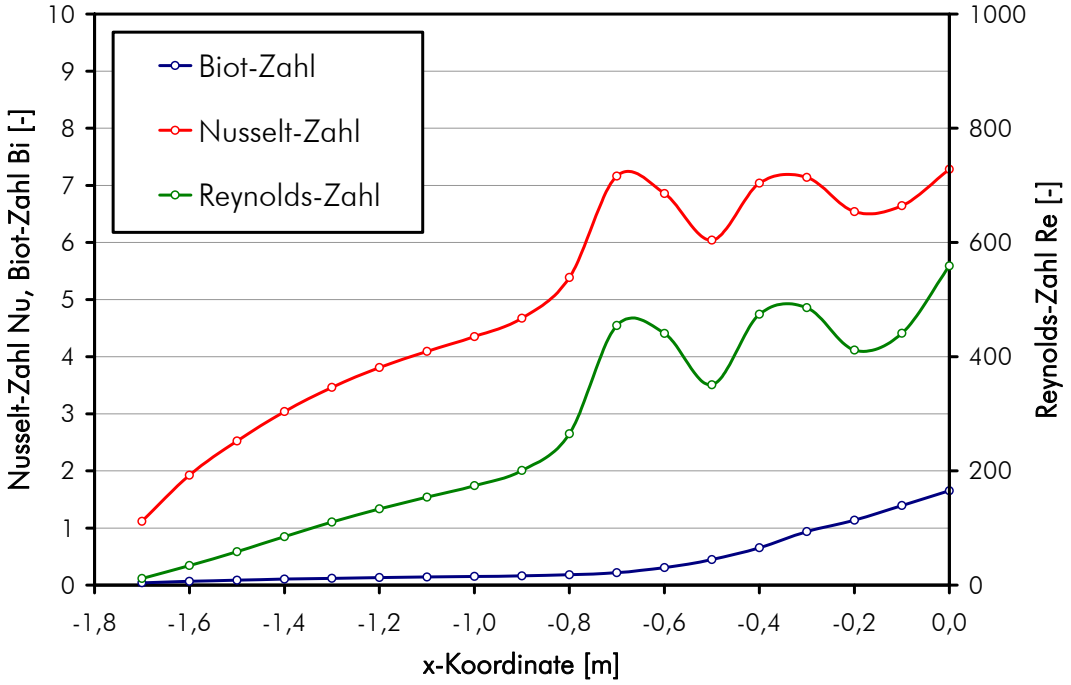


Abbildung 14-1: Mittelwerte der Biot-Zahl, Nusselt-Zahl und Reynolds-Zahl entlang der Ballenlängsachse (eine x-Koordinate von Null entspricht der brennenden Ballenoberfläche)

Tabelle 14-12: Regressierte Parameter des Trocknungsmodells für alle ausgewerteten TGA-Experimente (erster Wert für 10 °C/min, zweiter Wert für 20 °C/min, dritter Wert für 40 °C/min)

Parameter	TGA #1 bis #3 (100 Nml/min N_2 60 g Einwaage)	TGA #4 bis #6 reduzierter Gas-strom	TGA #7 bis #9 reduzierte Ein-waage
Präexponentieller Faktor	1,433	0,900	2,244
Wasser	1,650	2,011	2,366
A_{H2O} [10^{-4}/s]	2,731	2,414	2,797
Aktivierungsenergie Wasser	84.407	83.399	85.510
$E_{A,H2O}$ [J/mol]	83.952	85.167	85.174
	84.771	84.772	84.765
Startgehalt Wasser	8,54	8,73	7,97
w^0_{H2O} [wt%]	8,22	8,80	8,09
	9,61	10,34	9,54

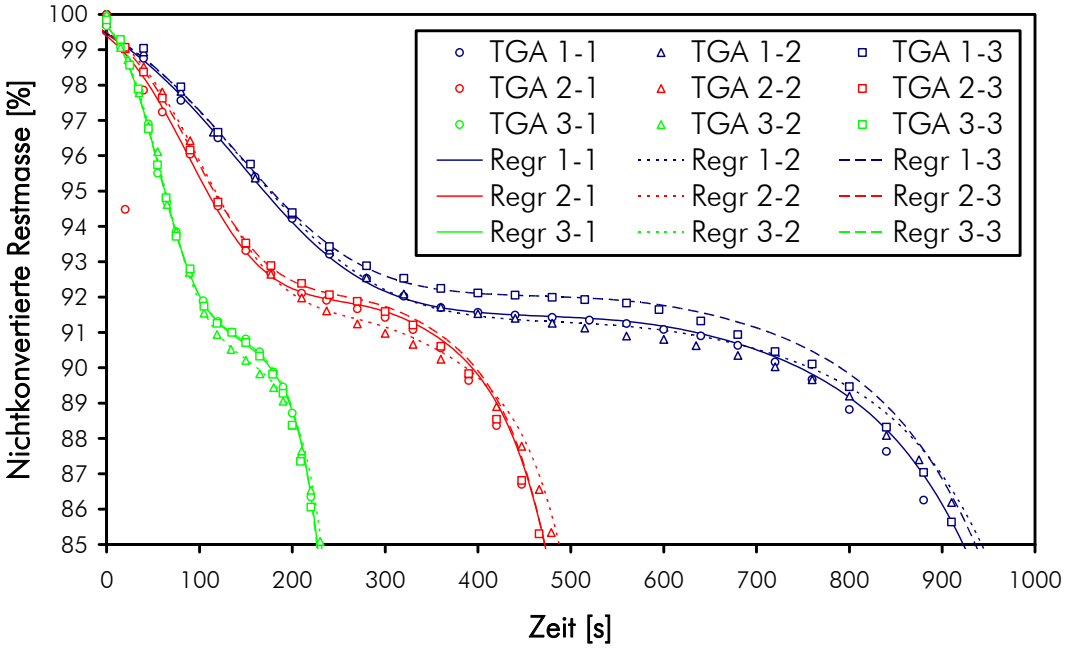


Abbildung 14-2: TGA-Auswertung des Trocknungsschrittes des Maisganzpflanzenbrennstoffs verglichen mit den Regressionen der einzelnen Experimente - nichtkonvertierte Restmasse in Abhängigkeit von der Zeit

Tabelle 14-13: Regressierte Parameter des Volatilisierungsmodells für alle ausgewerteten TGA-Experimente (erster Wert für 10 °C/min, zweiter Wert für 20 °C/min, dritter Wert für 40 °C/min)

Parameter	TGA #1 bis #3 (100 Nml/min N_2 60 g Einwaage)	TGA #4 bis #6 reduzierter Gas-strom	TGA #7 bis #9 reduzierte Ein-waage
Präexponentieller Faktor Zellulose $\log(A_{Cell})$ [1/s]	9,823 10,479 11,257	10,149 11,957 12,001	9,618 11,219 12,349
Aktivierungsenergie Zellulose $E_{A,Cell}$ [J/mol]	112.631 116.450 119.279	116.288 131.229 126.837	110.919 122.779 128.377
Startgehalt Zellulose w^0_{Cell} [wt%, waf]	54,88 54,62 55,98	53,87 52,32 55,26	53,31 53,19 56,26
Nichtvolatiler Anteil Zellulose w^∞_{Cell} [wt%]	3,63 0,07 1,03	0,59 0,00 0,00	0,54 0,00 2,11
Präexponentieller Faktor Hemizellulose $\log(A_{Hcell})$ [1/s]	4,485 4,650 3,752	4,179 6,207 4,406	3,798 5,083 6,087
Aktivierungsenergie Hemizellulose $E_{A,HCell}$ [J/mol]	73.895 72.787 60.585	71.367 88.030 68.040	67.435 76.010 83.322

Parameter	TGA #1 bis #3 (100 Nml/min N_2 60 g Einwaage)	TGA #4 bis #6 reduzierter Gas-strom	TGA #7 bis #9 reduzierte Ein-waage
Startgehalt Hemizellulose	14,50	16,63	15,62
w^0_{Hcell} [wt%, waf]	17,26	18,10	17,35
	15,58	15,76	14,34
Nichtvolatiler Anteil Hemizel-	43,96	41,46	41,19
lulose	48,25	46,43	45,75
w^∞_{Hcell} [wt%]	37,79	40,47	36,70
Präexponentieller Faktor Lig-	-3,071	-3,106	-3,100
nin	-2,730	-2,729	-2,708
$\log(A_{Lign})$ [1/s]	-2,581	-2,583	-2,552
Aktivierungsenergie Lignin	3.367	3.395	3.348
$E_{A,Lign}$ [J/mol]	3.403	3.401	3.437
	3.408	3.418	3.412
Startgehalt Lignin	30,63	29,51	31,07
w^0_{Lign} [wt%, waf]	28,12	29,58	29,47
	28,44	28,98	29,40
Nichtvolatiler Anteil Lignin	36,10	41,37	40,87
w^∞_{Lign} [wt%]	39,30	37,24	38,97
	45,55	45,00	44,12

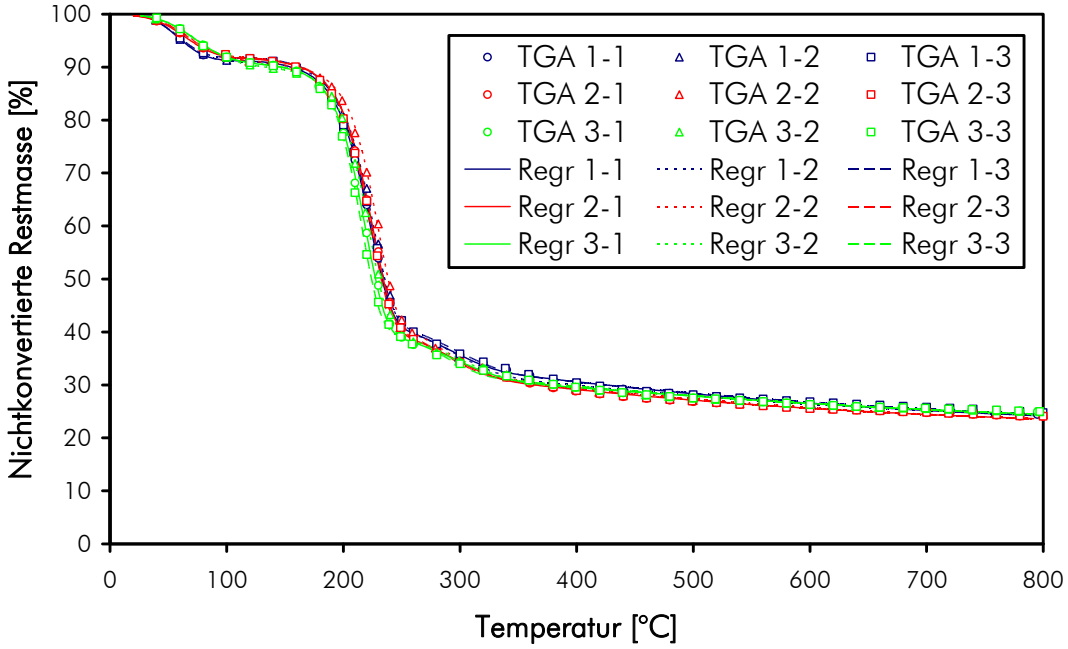


Abbildung 14-3: TGA-Auswertung des Maisganzpflanzenbrennstoffs im gesamten Volatilisationsbereich verglichen mit den Regressionen der einzelnen Experimente - nichtkonvertierte Restmasse in Abhängigkeit von der Temperatur

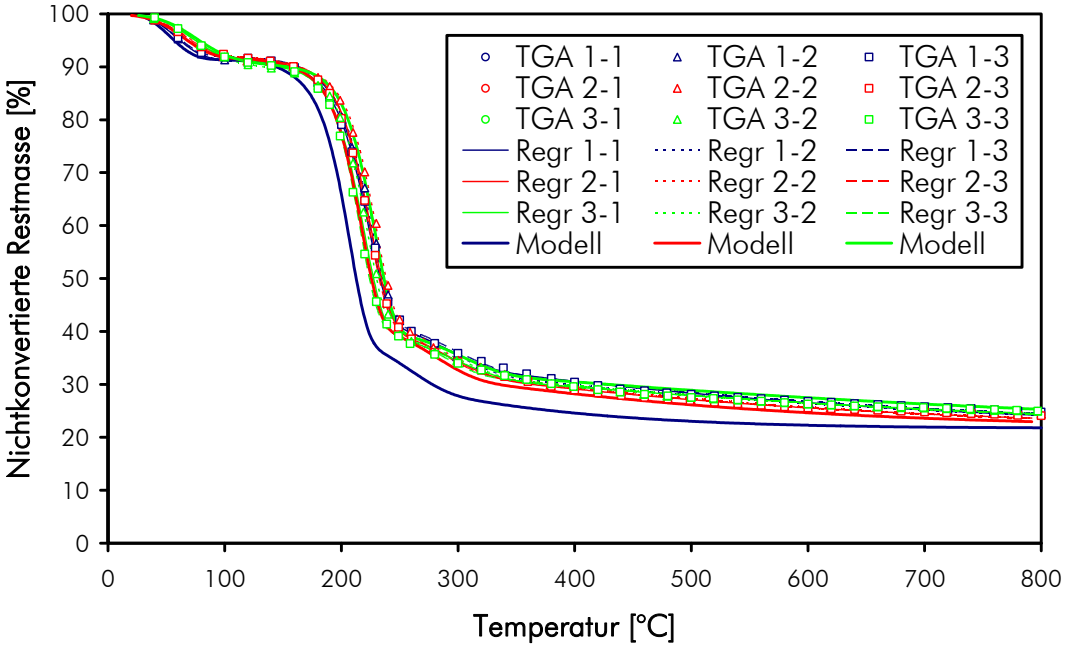


Abbildung 14-4: TGA-Auswertung des Maisganzpflanzenbrennstoffs im gesamten Volatilisationsbereich verglichen mit den Regressionen der einzelnen Experimente sowie den Ergebnissen des verwendeten Volatilisierungsmodells - nichtkonvertierte Restmasse in Abhängigkeit von der Temperatur

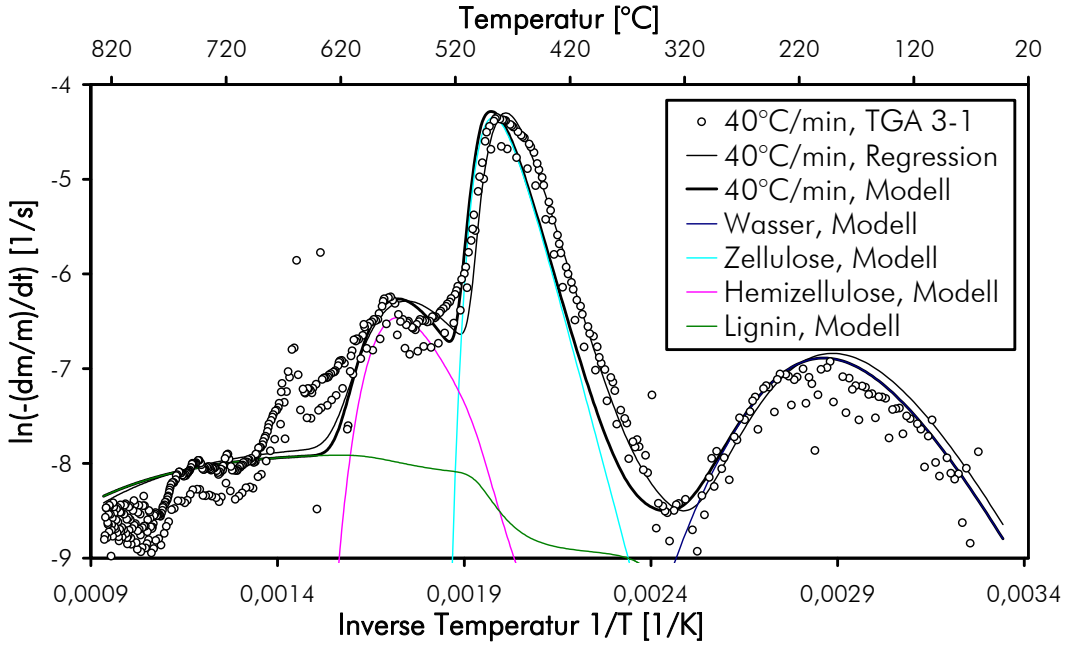


Abbildung 14-5: TGA-DTG-Auswertung des Maisganzpflanzenbrennstoffs im gesamten Volatilisationsbereich für eine Rampe von 40°C/min verglichen mit der Einzelregression, dem Ergebnis des verwendeten Volatilisierungsmodells sowie den Beiträgen der einzelnen Pseudokomponenten – spezifische Volatilisierungsrate in Abhängigkeit von der Temperatur

14.4 Validierung von Turbulenzmodellen am Strömungstestfall Freistrahl

Nachdem ein wesentliches Charakteristikum der in dieser Arbeit untersuchten Verbrennungstechnologie die turbulente Strömung im Verbrennungsapparat ist, muss im Zuge der numerischen Strömungssimulation auf eine möglichst korrekte Beschreibung der Turbulenz Acht gegeben werden. Aus diesem Grund wurden die im verwendeten CFD-Solver verfügbaren Turbulenzmodelle auf ihre Eignung bei der Beschreibung eines einfachen Strömungstestfalles hin untersucht. Da im Verbrennungsapparat Freistrahlen an verschiedensten Stellen eine besondere Bedeutung spielen, wurde als Testfall der ebene, isotherme, runde Freistrahl in ruhender Umgebung untersucht.

Für diese relativ einfache Strömungsform sind in der Literatur zahlreiche und umfangreiche Arbeiten dokumentiert, die gemeinsam mit eigenen experimentellen Arbeiten zur Validierung der eingesetzten Turbulenzmodelle herangezogen werden. Grundsätzliche Betrachtungen des Themas finden sich beispielsweise bei Schlichting et al. (Schlichting et al., 1997), Schneider (Schneider, 2003) und Su (Su, 2005), die auch analytische Beschreibungen sowie Erläuterungen zur Selbstähnlichkeit des einfachen Freistrahles enthalten (siehe auch Westerweel et al., 2002). Eine Arbeit zur Evaluierung von Turbulenzmodellen (speziell k-ε-Modell) für die Vorhersage der Geräuschentwicklung überschallschneller Freistrahlströmungen findet sich bei Nellasamy (Nellasamy, 1999). Eine sehr gute Analyse der Anwendbarkeit von Standardturbulenzmodellen (k-ε und k-ω) für die Beschreibung turbulenter Freistrahlen inklusive eines Vergleichs mit Messergebnissen liefert Wilcox (Wilcox, 1994). Wang et al. (Wang et al., 2010) dokumentiert darüber hinaus die direkte numerische Simulation von Freistrahlen und vergleicht die Ergebnisse mit experimentellen Daten. Ein Vergleich von Messergebnissen und Simulationsergebnissen von Freistrahlen mit newtonschen und nichtnewtonschen Fluiden wird bei Hammad et al. berichtet (Hammad et al., 1998). Freistrahlen im Querstrom werden beispielsweise bei Borean et al. (Borean et al., 1998) untersucht und Freistrahlen an einer Phasengrenzfläche bei Craft et al. (Craft et al., 2000). Gazzah et al. (Gazzah et al., 2002) schließlich hat eine Arbeit publiziert, die sich mit der Simulation von nicht-isothermen Freistrahlen und dem Vergleich mit experimentellen Ergebnissen beschäftigt.

In der vorliegenden Arbeit sind nicht nur einfache Freistrahlen von Interesse, sondern auch schwach verdrallte Strahlen, die mit verschiedensten Drallapparaten realisiert werden sollten. Da für die spezielle Geometrie keine Literaturdaten verfügbar waren, konnte auf die Durchführung eigener experimenteller Arbeiten zum Zwecke des Vergleichs mit den Simulationsergebnissen nicht verzichtet werden. Deshalb wurde ein „Düsenprüfstand“ realisiert, dessen Strömungsfeld mit hochwertiger Lasermesstechnik vermessen werden konnte. Dieser Teststand wurde anschließend auch in der CFD-Simulation abgebildet.

Die Testgeometrie umfasst ein, aus einem Windkasten angeströmtes, Rohr mit einem Meter Länge und einem Durchmesser von 104 mm. Durch diese Düse wird ein Freistrahl gebildet, der sich in den umgebenden Raum ausbreitet; es wird für die Untersuchung jedoch nur

ein Ausschnitt von 2x2 m im Querschnitt und 4 m Länge beobachtet. Ein Meter unterhalb des Strahlaustrittes wird eine feste Wand angenommen (Fußboden des Laboraufbaues). Durch Einbau verschiedener Düsenapparate in das Rohr können unterschiedliche Freistrahlformen analysiert werden. In der vorliegenden Arbeit wurden neben dem einfachen Freistrahl auch ein mild verdrallter Strahl (Drallkörper mit unter 20° angestellten Leitblechen), untersucht. Weiters wurde die Auswirkung einer Prallplatte, die zentrisch im Rohr angebracht ist und 50% des Rohrdurchmessers abdeckt, untersucht. Auch der Einfluss einer Blende, die die äußere Hälfte des Rohrquerschnittes abdeckt, wurde untersucht, ist aber in dieser Arbeit nicht dargestellt. Ein Schema der untersuchten Testgeometrie mit einer Detailansicht des verwendeten Drallapparates ist in Abbildung 14-6 dargestellt. Tabelle 14-14 gibt einen Überblick über die verwendeten Randbedingungen des untersuchten Teststandes.

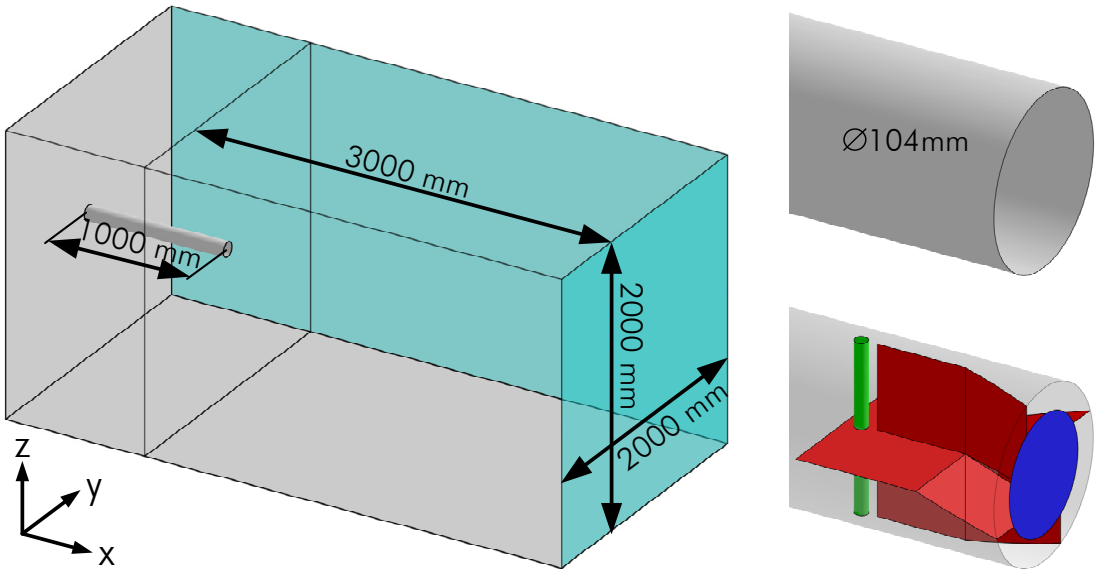


Abbildung 14-6: Untersuchte Testgeometrie für die Validierung von Turbulenzmodellen (links: Überblick Gesamtgeometrie mit Abmessungen; rechts: verwendete Einbauten am Düsenaustritt)

Tabelle 14-14: Randbedingungen für die numerische und experimentelle Untersuchung von Freistrahlen

Parameter	Wert
Temperatur (isotherm)	35 °C
Umgebungsdruck	101.325 Pa
Volumenstrom Zulauf	200,0 Nm^3/h 225,6 Bm^3/h
Massenstrom Zulauf	255,1 kg/h
Rohrdurchmesser	104 mm
Rohrlänge	1.000 mm
Mittlere Strömungsgeschwindigkeit im Rohr	7,38 m/s
Reynoldszahl im Rohr	45.727
Äußere Kräfte	Gravitation vernachlässigt
Beobachtetes Volumen	2x2x4 m
Randbedingungen feste Wände	Haftbedingung
Randbedingungen offene Wände	*Pressure outlet*, Umgebungsdruck

Folgende Turbulenzmodelle bietet der verwendete CFD-Solver standardmäßig an und wurden in die Evaluierung miteinbezogen:

- Spalart-Allmaras
- Standard-k-ε
- RNG-k-ε
- Realizable k-ε
- Standard-k-ω
- SST- k-ω
- Reynolds-Stress-Modell

Die meisten dieser Modelle erlauben die Auswahl von Standard- oder höher entwickelten Wandfunktionen (*Nonequilibrium* oder *Enhanced wall functions*) sowie die Zusatzanwahl bestimmter Modellparameter. Eine genaue Aufschlüsselung darüber, mit welchen Einstellungen die Evaluierung der Turbulenzmodelle durchgeführt wurde, findet sich in Tabelle 14-15. Im Fließtext werden der Einfachheit halber jeweils nur die Ergebnisse der Turbulenzmodelle mit Standardwandfunktionen und ohne die Anwahl von Zusatzoptionen präsentiert. Bringt bei einem Turbulenzmodell eine höhere Wandfunktion oder eine Zusatzoption eine wesentliche Verbesserung der Vorhersagequalität, so wird dies im Fließtext erwähnt, die entsprechenden Abbildungen sind dann aber dem Anhang zu entnehmen. Um darzulegen, wie groß der Fehler in der Simulation bei Vernachlässigung der Turbulenzmodellierung sein kann, wurde parallel auch eine Simulation durchgeführt, welche die laminaren Versionen der Erhaltungsgleichungen verwendet und damit die Turbulenz negiert (mathematisch erzwungene laminare Strömung).

Tabelle 14-15: Für die Modellvalidierung am turbulenten Freistrahl verwendete Turbulenzmodelle, Wandfunktionen und Modelloptionen

Turbulenzmodell	Wandfunktion	Erweiterte Modelleinstellungen
Spalart-Allmaras	Standard	Vorticity based Strain/Vorticity based
Standard-k-ε	Standard	-
	Nonequilibrium	-
	Enhanced	Standard Pressure gradient effects
RNG-k-ε	Standard	Standard Differential viscosity model Swirl dominated flow Differential viscosity & Swirl dominated
	Nonequilibrium	Standard Differential viscosity model Swirl dominated flow Differential viscosity & Swirl dominated
	Enhanced	Standard Differential viscosity model Swirl dominated flow Differential viscosity & Swirl dominated Pressure gradient effects

Turbulenzmodell	Wandfunktion	Erweiterte Modelleinstellungen
Realizable k-ε	Standard	-
	Nonequilibrium	-
	Enhanced	Standard Pressure gradient effects
Standard-k-ω	-	Standard Transitional flow Shear flow Transitional & Shear flow
SST-k-ω	-	Standard Trasitional flow
Reynolds-Stress-Modell	Standard	Standard Wall BC from k-equation Quadratic pressure strain Wall reflection
	Nonequilibrium	Standard Wall BC from k-equation Quadratic pressure strain Wall reflection
	Enhanced	Standard Wall BC from k-equation Wall reflection Pressure gradient effects

Für die Strömungssimulation wurden mehrere Gitter mit unterschiedlicher Diskretisierungsschemata und unterschiedlicher Zellzahl generiert. Die Simulationen des einfachen Freistrahles erlaubten die Verwendung einfacherer und homogenerer Gitter mit niedrigeren Zellzahlen, während die Simulation des Drallstrahles aufgrund der Geometrie des Drallkörpers eine etwas adaptierte Gitteranordnung und auch eine höhere Zelldichte erforderte. Da es der verwendete CFD-Solver erlaubt, an einem importierten Gitter feste Wände ein- oder auszuschalten, wurde der gerade Freistrahl auch auf dem Gitter für den Drallstrahl (nur mit ausgeblendetem Drallkörper) simuliert. Auf diese Weise konnten wertvolle Informationen hinsichtlich Gitterunabhängigkeit und Gitterkonvergenz gewonnen werden.

Es wurden vier verschiedene Gitter mit Zellzahlen von etwa 420.000, 620.000, 730.000 und 960.000 verwendet, wobei die beiden hochauflösenden Gitter jeweils für die Simulation des Drallstrahles sowie das Reynolds-Stress-Modell für die Turbulenzbeschreibung zum Einsatz kamen. Details zur Gitterqualität dieser vier Konfigurationen sind Tabelle 14-16 zu entnehmen. Als Gittergenerator sowie als CAD-Werkzeug zur Geometrieerstellung wurde der CFD-Preprozessor GAMBIT© in den Programmversionen 2.0 sowie 2.1 verwendet.

Für die Simulation des Düsenprüfstandes kamen vorwiegend blockstrukturierte Gitter mit ausschließlich hexaedrischen Zellen zum Einsatz. Die Diskretisierung des Kreisquerschnittes und der Übergang zum quadratischen Querschnitt wurden mit einem unstrukturierten Algorithmus (*pave*) generiert. Mit diesem Diskretisierungsschema wurde zur Reduktion der Gesamtzellzahl auch der Übergang zu Bereichen mit niedrigeren Strömungsgeschwindigkeiten und geringen Gradienten ausgedünnt. Das Resultat ist ein Gitter mit niedriger Auflösung in den Randbereichen (siehe Abbildung 14-7) und hoher Auflösung in den interessierenden

Zentralbereichen des Strahles (siehe Abbildung 14-8). Die erzeugten Oberflächengitter wurden sodann mit Hilfe des *cooper*-Algorithmus in ein Volumengitter erweitert (projiziert), womit der Schritt der Gittergenerierung abgeschlossen ist. Es sei angemerkt, dass an dieser Stelle lediglich das höchstauflösende Gitter gezeigt wird. Abbildung 14-9 zeigt eine Detailansicht des Gitters in der Symmetrieebene rund um den Düsenaustritt und das Kerngebiet des Freistrahles. In diesem Bereich ist die Zellgröße für die vorliegende Anwendung relativ klein.

Tabelle 14-16: Für die Modellvalidierung am turbulenten Freistrahl verwendete Gitter sowie deren Qualität für die numerische Strömungssimulation

Gitterbezeichnung	Zellzahl	Gitterqualität (Verteilung *scewness factor*)
Freistrahl_1	419.806	0,0 bis 0,2: 89,0 %
		0,2 bis 0,4: 10,0 %
		0,4 bis 0,6: 1,0 %
		> 0,6: keine Zellen
Freistrahl_2	618.504	0,0 bis 0,2: 69,6 %
		0,2 bis 0,4: 21,9 %
		0,4 bis 0,6: 7,2 %
		0,6 bis 0,9: 1,3 %
		> 0,9: keine Zellen
Freistrahl_3	731.572	0,0 bis 0,2: 57,3 %
		0,2 bis 0,4: 29,6 %
		0,4 bis 0,6: 11,2 %
		0,6 bis 0,9: 1,9 %
		> 0,9: 8 Zellen
Freistrahl_4	961.514	0,0 bis 0,2: 46,8 %
		0,2 bis 0,4: 35,8 %
		0,4 bis 0,6: 13,8 %
		0,6 bis 0,9: 3,6 %
		> 0,9: keine Zellen

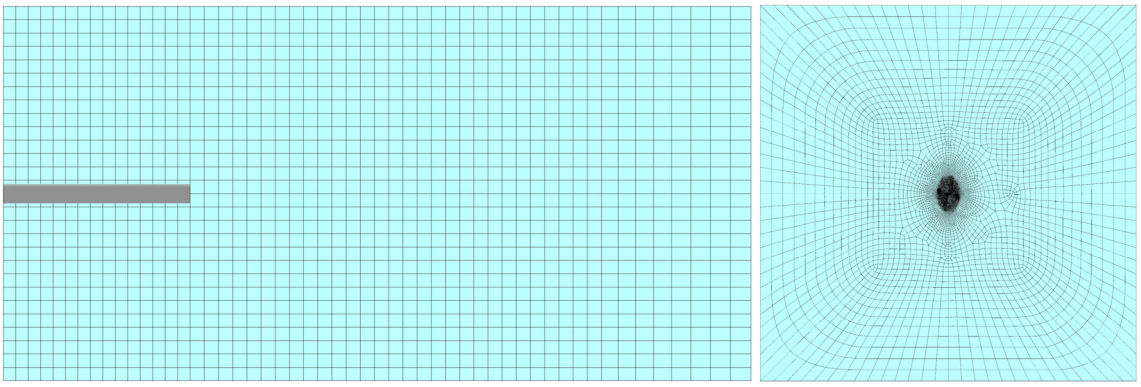


Abbildung 14-7: Oberflächengitter des Düsenprüfstandes (links: Seitenwand; rechts: Stirnfläche)

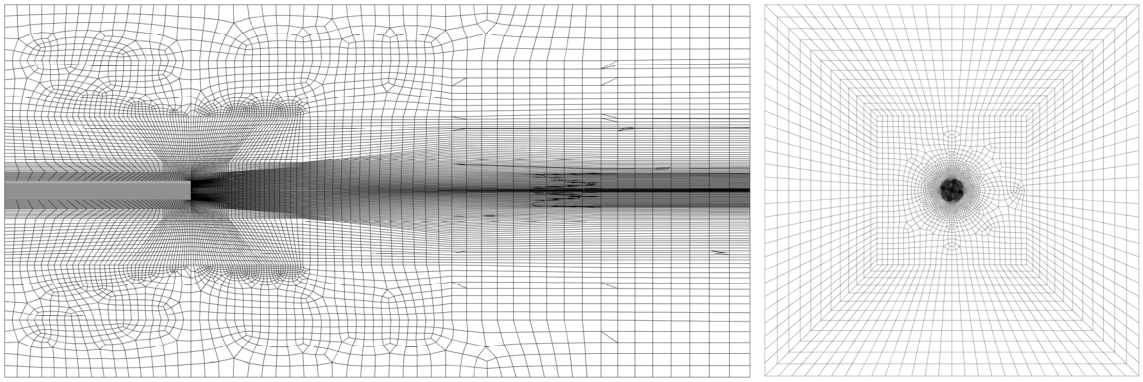


Abbildung 14-8: Gitter im Inneren der Fluiddomäne des Düsenprüfstandes (links: Gitter auf der Symmetrieebene des Strahles; rechts: Gitter auf der Austrittsebene des Strahles)

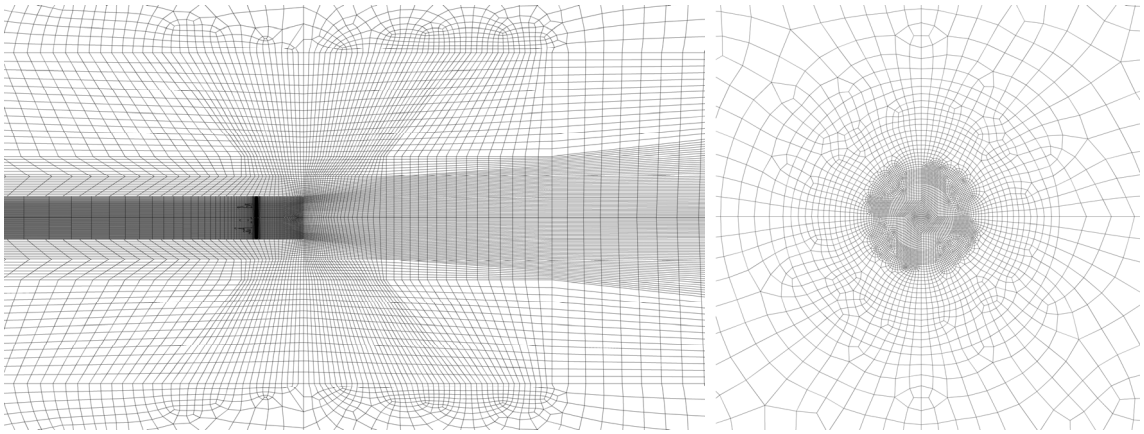


Abbildung 14-9: Detailansicht des Gitters im Inneren der Fluiddomäne des Düsenprüfstandes (links: Gitter auf der Symmetrieebene des Strahles; rechts: Gitter auf der Austrittsebene des Strahles)

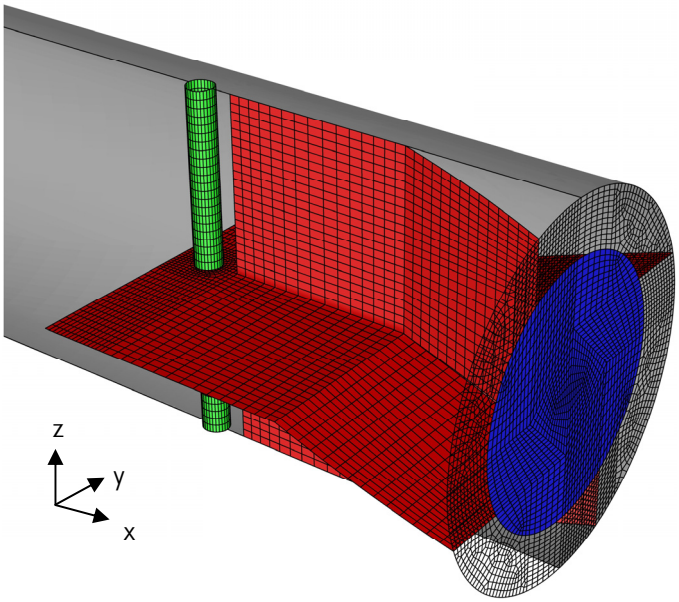


Abbildung 14-10: Oberflächengitter auf dem Drallapparat sowie im freibleibenden Ringspalt im Bereich des Strahlaustrittes des Düsenprüfstandes

Auch der Drallkörper selbst wurde relativ hoch aufgelöst um eine korrekte Beschreibung der turbulenten Wandgrenzschicht und der Strömungsumlenkung zu erhalten. Das Gitter auf der Oberfläche des verwendeten Drallkörpers mit einem Flügelanstellwinkel von 20° ist Abbildung 14-10 zu entnehmen.

Da der gebildete Freistrahl sehr wesentlich von der wandgebundenen Strömung im Rohr und Drallapparat beeinflusst wird, ist auf eine korrekte Beschreibung der Wandgrenzschicht zu achten (siehe Kapitel 14.2.6). Hierzu ist der dimensionslose Wandabstand y^+ möglichst im Bereich zwischen 30 und 100 zu halten. Durch iterative Gitteranpassung konnte dieses y^+-Kriterium für alle Oberflächenzellen in allen verwendeten Gitterkonfigurationen des Düsenprüfstandes eingehalten werden. Ein Beispiel für die Verteilung dieses Parameters auf den festen Oberflächen des hochauflösenden Gitters wird in Abbildung 14-11 gezeigt.

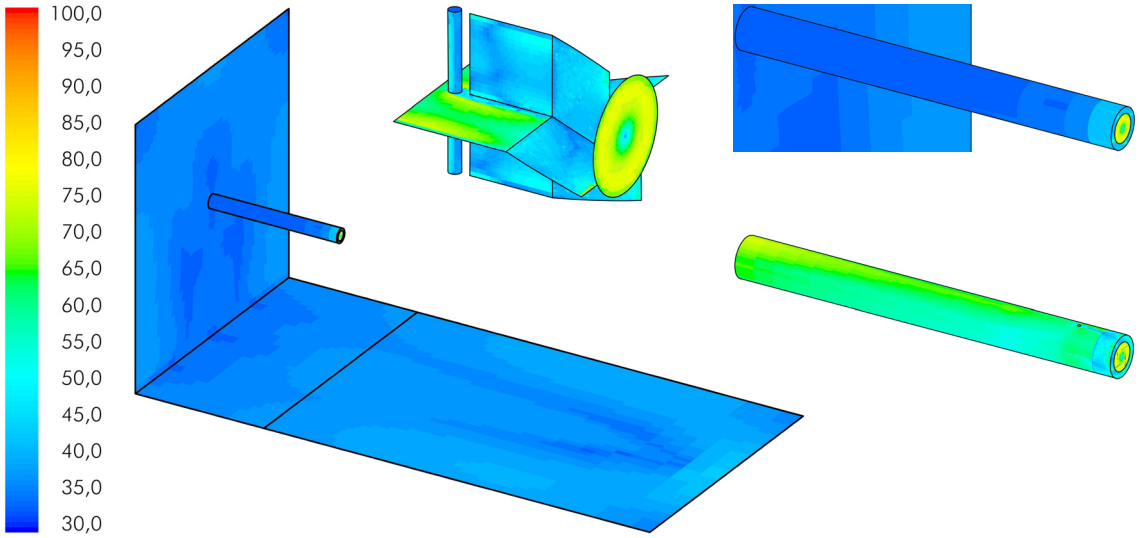


Abbildung 14-11: Turbulenzparameter y+ (30 bis 100) an den festen Wänden des Düsenprüfstandes (links: Übersicht; mitte oben: Drallkörper; rechts oben: Detail Rohrwand aussen; rechts unten: Detail Rohrwand innen)

Die CFD-Simulationen wurden dreidimensional, stationär und isotherm durchgeführt, das Gas wurde als inkompressibel betrachtet. Alle Stoffdaten des strömenden Mediums (Luft) wurden konstant bei einer Temperatur von 35 °C angesetzt. Als CFD-Solver wurde FLUENT© in den Programmversionen 6.1.18, 6.1.22 sowie 6.3.26 (*segregated solver*) verwendet. Die Diskretisierung der Bilanzgleichungen erfolgte durchwegs mit Methoden höherer Ordnung (*Second Order* für Druck, *Second Order Upwind* oder *Quick* für Impuls sowie Turbulenzgrößen). Als Konvergenzkriterien wurden die in Kapitel 6.10 vorgestellten Methoden herangezogen. Die Gitterunabhängigkeit der jeweils erhaltenen Lösung sowie die Gitterkonvergenz wurden durch wiederholte Simulation auf unterschiedlich strukturierten Gittern sowie durch Simulation auf feineren Gittern mit etwa doppelter Zellzahl und Vergleich der so erhaltenen Ergebnisse sichergestellt. Die wesentlichen Ergebnisse, die in dieser Arbeit dargestellt sind, weisen nach Richardson (siehe Kapitel 6.2) einen Diskretisierungsfehler von unter 2,5 % auf.

Zur experimentellen Untersuchung des geraden und des drallbehafteten Freistrahles wurde wie erwähnt am Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften der TU Wien ein einfacher Düsenprüfstand im Labor aufgebaut. Dieser bestand aus einem Windkasten (etwa 0,6x0,6x0,6 m), an dem das Düsenrohr mit 1 m Länge und

104 mm lichtem Rohrdurchmesser mittig an der Vorderfront angebracht war (siehe Abbildung 14-12). Der Bereich des Düsenaustrittes war so gestaltet, dass verschiedene Drallkörper, Prallplatten oder Blenden montiert und so unterschiedlichste Freistrahlformen generiert und untersucht werden konnten (siehe Abbildung 14-13). An der Rückwand des Windkastens wurde über eine Schlauchleitung und ein Gebläse der Volumenstrom beaufschlagt. Die Messung des Volumenstroms wurde mittels Normblende im Zulauf und U-Rohr-Manometer sowie stichprobenartig durch ein Hitzdrahtanemometer im Düsenrohr durchgeführt. Der Freistrahl war in den im Wesentlichen leeren Laborraum gerichtet und die freie Hauptströmung war unbehindert. Die Strahlachse wurde mittels Laserwasserwaage markiert (ebenfalls Abbildung 14-12). Ausgehend von dieser Achse konnte der Abstand beliebiger Punkte in allen Raumrichtungen gemessen werden (Maßskala am Laborfußboden). Es wurde jeweils der lokale Geschwindigkeitsvektor auf verschiedenen Punkten entlang der Strahlachse vermessen (positive x-Achse, Düsenaustritt bei x=0) sowie auf einigen ausgewählten Profilen quer zur Hauptströmungsrichtung in verschiedenen Abständen zum Düsenaustritt. Die Profile wurden dabei ausgehend von der Strahlachse in zwei Raumrichtungen vermessen, die positive y- und die positive z-Achse, wobei zusätzlich jeweils an 3 bis 4 Punkten entlang der negativen y- und z-Achsen gemessen wurde, um zu überprüfen, dass das jeweilige Profilmaximum der Strömungsgeschwindigkeit tatsächlich auf der markierten Strahlachse zu liegen kam (kein Aufsteigen des Freistrahls).

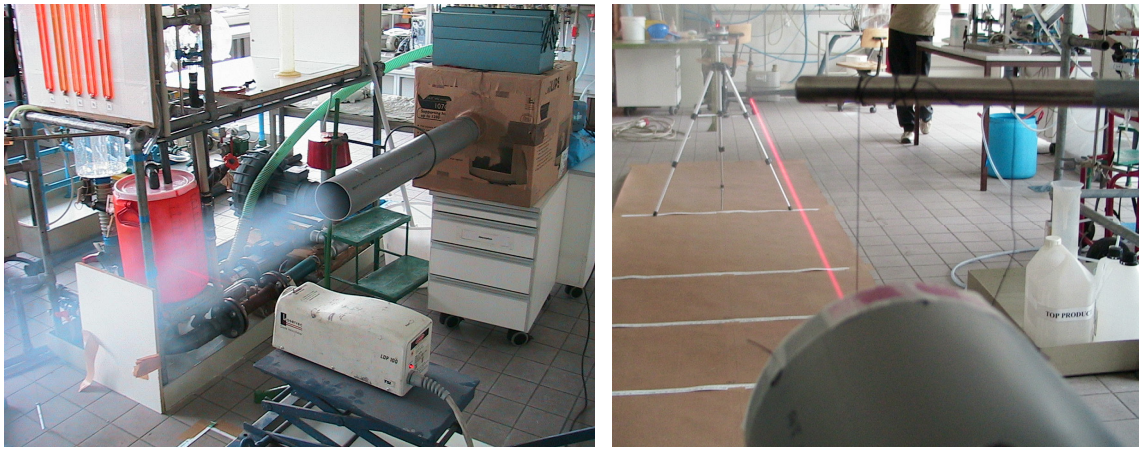


Abbildung 14-12: Abbildung des Laboraufbaues zur Untersuchung turbulenter Freistrahlen (links: Übersicht Düsenprüfstand; rechts: Detailansicht Markierung der Strahlachse)

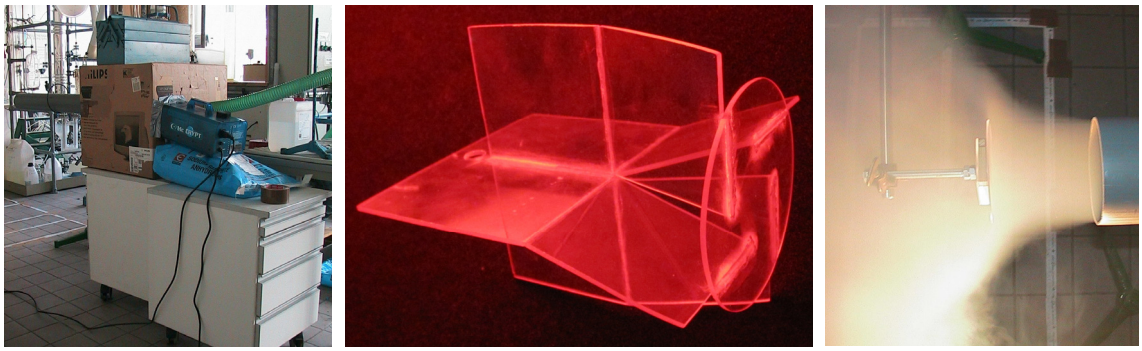


Abbildung 14-13: Detailansichten des Laboraufbaues zur Untersuchung turbulenter Freistrahlen (links: Windkastenrückwand mit Nebeldosierung; mitte: Drallkörper; rechts: Freistrahlvisualisierung bei weit abgesetzter Prallscheibe)

Zur Erfassung der Geschwindigkeitskomponenten in zwei Raumrichtungen wurde eine Laser-Doppler-Anemometrie (LDA) eingesetzt. Zur Anwendung gelangte hierbei das System LASERVEC LDP100/IFA600 des Herstellers TSI GmbH (siehe Abbildung 14-14). Die Hardware- und Software-Einstellungen, die zur Generierung aussagekräftiger Ergebnisse erarbeitet wurden, sind in Tabelle 14-17 zusammengefasst.

Tabelle 14-17: Geräte- und Software-Einstellungen für die Laser-Doppler-Anemometrie (LASERVAC LDP100/IFA600) bei der Vermessung turbulenter Freistrahlen

Parameter	Wert und Einheit
Processor Control:	
Sampling Frequency	40 MHz
Lowpass Filter	10 MHz
Downmix Frequency	40 MHz
SNR	Very Low
Amplitude Burst Gate	25 mV
Experiment:	
Timeout	120 s
Data points per file	10.000
Laser Optics:	
Fringe spacing	3,59988 μm
Beam spacing	50,0 mm
Focal length	262,0 mm
Laser wave length	687,0 nm

Dieses Gerät misst, wenn es aufrecht stehend betrieben wird, die horizontale Komponente der Gasgeschwindigkeit in einem Messvolumen (Größenordnung 1 mm^3), welches durch zwei gekreuzte Laserstrahlen erkennbar gemacht wird (siehe Abbildung 14-14). Der dynamische Messbereich des Gerätes liegt dabei bei etwa 10^8; es können also Geschwindigkeiten in einem sehr breiten Bereich erfasst werden (laut Herstellerangabe von 1 mm/s bis über 1.000 m/s). Bezüglich des Messfehlers macht der Hersteller keine Aussagen, der Wert für die Reproduzierbarkeit lag bei der Mehrzahl der durchgeführten eigenen Messungen aber bei etwa 98,5 %. Dieser Wert korrespondiert sehr gut mit dem zu erwartenden Messfehler von 2 % für LDA-Messungen, den verschiedene Experimentatoren veröffentlichen, beispielsweise Henne (Henne, 2001) oder das Deutsche Zentrum für Luft- und Raumfahrt (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, 2012). In den nachfolgenden Auswertungen wird deshalb für den Großteil der Geschwindigkeitsmessungen mittels LDA ein Messfehler von 2 % angenommen. Lediglich tangentiale und Richtungskomponenten mit Strömungsgeschwindigkeiten unter 2,0 m/s wiesen eine niedrigere Reproduzierbarkeit auf; als Messfehler wird an dieser Stelle 7,5 % angesetzt. Die Aussagekraft der Analyse wird hierdurch nicht wesentlich beeinträchtigt.

Das Messgerät wurde auf einer einfachen Traversiereinrichtung montiert, die eine räumliche Positionierung des Messvolumens mit einer Genauigkeit von etwa ±2,5 mm sowie eine Rotation um die Gerätelängsachse (zur Messung der vertikalen Geschwindigkeitskomponente) erlaubte. Diese Geräteanordnung ermöglicht sowohl die Vermessung der Axial-, als auch der Tangential- und Radialkomponenten der Gasgeschwindigkeiten im Freistrahl. Die Messung tangentialer Geschwindigkeitskomponenten erfolgt hierbei durch Messung der Strömungsgeschwindigkeit in Richtung der z-Achse entlang verschiedener Punkte auf der y-Achse

(vergleiche Abbildung 14-6). Die Messung radialer Geschwindigkeitskomponenten erfolgt hingegen durch Messung der Strömungsgeschwindigkeit in z-Richtung entlang verschiedener Punkte auf der z-Achse. Beide Komponenten werden mit um 90° verdrehtem Messgerät aufgenommen. In horizontalem (unverdrehtem) Zustand wird lediglich die Axialkomponente der Strömung gemessen.

Um die Strömung für das Messgerät sichtbar zu machen, wurde auf Glycerin basierender Nebel aus handelsüblichen Nebelgeneratoren in die Hauptströmung (Windkasten im Düsenzulauf) dosiert (siehe Abbildung 14-13). Das Messgerät nahm an jedem räumlichen Punkt bis zu 10.000 Einzelmessungen der Geschwindigkeit vor (wobei ein Timeout von 120 Sekunden eingestellt war, welches bei niedrigen gemessenen Geschwindigkeiten schlagend wurde) und gab den Mittelwert und die Schwankungsbreite (1-fache Standardabweichung) aus. Hierdurch wurde statistische Relevanz sowie ein Maß für die Turbulenzintensität erzeugt.

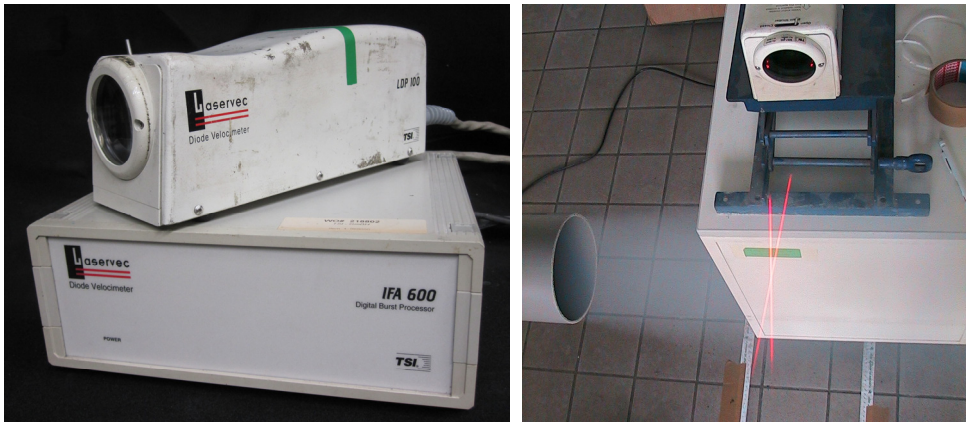


Abbildung 14-14: Zur Vermessung turbulenter Freistrahlen verwendetes LDA-Messsystem (links) und Darstellung der Durchführung einer Messung am Schnittpunkt zweier gekreuzter Laserstrahlen (rechts)

Die Erfahrungen, die mit diesem ersten Teststand gesammelt werden konnten, mündeten in der Errichtung eines zweiten, verbesserten Teststandes, der auch die Untersuchung von zwei parallelen Freistrahlen erlaubte (siehe Abbildung 14-15). Der Rohrdurchmesser für diesen Apparat wurde aufgrund des verfügbaren Raumangebots im Labor kleiner (44 mm) ausgeführt. Auch die Traversierung für die LDA, die Qualität der räumlichen Positionierbarkeit des LDA-Messvolumens und die LDA-Messung selbst wurden laufend verbessert.

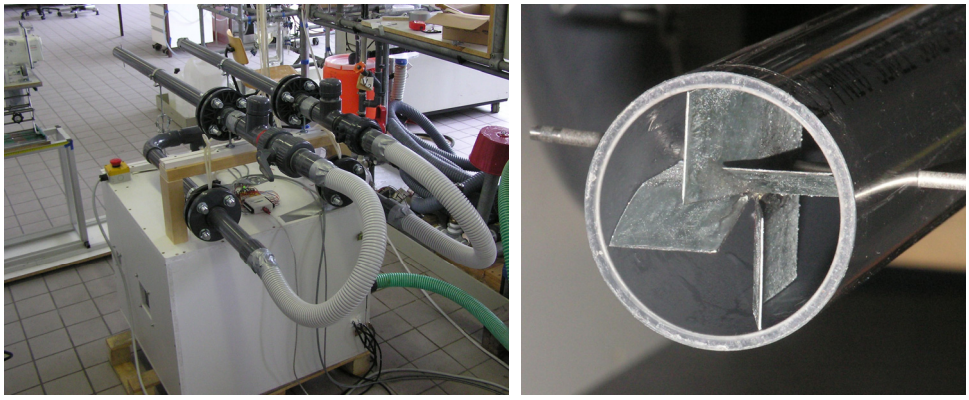


Abbildung 14-15: Verbesserter Teststand zur Untersuchung turbulenter Freistrahlen (links: Übersicht Laboraufbau; rechts: Detailansicht Drallkörper ohne Prallplatte)

14.4.1 Gerader Freistrahl

Der gerade Freistrahl ist wie bereits erwähnt in der Literatur sehr gut diskutiert und es ist eine Reihe guter Messergebnisse und analytischer Resultate verfügbar. Aufgrund seiner selbstähnlichen Struktur ist der Freistrahl nach wie vor wissenschaftlich interessant und ist stets ein guter Testfall für neuentwickelte Turbulenzmodelle. Die Literatur bietet eine Vielzahl möglicher Auswertungen des Strömungsfeldes abseits von Reichweite und Strahlaufweitung. Da durch diese umfangreichere Analyse eine wesentlich fundiertere Aussage über die Eignung von Turbulenzmodellen getroffen werden kann, ist in diesem Kapitel eine Vielzahl an Auswertungen und Vergleichen realisiert und der vorliegende Abschnitt entsprechend umfangreicher. Dadurch soll aber auch ein tiefergehender Einblick in die ausgesprochen interessante Struktur des vermeintlich einfachen Freistrahls ermöglicht werden.

Hinsichtlich des rechentechnischen Aufwandes zeigt die Anwendung der untersuchten Turbulenzmodelle zum Teil stark unterschiedliche Charakteristik. Sowohl die Rechenzeit für einen Iterationsschritt als auch die Anzahl erforderlicher Iterationen bis zur Erreichung einer konvergenten Lösung nach der vorgegebenen Definition sind hier zu berücksichtigen. Je nach Modell und verwendetem Rechengitter waren etwa 2.000 bis 5.000 Iterationen bis zur Konvergenz erforderlich. Hierbei gilt die Daumenregel, dass aufwändigere Modelle und feiner aufgelöste Gitter üblicherweise mehr Iterationen erfordern. Ausnahmen bestätigen auch hier die Regel; es konnte gezeigt werden, dass qualitativ hochwertige Gitter mit höherem Anteil an reinen hexaedrischen Zellen effizienter rechnen und trotz feinerer Auflösung oft weniger Iterationen benötigen als Gitter mit niedrigeren Qualitätsparametern. Die erforderliche Rechenzeit pro Iterationsschritt für eine exemplarische Gitterauflösung auf einem Einzelprozessor der Referenzmaschine sc.zserv.tuwien.ac.at ist für die wesentlichsten untersuchten Turbulenzmodelle in Tabelle 14-18 dargestellt. Sehr ähnliche Werte gelten erwartungsgemäß auch für die Simulation des Drallstrahles mit Prallplatte. In Summe liefern die Turbulenzmodelle damit einen Anteil zum rechentechnischen Aufwand der Gesamtsimulation, der für die Anwendung in der ingenieurstechnischen Praxis als zusätzliches Entscheidungskriterium angesehen werden muss.

Tabelle 14-18: Rechenzeiten pro Iterationsschritt für die wichtigsten untersuchten Turbulenzmodelle

Turbulenzmodell	Rechenzeit pro Iteration in Sekunden
Laminar	13
Spalart-Allmaras	18,3
Standard-k-ε	18
RNG-k-ε	19,3
Realizable k-ε	20,3
Standard-k-ω	17
SST-k-ω	20,5
Reynolds-Stress-Modell	32

Um einen ersten qualitativen Einblick in die vorhandenen Strömungsverhältnisse innerhalb des untersuchten Fluidbereiches zu erhalten, sind dreidimensionale Contour-Darstellungen aus den CFD-Resultaten hervorragend geeignet. Abbildung 14-16 und Abbildung 14-17 zeigen aus diesem Grund eine dreidimensionale Strahlgrenze des turbulenten Freistrahls, an

dieser Stelle definiert als die Fläche aus der Summe aller Punkte, bei denen die lokale Axialgeschwindigkeit auf 1 % der durchschnittlichen Axialgeschwindigkeit am Düsenaustritt abgesunken ist (hier entspricht dies einer Axialgeschwindigkeit von 0,07378 m/s). Als zusätzliche Information ist diese Isofläche nach dem Betrag des lokalen Gesamtgeschwindigkeitsvektors gefärbt. Abbildung 14-16 gibt die Ergebnisse der Simulationen mit den Turbulenzmodellen Spalart-Allmaras, Standard-k-ε, RNG-k-ε und Realizale-k-ε wieder, Abbildung 14-17 zeigt die Ergebnisse der Modelle Standard-k-ω, SST-k-ω und des Reynolds-Stress-Modells.

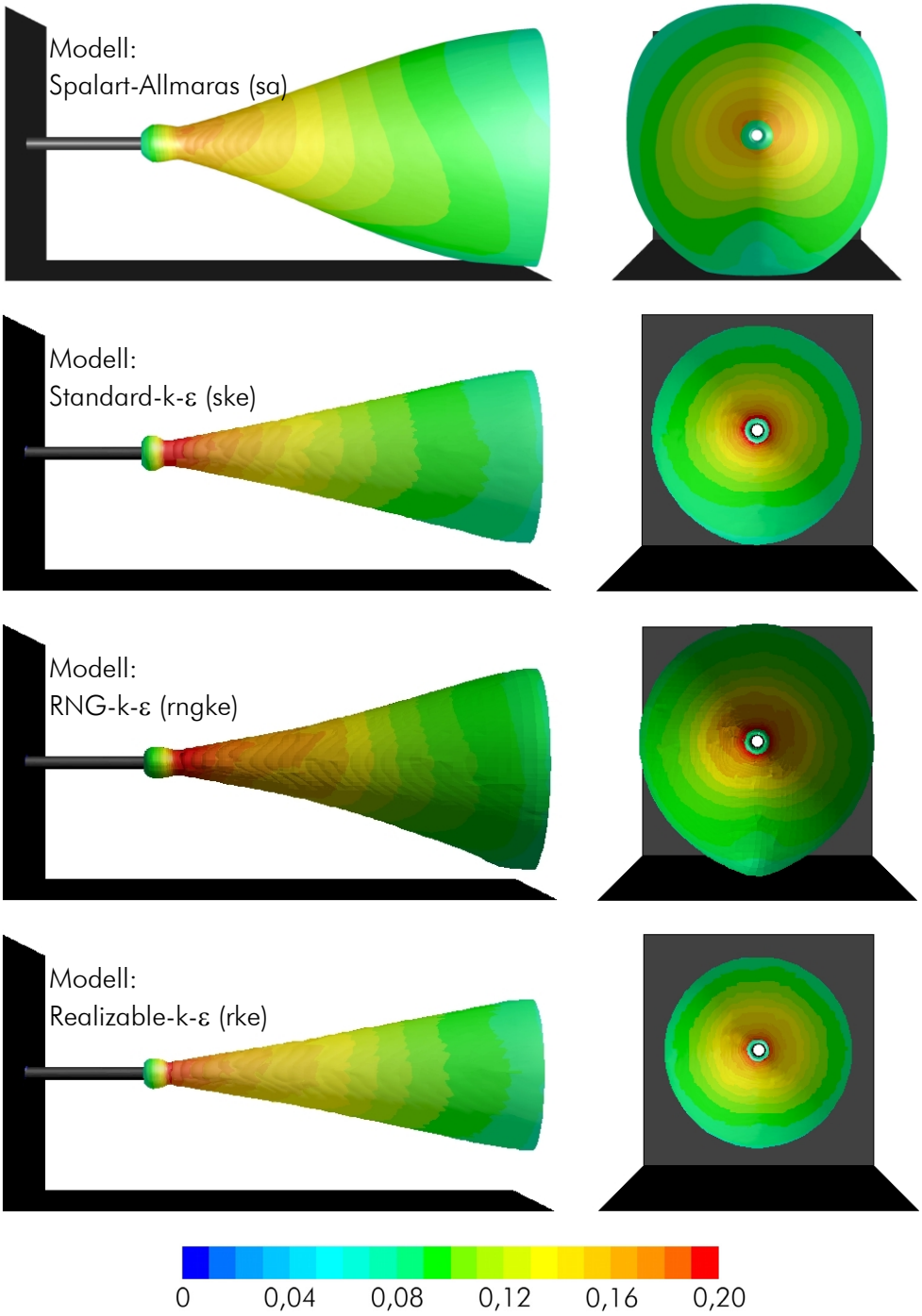


Abbildung 14-16: Betrag des Gasgeschwindigkeitsvektors (0 – 0,20 m/s) aufgetragen auf einer Fläche konstanter Axialgeschwindigkeit von 1 % der durchschnittlichen Axialgeschwindigkeit am Düsenaustritt (Ergebnisse der Turbulenzmodelle sa, ske, rngke und rke)

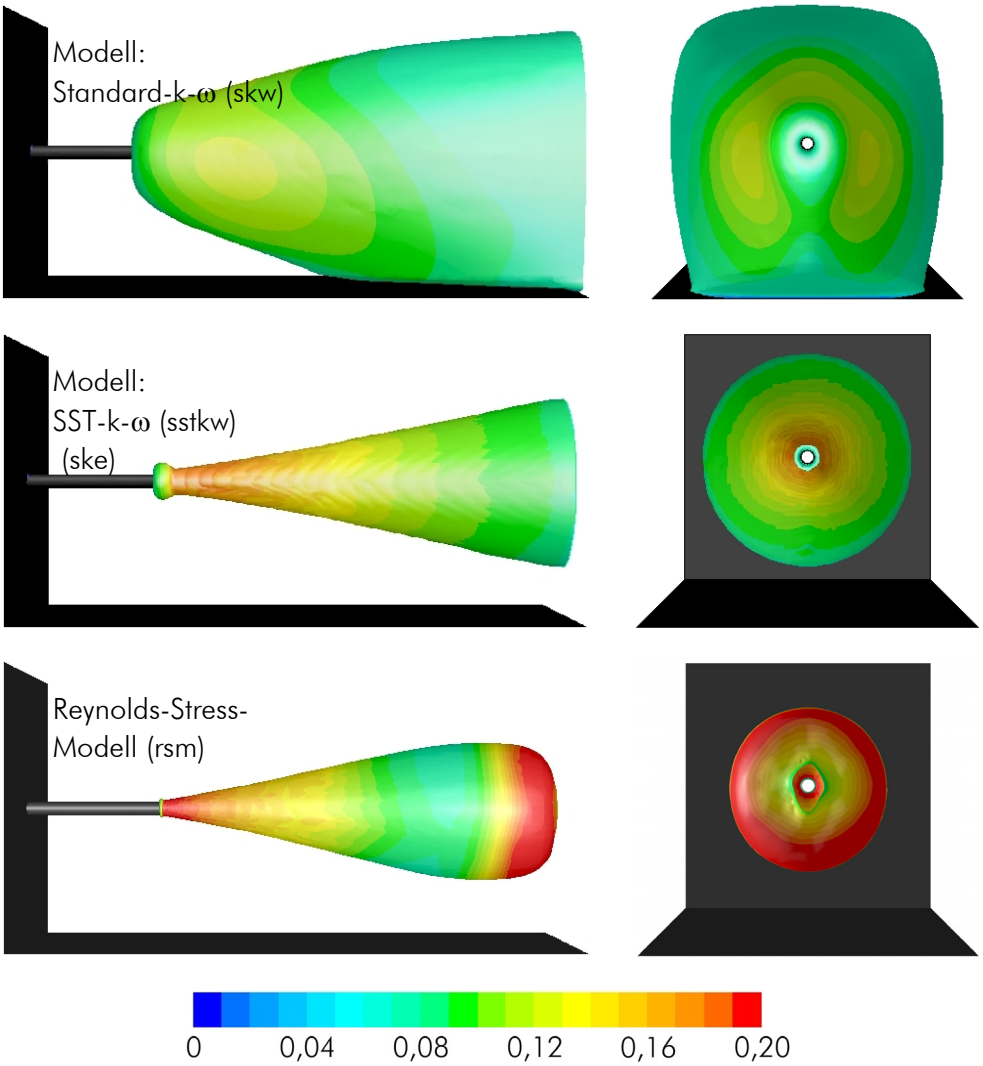


Abbildung 14-17: Betrag des Gasgeschwindigkeitsvektors (0 – 0,20 m/s) aufgetragen auf einer Fläche konstanter Axialgeschwindigkeit von 1 % der durchschnittlichen Axialgeschwindigkeit am Düsenaustritt (Ergebnisse der Turbulenzmodelle skw, sstkw und rsm)

Die Grafiken zeigen sehr eindrucksvoll die Aufweitung des Freistrahles mit zunehmender Lauflänge, die aufgrund der Kontinuität und der Impulserhaltung auch mit einer Reduktion der lokalen Gesamtgeschwindigkeit einhergeht. Im Wesentlichen ist ein Strahl mit dieser Aufweitung als Kegel aufzufassen, dessen Ursprung in der Nähe des Düsenaustritts anzusetzen ist (nicht direkt am Düsenaustritt, siehe hierzu Schlichting et al., 1997 und Wilcox, 1994) und der sich in das ruhende umgebende Medium ausbreitet. Die Aufwölbung der Isofläche, die sich bei allen Turbulenzmodellen mehr oder weniger stark direkt an der Düsenöffnung ausbildet, rührt daher, dass der Freistrahl eine bestimmte Menge Gas aus der ruhenden Umgebung ansaugt (siehe ebenfalls Schlichting et al., 1997 und Wilcox, 1994) und deshalb in der Umgebung der Strahlgrenze (speziell direkt im Anschluss des Düsenaustritts) höhere Strömungsgeschwindigkeiten in Richtung der x-Koordinate zum Strahl hin zu verzeichnen sind. Einige der Turbulenzmodelle sagen des Weiteren eine Abflachung des Ausbreitungswinkels im Freistrahl ab einer gewissen Distanz zur Düsenaustrittsebene voraus, was allerdings weder in der Literatur erwähnt wird, noch mittels der selbst durchgeführten Messungen bestätigt werden kann. An späterer Stelle wird ausgeführt, dass dieses nichtphysikalische Verhalten vermutlich ein rechentechnisches Artefakt darstellt, welches durch die aufgeprägte

Austrittsrandbedingung eines über die Fläche konstanten Umgebungsdruckes verursacht wird. Die wesentlichste Aussage der beiden Abbildungen ist allerdings jene, dass die Strahlform und damit das gesamte Strömungsfeld von den untersuchten Turbulenzmodellen zum Teil grundverschieden vorausgesagt werden. Damit zeigt sich, dass nicht alle Turbulenzmodelle zur Beschreibung des turbulenten Freistrahles gleich gut geeignet sind und eine quantifizierende Modellvalidierung unbedingt erforderlich ist, um abschließend eine fundierte Auswahl eines adäquaten Modells für die Simulation des gesamten Verbrennungsapparates durchführen zu können. Die k-ε-Modelle, das SST-k-ω-Modell sowie das Reynolds-Stress-Modell ergeben qualitativ vergleichbare Resultate, während Spalart-Allmaras und das Standard-k-ω-Modell eine signifikant höhere Strahlaufweitung vorhersagen. Das Reynolds-Stress-Modell zeigt darüber hinaus als einziges Modell die vom Freistrahl bekannte und physikalisch plausible Keulenform der Strahlgrenze. Keines der anderen untersuchten Modelle zeigt eine derartig geschlossene Strahlgrenze noch innerhalb der Simulationsdomäne. Ein quantitativer Vergleich dieser Keulenform mit Literaturdaten ist mangels veröffentlichter Daten in diesem Bereich nicht möglich. Die Ergebnisse von Wilcox (Wilcox, 1994) lassen aber darauf schließen, dass die zu erwartende Keulenform beim realen Freistrahl wesentlich größer sein müsste, als vom Reynolds-Stress-Modell vorhergesagt. Der sich wieder verjüngende Teil der Strahlgrenze und der geschlossene Teil liegen also real noch weiter stromabwärts als vom Reynolds-Stress-Modell ermittelt. Es zeigt sich, dass die weit stromabwärts liegenden Bereiche des Freistrahles räumlich relativ nahe an die Ränder der Simulationsdomäne heranreichen. Dies könnte zu der Annahme führen, dass die Randbedingung eines konstanten Druckes (*pressure outlet*) an 4 Begrenzungsflächen der Simulationsdomäne die Ergebnisse negativ beeinflussen kann. Eine solche erhöhte Sensitivität gegenüber einer Randbedingung wäre ein erheblicher Nachteil gegenüber einem Modell mit größerer Robustheit.

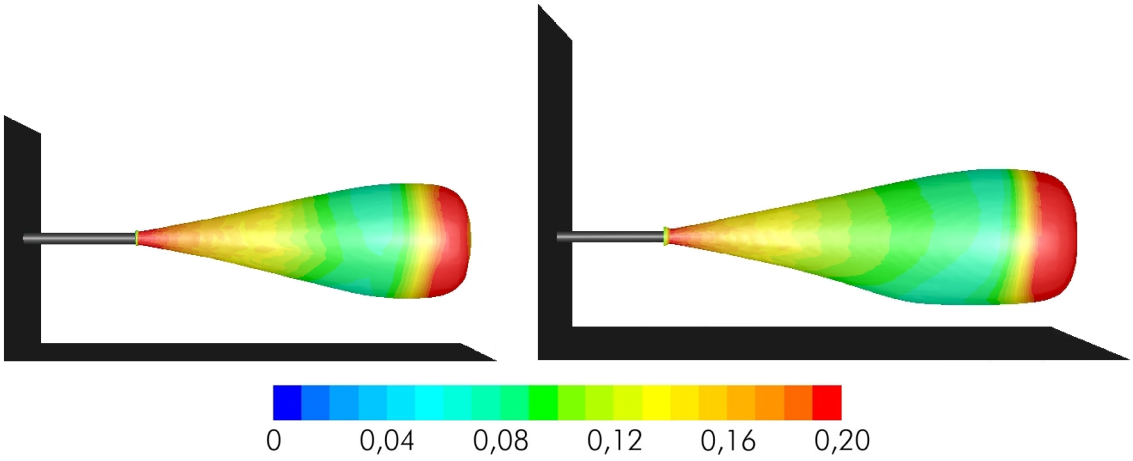


Abbildung 14-18: Betrag des Gasgeschwindigkeitsvektors (0 – 0,20 m/s) aufgetragen auf einer Fläche konstanter Axialgeschwindigkeit von 1 % der durchschnittlichen Axialgeschwindigkeit am Düsenaustritt (Ergebnisse des Reynolds-Stress-Modells auf dem ursprünglichen Gitter sowie auf dem vergrösserten Gitter)

Um den Einfluss der Ränder der Simulationsdomäne auf die Ergebnisse des Reynolds-Stress-Modells zu untersuchen, wurde zunächst ein größeres Gitter entwickelt, bei dem alle Austrittsränder um einen Meter zurückgesetzt wurden (linke und rechte Seitenwand in negative und positive y-Richtung, Decke in positive z-Richtung und „Aufprallfläche" in positive x-Richtung). Auf diesem Gitter wurden sodann Simulationen mit dem Reynolds-Stress-Modell unter sonst gleichen Randbedingungen durchgeführt und die Ergebnisse mit der kleineren

Geometrie verglichen. Als Ergebnisse dieser Analyse sind in Abbildung 14-18 die bereits bekannten Contourplots für die 1%-Strahlgrenze auf dem ursprünglichen sowie auf dem vergrößerten Gitter dargestellt.

Die Deutung der Ergebnisse ist nicht leicht, jedoch zeigt sich durchaus ein Einfluss der Domänengröße auf die Strahlform. Zwar bleibt das Nahfeld und der Übergangsbereich erwartungsgemäß unbeeinflusst, aber das Fernfeld, genauer die Lage des Schnittpunktes der 1%-Strahlgrenze mit der x-Achse sowie die Länge der Keule, sind eindeutig unterschiedlich. Die beiden Contourplots lassen vermuten, dass sich das stromabwärts liegende Ende der Keule jeweils an der Domänenbegrenzung der x-Achse orientiert und sich in einem bestimmten Abstand dort anlegt. Als Schlussfolgerung daraus muss davon ausgegangen werden, dass die Keulenform auf beiden verwendeten Gittern nicht korrekt abgebildet wird. Für eine genaue Erfassung der gesamten Strahlform muss die Strömung in einer weiterführenden Arbeit auf einem wesentlich erweiterten Gitter untersucht werden. Eine analoge Auswertung wurde auch für die Ergebnisse des SST-k-ω-Modells durchgeführt und die Resultate hierzu sind in Abbildung 14-19 dargestellt.

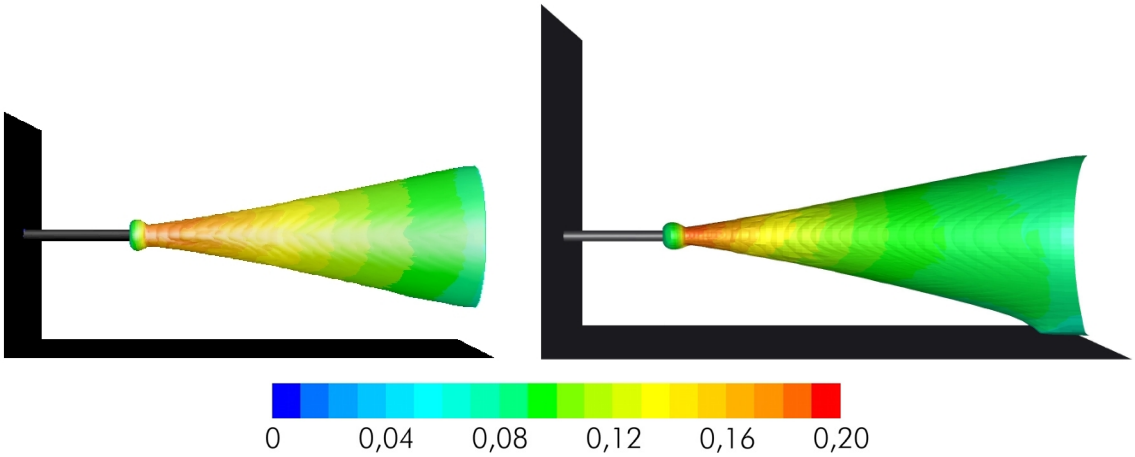


Abbildung 14-19: Betrag des Gasgeschwindigkeitsvektors (0 – 0,20 m/s) aufgetragen auf einer Fläche konstanter Axialgeschwindigkeit von 1 % der durchschnittlichen Axialgeschwindigkeit am Düsenaustritt (Ergebnisse des SST-k-ω-Modells auf dem ursprünglichen Gitter sowie auf dem vergrösserten Gitter)

Im Gegensatz zum Reynolds-Stress-Modell ist hier kein grundlegender Einfluss der Nähe der Austrittsrandbedingungen auf die ermittelte Strahlform festzustellen. Die 1%-Strahlgrenze ist für das SST-k-ω-Modell auf den beiden Gittern mit unterschiedlicher Größe nahezu ident geformt. Eine analoge Aussage gilt auch für das Standard-k-ω-Modell, eine entsprechende Abbildung wurde aber nicht mehr in diese Arbeit aufgenommen. Damit kann postuliert werden, dass das Reynolds-Stress-Modell sensibler gegenüber zu nahe angeordneter Domänenbegrenzungen ist als andere Turbulenzmodelle, was für manche Anwendungen sicherlich einen Nachteil des Modells darstellt.

Für die vorliegende Arbeit sind die wesentlichen Bereiche des Strahls das Nahfeld und das Übergangsgebiet, da auch im Verbrennungsapparat aufgrund der räumlichen Begrenzung nur diese beiden Bereiche auftreten. Die interessierenden Bereiche des Strahls sind also auch für das Reynolds-Stress-Modell von der Nähe der Domänenbegrenzung unabhängig, aber dies gilt nicht generell für das Strömungsfeld im gesamten Strahl. Wenn eine qualitativ

hochwertige Beschreibung des Freistrahls über die gesamte Lauflänge mittels CFD durchgeführt werden soll, so ist eine entsprechend große Simulationsdomäne zu wählen, um solche Einflüsse der Randbedingungen hintanzuhalten. Dies gilt aber sinngemäß (wenn auch nicht in gleichem Ausmaß) für alle Turbulenzmodelle, nicht nur für das Reynolds-Stress-Modell.

Auch der Vergleich der Contourplots mit den selbst durchgeführten Messungen ist ausgesprochen schwierig, da die 1%-Strahlgrenze Strömungsgeschwindigkeiten von unter 0,08 m/s impliziert, welche in der verwendeten Messanordnung nicht in ausreichender Genauigkeit wiedergegeben werden können. Die Evaluierung wird sich dementsprechend auf den messtechnisch zugänglichen Bereich des Freistrahles beschränken.

Obwohl die gezeigten CFD-Visualisierungen einen sehr guten ersten Eindruck über das Strömungsbild der konkreten Problemstellung bieten, wird jedoch speziell anhand der Unterschiede in den Abbildungen klar, dass zur quantitativen Validierung der einzelnen infrage kommenden Turbulenzmodelle eine detailliertere Analyse erforderlich ist, welche im Folgenden ausgeführt werden soll.

Die erste aufschlussreiche Auswertung des Strömungsfeldes am Freistrahl soll die Axialgeschwindigkeit entlang der Strahlachse behandeln. Da dimensionslose Abbildungen in ihrer Aussagekraft immer universeller sind, wird an dieser Stelle die x-Koordinate (Abstand vom Düsenaustritt entlang der Strahlachse) auf den Düsenaustrittsdurchmesser (0,104 m) bezogen. Die Axialgeschwindigkeit v_x entlang der Achse wird durch Division durch die am Strahl auftretende Maximalgeschwindigkeit dimensionslos gemacht. In der vorliegenden Arbeit tritt diese Maximalgeschwindigkeit direkt am Düsenaustritt auf und kann deshalb mit $v_x(0,0)$ bezeichnet werden. Aufgrund der Ausbildung eines parabolischen Geschwindigkeitsprofiles im Rohr beträgt diese Geschwindigkeit etwa 8,25 m/s (im Vergleich zur homogenen Geschwindigkeitsverteilung von 7,38 m/s, die am Eintritt in das Rohr vorgegeben wurde). Abbildung 14-20 zeigt zunächst einen Vergleich der selbst durchgeführten Messungen mit veröffentlichten Werten von Warda (Warda et al., 1999) sowie Ashforth-Frost (Ashforth-Frost et al., 1996). Es ist klar zu erkennen, dass die Übereinstimmung des Geschwindigkeitsverlaufes sehr gut ist, die Qualität der eigenen Messungen also für die hier zu erfüllende Aufgabe ausreichend gut ist. Klar zu erkennen ist ein Bereich im Strahl, in dem die Axialgeschwindigkeit zunächst nicht oder nur marginal absinkt. Daran anschließend liegt ein Übergangsbereich ehe die Geschwindigkeit umgekehrt proportional zum Achsabstand abfällt. Der erste Bereich wird als Strahlkern (oft auch Strahlnahfeld) bezeichnet und kennzeichnet die, von den Scherschichten an der Grenze zur (nahezu) ruhenden Umgebung zunächst unbeeinflusste, Kernströmung des Strahles. Ausgehend von Düsenrohr breiten sich diese Scherschichten radial nach beiden Seiten mit zunehmendem Achsabstand aus, bis sie sich schließlich am Ende des Strahlkernes auf der Achse vereinigen. In der Literatur wird zur Definition der Strahlgrenze üblicherweise ein 95%-Kriterium angewendet (der Punkt, an dem die Axialgeschwindigkeit auf das 0,95-fache der Maximalgeschwindigkeit abgesunken ist). Im Anschluss an das Nahfeld folgt ein Übergangsbereich, der sich etwa bis zu einem Abstand x/d von 8,0 erstreckt. Der dritte Bereich wird als Strahlfernfeld bezeichnet und beginnt etwa bei einem Wert für x/d von 8,0. Diese drei Bereiche werden auch in *Perry´s Chemical Engineers´ Handbook*, Kapitel 6 (Tilton, 1997) beschrieben. Basierend auf den eigenen Messungen kann für das Strahlfernfeld in guter Näherung eine sehr einfache Approximationsfunktion entwickelt werden (Gleichung 14.77). Wie Abbildung 14-20 entnommen werden kann, lie-

fert diese Approximation für Werte von *x/d* größer 7,0 eine sehr gute Näherung für die Axialgeschwindigkeit.

$$\frac{\overline{v_x(x,0)}}{\overline{v_x(0,0)}} = \frac{5{,}7}{\frac{x}{d_D}} \tag{14.77}$$

Die in Gleichung 14.77 enthaltene Konstante 5,7 ist streng nur für die hier auftretende Reynoldszahl gültig und deckt sich hervorragend mit dem Wertebereich, den Tilton in seiner Arbeit (Tilton, 1997) angibt. Da die in diesem Vergleich durchgeführten Messungen in unterschiedlichen Reynoldszahl-Bereichen durchgeführt wurden (7.200, 13.000, 22.500 und 45.727), lassen sich auch Aussagen zum Einfluss der Reynoldszahl auf die Strahlform treffen. Der Vergleich lässt diesbezüglich vermuten, dass bei höheren Reynoldszahlen größere Kernlängen und eine ausgeprägtere Abtrennung der genannten drei Bereiche zu erwarten ist. Um diese Aussage gesichert treffen zu können, wären allerdings zusätzliche Messungen, vor allem mit einem einheitlichen Setup, erforderlich.

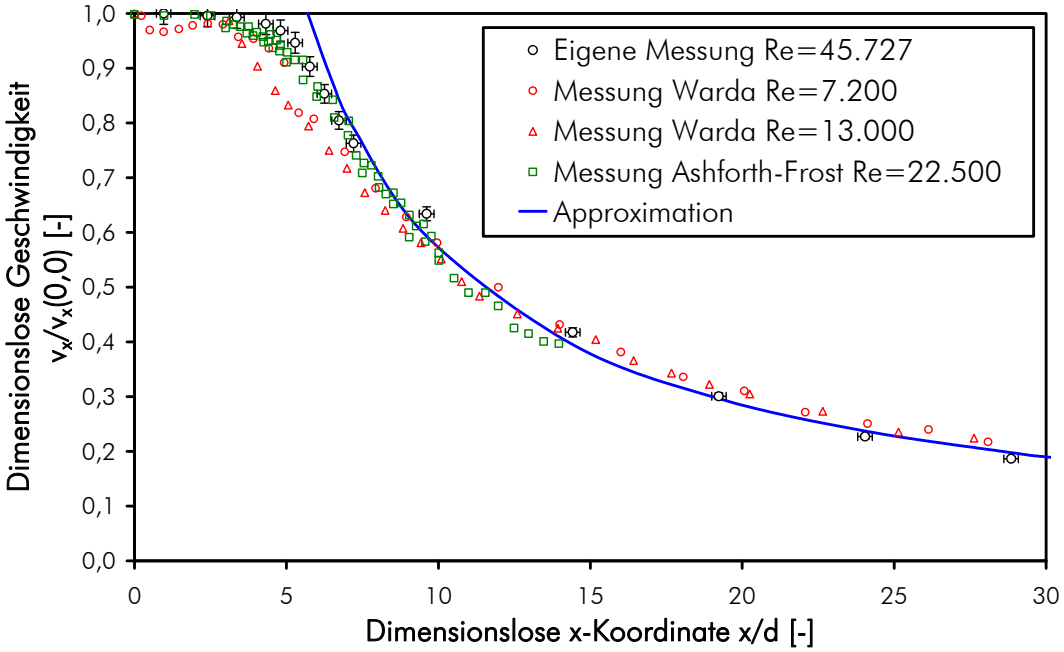


Abbildung 14-20: Dimensionslose Axialgeschwindigkeit des turbulenten Freistrahls entlang der Strahlachse: eigene Messungen und Approximation verglichen mit Messungen von Warda (Warda et al., 1999) und Ashforth-Frost (Ashforth-Frost et al., 1996)

Abbildung 14-21 zeigt nun die Leistung der untersuchten Turbulenzmodelle bei der Vorhersage des Strömungsfeldes entlang der Strahlachse. Das Standard-k-ε-Modell liefert hier die besten Ergebnisse über die gesamte Lauflänge des Strahls, dieses Modell wurde in seiner Entwicklung auch speziell auf freie Scherströmungen hin parametriert (Wilcox, 1994). Das SST-k-ω-Modell schneidet ebenfalls sehr gut ab, wobei die Übereinstimmung mit den Messwerten im Nahfeld sowie im Übergangsbereich aber etwas schlechter ist. Generell profitiert dieses Modell aber von der guten Leistung des Standard-k-ε-Modells, auf das im SST-k-ω-Modell im Bereich freier Scherströmungen umgeschaltet wird (siehe Kapitel 14.2.4.2). Das Modell von Spalart-Allmaras weist trotz seiner einfachen Gestalt speziell im Nahfeld erstaun-

lich gute Ergebnisse auf und bietet aufgrund seines geringen rechentechnischen Aufwandes damit einer relativ gute Alternative. Relativ schlechte Ergebnisse liefern hingegen die Modelle RNG-k-ε, Realizable-k-ε sowie erstaunlicherweise auch das Reynolds-Stress-Modell (alle liefern zu große Kernlängen). Die schlechteste Übereinstimmung mit den Messwerten zeigt das Standard-k-ω-Modell, was aber aufgrund der Modellformulierung (spezielle Eignung und Parameteranpassung für wandgebundene turbulente Scherströmungen) und vor allem aufgrund der Hinweise in der Literatur (Wilcox, 1994) auch zu erwarten war. Generell ist anzumerken, dass die Vorhersagequalität des Geschwindigkeitsverlaufes im Fernfeld des Strahles schlechter ist als im Nahfeld und im Übergangsbereich. Die erzwungen laminare Strömung, die zu Vergleichszwecken ebenfalls durchgeführt wurde, liefert erwartungsgemäß ein nichtphysikalisches Ergebnis. Der Freistrahl schießt ohne Aufweitung und damit ohne Reduktion der Axialgeschwindigkeit relativ unbeeinflusst durch das umgebende Medium. Das Ergebnis zeigt lediglich die hohe Reichweite, die laminaren Freistrahlen eigen ist.

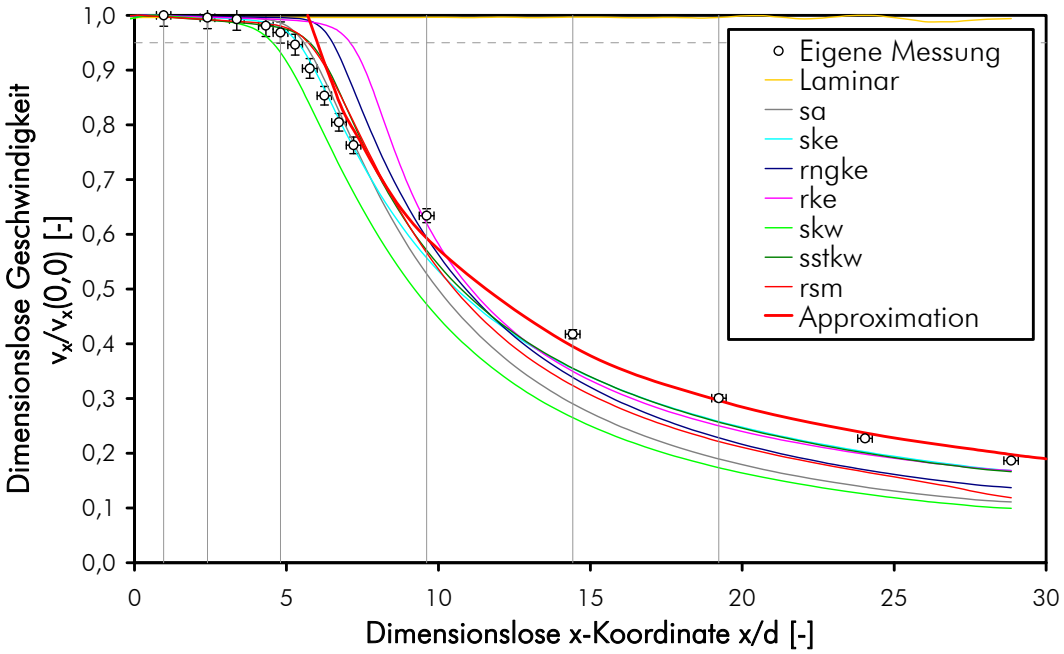


Abbildung 14-21: Dimensionslose Axialgeschwindigkeit des turbulenten Freistrahls entlang der Strahlachse: eigene Messungen, Simulationsergebnisse und vereinfachte Approximation

Ein wesentliches und auch einfach zu quantifizierendes Merkmal des Freistrahls ist die dimensionslose Kernlänge, wie erwähnt unter Voraussetzung eines 95%-Kriteriums (in Abbildung 14-21 ist diese Grenze als hellgraue strichlierte Linie eingezeichnet). Tabelle 14-19 fasst die mit den unterschiedlichen Turbulenzmodellen ermittelte dimensionslose Kernlänge für den betrachteten Freistrahl zusammen. Auch hier zeigt das Standard-k-ε-Modell eine hervorragende Vorhersagegenauigkeit. Auch das Modell von Spalart-Allmaras, das Reynolds-Stress-Modell und das SST-k-ω-Modell liefern eine passable Abweichung zum Messergebnis. Mit drei Ausnahmen (RNG-k-ε, Realizable-k-ε und Standard-k-ω) stimmen die ermittelten Kernlängen auch relativ gut mit Literaturergebnissen überein (Bahner, 2001), die eine Kernlänge von 5 bis 6 Düsendurchmessern angeben. Einen Überblick über zu erwartende Kernlängen liefert beispielsweise auch Eck (Eck, 1988; Eck, 1991), die Werte dort sind aber aufgrund der Strahlgeometrie sowie aufgrund unterschiedlicher Definitionen der Kernlänge nicht mit den hier präsentierten Ergebnissen zu vergleichen.

Tabelle 14-19: Dimensionslose Kernlänge des untersuchten Freistrahls berechnet aus den durchgeführten eigenen Messungen sowie den Simulationsergebnissen mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen

	Dimensionslose Kernlänge (95%-Grenze) [-]	Relative Abweichung zur Messung [%]
Messung	5,21	
Spalart-Allmaras	5,58	+7,1
Standard-k-ε	5,36	+2,9
RNG-k-ε	6,50	+24,8
Realizable k-ε	7,10	+36,3
Standard-k-ω	4,53	-13,1
SST-k-ω	5,75	+10,4
Reynolds-Stress-Modell	5,70	+9,5

Eine zweite sehr aufschlussreiche Auswertung liefert die Analyse des Axialgeschwindigkeitsverlaufes an Profilen quer zur Hauptströmungsrichtung in unterschiedlichen Abständen zum Düsenaustritt. Zur Auswertung wurden dabei Profile in 6 unterschiedlichen Entfernungen herangezogen, die sich auf alle drei identifizierten Bereiche des Freistrahles erstrecken und deren exakte Positionen in Abbildung 14-21 ersichtlich ist. Abbildung 14-22 zeigt nun die dimensionsbehafteten Axialgeschwindigkeitsverläufe auf diesen Profilen und vergleicht die gewonnenen Messwerte mit den Ergebnissen der CFD-Simulation mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen. Sehr gut erkennbar sind in diesen Diagrammen die Verbreiterung der Geschwindigkeitsverteilung mit zunehmendem Abstand vom Düsenaustritt und die damit einhergehende Reduktion des Geschwindigkeitsbetrages. Durch die Ansaugung von Fluid aus der Umgebung nimmt zwar des Massenstrom im Freistrahl selbst mit zunehmender Lauflänge zu (Wilcox, 1994; Schneider, 2003), der Gesamtimpuls bleibt aber erhalten und durch die Verbreiterung des Geschwindigkeitsprofiles muss die Absolutgeschwindigkeit absinken. Die Analyse der Simulationsergebnisse zeigt auch hier, dass die Abweichung zu den Messergebnissen im Nahfeld und auch im Übergangsbereich relativ gering ist, mit zunehmender Lauflänge im Fernfeld aber immer größer wird. Die hier analysierten Turbulenzmodelle liefern in Entfernungen von über einem Meter ($x/d > 10$) zunehmend unzureichende Ergebnisse. Ein möglicher Grund für diesen Effekt soll später erläutert werden. Dennoch kann ganz klar zwischen besser und schlechter geeigneten Modellen unterschieden werden. Standard-k-ω liefert einmal mehr die schlechteste Performance und sagt einen signifikant zu hohen Aufweitungsgrad des Strahles und damit zu niedrige Geschwindigkeiten vorher. Die besten Ergebnisse liefern an dieser Stelle SST-k-ω, Standard-k-ε und auch das Realizable-k-ε-Modell. Das RNG-k-ε-Modell liefert bei niedrigen Entfernungen zum Düsenaustritt im Fernfeld noch gute Ergebnisse, verliert aber mit zunehmender Lauflänge auch gegenüber den anderen Modellen zunehmend an Qualität. Spalart-Allmaras und das Reynolds-Stress-Modell liefern beide vergleichbare aber lediglich mittelmäßige Ergebnisse. Der signifikant höhere Rechenaufwand des Reynolds-Stress-Modells kann für den hier betrachteten Testfall nicht in qualitativ höherwertige Ergebnisse umgemünzt werden. Abschließend ist erkennbar, dass zwar alle Turbulenzmodelle für das Nahfeld des Strahles gute Ergebnisse liefern, für das Fernfeld allerdings zu niedrige Geschwindigkeiten und eine zu große Strahlverbreiterung vorhersagen. Diese Aussage trifft für die dimensionsbehaftete Darstellung (Abbildung 14-22) genauso wie auch für die dimensionslose Darstellung (Abbildung 14-23) zu. Es sind bei den analysierten Turbu-

lenzmodellen im Fernfeld also sowohl die Absolutgeschwindigkeiten als auch die auf die Maximalgeschwindigkeit bezogenen Geschwindigkeitsverläufe mit Unsicherheiten behaftet.

Die dimensionsbehaftete Darstellung in Abbildung 14-22 liefert zwar einen guten Einblick in die Aufweitung des Freistrahles und die Reduktion der Strömungsgeschwindigkeit sowie eine Aussage zur absoluten Genauigkeit der Simulationsergebnisse, für einen universellen Vergleich ist allerdings eine dimensionslose Darstellung vorzuziehen. Abbildung 14-23 zeigt aus diesem Grund dimensionslose Axialgeschwindigkeitsprofile (Geschwindigkeit bezogen jeweils auf die lokale Geschwindigkeit auf der Strahlachse), wobei die y-Koordinate durch Division mit dem Düsendurchmesser d_D dimensionslos gemacht wurde. Damit lassen sich Freistrahlen aus Düsen unterschiedlicher Durchmesser direkt vergleichen.

Abbildung 14-24 zeigt schließlich wiederum dimensionslose Geschwindigkeitsprofile, diesmal aber in Abhängigkeit einer y-Koordinate, die mit dem jeweiligen Axialabstand x vom Düsenaustritt dimensionslos gemacht wurde. Diese Darstellung erlaubt nun den direkten Vergleich der einzelnen Profile miteinander und enthüllt die Selbstähnlichkeit des turbulenten Freistrahles. Bezüglich der Qualität der untersuchten Turbulenzmodelle ergeben sich aus diesen beiden Abbildungen im Vergleich zu Abbildung 14-22 aber keine wesentlichen zusätzlichen Erkenntnisse.

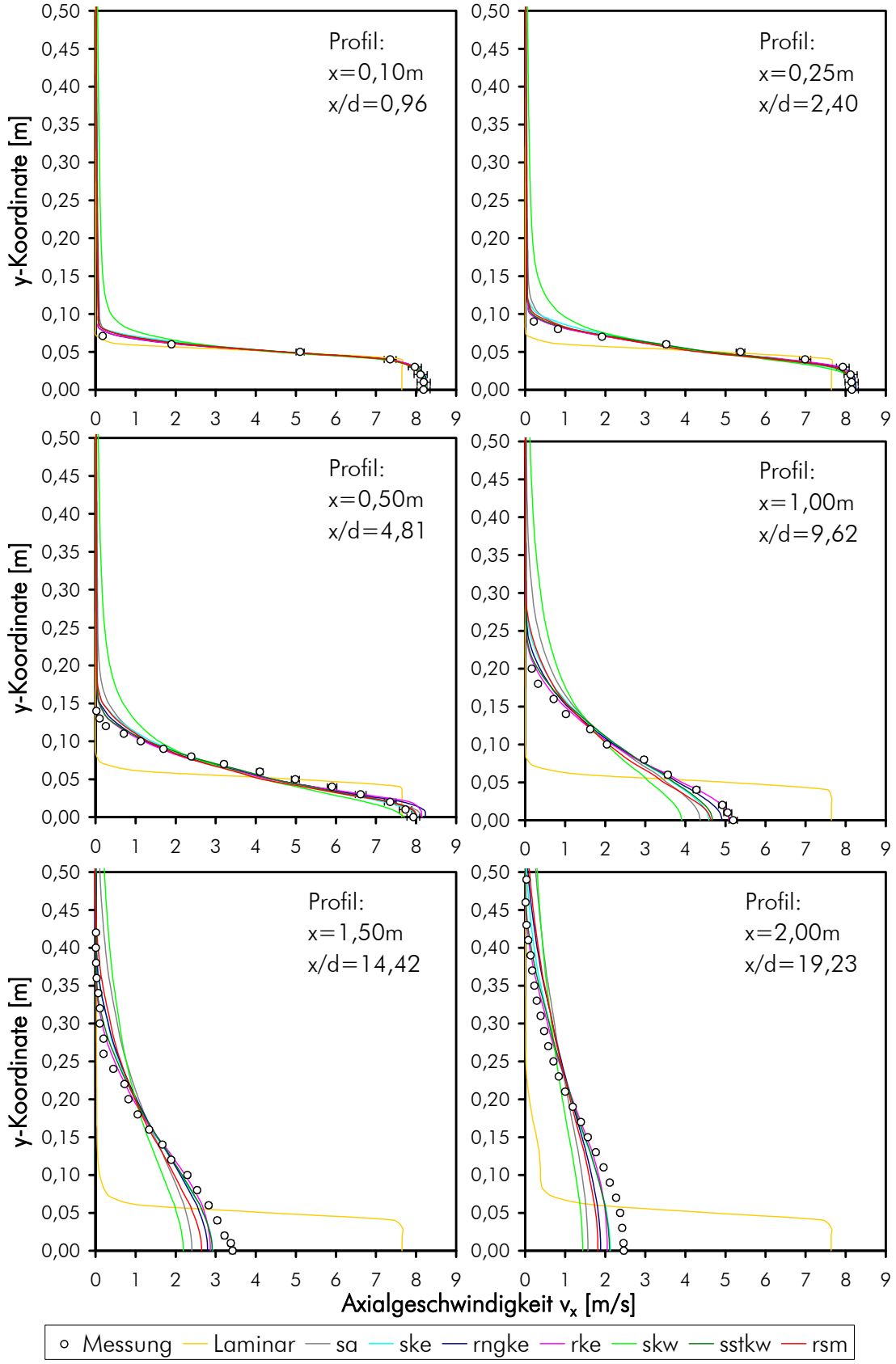


Abbildung 14-22: Axialgeschwindigkeitsprofile des turbulenten Freistrahls in verschiedenen Entfernungen x zum Düsenaustritt (Messungen und Simulationsergebnisse)

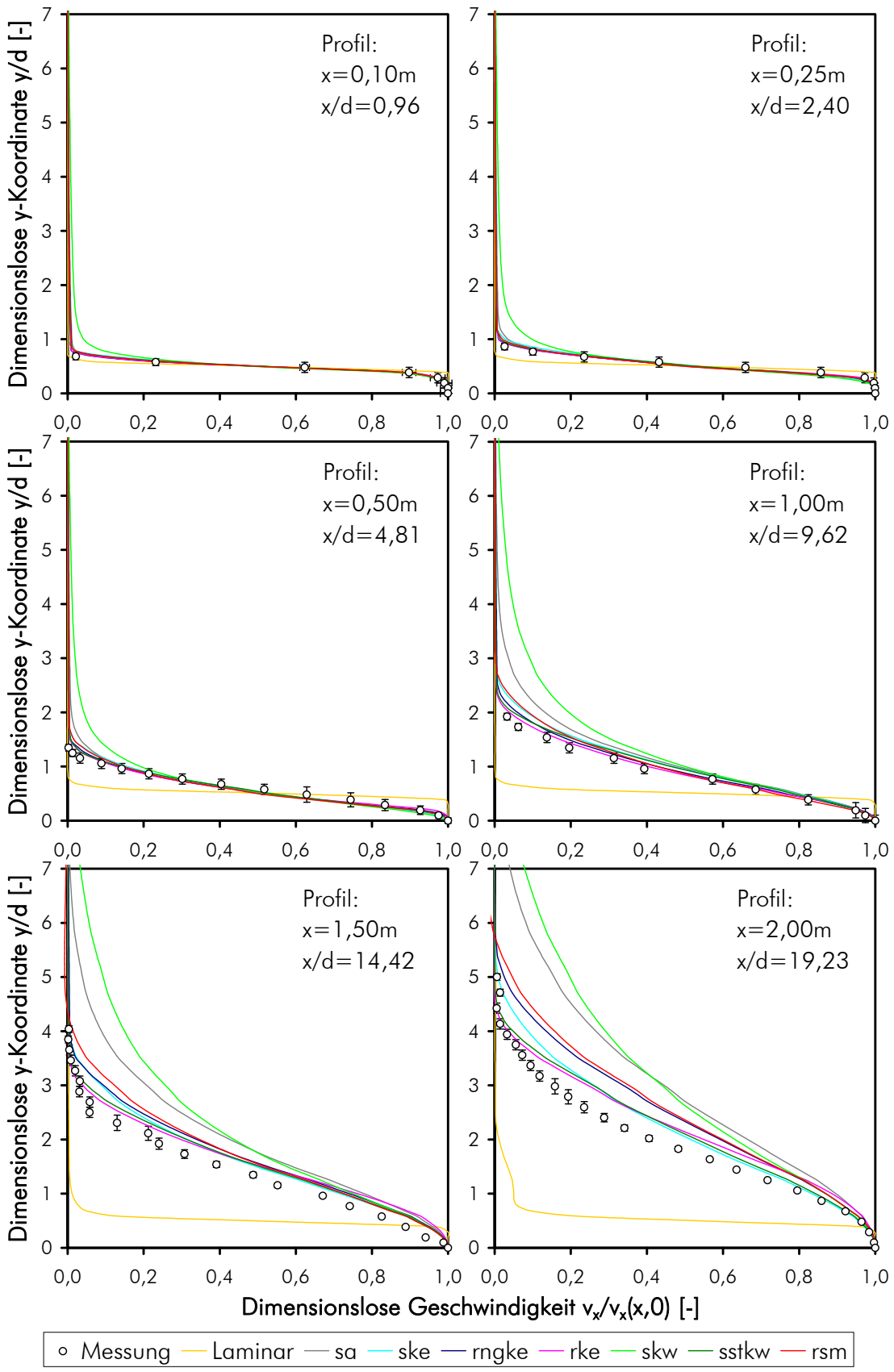


Abbildung 14-23: Dimensionslose Axialgeschwindigkeitsprofile (y bezogen auf d) des turbulenten Freistrahls in verschiedenen Entfernungen x zum Düsenaustritt

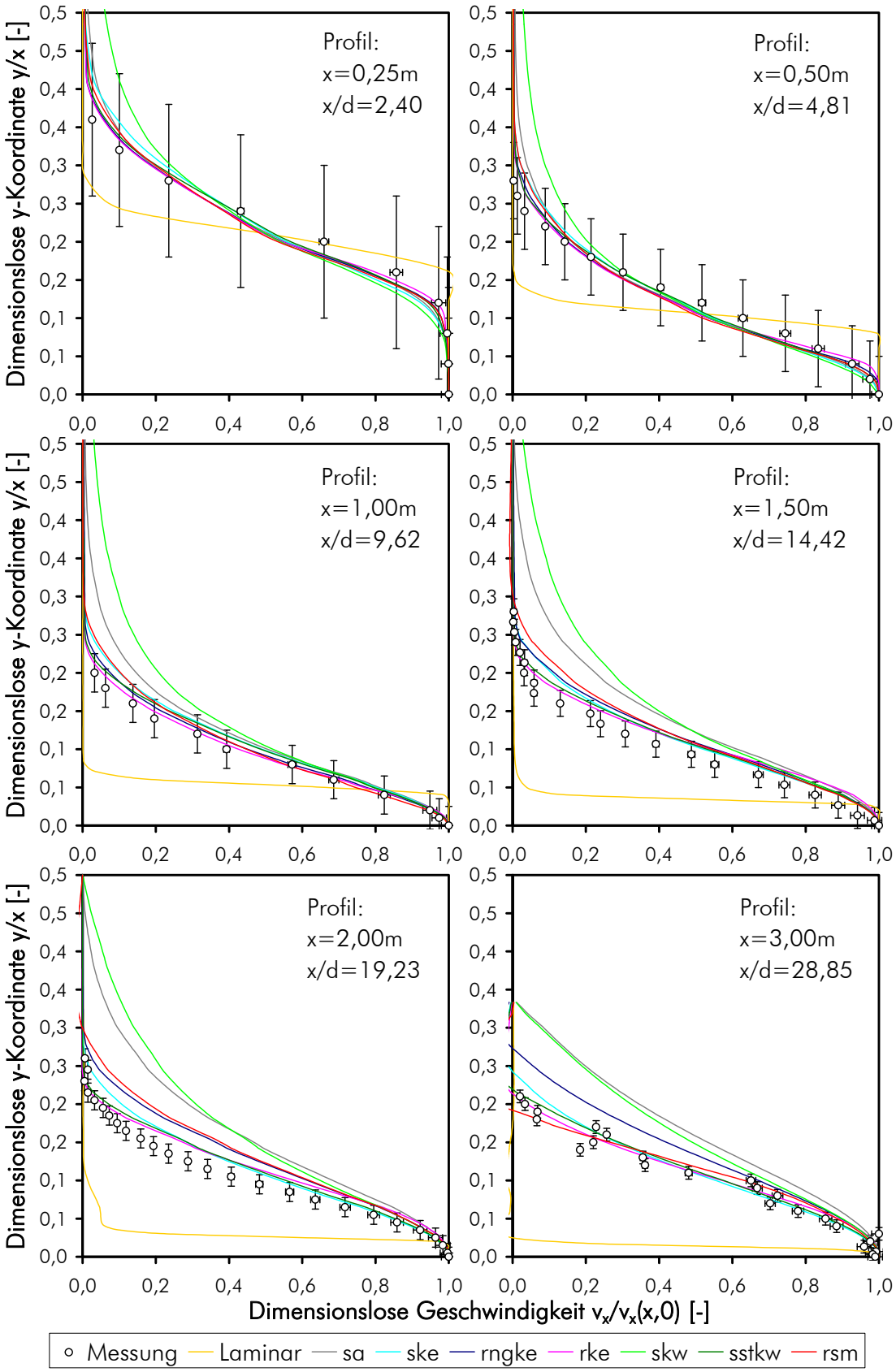


Abbildung 14-24: Dimensionslose Axialgeschwindigkeitsprofile (y bezogen auf x) des turbulenten Freistrahls in verschiedenen Entfernungen x zum Düsenaustritt

Diese Geschwindigkeitsprofile können nun in einem Diagramm zusammengefasst werden, wodurch der Aspekt der Selbstähnlichkeit besonders deutlich hervortritt. Abbildung 14-25 zeigt nun die eigenen Messergebnisse aller Axialgeschwindigkeitsprofile außerhalb des Strahlkernes und vergleicht diese mit Messungen von Bradbury, die im Standardwerk von Wilcox (Wilcox, 1994) zusammengefasst sind.

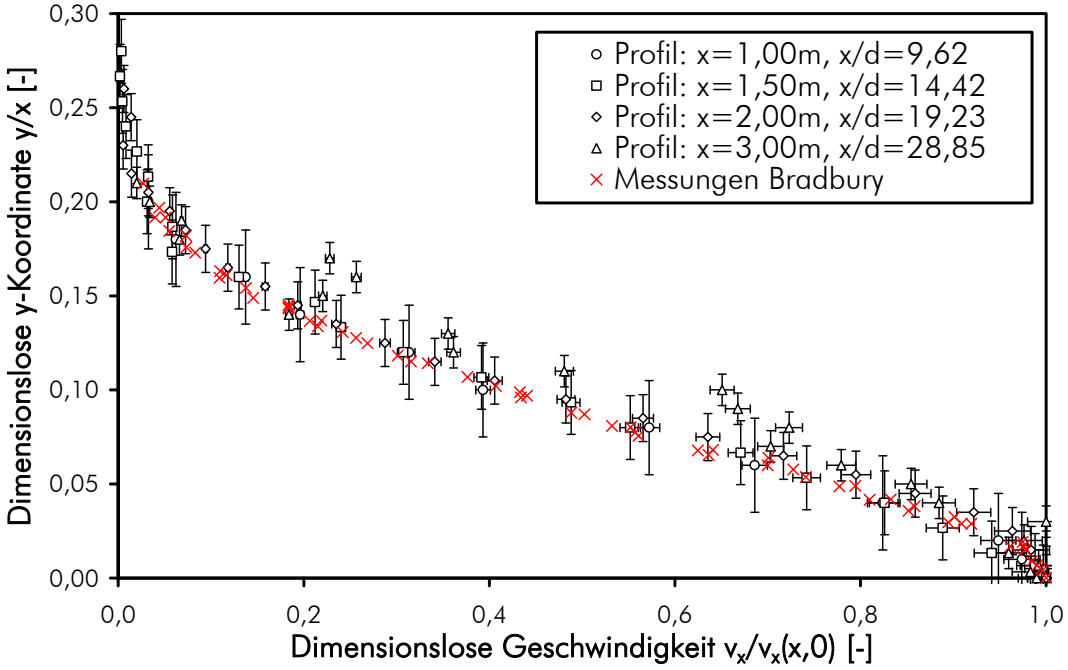


Abbildung 14-25: Axialgeschwindigkeitsprofile außerhalb des Strahlkernes: eigene Messungen verglichen mit Messungen von Bradbury (Wilcox, 1994)

Hierbei zeigt sich, dass alle Verläufe der Axialgeschwindigkeit auf Profilen im Fernfeld und teilweise bereits im Übergangsbereich bei dieser dimensionslosen Darstellung deckungsgleich sind. Abbildung 14-25 zeigt, dass die selbst durchgeführten Messungen dem Kriterium der Selbstähnlichkeit im Wesentlichen sehr gut entsprechen und auch die Übereinstimmung mit den genannten Literaturwerten unter Berücksichtigung des Messfehlers ausgezeichnet ist. Lediglich die Messwerte im am weitesten vom Düsenaustritt entfernten Profil (Abstand x=3,00 m) weichen stärker vom Idealverlauf ab, was allerdings auf größer werdende Fehlerbereiche mit zunehmendem Abstand zurückzuführen sein dürfte. Dieses Profil wird für die Auswertung aber ohnehin nicht herangezogen, da auch den Ergebnissen der CFD-Simulation an dieser Stelle nicht mehr vertraut werden darf, weil in 3 m Axialabstand vom Düsenaustritt der Rand der Simulationsdomäne gewählt und die Randbedingung konstanten Druckes auf der gesamten Fläche aufgeprägt wurde. Ansonsten lässt sich mit diesem Diagramm postulieren, dass die Qualität der gemessenen Axialgeschwindigkeitsverläufe für die in der vorliegenden Arbeit durchgeführte Analyse adäquat ist.

Die Diagramme in Abbildung 14-26 und in Abbildung 14-27 zeigen nun die Simulationsergebnisse mit den unterschiedlichen Turbulenzmodellen in Bezug auf die Selbstähnlichkeit des turbulenten Freistrahles und vergleichen die Ergebnisse mit den eigenen Messungen und jenen von Bradbury, welche der Arbeit von Wilcox (Wilcox, 1994) entnommen wurden. Dargestellt sind wie in Abbildung 14-25 alle ausgewerteten Axialgeschwindigkeitsprofile im Fernfeld und im Übergangsbereich des Freistrahles in zweifach dimensionsloser Darstellung aufgetrennt auf die einzelnen Turbulenzmodelle.

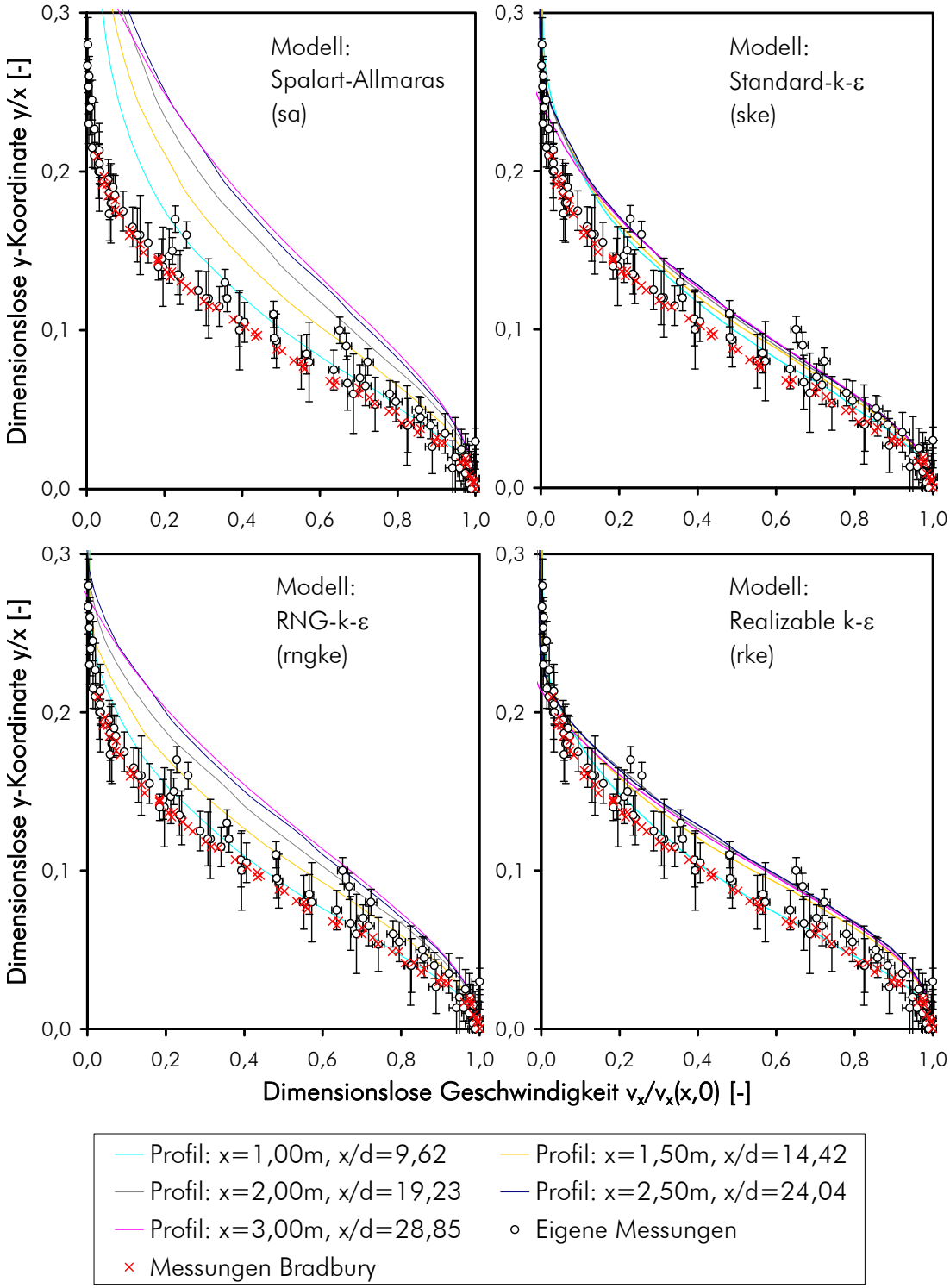


Abbildung 14-26: Axialgeschwindigkeitsprofile außerhalb des Strahlkernes: Simulationsergebnisse mit den Turbulenzmodellen sa, ske, rngke und rke verglichen mit eigenen Messungen und Messungen von Bradbury (Wilcox, 1994)

Wie zu erwarten war, ist das relativ einfache Modell von Spalart-Allmaras nicht in der Lage, die Form des Freistrahles und die einzelnen Geschwindigkeitsprofile angemessen abzubilden. Der ermittelte geringfügig niedrigere Rechenaufwand mit diesem Modell rechtfertigt für diese Anwendung den Einsatz des einfachen Modells daher nicht. Das Standard-k-ε-

Modell liefert hervorragende Ergebnisse über den gesamten Bereich und wird in dieser Analyse nur durch das etwas bessere SST-k-ω-Modell geschlagen. Aufgrund des geringen rechentechnischen Aufwandes gepaart mit den ausgezeichneten Ergebnissen ist dieses Modell also für die vorliegende Problemstellung „Düsenprüfstand" aus ökonomischen Gründen am besten geeignet. Im Vergleich dazu liefern die „erweiterten" k-ε-Modelle relativ enttäuschende Ergebnisse. Während das Realizable-k-ε-Modell in Summe nur geringfügig schlechtere Ergebnisse liefert als das Standardmodell und im Übergangsbereich des Freistrahles sogar eine bessere Performance aufweist, zeigt das RNG-k-ε-Modell eine vergleichsweise schlechte Abbildung der selbstähnlichen Profile, die so nicht unbedingt zu erwarten waren. Beide Modelle wurden ursprünglich zur Erweiterung des Standardmodells hinsichtlich niedrigerer Reynoldszahlen sowie zur besseren Abbildung der turbulenten Dissipation entwickelt. Laut Literatur (Wilcox, 1994; FLUENT, 2005) sollten daher beide Modelle eine wesentlich bessere Beschreibung turbulenter Freistrahlen ermöglichen als mit dem Standardmodell. Diese Leistung konnte in dieser Arbeit speziell für das RNG-k-ε-Modell nicht verifiziert werden; in der konkreten Problemstellung kann die erweiterte Modellierung nicht in signifikant bessere Ergebnisse umgesetzt werden. Das Realizable-k-ε-Modell ist zwar immer noch für die Problemstellung sehr gut einsetzbar, bringt gegenüber dem Standard-k-ε-Modell speziell unter Berücksichtigung des höheren Berechnungsaufwandes aber keine Vorteile.

Schließlich sei auch die relativ schlechte Übereinstimmung der Ergebnisse des Reynolds-Stress-Modells mit den Messwerten genannt, die speziell bei der dimensionslosen Darstellung der selbstähnlichen Profile augenscheinlich wird. Auch hier sollte aufgrund der Modellierung und aufgrund von Erfahrungswerten aus der Literatur eine höhere Qualität der Ergebnisse zu erwarten sein. Eine genaue Auswertung zeigt, dass die Ergebnisse mit zunehmender Strahllauflänge, bzw. mit zunehmender Nähe zur Begrenzung der Simulationsdomäne an Qualität verlieren. Dass dieses Verhalten durchaus mit den Randbedingungen konstanten Druckes auf den Domänenrändern zu erklären ist, wurde bereits eingangs diskutiert.

Abbildung 14-27 zeigt einmal mehr die schlechte Eignung des Standard-k-ω-Modells für die betrachtete freie Scherströmung. Diese Unzulänglichkeit ist in der Modellformulierung und Parametrierung verhaftet und wird schon in der Arbeit von Wilcox (Wilcox, 1994) deutlich beschrieben. Das Modell sagt eine signifikant zu große Strahlaufweitung und damit auch eine wesentlich zu niedrige Strahlreichweite voraus. Die wesentliche Erweiterung dieses Modells durch Menter macht aber die k-ω-Modellfamilie für die Freistrahlsimulation dennoch interessant. Das SST-k-ω-Modell liefert nämlich, wie bereits erwähnt, qualitativ die besten Ergebnisse, welche darüber hinaus auch die hervorragende Anwendbarkeit von CFD im Bereich der ingenieurswissenschaftlichen Simulation turbulenter Freistrahlen demonstrieren. Da dieses Modell sowohl die Vorteile des Standard-k-ε-Modells bei freien Scherströmungen als auch die Vorteile des Standard-k-ω-Modells für wandgebundene turbulente Strömungen in sich vereint und damit für komplexe und vielfältige Strömungsformen flexibel einsetzbar ist, ist dieses Modell der leistungsfähigste und immer noch ein ökonomischer Kandidat für die Simulation des gesamten Verbrennungsapparates.

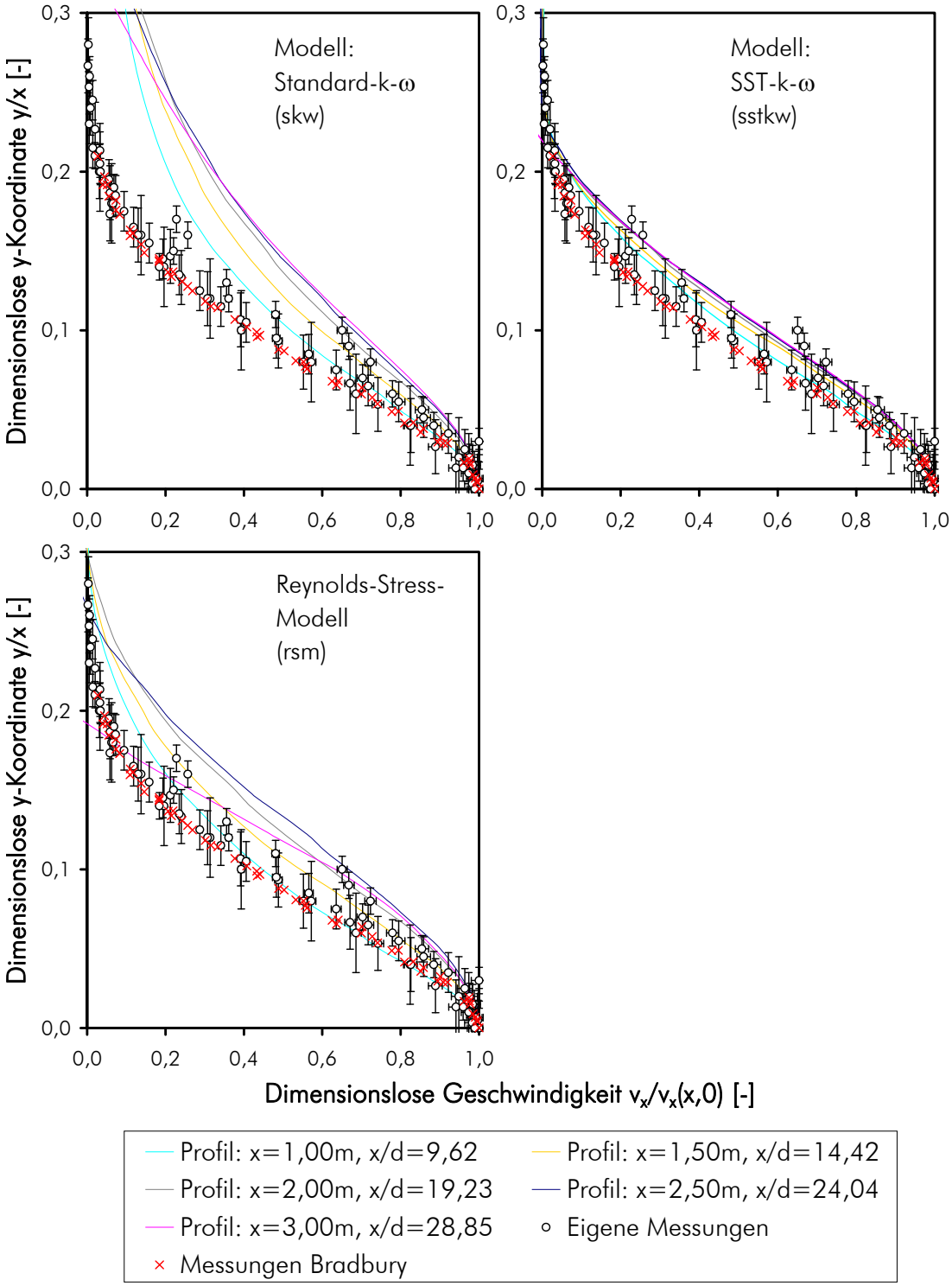


Abbildung 14-27: Axialgeschwindigkeitsprofile außerhalb des Strahlkernes: Simulationsergebnisse mit den Turbulenzmodellen skw, sstkw und rsm verglichen mit eigenen Messungen und Messungen von Bradbury (Wilcox, 1994)

Das zweite wesentliche Charakteristikum eines Freistrahles, welches rein numerisch angegeben werden kann, ist neben der bereits ausgeführten Kernlänge auch der Strahlöffnungswinkel, also das Maß der Aufweitung des turbulenten Strahls. In der Literatur sind hierbei

jedoch anders als bei der Kernlänge verschiedene Definitionen zu finden, von denen zwei an dieser Stelle diskutiert werden sollen.

Das erste Maß für die Strahlaufweitung ist das sogenannte Aufweitverhältnis (*spreading rate*), die beispielsweise bei Schlichting et al. und bei Wilcox (Wilcox, 1994; Schlichting et al., 1997) ausgeführt wird. Hierfür wird für jedes Profil quer zur Hauptströmungsrichtung der Abstand y von der Achse gesucht, bei dem die Axialgeschwindigkeit auf 50 % des Wertes des lokalen Maximums auf dem Profil (in aller Regel auf der Strahlachse) abgesunken ist. Dieser Wert $y0.5$ wird auch Halbwertsbreite genannt und kann durch Division durch den Düsendurchmesser d_D dimensionslos gemacht und in einem Diagramm gegen die bereits bekannte dimensionslose x-Koordinate aufgetragen werden. Eine solche Darstellung, bei der die erzielten Simulationsergebnisse mit den eigenen Messungen sowie mit Messungen von Warda (Warda et al., 1999) verglichen werden, ist in Abbildung 14-28 gegeben. Für Profile im Fernfeld ergibt sich laut Theorie (Wilcox, 1994) für den idealen Freistrahl ein konstantes Verhältnis aller Werte y/x in dieser Darstellung, es gilt also die in Gleichung 14.78 dargestellte Approximation. Die Konstante in dieser Gleichung wird als Aufweitverhältnis oder *spreading rate* bezeichnet.

$$\frac{\frac{y0.5(x)}{d_D}}{\frac{x}{d_D}} = \frac{y0.5(x)}{x} \approx konst. \tag{14.78}$$

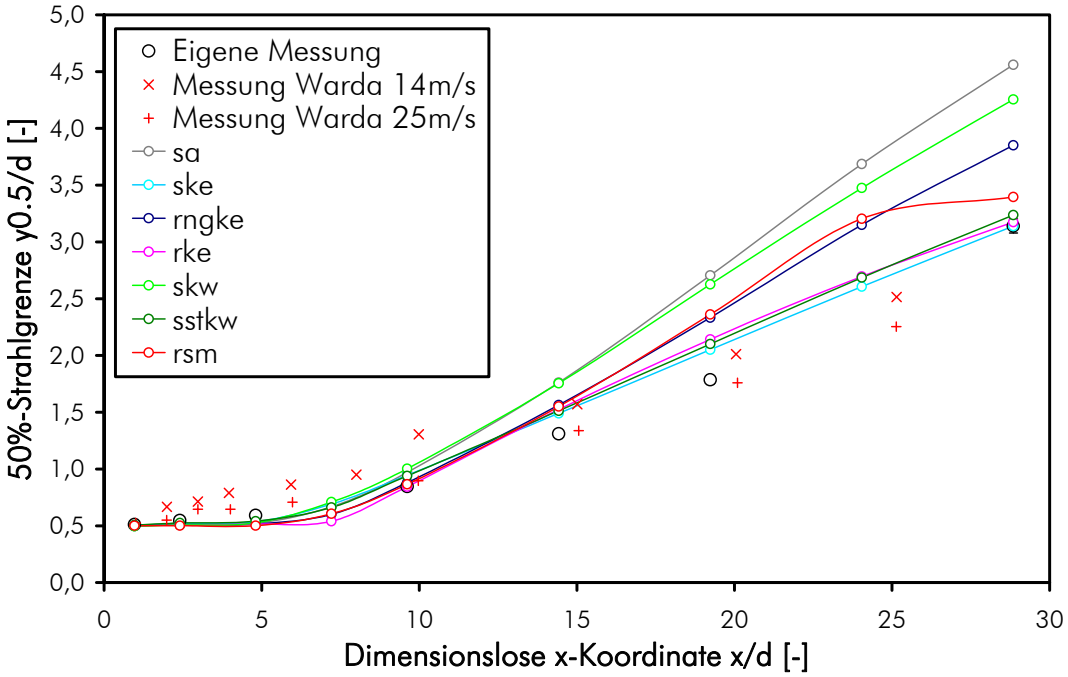


Abbildung 14-28: Dimensionslose 50%-Strahlgrenze des untersuchten Freistrahls: eigene Messungen und Simulationsergebnisse sowie Messungen von Warda (Warda et al., 1999) bei verschiedenen Geschwindigkeiten

Ein zweites gängiges Maß für die Strahlaufweitung ist der Ausbreitungswinkel wie er beispielsweise bei Schneider (Schneider, 2003) Verwendung findet. Hier wird nicht wie im Falle

des Aufweitverhältnisses die 50%-Strahlgrenze herangezogen, sondern die 1%-Strahlgrenze, also die y-Koordinaten jener Punkte auf den Strömungsprofilen, bei denen die Axialgeschwindigkeit auf 1 % des Wertes des lokalen Profilmaximums abgesunken ist. Auch dieser Wert *y0.01* kann mit dem Düsendurchmesser d_D dimensionslos gemacht werden und gegen die dimensionslose x-Koordinate aufgetragen werden. Ein solches Diagramm, welches die Simulationsergebnisse mit den eigenen Messungen und mit dem in der Literatur vorgeschlagenen Wertebereich (Schneider, 2003) vergleicht, ist in Abbildung 14-29 dargestellt. Die Selbstähnlichkeit des Freistrahles verlangt nun, dass im Fernfeld des Strahles ein linearer Zusammenhang zwischen den Werten für *x* und für *y* besteht, sich der Freistrahl also konstant linear aufweitet. Berechnet man nun die Steigung dieser Geraden und hieraus wiederum den Winkel der Geraden, erhält man ein gutes Maß für die Strahlaufweitung, welches als Ausbreitungswinkel definiert ist. Der Ausbreitungswinkel entspricht dem halben Strahlöffnungswinkel bei Verwendung eines 1%-Kriteriums.

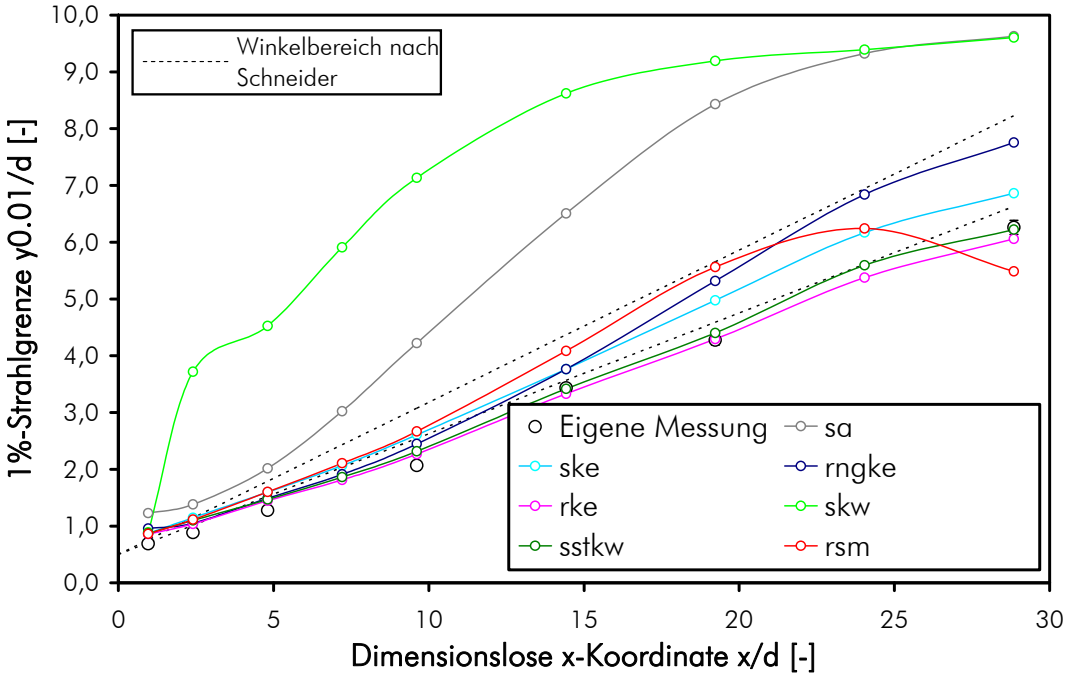


Abbildung 14-29: Dimensionslose 1%-Strahlgrenze des untersuchten Freistrahls: eigene Messungen und Simulationsergebnisse im Vergleich zur Literaturangabe nach Schneider (Schneider, 2003)

Abbildung 14-28 zeigt, dass die Ergebnisse der Simulationen mit den unterschiedlichen Turbulenzmodellen unter Berücksichtigung der 50%-Strahlgrenze durchaus ähnliche Verläufe ergibt. Alle Simulationen ergeben eine merklich zu große Aufweitung des Strahles im Vergleich mit den eigenen Messungen und jenen von Warda. Die Modelle Standard-k-ε-, Realizable-k-ε und SST-k-ω schneiden noch vergleichsweise gut ab, während die Abweichung für die anderen Modelle schon verhältnismäßig groß ist. Abweichend von allen anderen Modellen ist der Verlauf, den das Reynolds-Stress-Modell vorhersagt, da sich hier ein scharfer Knick bei einem Axialabstand von etwa dem 24-fachen des Düsendurchmessers ergibt. Noch stärker ist dieses Phänomen bei Verwendung der 1%-Strahlgrenze in Abbildung 14-29 ausgeprägt, in dieser Darstellung wird ein, sich mit zunehmendem Abstand wieder verjüngender Strahl, vorhergesagt. Auf dieses Ergebnis wurde bereits im Zuge der Diskussion der Contourplots eingegangen. Die Darstellung zeigt den selben Effekt auch für das Standard-k-ω-

Modell, wobei hier allerdings die an den Rändern der Simulationsdomäne aufgeprägte Randbedingung eines konstanten Druckes aufgrund der räumlichen Nähe tatsächlich einen störenden Einfluss haben dürfte. Unabhängig davon wird mit diesem Modell generell eine viel zu hohe Aufweitung vorhergesagt. Diese Einschätzung ist auch für das Spalart-Allmaras-Modell zu treffen. Während die Ergebnisse aller anderen Turbulenzmodelle im Inneren der betrachteten Fluiddomäne sehr gute Übereinstimmung mit den Literaturwerten sowie den eigenen Messergebnissen liefern, zeigt eine genaue Betrachtung aber doch, dass das letzte analysierte Geschwindigkeitsprofil an der Domänengrenze in einem Abstand von 3,00 m vom Düsendurchmesser (x/d_D=28,85) vom restlichen Verhalten im Domäneninneren abweicht. Der Autor führt dies ebenfalls auf die aufgeprägte Druckrandbedingung zurück. Dies ist der Grund dafür, dass die vorliegende Analyse lediglich mit Profilen bis zu einem Abstand von 2,50 m vom Düsenaustritt (x/d_D=24,04) durchgeführt wurde, Auswertungen die näher an einer Druckrandbedingung durchgeführt werden ist zunächst generell zu misstrauen.

In Tabelle 14-20 sind nun die numerischen Werte für die beiden Definitionen der Strahlaufweitung für die durchgeführten CFD-Simulationen zusammengefasst und es wird ein Vergleich mit den eigenen Messwerten sowie mit den Literaturdaten (Wilcox, 1994; Tilton, 1997; Schneider, 2003; Balabel et al., 2011) angestellt. Weiters sind die Ergebnisse, die Wilcox in seiner Arbeit (Wilcox, 1994) mit der Simulation des Freistrahls mit dem Standard-k-ε-, dem Standard-k-ω- sowie mit dem Reynolds-Stress-Modell erzielt und veröffentlicht hat, in dieser Tabelle zum Vergleich angegeben.

Tabelle 14-20: Aufweitverhältnis und Ausbreitungswinkel des untersuchten Freistrahls berechnet aus den durchgeführten eigenen Messungen sowie den Simulationsergebnissen mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen und Vergleich mit Literaturwerten

	Aufweitverhältnis (*spreading rate*) [-]	Ausbreitungswinkel [°]
Eigene Messung	0,095	12,0
Spalart-Allmaras	0,135	24,3
Standard-k-ε	0,105	13,9
RNG-k-ε	0,117	17,0
Realizable k-ε	0,105	11,4
Standard-k-ω	0,131	28,5
SST-k-ω	0,107	12,5
Reynolds-Stress-Modell	0,114	16,2
Literaturangabe Balabel	0,086	-
Messungen Wilcox	0,086 – 0,095	-
Simulationen Wilcox Standard-k-ε	0,120	-
Simulationen Wilcox Standard-k-ω	0,073 – 0,371	-
Simulationen Wilcox Reynolds-Stress-Modell	0,135	-
Literaturangabe Tilton	-	10
Literaturangabe Schneider	-	12 – 15

Tabelle 14-20 zeigt, dass auch die mit den selbst durchgeführten Messungen ermittelte Strahlaufweitung sehr gut mit den Angaben aus der Literatur übereinstimmen. Der von Tilton (Tilton, 1997) angegebene Wert für die Strahlaufweitung erscheint etwas zu gering; auf welche Strahlgrenze er sich bei dieser Angabe bezieht, ist der Literaturstelle leider nicht zu entnehmen. Die Resultate der Modelle Standard-k-ε, Realizable-k-ε und SST-k-ω hinsichtlich dieser Kennzahlen sind ebenfalls ausgezeichnet. Alle anderen Modelle weichen vom Experiment schon mehr oder weniger stark ab. Auch hier ist auffällig, dass alle Turbulenzmodelle eine zu starke Ausweitung des Strahles vorhersagen. Betrachtet man die Ergebnisse des Standard-k-ε-Modells, so fällt auf, dass die älteren Simulationen, die von Wilcox (Wilcox, 1994) durchgeführt wurden, wesentlich schlechtere Ergebnisse liefern, als jene, die in der vorliegenden Arbeit präsentiert werden. Woran dieser signifikante Unterschied in der Vorhersagequalität des Modells liegt, kann an dieser Stelle nicht festgestellt werden. Die Modellformulierung, die entsprechenden Differentialgleichungen sowie die Modellparameter, die zur Anwendung gelangen sind in beiden Fällen exakt gleich (siehe FLUENT, 2005 und vergleiche mit Wilcox, 1994), also muss davon ausgegangen werden, dass unterschiedliche Problem-Setups die beobachteten Diskrepanzen zu verantworten haben. Um dies zu verifizieren sind eine Reihe zusätzlicher Simulationen erforderlich, in denen alle wesentlichen Einflussgrößen variiert werden sollten: Gitterstruktur und Gitterauflösung, Größe der Simulationsdomäne, Randbedingungen, Bereich der Reynolds-Zahl, verwendeter Strömungslöser. Möglicherweise verwendet die hier zur Anwendung gelangte Version des CFD-Solvers FLUENT eine etwas andere Modellformulierung, eine andere Implementierung oder eine andere Lösungsstrategie als in der Literaturarbeit verwendet wurde. Eine ähnliche Diskrepanz tritt auch bei einem Vergleich der Resultate des Reynolds-Stress-Modells auf. Auch hier berichtet die Arbeit von Wilcox von einer wesentlich schlechteren Eignung des Modells als in der vorliegenden Arbeit ermittelt werden konnte. Obwohl die genaue Formulierung des verwendeten Modells in der Arbeit von Wilcox (Wilcox, 1994) nicht evaluiert werden konnte, ist die große Abweichung der Simulationsergebnisse voneinander doch frappierend; umso mehr als eigentlich davon ausgegangen werden kann, dass mit dem Reynolds-Stress-Modell aufgrund des Modellaufwandes bessere Ergebnisse zu erzielen sein müssten. Hier müssten weiterführende Arbeiten und umfangreichere Analysen zur Ursacheneingrenzung durchgeführt werden. Die Ergebnisse, die Wilcox in seiner Arbeit für das dritte untersuchte Turbulenzmodell publiziert, jene des Standard-k-ω-Modells, decken sich aber sehr gut mit den selbst erzielten Resultaten.

Einen ersten Einblick in die turbulente Schwankungsbreite aller Geschwindigkeitskomponenten im turbulenten Freistrahl liefert eine Darstellung der einfachen Standardabweichung der aufgezeichneten Messwerte. Die Größe ist zwar keine quantitative jedoch ein recht anschauliches und leicht zu ermittelndes qualitatives Maß für die auftretende Turbulenzintensität. Abbildung 14-30 zeigt exemplarisch für den Verlauf der Axialgeschwindigkeit entlang der Strahlachse sowie auf zwei Profilen im Strahlkern und im Fernfeld die zu erwartende turbulente Fluktuationsbreite als positive und negative halbe Standardabweichung um den gemessenen Mittelwert und vergleicht diese Daten mit den Simulationsergebnissen, die mit dem Standard-k-ε- und dem SST-k-ω-Modell ermittelt werden konnten. Abbildung 14-30 zeigt, dass die gemessene Turbulenz qualitativ im Bereich der Kernlänge und im Übergangsgebiet am größten ist, mit zunehmendem Axialabstand reduziert sich die Turbulenz auf der Strahlachse. Entlang der beiden Profile ist die so ermittelte Turbulenz auch nicht gleich verteilt, sondern abhängig vom Abstand zur Strahlachse. Qualitativ lässt sich beurteilen, dass bei dem Profil im Fernfeld die maximale Turbulenz direkt auf der Strahlachse auftritt und zum

Rand hin abnimmt. Beim Profil im Nahfeld hingegen ist klar zu erkennen, dass die größte Fluktuationsbreite nicht auf der Strahlachse, sondern erst bei einem bestimmten Abstand von der Achse auftritt und zum Rand des Profils hin wieder abnimmt. Dieses Verhalten soll etwas weiter unten ausführlich und quantitativ beurteilt werden. An dieser Stelle sein noch einmal betont, dass in diesen Diagrammen keine Fehlerbereiche, sondern ein Maß für die Schwankungsbreite um den Mittelwert eingetragen ist, sich also durch einen Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Messwerten unter Berücksichtigung dieses Schwankungsbereiches keine zusätzlichen sinnvollen Aussagen treffen lassen.

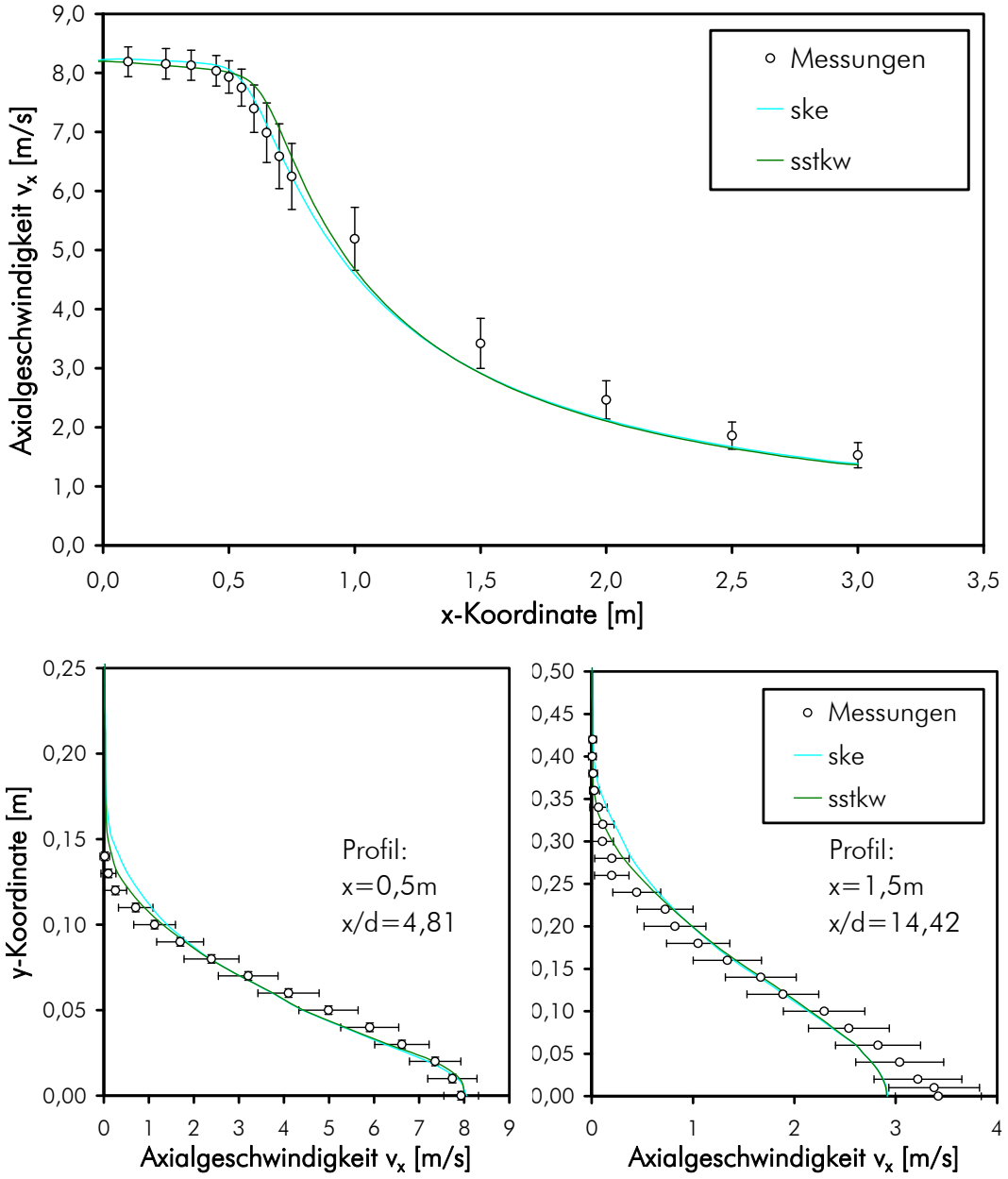


Abbildung 14-30: Axialgeschwindigkeit des turbulenten Freistrahls entlang der Strahlachse sowie auf zwei Profilen in den Entfernungen x=0,5m und x=1,5m zum Düsenaustritt (Messungen unter Angabe der jeweiligen turbulenten Schwankungsbreite sowie Simulationsergebnisse)

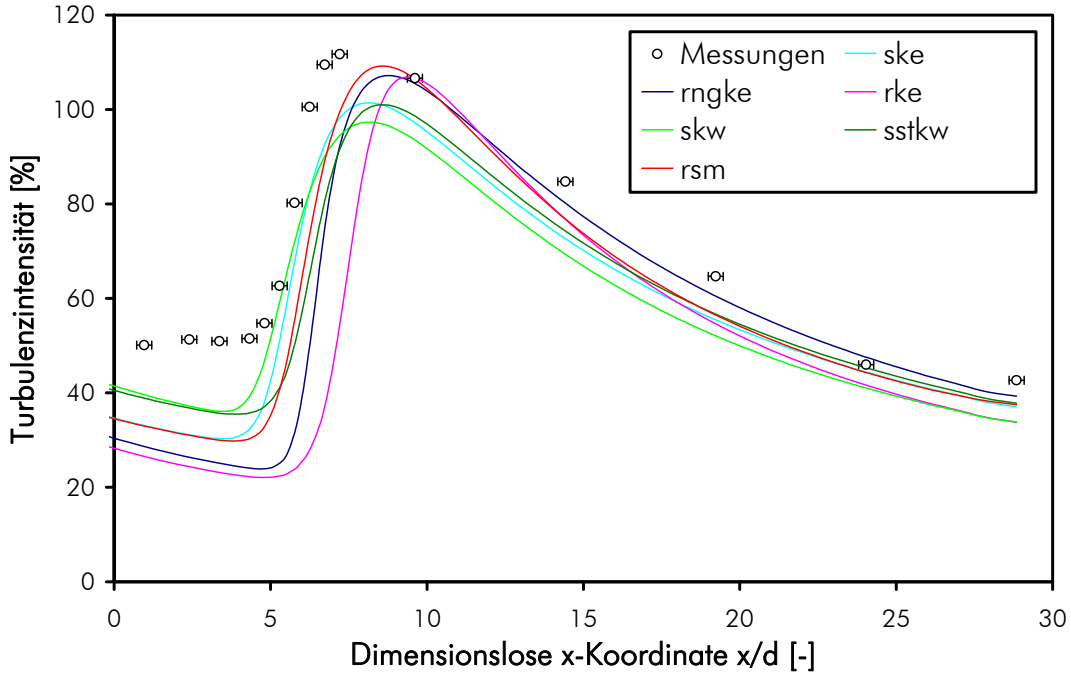


Abbildung 14-31: Turbulenzintensität entlang der dimensionslosen Strahlachse des turbulenten Freistrahls (eigene Messungen und Simulationsergebnisse)

Abbildung 14-31 zeigt nun als quantitative Größe für die Turbulenz die Turbulenzintensität (Definition siehe Gleichung 6.66) entlang der dimensionslosen Strahlachse und vergleicht die Ergebnisse der CFD-Simulation mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen mit den Messergebnissen für die Turbulenzintensität, welche aus der bereits erwähnten Standardabweichung der Messwerte abgeleitet werden kann. Die Abbildung zeigt sowohl qualitativ als auch quantitativ eine relativ gute Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation, was angesichts der schwierigen Materie der Turbulenzbeschreibung sehr ermutigend ist. Im Bereich des Strahlkernes ist die Turbulenz vergleichsweise gering und bleibt in etwa konstant (die CFD-Simulation sagt geringe Abnahme der Turbulenzintensität mit steigendem Abstand vom Düsenaustritt voraus). Gegen Ende des Strahlkernes steigt die Turbulenz dann kräftig an und erreicht knapp nach dem Erreichen der Kernlänge ihr Maximum. Nach Schlichting und Schneider (Schlichting et al., 1997; Schneider, 2003) liegt in diesem Bereich die Vereinigung der beiden Scherschichten, die sich vom Düsenrohr aus sowohl in den umgebenden Raum als auch ins Innere des Strahles ausbreiten und bei ihrem Zusammentreffen den Strahlkern begrenzen. Entsprechend den bereits ausgewerteten unterschiedlichen Kernlängen, die mit den analysierten Turbulenzmodellen erhalten werden können, ist dieses Maximum der Turbulenzintensität auch in unterschiedlichen Abständen vom Düsenaustritt zu erwarten. Der Vergleich der Lage des Turbulenzintensitätsmaximums mit den Kernlängen aus Tabelle 14-19 zeigt einen eindeutigen Zusammenhang zwischen diesen beiden Parametern. Die Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit den Messergebnissen hinsichtlich des Ortes als auch des Absolutbetrages dieses Maximums ist selbst für offensichtlich schlecht geeignete Modelle (z. B. Standard-k-ω) relativ gut (etwa 15 % Abweichung). Wie ursprünglich zu erwarten war, wird die beste Übereinstimmung mit dem Reynolds-Stress-Modell erzielt.

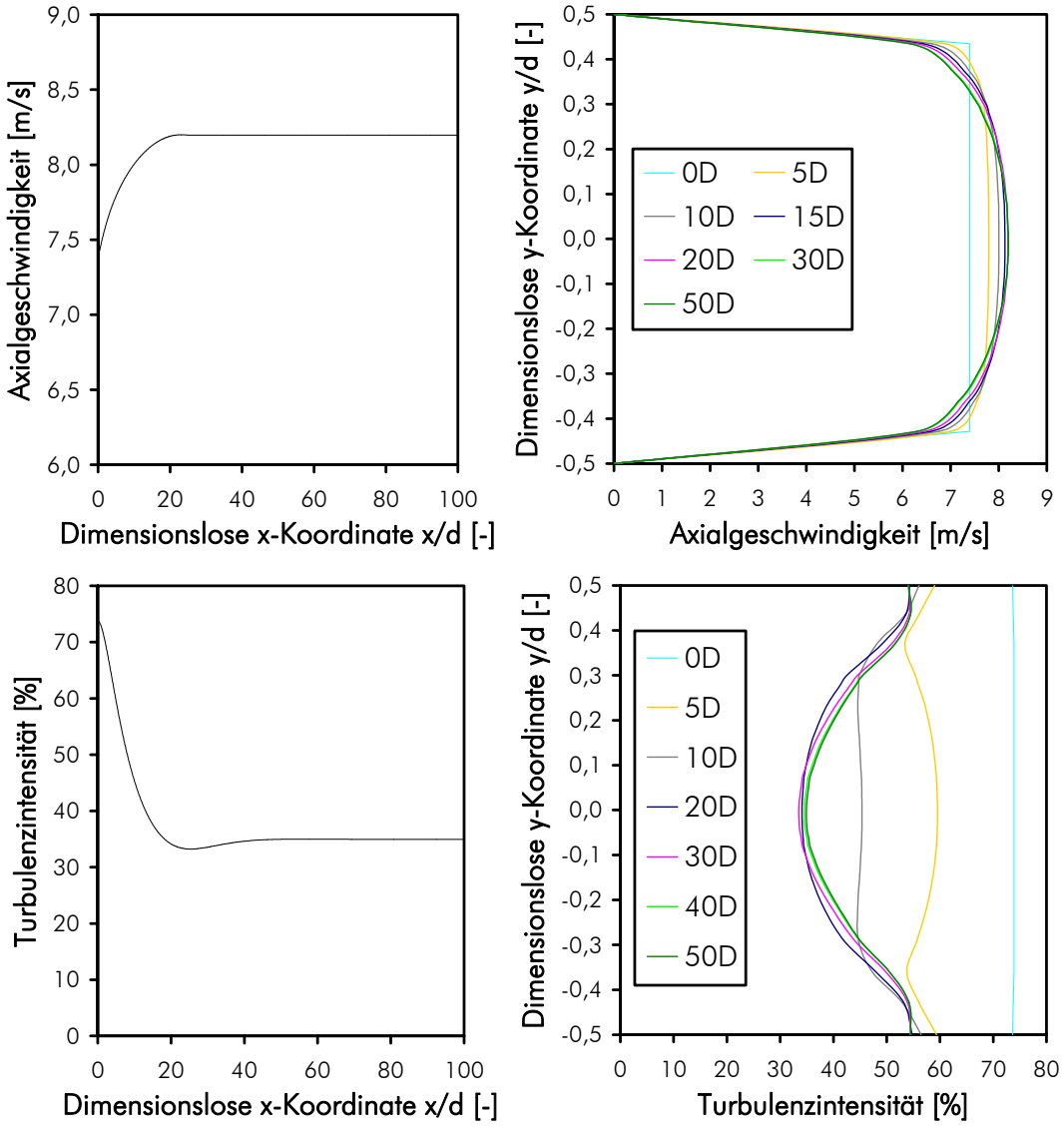


Abbildung 14-32: Axialgeschwindigkeit und Turbulenzintensität im kreisrunden Rohr entlang der dimensionslosen Rohrachse sowie auf relevanten Profilen quer zur Hauptströmungsrichtung (Simulationsergebnisse mit dem SST-k-ω-Modell bei uniformer Eintrittsrandbedingung hinsichtlich Geschwindigkeit und Turbulenz)

Hinsichtlich der empfohlenen Randbedingung einer über den Eintrittsquerschnitt konstanten Turbulenzintensität von 10 % (FLUENT, 2005) lässt Abbildung 14-31 einige Zweifel zu (direkt am Düsenaustritt beträgt die Turbulenzintensität je nach Turbulenzmodell 25 bis 45 %). Hierzu sei an dieser Stelle ein kurzer Einschub erlaubt. Eine genaue Auswertung des Verlaufes der Turbulenzintensität im Düsenrohr zeigt, dass direkt nach dem Eintritt die Turbulenzintensität von 10 % auf etwa 70 % ansteigt. Dies ist durch die Ausbildung des turbulenten Geschwindigkeitsprofiles im Rohr begründet, welches sich aus der Zulaufrandbedingung einer gleichverteilten Geschwindigkeit erst einstellen muss. Mit fortschreitender Ausbildung dieses Profils reduziert sich auch die Turbulenzintensität, bis sie nach einem Meter Rohrlänge, also direkt am Düsenaustritt, auf der Strahlachse einen Wert von etwa 45 % (je nach verwendetem Turbulenzmodell) annimmt. Nach einer Länge von 40 Rohrdurchmessern hat sich dann ein Wert von etwa 35 % eingestellt, der im weiteren Verlauf der Rohrströmung

konstant bleibt. Diese (simulationstechnische) Länge ist durchaus mit der physikalisch beobachtbaren Einlauflänge in einem Rohr zu vergleichen. Eine analoge Untersuchung wurde auch für die Ausbildung des turbulenten Axialgeschwindigkeitsprofils im Rohr durchgeführt. Hier kann gezeigt werden, dass bei einer Eintrittsrandbedingung von 7,38 m/s konstant über den Querschnitt eine Einlauflänge von etwa 20 Rohrdurchmessern erforderlich ist. Bei diesem Abstand hat sich das endgültige Geschwindigkeitsprofil mit einer Maximalgeschwindigkeit von etwa 8,2 m/s auf der Rohrachse eingestellt. Nach einer Länge von 10 Durchmessern ist das Profil noch nicht vollständig ausgebildet und die Geschwindigkeit auf der Rohrachse beträgt etwa 8,0 m/s. Zur Veranschaulichung der hier getroffenen Aussagen zur Rohrströmung bei uniformer Eintrittsrandbedingung sind in Abbildung 14-32 die Axialgeschwindigkeit und die Turbulenzintensität im kreisrunden Rohr entlang der dimensionslosen Rohrachse sowie auf einigen relevanten Profilen quer zur Hauptströmungsrichtung dargestellt. Die Ergebnisse hierzu stammen aus einer separaten CFD-Simulation eines Rohres (Durchmesser: 0,104 m, Länge: 100 Rohrdurchmesser) unter Anwendung des SST-k-ω-Modells.

Für präzise Simulationen ist also für die Turbulenzintensität eine Einlauflänge von 40 Rohrdurchmessern und für die Axialgeschwindigkeit eine Einlauflänge von 20 Rohrdurchmessern zu empfehlen. Verwendet man entsprechend der Literaturempfehlung lediglich 10 Rohrdurchmesser, so ist bei der Turbulenzintensität mit einem Fehler von knapp über 20 % und bei der Strömungsgeschwindigkeit mit einem Fehler von etwa 2,5 % aufgrund des nicht vollständig ausgebildeten Profils zu rechnen. Da die hier vorgestellten Simulationen hinsichtlich der Strömungsgeschwindigkeit aber gerade im Strahlkern hervorragende Übereinstimmung mit den Messergebnissen und Literaturwerten zeigen, ist davon auszugehen, dass diese nicht voll ausgebildete Strömung keinen wesentlichen Einfluss auf die stromabwärts liegende Strömung hat. Darüber hinaus ist natürlich auch festzuhalten, dass auch die hier gezeigten Messungen an einer Apparatur mit einer Einlauflänge von 10 Rohrdurchmessern durchgeführt wurden. Hinsichtlich der Turbulenzintensität ist durch die Anwendung einer Eintrittsrandbedingung von etwa 35 % statt der empfohlenen 10 % allerdings von einer deutlichen Verbesserung der Simulationsergebnisse auszugehen. Da bekannt ist, dass die Rohrströmung einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf die Strömung im Kerngebiet des Freistrahles hat (Wilcox, 1994), ist zu erwarten, dass bei einer Adaptierung der Eintrittsrandbedingung die in Abbildung 14-31 erkennbare Abweichung im Strahlkern zumindest stark reduziert werden kann. Da der Einfluss der Rohrströmung auf weiter stromabwärts gelegene Bereiche des Freistrahles schwindet, sind in Übergangsbereich und Strahl-Fernfeld keine Effekte durch diese Änderung zu erwarten. Vom ingenieurwissenschaftlichen Standpunkt aus ist die vorgegebene Randbedingung einer uniformen Geschwindigkeits- und Turbulenzintensitätsverteilung über den Zulaufquerschnitt bei Einhaltung einer Einlauflänge von 10 Rohrdurchmessern sicher gerechtfertigt und in der Praxis der Simulationsarbeit leicht handzuhaben. Eine Anpassung der Turbulenzintensität am Eintritt in die Simulationsdomäne ist sicher von Fall zu Fall zu überprüfen.

Abbildung 14-33 zeigt die turbulente kinetische Energie entlang der dimensionslosen Strahlachse und liefert eine ähnliche Aussage wie Abbildung 14-31 aber zunächst keinen weiteren Erkenntnisgewinn. Abbildung 14-34 zeigt schließlich die turbulente Viskosität (Wirbelviskosität) entlang der dimensionslosen Achse. Bei dieser Darstellung einer Turbulenzkenngröße lässt sich die schlechte Eignung des Standard-k-ω-Modells für die Freistrahlsimulation sehr gut abbilden, da hier signifikant höhere Wirbelviskositäten vorhergesagt werden.

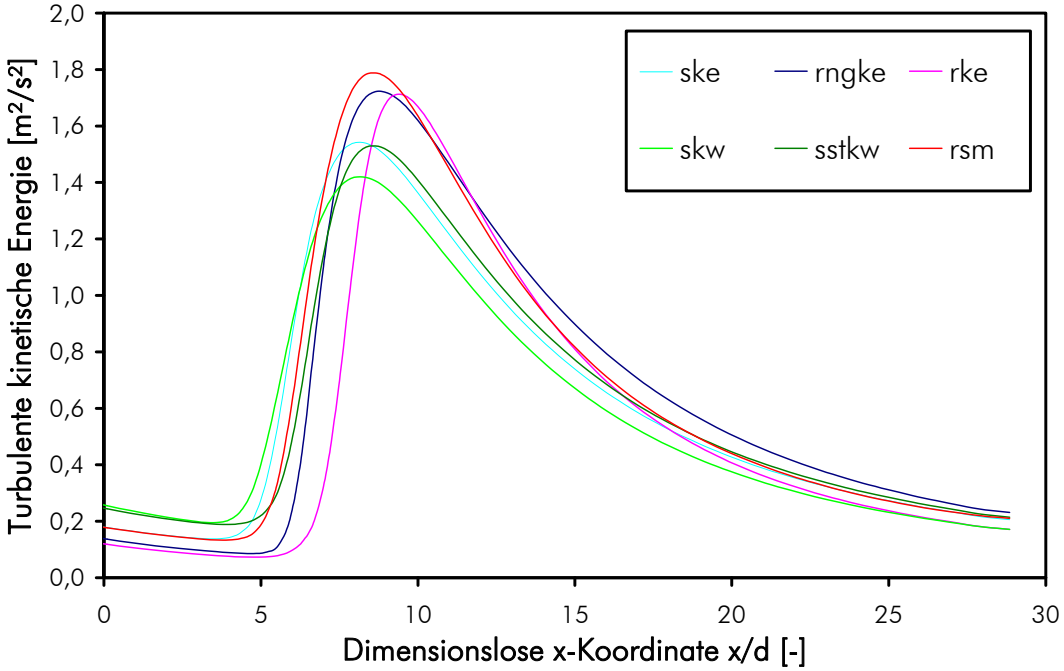


Abbildung 14-33: Turbulente kinetische Energie entlang der dimensionslosen Strahlachse (Simulationsergebnisse mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen)

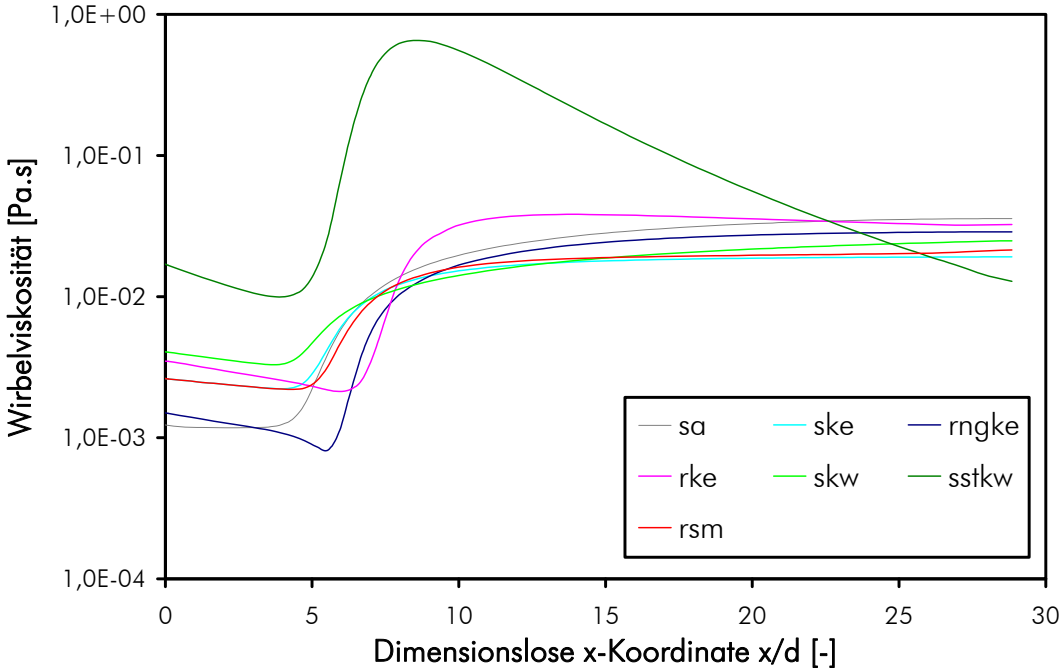


Abbildung 14-34: Wirbelviskosität entlang der dimensionslosen Strahlachse (Simulationsergebnisse mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen)

Abschließend ist mit dieser Abbildung auch ein wesentliches Merkmal turbulenter Strömungen darstellbar: die molekulare Viskosität (Stoffeigenschaft) wird durch den turbulenten Impulstransport ganz klar in den Hintergrund gedrängt. Die ermittelten Wirbelviskositäten liegen in einem Bereich von 10^{-3} bis 10^{-2} Pa.s während die molekulare Viskosität bei etwa $1{,}9*10^{-5}$ Pa.s liegt, also um Größenordnungen kleiner ist. Ist eine Strömung also einmal turbulent, so hat die molekulare Viskosität als Stoffeigenschaft keinen nennenswerten Einfluss

auf die Strömung mehr. Ob die Strömung turbulent oder laminar ist, hängt natürlich sehr wohl über die Reynoldszahl von der molekularen Viskosität ab.

Um einen umfassenden Eindruck von der Turbulenz im gesamten Strömungsfeld zu erhalten, ist wiederum die Auswertung von Profilen normal zur Hauptströmungsrichtung erforderlich. Trägt man nun die Turbulenzintensität auf solchen Profilen in verschiedenen Entfernungen zum Düsenaustritt auf, so kann die Entwicklung des Freistrahls, speziell der Bereich um den Strahlkern, hervorragend beobachtet werden. Diese Profile sind Abbildung 14-35 zu entnehmen. Die Ergebnisse der Simulationen mit den unterschiedlichen Turbulenzmodellen (mit Ausnahme des Modells nach Spalart-Allmaras; dieses Modell bildet die Turbulenzintensität nicht ab) sind hier mit Daten verglichen, welche aus den durchgeführten Experimenten gewonnen werden konnten. Als Maß für die Turbulenzintensität wurde hierbei die einfache Standardabweichung der fluktuierenden Axialgeschwindigkeit (ausgedrückt in %) aus den Messergebnissen extrahiert. Für eine exakte Beschreibung müssten auch die Fluktuationen in tangentialer und in radialer Richtung berücksichtigt werden und in jedem Punkt der Mittelwert dieser drei Komponenten berechnet werden. Da allerdings für den geraden Freistrahl lediglich Axialgeschwindigkeitskomponenten gemessen wurden, ist die erforderliche Datenbasis unvollständig. Deshalb ist die quantitative Aussagekraft dieser Abbildung beschränkt, die Messdaten liegen allesamt höher als die Simulationsergebnisse. Für den Drallstrahl (siehe Kapitel 14.4.2) wurden aber alle erforderlichen Geschwindigkeitskomponenten und deren Fluktuationsbreite gemessen und eine korrekte Berechnung der experimentellen Turbulenzintensität konnte durchgeführt werden. Die Analyse zeigt dort, dass die Fluktuationen in tangentialer und in radialer Richtung kleiner sind als in axialer Richtung (etwa 20 bis 25 %), was auch für den geraden Freistrahl angenommen werden kann. Dadurch wird auch der Mittelwert der drei Komponenten kleiner und die Simulationsergebnisse für den Freistrahl stimmen dann mit den experimentellen Resultaten sowohl qualitativ als auch quantitativ hervorragend überein (siehe Abbildung 14-35). Die Abbildung zeigt, dass auf den Profilen ausgeprägte Maxima der Turbulenzintensität auftreten und dass sich die Orte dieser Maxima mit fortschreitender Strahllauflänge vom Strahlrand zur Strahlachse hin verschieben. Das Maximum am düsennächsten Profil liegt bei einem Abstand von 0,052 m von der Strahlachse, also genau bei der Kante des Düsenaustritts (Rohrwand). Hier trifft die Rohrströmung auf das ruhende Umgebungsmedium und es bildet sich eine ausgeprägte Scherschicht aus. Diese Scherschicht breitet sich mit steigendem Abstand vom Düsenaustritt sowohl in Richtung Strahlachse als auch in Richtung Umgebung aus, der Strahl weitet sich auf. Das Maximum der Turbulenzintensität verschiebt sich immer weiter in Richtung Zentrum, welches bei einem Düsenabstand von etwa 1,5 m erreicht wird. Mit Ausnahme des Standard-k-ω-Modells liefern alle Turbulenzmodelle sehr ähnliche Resultate, die auch mit den Messergebnissen sehr gut übereinstimmen. Auf Basis dieser Auswertung ist nicht zu entscheiden, welches Modell am besten geeignet ist, es zeigt sich lediglich einmal mehr, dass das Standard-k-ω-Modell nicht geeignet ist und dass das Reynolds-Stress-Modell mit wachsender Entfernung vom Düsenaustritt zunehmend abweichende Ergebnisse liefert.

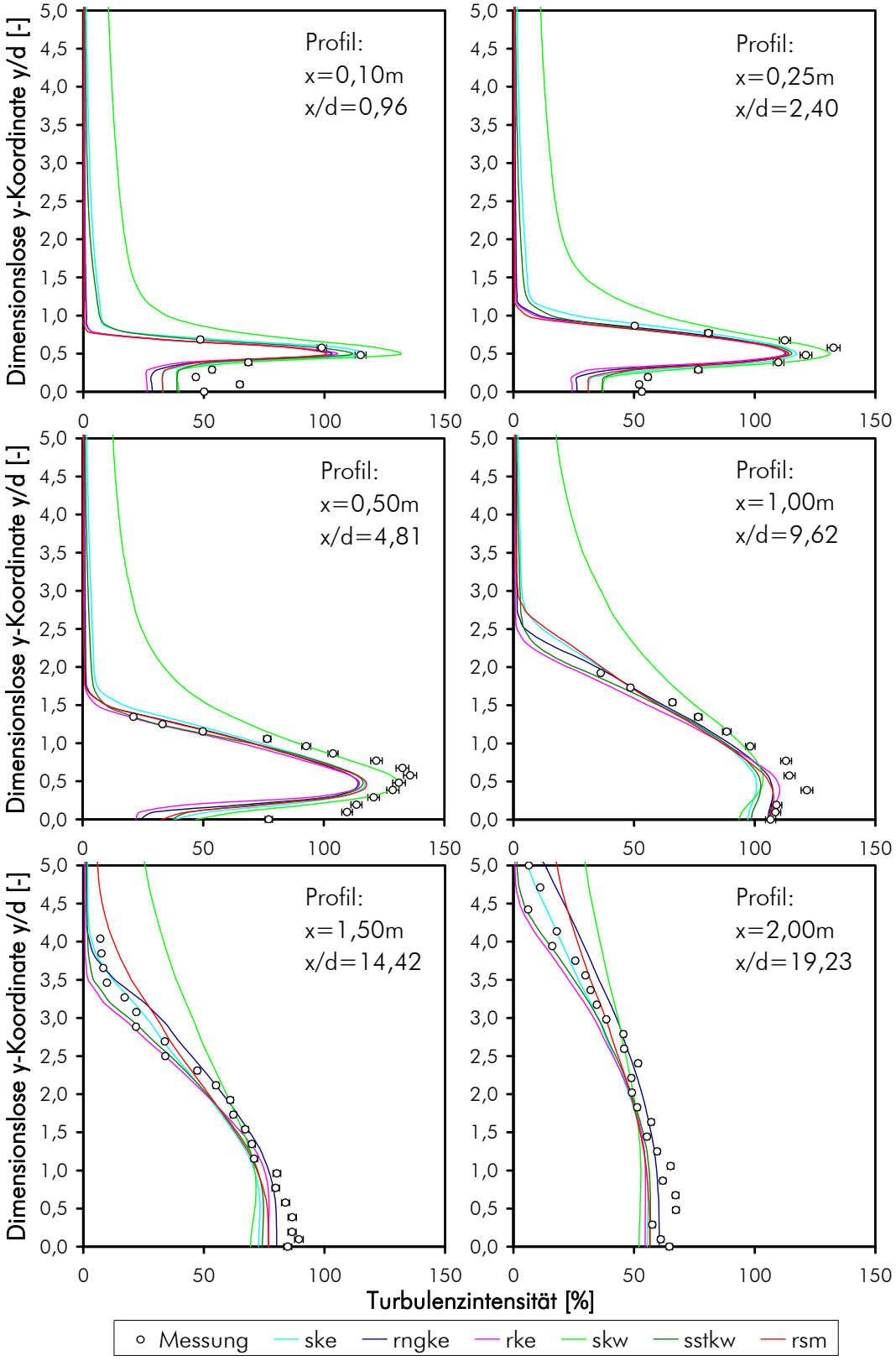


Abbildung 14-35: Profile der Turbulenzintensität des turbulenten Freistrahls in verschiedenen Entfernungen zum Düsenaustritt (Messungen und Simulationsergebnisse)

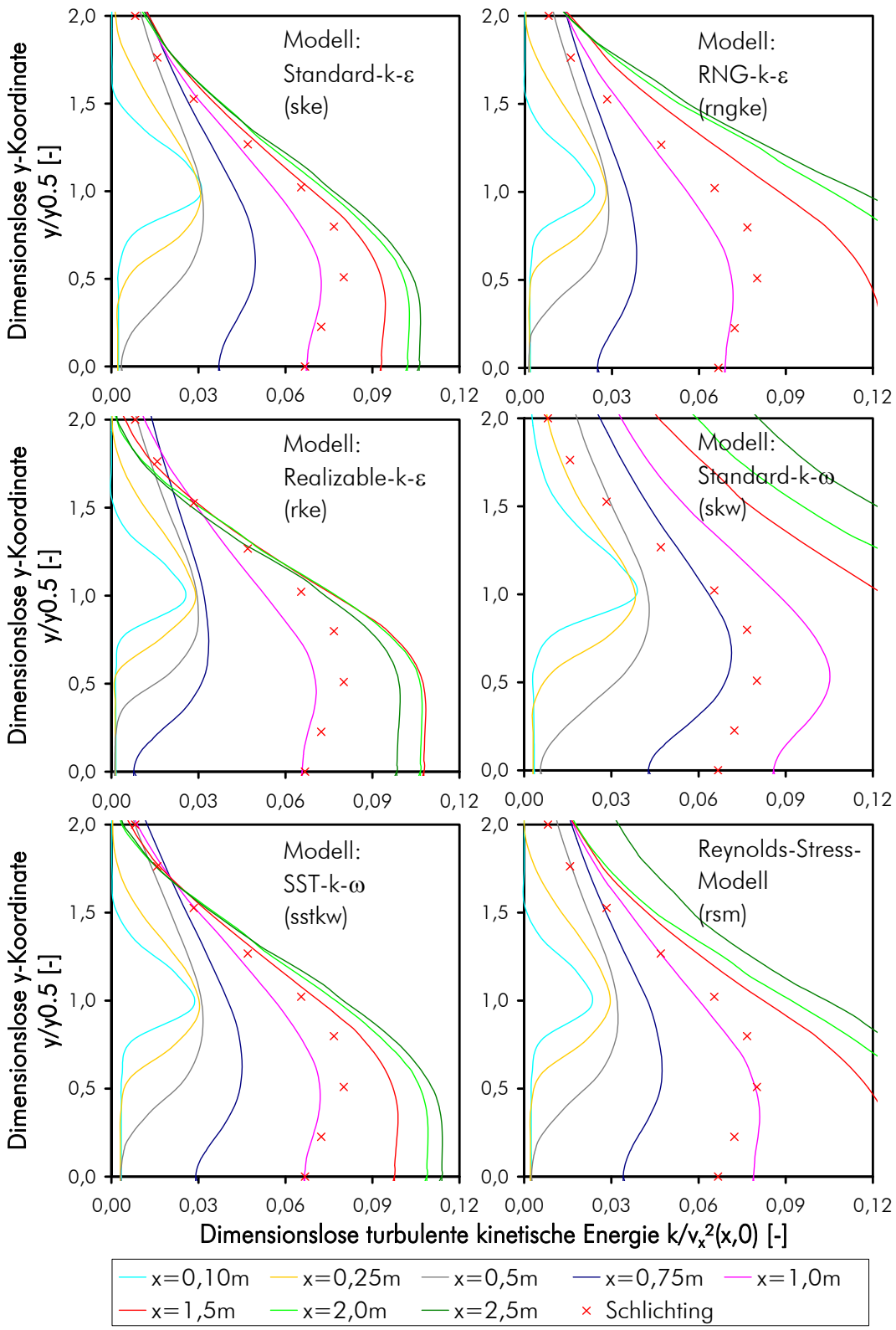


Abbildung 14-36: Profile der dimensionslosen turbulenten kinetischen Energie für den turbulenten Freistrahl: Simulationsergebnisse mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen im Vergleich zu Literaturergebnissen nach Schlichting (Schlichting et al., 1997)

Abschließend soll an dieser Stelle noch versucht werden, die ermittelten Ergebnisse mit Literaturdaten zu vergleichen. Abbildung 14-36 zeigt zu diesem Zweck die dimensionslose turbulente kinetische Energie auf Profilen in verschiedenen Entfernungen zum Düsenaustritt

(Nahfeld, Übergangsbereich und Fernfeld). Die dimensionsbehaftete turbulente kinetische Energie wird zu diesem Zweck durch Division durch das Quadrat der lokalen Profilmaximumsgeschwindigkeit $v_x(x,0)$ (jeweils auf der Strahlachse) dimensionslos gemacht. Wie Abbildung 14-33 zeigt, sinkt die turbulente kinetische Energie mit zunehmendem Abstand vom Düsenaustritt im Fernfeld zwar stark ab, die dimensionslose Darstellung setzt die turbulente kinetische Energie aber ins Verhältnis zur lokalen Geschwindigkeit am Profil, wodurch die Größenordnungen ähnlich und die Profile untereinander besser vergleichbar sind. Als Ortskoordinate entlang der einzelnen Profile wurde eine dimensionslose y-Koordinate gewählt, die aus der dimensionsbehafteten Raumkoordinate y durch Division durch $y0.5$ (Halbwertsbreite des jeweiligen Profils) erhalten wird. Diese Darstellungsform wurde von Schlichting (Schlichting et al., 1997) vorgeschlagen und erlaubt eine übersichtliche Darstellung und einen guten Vergleich der einzelnen Profile. In Abbildung 14-36 sind die Ergebnisse der CFD-Simulationen mit den unterschiedlichen Turbulenzmodellen dargestellt und mit experimentellen Daten von Shih et al. (Shih et al., 1990) verglichen, welche in aufbereiteter Form der Arbeit von Schlichting (Schlichting et al., 1997) entnommen werden konnten. Diese Vergleichswerte dienen jedoch nur zur Evaluierung der Größenordnung, da sie streng genommen nur für den Spezialfall des ebenen Freistrahles gelten (Schlichting et al., 1997) und hier auch nur für weit stromabwärts gelegene Profile (Shih et al., 1990) für die gilt: $x/d_D>15$. Speziell aufgrund der geometrischen Unterschiede der Freistrahlen ist der direkte quantitative Vergleich mit Vorsicht zu genießen. Die Darstellung zeigt einmal mehr drastische Unterschiede in den Ergebnissen, welche mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen erhalten werden können. Während das Standard-k-ε- und das SST-k-ω-Modell sehr ähnliche Ergebnisse liefern, weichen die Resultate des RNG-k-ε- sowie des Realizable-k-ε-Modells stark ab. Ersteres sagt speziell im Fernfeld signifikant höhere turbulente kinetische Energie vorher, während letzteres zwar größenordnungsmäßig vergleichbare Werte, jedoch eine Trendumkehr im Fernfeld vorhersagt (mit zunehmendem Abstand vom Düsenaustritt sinkt die dimensionslose turbulente kinetische Energie wieder ab). Das Standard-k-ω-Modell sowie das Reynolds-Stress-Modell zeigen in dieser Darstellung eine zu hohe dimensionslose turbulente kinetische Energie, was aber nicht an einer Überschätzung der dimensionsbehafteten turbulenten kinetischen Energie liegt (siehe auch Abbildung 14-31), sondern an der Tatsache, dass die Axialgeschwindigkeiten und damit die Bezugsgeschwindigkeit für die Berechnung der dimensionslosen Größe zu niedrig berechnet werden.

Sollen nun die Verläufe der Simulationsergebnisse mit den Literaturdaten von Shih et al. (Shih et al., 1990) verglichen werden, so muss, wie bereits erwähnt, berücksichtigt werden, dass die Literaturdaten am ebenen Freistrahl gewonnen wurden. Unter dieser Prämisse ist die Übereinstimmung der meisten Turbulenzmodelle relativ gut. Wieder wird deutlich, dass die Übereinstimmung für das Standard-k-ε-, das Realizable-k-ε-, sowie das SST-k-ω-Modell am besten ist. Die Abweichungen für die anderen Turbulenzmodelle sind speziell mit zunehmendem Düsenabstand vergleichsweise hoch. Da sich nach Shih et al. (Shih et al., 1990) aber gerade in den weit stromabwärts gelegenen Bereichen eine Selbstähnlichkeit auch für die Turbulenzgrößen einstellt, sollte die Übereinstimmung dort am besten sein. Darüber hinaus gilt, dass mit zunehmendem Abstand vom Düsenaustritt die Profile immer ähnlicher werden und nach Erreichen der Selbstähnlichkeit gleich aussehen müssen. Aus diesem Grund geben Shih et al. (Shih et al., 1990) auch nur ein Profil an, welches für den voll ausgebildeten selbstähnlichen Bereich gilt. Dieses Qualitätskriterium, dass die Verläufe der Profile mit zunehmendem Abstand vom Düsenaustritt gegen ein „endgültiges" Profil konvergieren, erfüllen nur die drei am besten geeigneten Modelle mit ausreichender Genauigkeit. Die Überein-

stimmung dieses „endgültigen" Profils bei voll ausgebildeter Selbstähnlichkeit ist für diese drei Turbulenzmodelle zwar nicht perfekt aber dennoch relativ gut. Dass die Modelle das in den Literaturdaten abgebildete lokale Minimum auf der Strahlachse nicht abbilden, liegt nach Einschätzung des Autors daran, dass ein solches bei einem runden Freistrahl nicht in dieser Form auftritt. Diese Hypothese kann aber aufgrund mangelnder Arbeiten in der Literatur nicht bestätigt werden. Auf diesen Mangel an publizierten Daten machen auch Shih et al. (Shih et al., 1990) in ihrer Arbeit aufmerksam. Die selbst durchgeführten Messungen erlaubten lediglich die Ermittlung der Turbulenzintensität, aus der die turbulente kinetische Energie nicht direkt ableitbar ist, wodurch auch hierdurch die aufgestellte Hypothese nicht untermauert werden kann. Betrachtet man aber die Profile der Turbulenzintensität in Bereichen der voll ausgebildeten Selbstähnlichkeit, so erscheint die Hypothese des fehlenden lokalen Turbulenzminimums (auch in dimensionsloser Formulierung) auf der Strahlachse als plausibel.

Da bisher lediglich die Ergebnisse der genannten Turbulenzmodelle mit ihren jeweiligen Standardeinstellungen sowie mit den Standard-Wandfunktionen diskutiert wurden, soll in der Folge sehr kurz und taxativ darauf eingegangen werden, welche Verbesserung die Anwahl von Zusatzoptionen sowie die Anwendung von höheren Wandfunktionen bei den jeweiligen Turbulenzmodellen bewirken können.

Spalart-Allmaras: Die Suboption „*Strain/Vorticity based production*" bringt keine Verbesserung, höhere Wandfunktionen können mit diesem Turbulenzmodell in der verwendeten Version des CFD-Solvers nicht implementiert werden.

Standard-k-ε: Höhere Wandfunktionen bringen keine weitere Verbesserung, die Suboption „*Pressure gradient effects*", welche bei Verwendung der „*Enhanced wall function*" anwählbar ist, hat (wohl aufgrund der geringen auftretenden Druckgradienten in der Simulationsdomäne) keine Auswirkungen.

RNG-k-ε: Die Suboption „*Differential viscosity model*" bringt geringfügige Verbesserung im Übergangsbereich und im Fernfeld, die Option „*Swirl dominated flow*" bringt keine Verbesserung. Trotzdem holt das Modell gegenüber den besser geeigneten Modellen nichts Wesentliches auf. Die Anwendung höherer Wandfunktionen hat keinen Einfluss.

Realizable-k-ε: Die Funktion „*Pressure gradient effects*" bringt marginale Verbesserungen in der Beschreibung des Fernfeldes während die höheren Wandfunktionen das Ergebnis im Fernfeld drastisch verschlechtern (die Axialgeschwindigkeiten zeigen ein lokales Profil-Minimum auf der Strahlachse). Keine Suboption des Modells ermöglicht jedoch bessere Ergebnisse, als mit dem Standard-k-ε zu erzielen sind.

Standard-k-ω: Durch die Auswahl der Option „*Shear flow corrections*" wird die Qualität der Ergebnisse des Modells für den Freistrahl signifikant verbessert. Die Strahlform wird schlanker und entspricht relativ gut den experimentellen Ergebnissen. Allerdings wird die Geschwindigkeit auf der Achse mit dieser Option um einen Faktor 1,4 bis 1,7 überschätzt, während ohne die Option dort viel zu niedrige Geschwindigkeiten ermittelt wurden. Ein Diagramm, welches die Axialgeschwindigkeit auf verschiedenen Profilen darstellt, um die Wirkung der unterschiedlichen Zusatzoptionen zu demonstrieren, ist in Abbildung 14-37 gegeben. Da die Profile eigentlich mit den experimentellen Werten sowie den Literaturergebnissen sehr gut übereinstimmen, nur im Bereich der Strahlachse viel zu hoch sind, ist anzunehmen, dass die Impulserhaltung im Strahl verletzt wird und damit das Ergebnis unphysikalisch ist.

Aufgrund dessen ist anzunehmen, dass die Vorhersagequalität des Standard-Modells für den betrachteten Testfall auch unter Ausschöpfung der Zusatzoption nicht adäquat ist; das Modell liefert auch mit Option nicht die besten Ergebnisse aller untersuchten Turbulenzmodelle. Die Suboption „*Transitional flow*“ hat keinen Einfluss auf die Ergebnisse, wohl aufgrund der klar turbulenten Reynoldszahl.

SST-k-ω: Die Funktion „*Transitional flow option*“ bewirkt geringfügige Verbesserung der Übereinstimmung der Geschwindigkeiten auf der Strahlachse im Übergangsbereich und im Fernfeld. Damit einher geht jedoch eine Verschlechterung im Nahfeld und bei der Beschreibung des Strahlkernes, weshalb in Summe keine Qualitätssteigerung des Modells mehr zu verzeichnen ist.

Reynolds-Stress-Modell: Wie bei den meisten Modellen bewirkt die Anwendung höherer Wandfunktionen keine Verbesserung der Simulationsergebnisse, auch die Suboption „*Wall boundary condition from k-equation*“ hat keinen Einfluss auf den Freistrahl. Die beiden Suboptionen „*Quadratic pressure strain*“ und „*Wall reflection*“ zeigen nur in einigen Strömungszonen marginale Verbesserungen. Die Auswahl von Suboptionen für das Reynolds-Stress-Modell ist damit hinsichtlich der Verbesserung der Vorhersagequalität des Modells nicht zielführend.

Unter dem Strich lässt sich abschließend die Aussage treffen, dass am untersuchten turbulenten Freistrahl keine außergewöhnlichen Bedingungen auftreten, die die Auswahl von Zusatzoptionen erfordern (stark rotierende Strömungen, Strömungen nahe des laminar-turbulenten Übergangsgebietes, schallnahe Strömungen und große Druckgradienten). Da der Freistrahl keine wandgebundene turbulente Scherströmung, sondern eine freie turbulente Scherströmung darstellt, ist dass Ergebnis, dass der Einsatz höherer Wandfunktionen wirkungslos ist, plausibel. Die verbesserte Abbildung der turbulenten Rohrströmung, die durch höhere Wandfunktionen im Detail durchaus zu erreichen ist, zeigt offensichtlich nur einen untergeordneten Einfluss auf den Freistrahl selbst.

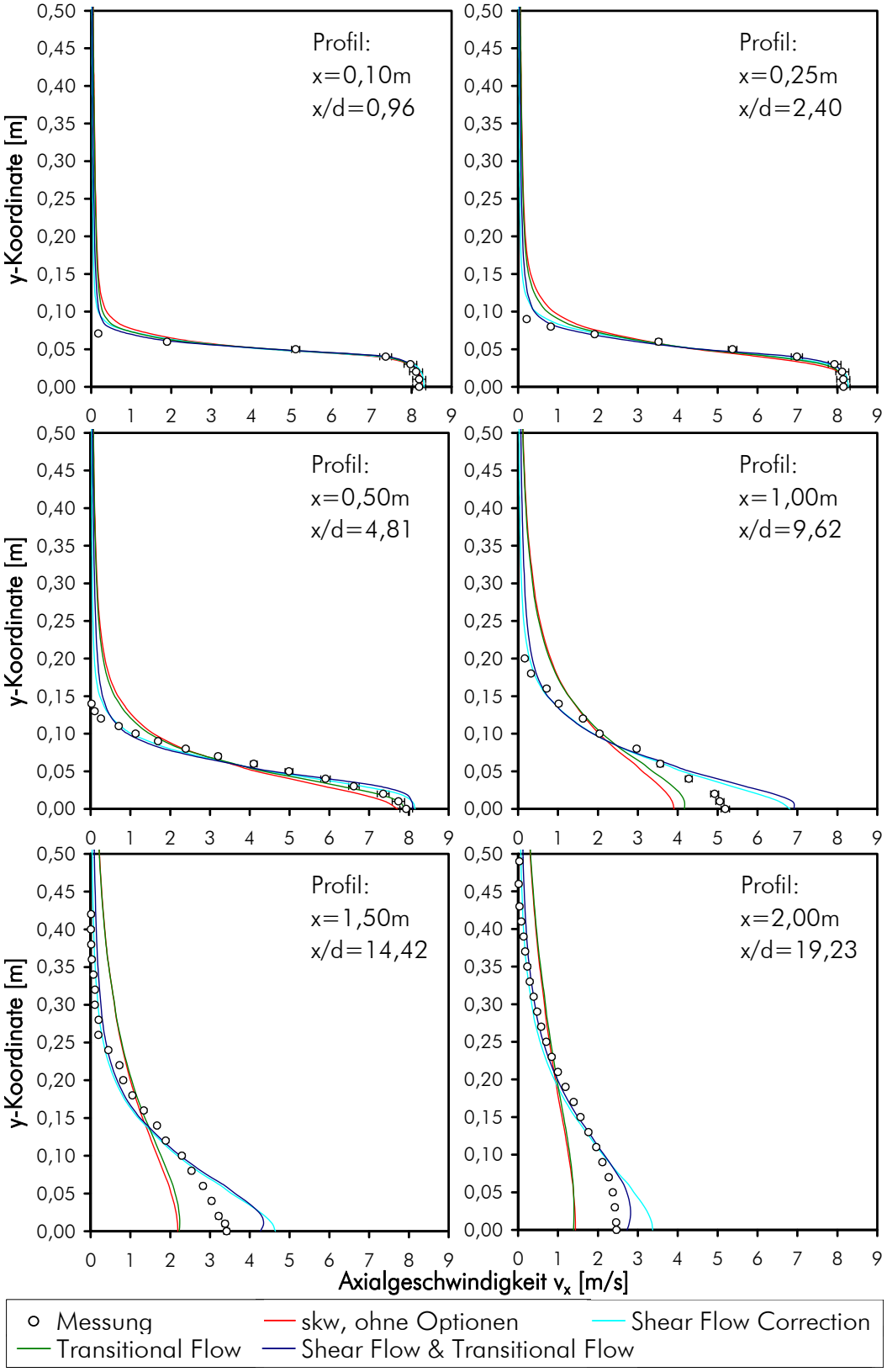


Abbildung 14-37: Axialgeschwindigkeitsprofile in verschiedenen Entfernungen x zum Düsenaustritt (Messungen und Simulationsergebnisse mit dem Standard-k-ω-Modell

14.4.2 Schwach verdrallter Freistrahl mit Prallplatte

Manche Turbulenzmodelle haben bekanntermaßen Schwierigkeiten mit stark rotierenden Strömungen sowie mit stark gekrümmten Pfadlinien (Wilcox, 1994). Die im Verbrennungsapparat angewandten Dralldüsen mit Prallplatten (siehe Abbildung 14-10) unterscheiden sich in diesen beiden Punkten vom geraden Freistrahl, weshalb zur Einschätzung der Eignung von Turbulenzmodellen für die Simulation des Gesamtapparates auch die Dralldüse in Betracht gezogen werden muss. Ein Maß für die Rotation einer Strömung oder des Dralles, den ein Drallkörper verursacht, ist die vereinfachte Drallzahl nach Günther (Günther, 1984), deren Definition in Gleichung 14.79 gegeben ist. Für den betrachteten Drallkörper mit einem Anstellwinkel von 20° ergibt sich für die vereinfachte Drallzahl ein Wert von 0,243, was nach Günther (Günther, 1984) einer schwachen Verdrallung und geringer Strömungsrotation entspricht.

$$\vartheta = \frac{2}{3}\tan\delta_0 \tag{14.79}$$

Aufgrund der Teilabdeckung des Düsenaustrittes durch die Prallplatte tritt bei diesem Testfall neben der Strömungsrotation auch eine stagnante Zone mit Rückströmungsbereich und stärker gekrümmten Stromlinien auf. Aufgrund der Ausbildung einer Rückströmungszone ergibt sich auf der Strahlachse ein markanter Punkt, an dem die Strömung stillsteht (Betrag der Gasgeschwindigkeit gleich Null). Die Struktur der Strömung im Nahbereich des Düsenaustrittes ist zur Verdeutlichung in Abbildung 14-38 durch Strömungspfadlinien auf einem Vertikalschnitt durch die Strahlachse dargestellt (Ergebnisse der Simulation mit dem SST-k-ω-Turbulenzmodell).

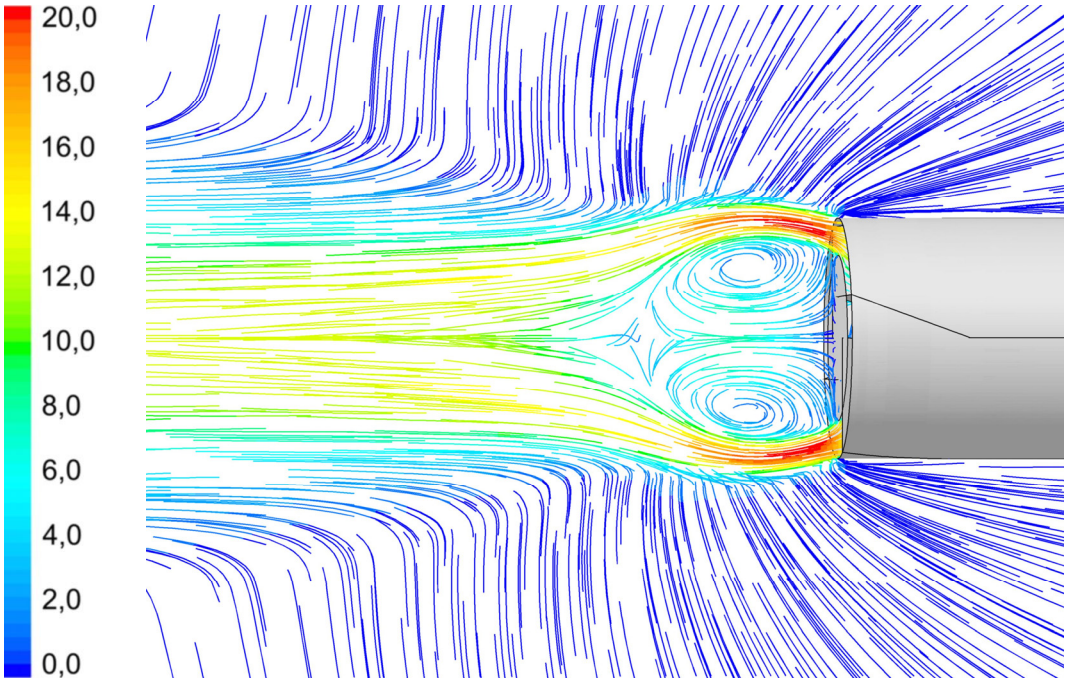


Abbildung 14-38: Strömungspfadlinien für den schwach verdrallten Freistrahl mit Prallplatte eingefärbt nach dem Betrag der Gasgeschwindigkeit (0 – 20 m/s)

Für die hier untersuchte spezielle Düsenbauform ist in der Literatur erwartungsgemäß keine genaue Entsprechung dokumentiert, weshalb zur Einschätzung der Eignung verschiedener Turbulenzmodelle zur Strömungssimulation auf eigene experimentelle Untersuchungen nicht verzichtet werden kann. Rein qualitative Vergleiche hinsichtlich Strömungsformen und Größenordungen sind aber auch mit vorhandenen Literaturarbeiten durchführbar. Hui et al (Hui et al., 1999) haben beispielsweise relativ detaillierte experimentelle Arbeiten über teilabgedeckte Freistrahlen publiziert, während bei Liang et al. (Liang et al., 2008) rotierende Freistrahlen und gerade Freistrahlen in rotierenden Umgebungsfluiden untersucht wurden. Die folgende quantitative Analyse des betrachteten Drallstrahles erfolgt aber ausschließlich mit selbst durchgeführten Messungen, deren Methoden im vorherigen Kapitel der geraden Freistrahlen ausführlich entwickelt und validiert werden konnten.

Zunächst sollen aber ähnlich wie beim geraden Freistrahl dreidimensionale Contour-Darstellungen, die direkt aus den CFD-Resultaten erhalten werden können, einen ersten Überblick über die Strömung und die Strahlform geben. Ähnlich wie beim geraden Freistrahl wird hierfür die 1%-Strahlgrenze gewählt, also eine Fläche konstanter Axialgeschwindigkeit von 0,07378 m/s, welche dann nach dem Betrag des lokalen Gesamtgeschwindigkeitsvektors eingefärbt ist. Im Gegensatz zum geraden Freistrahl besteht diese Fläche beim Drallstrahl mit Prallplatte nicht nur aus einer, sondern aus zwei abgeschlossenen Flächen. Eine Isofläche liegt außerhalb des Strahles und hüllt diesen ein, eine zweite Isofläche liegt innerhalb des Strahles und hüllt den Nachlaufbereich hinter der Prallplatte ein. Um beide Flächen sichtbar zu machen und zu vermeiden, dass die zweite durch die erste Fläche verdeckt wird, werden beide Flächen „aufgeschnitten" dargestellt. Das heißt, es ist nur jene Hälfte der Isofläche dargestellt, welche eine positive y-Koordinate aufzuweisen hat (siehe Abbildung 14-6). Abbildung 14-39 zeigt hierbei die Ergebnisse der Simulationen mit den Turbulenzmodellen Spalart-Allmaras, Standard-k-ε, RNG-k-ε und Realizale-k-ε, während in Abbildung 14-40 die Ergebnisse der Modelle Standard-k-ω, SST-k-ω und des Reynolds-Stress-Modells dargestellt sind. Die Abbildungen beinhalten jeweils links eine Übersicht über den gesamten Strahl, während rechts eine Detailansicht des Nachlaufbereiches hinter der Prallplatte dargestellt ist. Die Geschwindigkeitsskalen der beiden Darstellungen unterscheiden sich voneinander, da um den Nachlaufbereich höhere Radial- und Tangentialkomponenten auftreten als um den Strahlrand. Aus demselben Grund unterscheiden sich beide Skalen auch von der Skala, welche für den geraden Freistrahl verwendet wurde, weshalb der direkte Vergleich beider Strahlen etwas erschwert wird.

Auch hier ist die kegelförmige Aufweitung des Freistrahls sowie der Bereich verstärkten Ansaugens von Gas aus der ruhenden Umgebung in den Strahl sehr deutlich zu erkennen. Der Übergang zwischen diesem Ansaugbereich und dem Strahlkegel scheint beim Drallstrahl mit Prallplatte abrupter ausgeprägt zu sein (zumindest bei den meisten Turbulenzmodellen). Direkt stromabwärts des Nachlaufbereiches ist die Isofläche wohl aufgrund erhöhter Turbulenz verworfen und in Falten gelegt; auch dies je nach Turbulenzmodell unterschiedlich stark ausgeprägt. Während das Standard-k-ε-, das Realizable-k-ε, das SST-k-ω- und auch das Reynolds-Stress-Modell qualitativ ähnliche Resultate für die Strahlgrenze und den Strahlöffnungswinkel liefern, weichen die anderen Modelle zum Teil in abenteuerlicher Weise von diesem Verlauf ab. Die Form des Nachlaufbereiches ist jedoch für alle Modelle nahezu ident. Das Reynolds-Stress-Modell zeigt schließlich den vom geraden Freistrahl bekannten Effekt des sich mit zunehmender Strahllänge wieder verjüngenden Strahles. Auch hier ist wiederum festzuhalten, dass die damit auftretende keulenartige Form der Strahlgrenze im Prinzip

physikalisch korrekt ist, die genaue Lage der Verjüngung und der Ort, an dem die Strahlgrenze die x-Achse schneidet allerdings mit dem gewählten Messaufbau nicht zu erfassen ist. Wie beim geraden Freistrahl muss von einer Beeinflussung der Keulenform durch die Domänenränder ausgegangen werden, wodurch die auf diesem Gitter abgebildete Keulenform als unzutreffend beurteilt werden kann. Für die vorliegende Arbeit stellt diese Tatsache aber, wie bereits für den geraden Freistrahl diskutiert, keine Einschränkung dar.

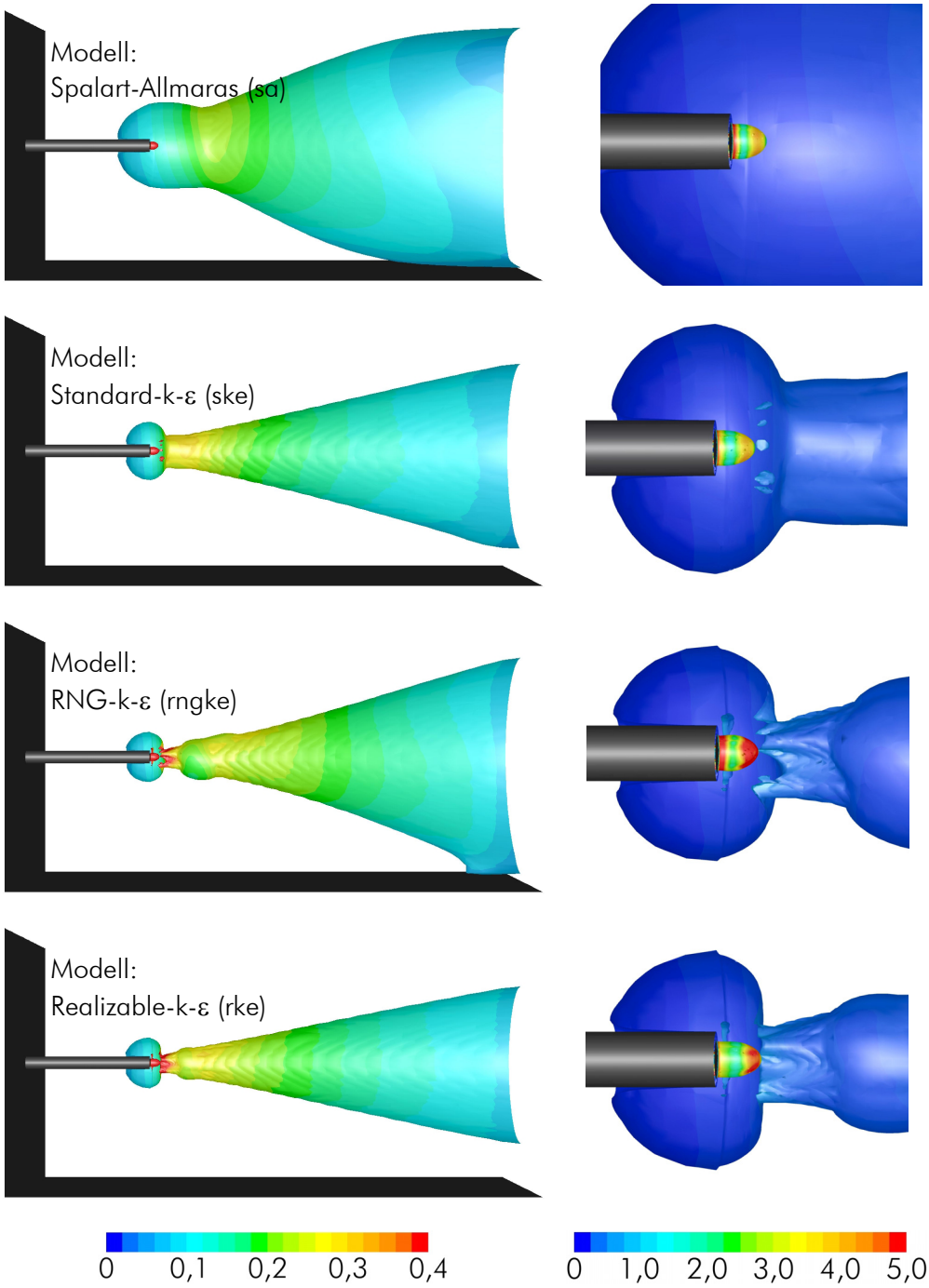


Abbildung 14-39: Betrag des Gasgeschwindigkeitsvektors aufgetragen auf einer Fläche konstanter Axialgeschwindigkeit von 1 % der durchschnittlichen Axialgeschwindigkeit am Düsenaustritt (Ergebnisse der Turbulenzmodelle sa, ske, rngke und rke); links: Übersicht Drallstrahl (0 – 0,4 m/s), rechts: Detail Düsenaustritt (0 – 5,0 m/s)

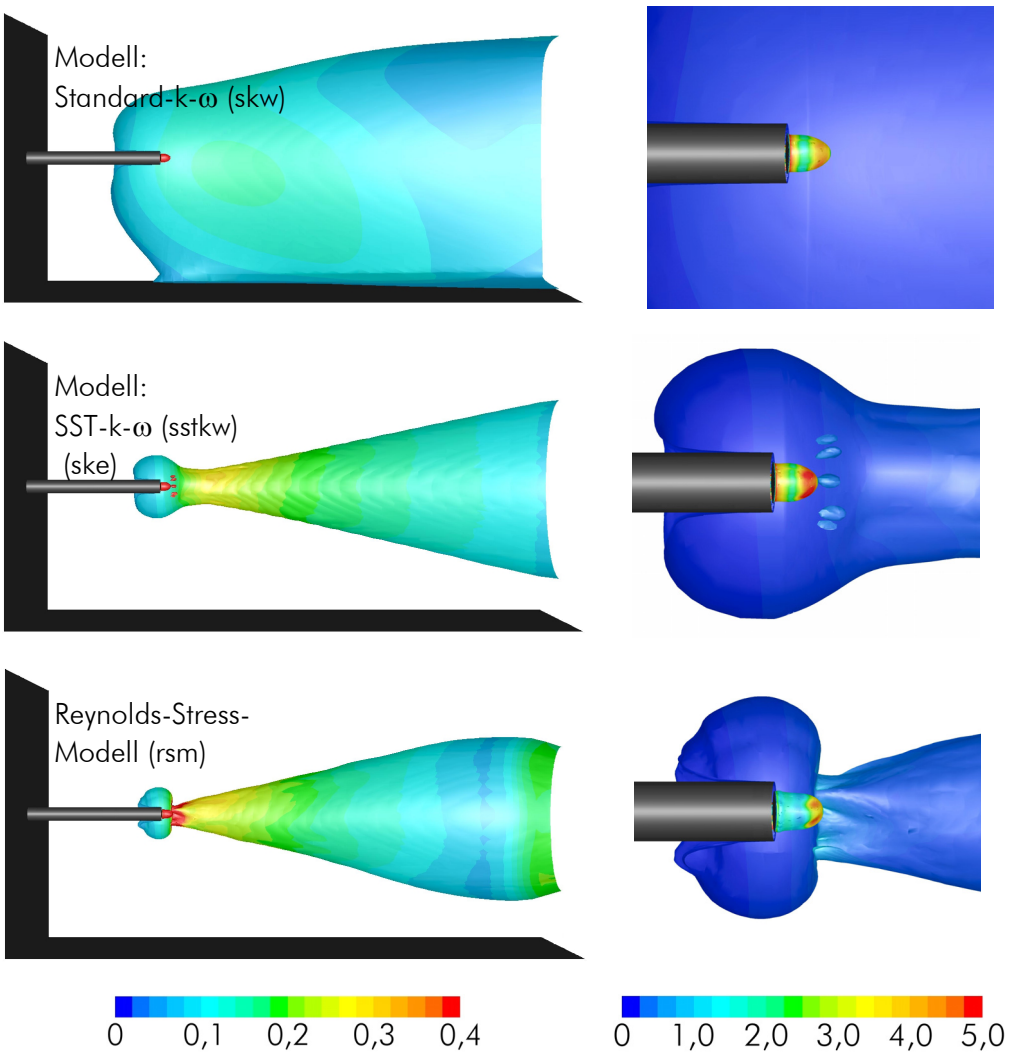


Abbildung 14-40: Betrag des Gasgeschwindigkeitsvektors aufgetragen auf einer Fläche konstanter Axialgeschwindigkeit von 1 % der durchschnittlichen Axialgeschwindigkeit am Düsenaustritt (Ergebnisse der Turbulenzmodelle skw, sstkw und rsm); links: Übersicht Drallstrahl (0 – 0,4 m/s), rechts: Detail Düsenaustritt (0 – 5,0 m/s)

Eine qualifizierte Validierung der einzelnen Turbulenzmodelle ist mit diesen Darstellungen kaum zu bewerkstelligen, weswegen die detaillierte und quantitative Auswertung wieder ausschließlich in Diagrammform und nicht aufgrund der Contour-Plots erfolgt. Abbildung 14-41 zeigt die dimensionslose Axialgeschwindigkeit (bezogen auf die Düsenaustrittsgeschwindigkeit) entlang der dimensionslosen Strahlachse und vergleicht die Simulations- mit den Messergebnissen. Vergleicht man diese Darstellung mit jener des geraden Freistrahls ohne Prallplatte (Abbildung 14-21), so ist deutlich die Strömungstotzone im Nachlauf der Prallplatte (bis etwa x/d = 0,25) sichtbar. Am Ende dieser Nachlaufzone wird ein Maximum der Axialgeschwindigkeit erreicht, welches nur unwesentlich von der Düsenaustrittsgeschwindigkeit abweicht. Direkt nach der Prallplatte (etwa bis x/d = 0,08) ist aufgrund des sich in der Totzone ausbildenden Wirbels eine negative Axialgeschwindigkeit zu verzeichnen. Im Strahlfernfeld liegt die dimensionslose Axialgeschwindigkeit deutlich unterhalb jener des geraden Freistrahls.

Bis zu einer dimensionslosen Strahllauflänge von etwa 10 zeichnet sich das Reynolds-Stress-Modell durch eine hervorragende Übereinstimmung mit den durchgeführten Messun-

gen aus, sowohl die dimensionslose als auch die dimensionsbehaftete (wird in Abbildung 14-42 gezeigt) Axialgeschwindigkeit werden nahezu perfekt abgebildet. Alle anderen Turbulenzmodelle zeigen mehr oder weniger starke Abweichungen vom gemessenen Verlauf. Diese sind besonders ausgeprägt für sehr niedrige sowie für sehr große Abstände vom Düsenaustritt. Spalart-Allmaras, Standard-k-ε- und SST-k-ω liefern hier noch die besseren Ergebnisse, während RNG-k-ε, Realizable-k-ε und Standard-k-ω schlechter abschneiden.

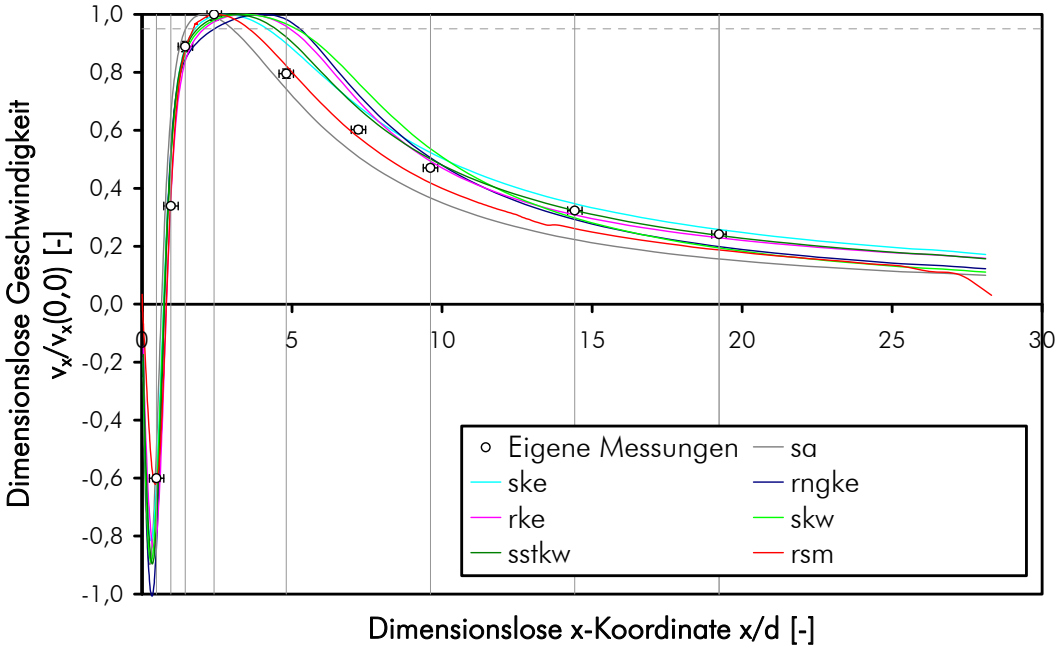


Abbildung 14-41: Dimensionslose Axialgeschwindigkeit des turbulenten Drallstrahls entlang der Strahlachse: eigene Messungen und Simulationsergebnisse mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen

In Abbildung 14-42 und Abbildung 14-43 ist die Axialgeschwindigkeit auf quer zur Hauptströmungsrichtung liegenden Profilen in unterschiedlichen Abständen vom Düsenaustritt dargestellt. Im Vergleich zu den Messungen am geraden Freistrahl wurde hier speziell das Strahlnahfeld im Bereich der Strömungstotzone messtechnisch höher aufgelöst (ein Profil jeweils alle 5 cm). Es ist zu beachten, dass die Achsenskalierungen für die insgesamt acht dargestellten Diagramme unterschiedlich sind, um einen Vergleich zwischen Simulation und Experiment für die einzelnen Profile zu unterstützen. Die Vergleichbarkeit der Profile untereinander wird dadurch ein wenig erschwert. Auch bei diesen Axialgeschwindigkeitsprofilen ist der Rückströmbereich bei einem Düsenabstand von 5 cm gut erkennbar, während bei 10 cm bereits wieder positive Axialgeschwindigkeit vorliegt. Das Profilmaximum der Axialgeschwindigkeit liegt beim düsennächsten Profil bei etwa 0,05 m Abstand von der Strahlachse, was etwa dem Rohradius entspricht. Dieses Maximum nähert sich mit zunehmender Lauflänge immer mehr der Strahlachse und erreicht diese zwischen den Profilen bei 0,25 m und 0,50 m. Weiter stromabwärts sind die Profile jenen des geraden Freistrahles relativ ähnlich.

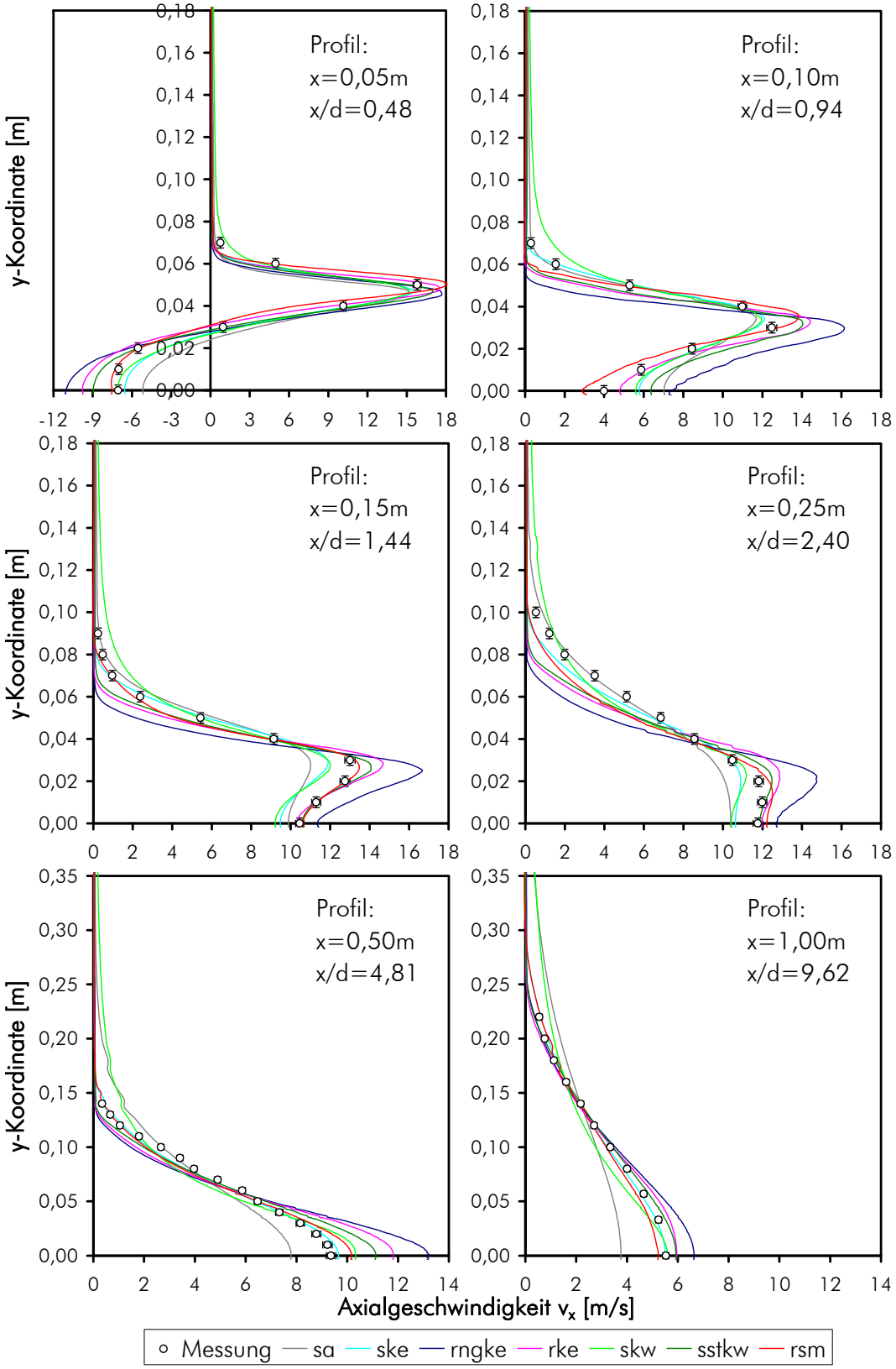


Abbildung 14-42: Axialgeschwindigkeitsprofile des turbulenten Drallstrahls in verschiedenen Entfernungen zum Düsenaustritt (Messungen und Simulationsergebnisse)

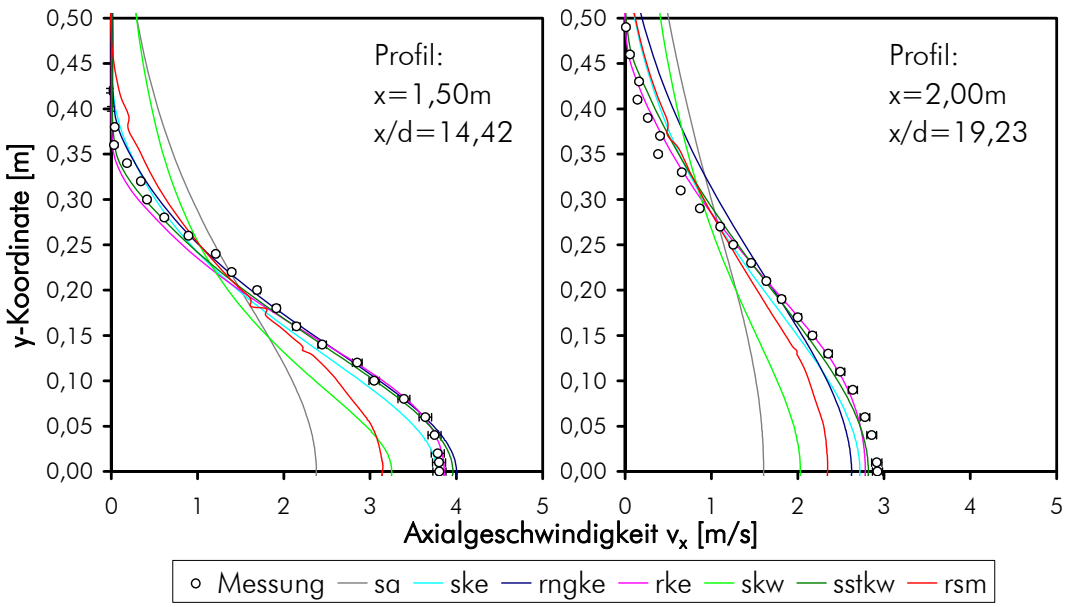


Abbildung 14-43: Axialgeschwindigkeitsprofile im Fernfeld des turbulenten Drallstrahls in verschiedenen Entfernungen zum Düsenaustritt (Messungen und Simulationsergebnisse)

Speziell in den Profilen des Strahlnahfeldes und des Übergangsbereiches wird die hervorragende Vorhersagequalität des Reynolds-Stress-Modells deutlich. Nicht nur die Axialgeschwindigkeit entlang der Strahlachse sondern das gesamt Axialgeschwindigkeitsfeld werden in diesem Bereich mit sehr hoher Genauigkeit abgebildet. Im Fernfeld weichen die Ergebnisse dieses Modells aber immer stärker von den Messwerten ab; auch hier ist, ähnlich wie beim geraden Freistrahl, zu befürchten, dass die Austrittsrandbedingung eines konstanten Druckes die Performance des Modells negativ beeinflusst. Eine sehr konstante Leistung über den gesamten Bereich liefert hingegen das SST-k-ω-Modell. Im Nahfeld und Übergangsbereich weicht dieses Modell nur geringfügig vom Reynolds-Stress-Modell ab, im Fernfeld liefert es sogar hervorragende Übereinstimmung. Die Ergebnisse des Standard-k-ε- und des Standard-k-ω-Modells sind überraschenderweise sehr ähnlich, weichen aber im Nahfeld und Übergangsbereich signifikant von den Messergebnissen ab. Nur im Fernfeld liefert das Standard-k-ε-Modell ähnlich überzeugende Ergebnisse wie für den geraden Freistrahl, das Standard-k-ω-Modell bleibt auch hier ungeeignet. Ebenso ungeeignet ist für diesen Testfall das einfache Modell nach Spalart-Allmaras, welches die größten Abweichungen aller untersuchten Turbulenzmodelle aufweist. Das Modell sagt eine deutlich zu große Strahlaufweitung mit entsprechend zu niedrigen Profilsgeschwindigkeiten voraus. Das Realizable-k-ε-Modell zeigt für den untersuchten Drallstrahl eine wesentlich bessere Eignung als das Standard-k-ε-Modell. Über den gesamten Bereich des Strahls sind die Ergebnisse durchaus passabel und das Modell wäre für eine ingenieurstechnische Anwendung durchaus zu empfehlen. Dies gilt nicht für die RNG-Formulierung des k-ε-Modells, von der Verwendung dieses Modells für das vorliegende Strömungsmodell ist abzuraten. Mit Ausnahme des weit stromabwärts liegenden Fernfeldes werden wesentlich zu hohe Geschwindigkeiten und ein zu schlanker Strahl vorhergesagt.

Tabelle 14-21 zeigt als Berechnungsergebnisse aus den Verläufen der Axialgeschwindigkeiten nun das Aufweitverhältnis nach Wilcox (Wilcox, 1994) und den Ausbreitungswinkel nach Schneider (Schneider, 2003) wie sie aus den eigenen Messungen sowie aus den CFD-Simulationen mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen ermittelt wurden. Nachdem beide

Parameter auch beim geraden Freistrahl sinnvoll nur für das Fernfeld auszuwerten sind, macht diese Auswertung auch für den Drallstrahl mit Prallplatte Sinn. Profile im Bereich des Totgebietes hinter der Prallplatte (Nahfeld) und im Bereich der Stromvereinigung knapp dahinter (Übergangsgebiet) gehen nicht in die Berechnung ein. Der Vergleich mit den Werten für den geraden Freistrahl zeigt, dass diese Parameter für beide Strahlen sehr ähnlich sind. Der Drallstrahl mit Prallplatte zeigt eine geringfügig größere Strahlaufweitung als der gerade Strahl, was so auch zu erwarten war. Der Einfluss auf das Aufweitverhältnis (50%-Strahlgrenze) ist hier etwas stärker als auf den Ausbreitungswinkel (1%-Strahlgrenze), woraus zu schließen ist, dass die Zonen mit höherer Geschwindigkeit sich beim Drallstrahl stärker ausbreiten als jene mit niedrigeren Geschwindigkeiten. Das Aufweitverhältnis beim analysierten Drallstrahl ist um 10 bis 20 % größer als beim geraden Freistrahl, der Ausbreitungswinkel hat sich nur um 1 bis 2 % erhöht (bei schlecht geeigneten Modellen teilweise sogar reduziert).

Tabelle 14-21: Aufweitverhältnis und Ausbreitungswinkel des untersuchten Drallstrahls berechnet aus den durchgeführten Messungen sowie den Simulationsergebnissen mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen

	Aufweitverhältnis (*spreading rate*) [-]	Ausbreitungswinkel [°]
Eigene Messung	0,118	12,2
Spalart-Allmaras	0,177	23,2
Standard-k-ε	0,115	14,3
RNG-k-ε	0,125	17,0
Realizable k-ε	0,115	12,0
Standard-k-ω	0,125	27,2
SST-k-ω	0,116	12,8
Reynolds-Stress-Modell	0,128	15,2

Der Vergleich mit der Messung zeigt, dass das Realizable-k-ε- und das SST-k-ω-Modell die beobachteten Verhältnisse am besten beschreiben. Auch das Standard-k-ε-Modell schneidet noch sehr gut ab. Das Reynolds-Stress-Modell zeigt bei dieser Auswertung (gemeinsam mit dem RNG-k-ε-Modell) relativ schlechte Ergebnisse, da es zwar das Nahfeld und das Übergangsgebiet hervorragend beschreibt, den Geschwindigkeitsverlauf im Fernfeld allerdings sehr schlecht berechnet. Einmal mehr ist hier nicht dem Modell selbst die Schuld zu geben. Wie schon an anderer Stelle andiskutiert, ist der Einfluss der Austrittsrandbedingung für dieses Modell so groß, dass Geschwindigkeiten in randnäheren Bereichen nicht mehr korrekt vorhergesagt werden können. Das Standard-k-ω-Modell und jenes nach Spalart-Allmaras sind für die Anwendung ungeeignet.

In Abbildung 14-44 sind Profile der Tangentialgeschwindigkeit im Nahfeld und Übergangsbereich dargestellt, Abbildung 14-45 enthält die entsprechenden Profile im Fernfeld. Die Rotation des Strahles im Uhrzeigersinn (bei Betrachtung entlang der Strahlachse in positive x-Richtung) ist deutlich zu erkennen. Diese Rotation ist interessanterweise nicht am düsennächsten Profil, sondern in einem Abstand von 0,1 m vom Düsenaustritt am größten. Mit zunehmender Entfernung vom Düsenaustritt werden auch diese Profile flacher und breiter. Ab einer Entfernung von etwa einem halben Meter nehmen die Profilmaxima Werte von 0,5 m/s

und darunter an und sind deshalb mit entsprechenden Messfehlern behaftet. Dennoch sind auch hier noch tendenziell gute Aussagen zu treffen.

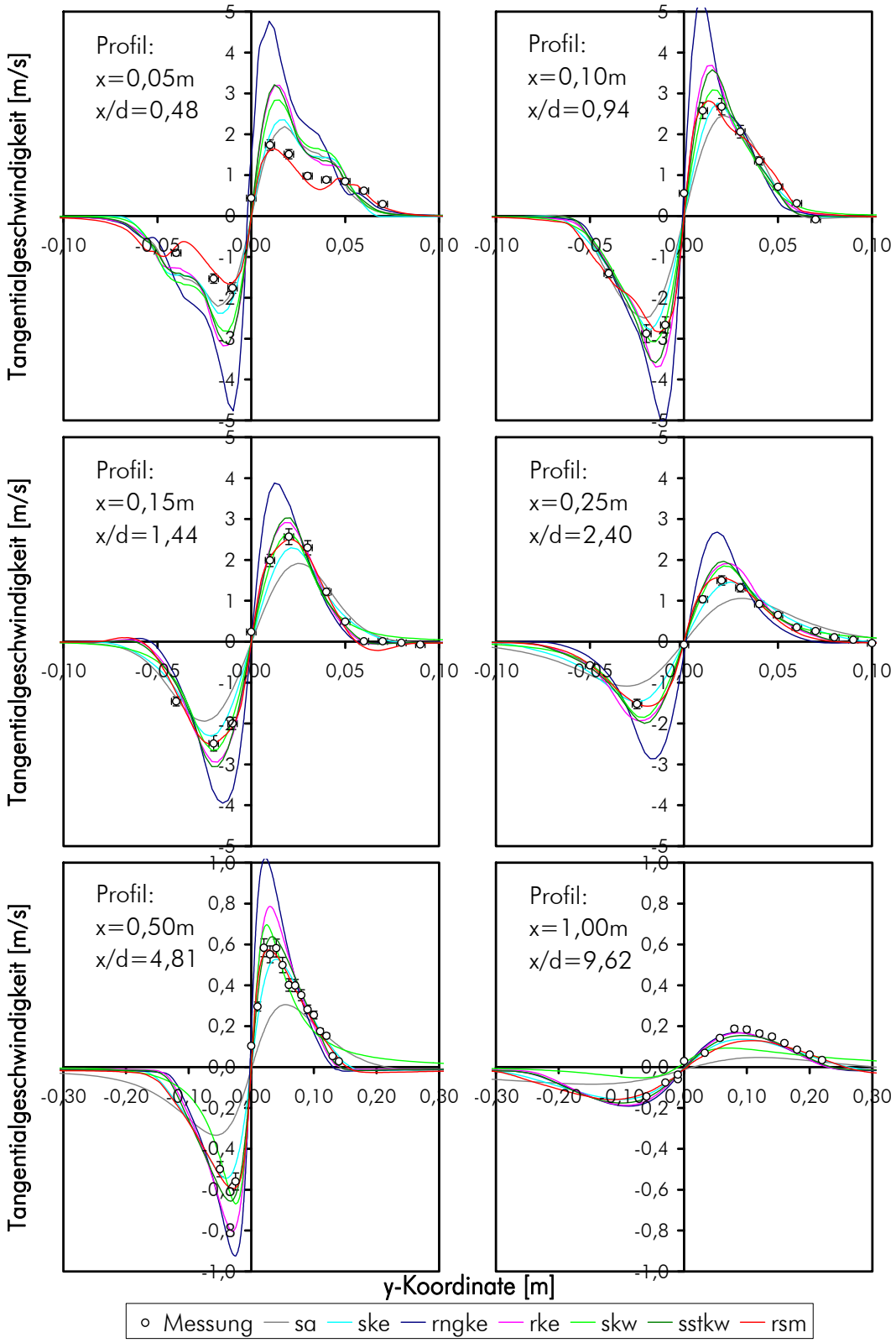


Abbildung 14-44: Tangentialgeschwindigkeitsprofile des turbulenten Drallstrahls in verschiedenen Entfernungen zum Düsenaustritt (Messungen und Simulationsergebnisse)

Auch die Auswertung der Tangentialgeschwindigkeiten zeigt die hervorragende Eignung des Reynolds-Stress-Modells für diese Strömung. Lediglich im Strahlfernfeld weichen die Simulationsergebnisse dieses Modells merkbar von den Messergebnissen ab. In diesem Bereich sind die Geschwindigkeitsbeträge allerdings bereits kleiner als 0,1 m/s und es ist bemerkenswert, dass die Verläufe der Profile qualitativ dennoch sehr gut übereinstimmen. Ansonsten gelten ähnliche Schlussfolgerungen wie für die Axialgeschwindigkeitsprofile: das SST-k-ω-Modell kommt dem Reynolds-Stress-Modell am nächsten und bildet das Strömungsfeld über den gesamten Bereich sehr gut ab. Auch das Standard-k-ε- und das Realizable-k-ε-Modell liefern sehr brauchbare Ergebnisse ab. Das Standard-k-ω-Modell und vor allem das RNG-k-ε- und das Spalart-Allmaras-Modell weisen sehr große Abweichungen zu den Messergebnissen auf. Diese drei Modelle können auf weiten Strecken das Strömungsfeld und die Strahlsymmetrie nicht adäquat vorhersagen.

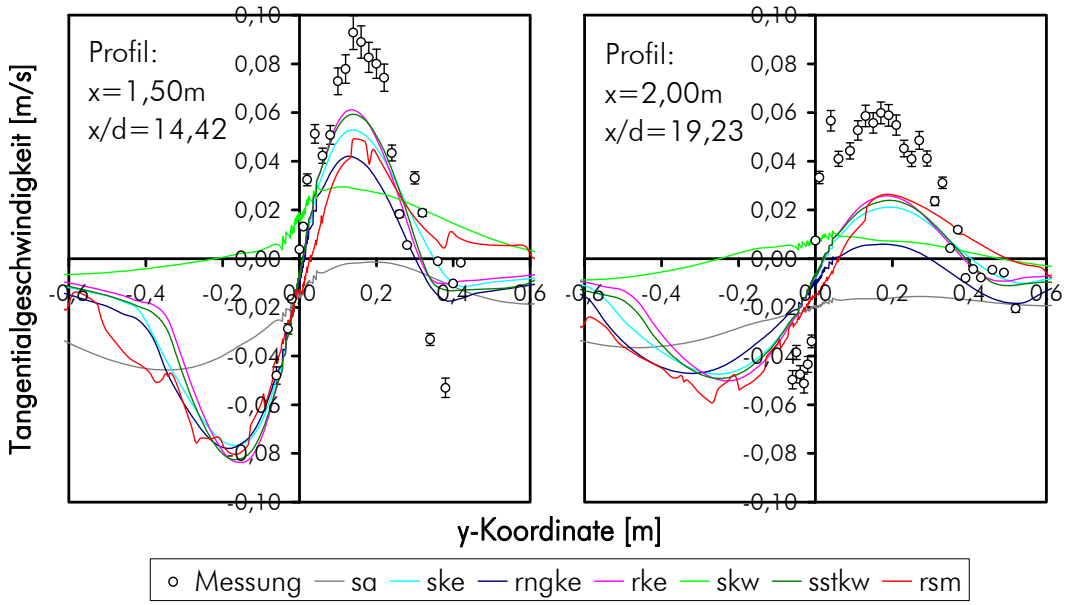


Abbildung 14-45: Tangentialgeschwindigkeitsprofile im Fernfeld des turbulenten Drallstrahls in verschiedenen Entfernungen zum Düsenaustritt (Messungen und Simulationsergebnisse)

Auch die Radialgeschwindigkeitskomponenten wurden in ähnlicher Weise ausgewertet und beurteilt. Zur Veranschaulichung enthält Abbildung 14-46 die Radialgeschwindigkeitsprofile im Nahfeld und im Übergangsbereich und Abbildung 14-47 die Auswertung im Fernfeld. Grundsätzlich ist festzuhalten, dass auch für das Radialgeschwindigkeitsfeld analoge Aussagen gelten wie für die Axial- und Tangentialgeschwindigkeitsfelder.

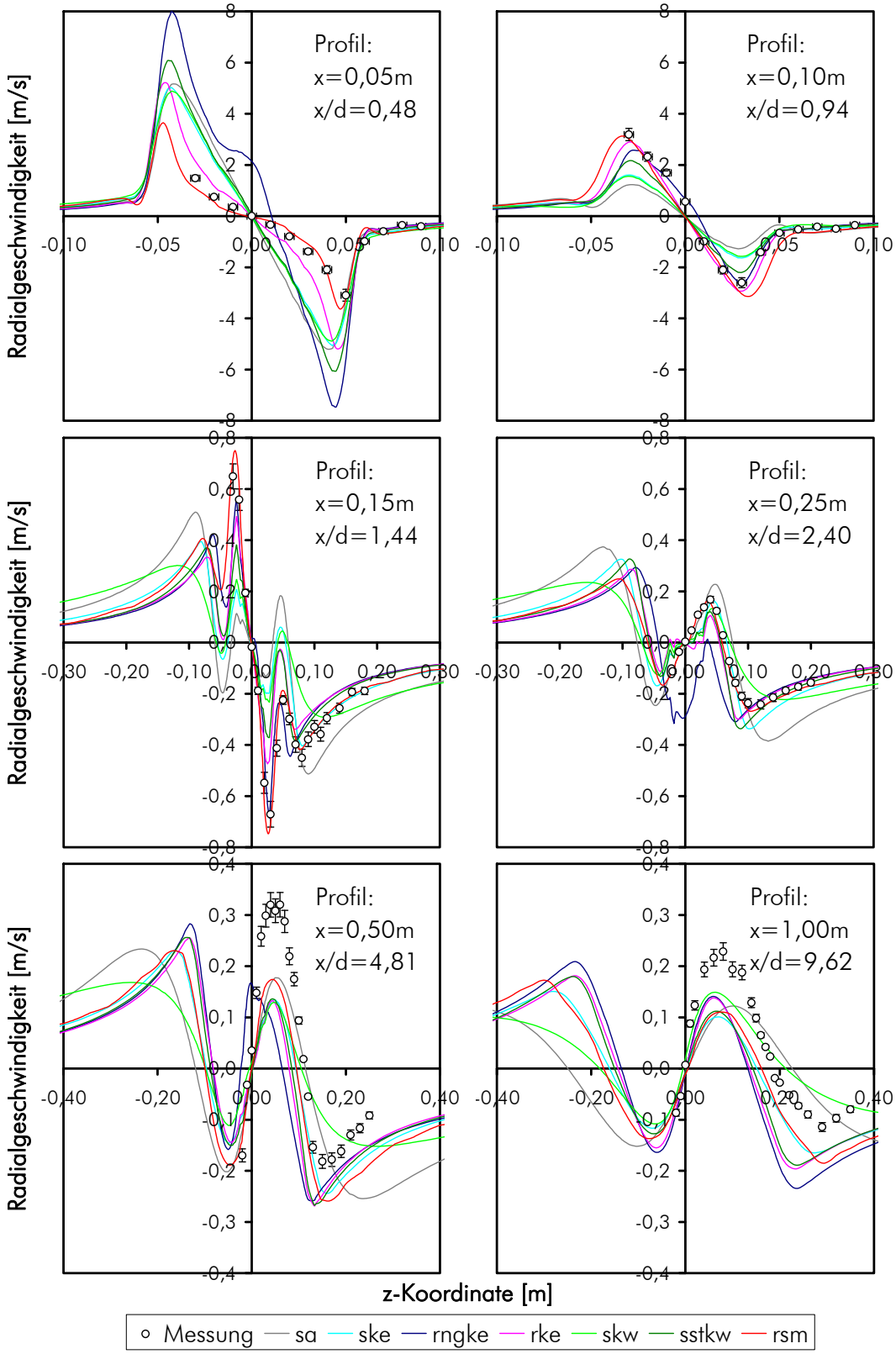


Abbildung 14-46: Radialgeschwindigkeitsprofile im Nahfeld und im Übergangsbereich des turbulenten Drallstrahls in verschiedenen Entfernungen zum Düsenaustritt (Messungen und Simulationsergebnisse)

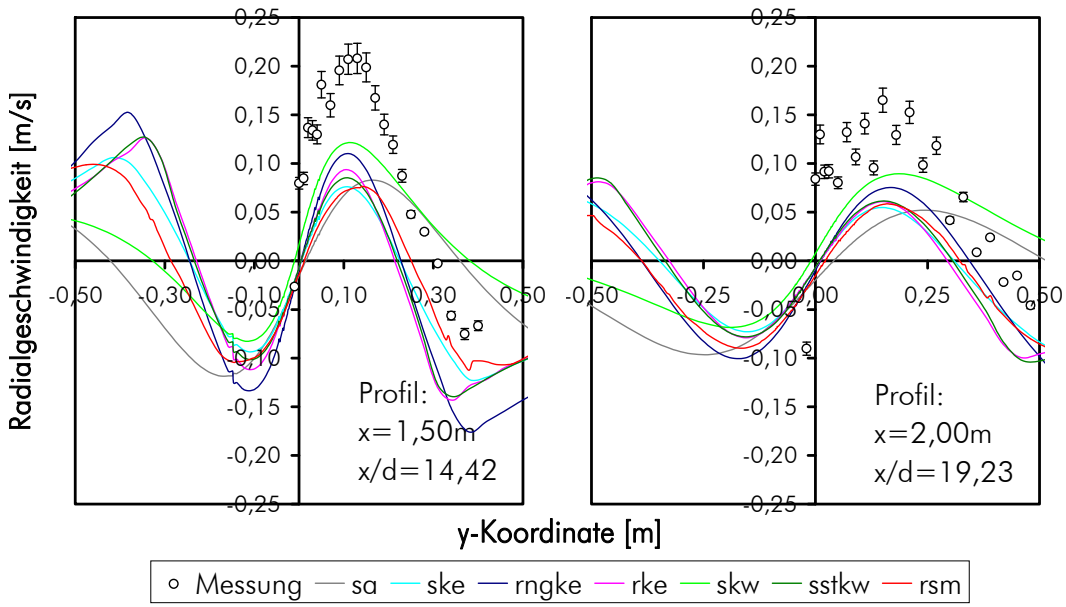


Abbildung 14-47: Radialgeschwindigkeitsprofile im Fernfeld des turbulenten Drallstrahls in verschiedenen Entfernungen zum Düsenaustritt (Messungen und Simulationsergebnisse)

Unter dem Strich kann zusammengefasst werden, dass das Reynolds-Stress-Modell vor allem das Geschwindigkeitsfeld im Nahfeld und im Übergangsbereich mit hoher Genauigkeit berechnen kann. Im Fernfeld ist die Übereinstimmung weniger gut und das Modell zeigt kaum noch Vorteile gegenüber einfacheren und weniger aufwändigen Modellen. Das SST-k-ω- und das Realizable-k-ε-Modell liefern ebenfalls sehr gute Resultate und stellen damit effiziente und robuste Alternativen zum Reynolds-Stress-Modell dar. Die übrigen Modelle können nur bedingt (Standard-k-ε und Standard-k-ω) oder gar nicht (Spalart-Allmaras und RNG-k-ε) empfohlen werden.

Abschließend soll noch beleuchtet werden, wie gut Turbulenzparameter, genauer die Turbulenzintensität, mit den untersuchten Turbulenzmodellen berechnet werden können. Zu diesem Zweck ist in Abbildung 14-48 zunächst die Turbulenzintensität entlang der dimensionslosen Strahlachse aufgetragen. Ähnlich wie in Abbildung 14-31 werden die Ergebnisse der Simulationen mit den unterschiedlichen Turbulenzmodellen mit experimentellen Daten verglichen. Auch hier wird als Maß für die experimentelle Turbulenzintensität die einfache Standardabweichung der Geschwindigkeitsfluktuationen herangezogen. Anders als beim geraden Freistrahl wurden aber beim Drallstrahl Geschwindigkeitskomponenten (sowie deren Schwankungsbreite) in alle Raumrichtungen gemessen, wodurch unter Ausnutzung der Strahlsymmetrie für alle relevanten räumlichen Punkte ein vollständiger dreidimensionaler Datensatz zur weiteren Auswertung zur Verfügung steht. In jedem Punkt wurde dann aus dem Mittelwert der Standardabweichungen der Geschwindigkeitskomponenten in die drei Raumrichtungen die experimentelle Turbulenzintensität ermittelt.

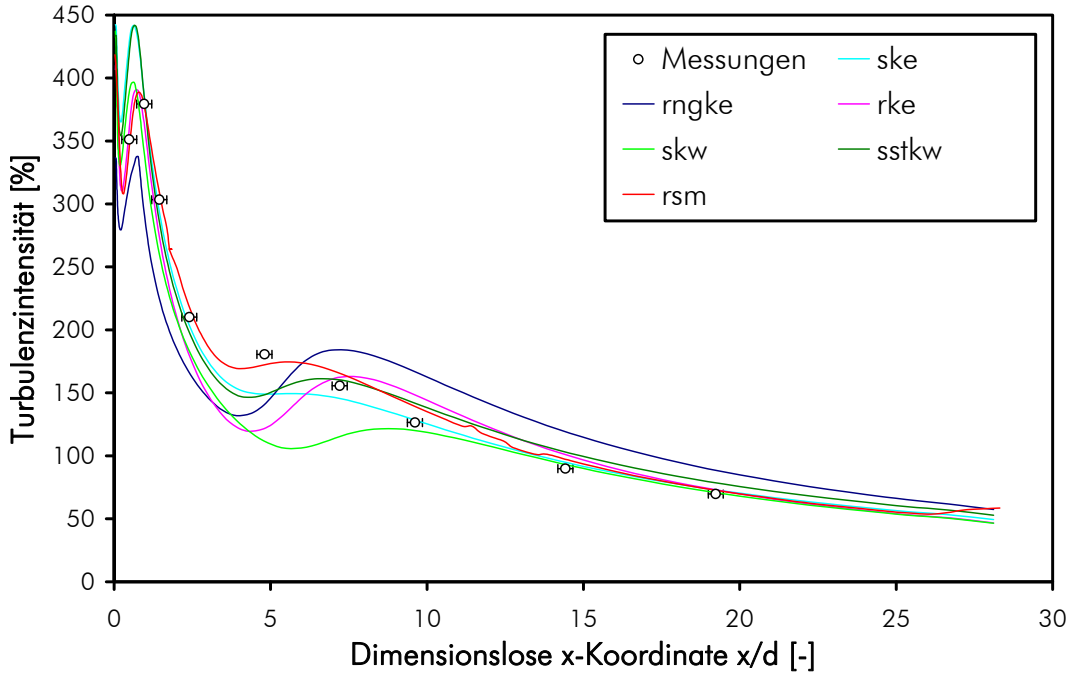


Abbildung 14-48: Turbulenzintensität entlang der dimensionslosen Strahlachse des turbulenten Drallstrahls (eigene Messungen und Simulationsergebnisse)

Das Maximum der Turbulenzintensität mit einem Wert von rund 400 % tritt räumlich etwa an der Stelle des Nulldurchganges der Axialgeschwindigkeit innerhalb der Nachlaufzone hinter der Prallplatte auf. Danach sinkt die Turbulenzintensität stark ab. Eine lokale Flachstelle im Verlauf der Turbulenzintensität findet sich dann bei etwa dem 4,5 bis 5fachen des Düsendurchmessers, also etwa dort, wo die Axialgeschwindigkeit ihr Maximum auf der Strahlachse erreicht (siehe Abbildung 14-41). Im Bereich der Nachlaufzone hinter der Prallplatte und im Bereich der Strömungsvereinigung direkt im Anschluss ist die Turbulenz also besonders stark ausgeprägt. Dann fällt die Turbulenzintensität mit zunehmender Strahllauflänge stark ab. Speziell der Vergleich der Abbildung 14-48 mit Abbildung 14-31 liefert aufschlussreiche Erkenntnisse bezüglich der Unterschiede der betrachteten Freistrahlen. Beim Drallstrahl mit Prallplatte ist die Turbulenzintensität im Nahfeld wesentlich größer (Faktor 3,5 bis 4) als beim geraden Freistrahl. Auch im Fernfeld bleibt die Turbulenzintensität für den Drallstrahl bis etwa zum 10fachen des Düsendurchmessers um 20 % höher als beim geraden Freistrahl.

Ähnlich wie beim geraden Freistrahl gilt generell, dass die betrachteten Turbulenzmodelle die Turbulenzintensität relativ gut berechnen lassen. Sowohl die Größenordnung als auch der Verlauf entlang der Strahllauflänge werden selbst mit weniger geeigneten Modellen verhältnismäßig gut vorhergesagt. Die beste Übereinstimmung mit den Messergebnissen zeigt wie erwartet einmal mehr das Reynolds-Stress-Modell, mit welchem der gemessene Verlauf nahezu exakt nachgebildet werden kann. Ebenfalls sehr gut geeignet sind nach dieser Auswertung das Standard-k-ε- sowie das SST-k-ω-Modell, die aber abschnittsweise schon Abweichungen bis 30 % aufweisen. Die beiden erweiterten k-ε-Modelle sowie das Standard-k-ω-Modell weichen zum Teil stark vom gemessenen Verlauf ab und sind demnach nicht zu empfehlen.

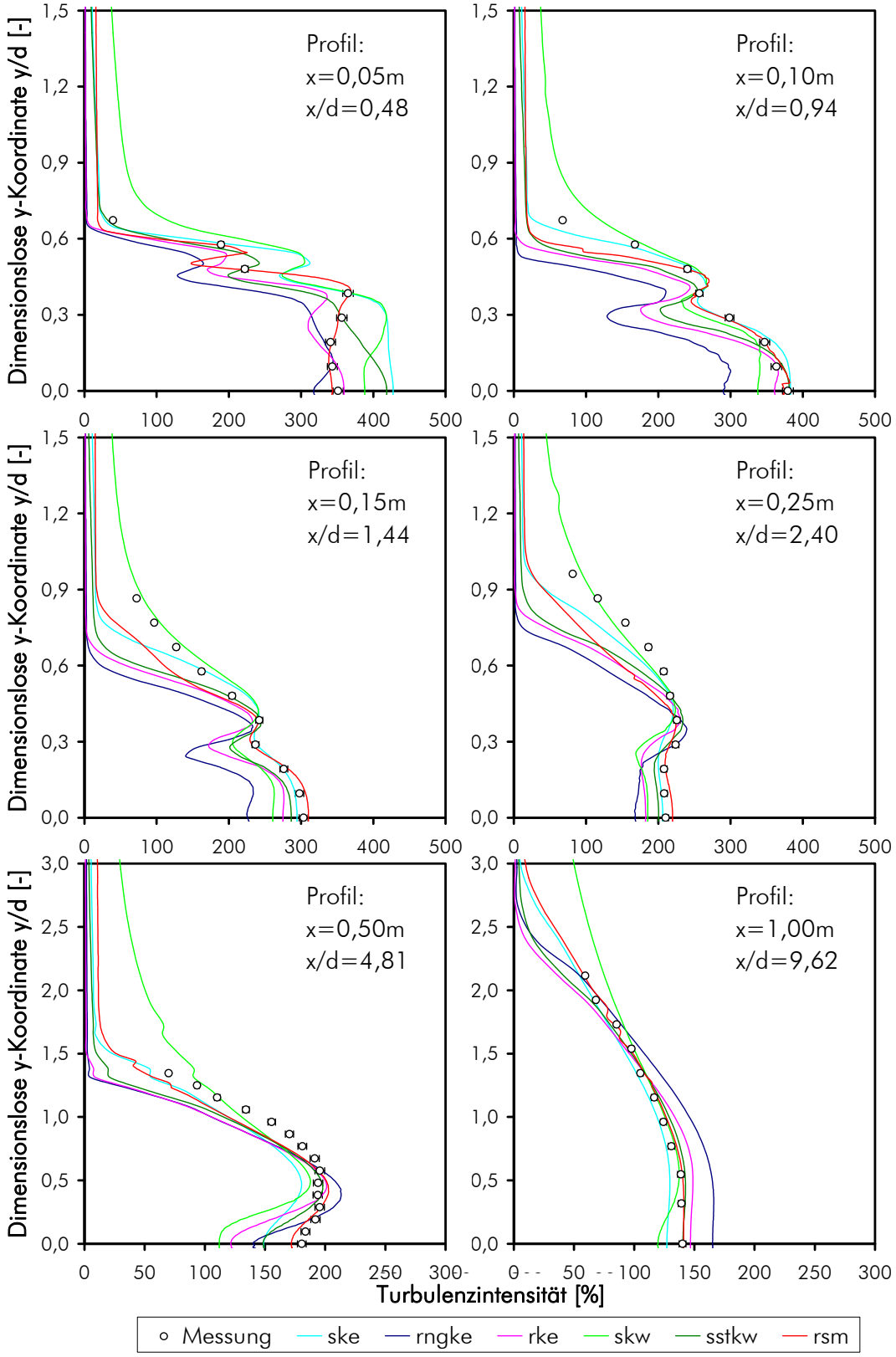


Abbildung 14-49: Profile der Turbulenzintensität des turbulenten Drallstrahls in verschiedenen Entfernungen zum Düsenaustritt (Messungen und Simulationsergebnisse)

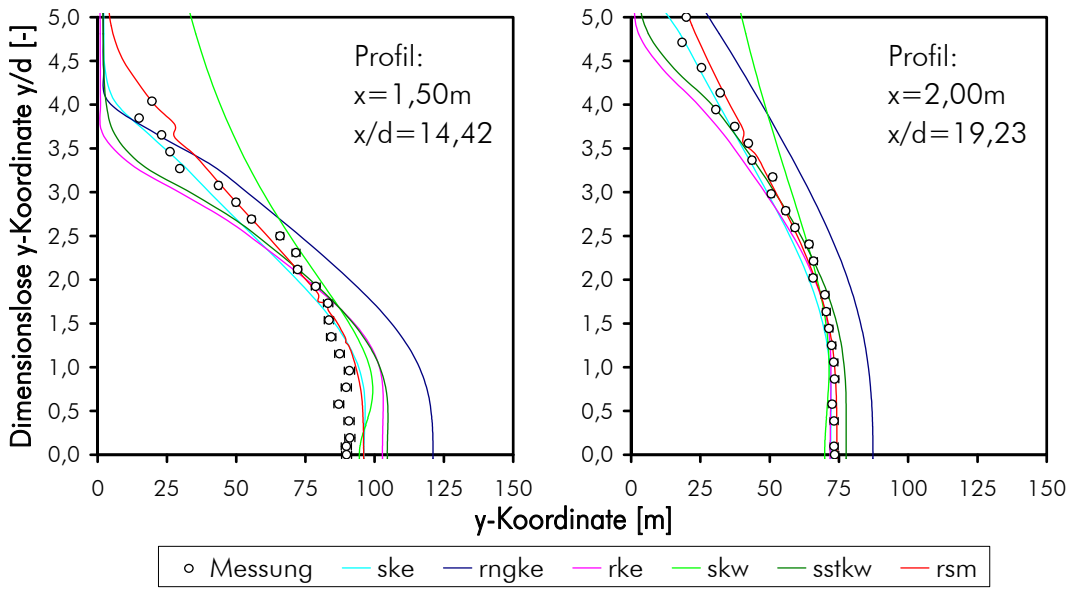


Abbildung 14-50: Profile der Turbulenzintensität im Fernfeld des turbulenten Drallstrahls in verschiedenen Entfernungen zum Düsenaustritt (Messungen und Simulationsergebnisse)

Wird nun die Turbulenzintensität entlang der bisher bereits öfters verwendeten Profile aufgetragen, so vervollständigt sich das Bild, das entlang der Strahlachse gewonnen werden konnte. In Abbildung 14-49 ist die Turbulenzintensität als Funktion der dimensionslosen y-Koordinate auf Profilen in unterschiedlichen Entfernungen zum Düsenaustritt dargestellt (Nahfeld und Übergangsbereich); wieder werden Simulations- und Messergebnisse verglichen. Abbildung 14-50 enthält diese Auswertung für das Strahlfernfeld. Bei dieser Auswertung werden größere Unterschiede zwischen den Ergebnissen der Simulationen mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen sichtbar, die auf der Strahlachse noch nicht augenscheinlich waren. Auch hier wird die beste Übereinstimmung mit dem Reynolds-Stress-Modell erzielt. Im Übergangsbereich und im Strahlfernfeld werden die gemessenen Profile einmal mehr beinahe perfekt durch das Modell abgebildet. Lediglich im Nahfeld sind an den Profilrändern größere Abweichungen zu verzeichnen. Diese Abweichungen erreichen für einige Raumpunkte, an denen große Gradienten der Turbulenzintensität auftreten, durchaus 50 bis 100 %, was etwa einem Viertel bis der Hälfte des jeweiligen Messwertes entspricht. Dennoch ist die Übereinstimmung gesamtheitlich betrachtet sehr bemerkenswert. Das SST-k-ω-Modell liefert etwas schlechtere Ergebnisse, ist mit den Resultaten des Reynolds-Stress-Modells aber noch am ehesten zu vergleichen. Mit Ausnahme des düsennächsten Profils ist die Übereinstimmung für dieses Modell auch noch sehr gut. Ähnliches gilt auch für das Standard-k-ε-Modell. Die übrigen Modelle zeigen vor allem im Nahfeld rund um den Nachlauf der Prallplatte, aber auch im Fernfeld (speziell RNG-k-ε) sehr große Abweichungen von den gemessenen Werten.

Zum Abschluss soll auch für den untersuchten Drallstrahl analysiert werden, welchen Einfluss die Anwahl von Zusatzoptionen und höheren Wandfunktionen auf die Simulationsergebnisse haben. Wie beim geraden Freistrahl beschränkt sich diese Auswertung aus Platzgründen auf eine qualitative Beschreibung.

Spalart-Allmaras: Die Suboption „*Strain/Vorticity based production*“ bringt eine geringfügige Verbesserung der Beschreibung des Strahlfernfeldes (ab etwa 10 Rohrdurchmessern Lauflänge) hinsichtlich aller Strömungsgeschwindigkeitskomponenten. Gleichzeitig ver-

schlechtern sich aber die Ergebnisse im Nahfeld und Übergangsbereich etwa im gleichen Ausmaß. Eine bessere Eignung des Modells für die Simulation der Problemstellung ist damit nicht zu verzeichnen. Höhere Wandfunktionen können mit diesem Turbulenzmodell in der verwendeten Version des CFD-Solvers nicht implementiert werden.

Standard-k-ε: Auch hier bringen höhere Wandfunktionen keine weitere Verbesserung, die Axialgeschwindigkeit im Nahfeld wird sogar geringfügig schlechter vorhergesagt. Die Suboption *„Pressure gradient effects"*, welche bei Verwendung der *„Enhanced wall function"* anwählbar ist, hat (wohl aufgrund der geringen auftretenden Druckgradienten in der Simulationsdomäne) keine Auswirkungen.

RNG-k-ε: Im Gegensatz zum geraden Freistrahl bringt hier die Suboption *„Differential viscosity model"* durchwegs signifikante Verschlechterungen der Ergebnisse, speziell was die Verläufe von Axial- und Radialgeschwindigkeit betrifft. Die anderen Suboptionen bringen dem Modell keinen Vorteil, da zwar einzelne Geschwindigkeitsprofile besser, andere dafür schlechter abgebildet werden. Die Anwendung höherer Wandfunktionen hat keinen Einfluss.

Realizable-k-ε: Die Anwendung höherer Wandfunktionen zeigt bei diesem Modell geringfügige Unterschiede in den Ergebnissen im Vergleich mit der Standard-Wandfunktion. Im Nahfeld und im Übergangsgebiet werden sowohl die Axial- als auch Tangentialgeschwindigkeitsverteilungen besser abgebildet, während im Fernfeld eine Verschlechterung zu erkennen ist. Bei den Verläufen der Radialgeschwindigkeit ist kein Einfluss zu erkennen. Auch hier zeigt die Suboption *„Pressure gradient effects"*, welche bei Verwendung der *„Enhanced wall function"* anwählbar ist, keine Auswirkungen auf die Ergebnisse. Im Vergleich zum Standard-k-ε-Modell sind keine Trends auszumachen; manche Profile werden besser, manche schlechter als bei diesem Modell abgebildet. An dieser Tatsache ändern die höheren Wandfunktionen aufgrund des geringen Einflusses auf das Ergebnis nichts.

Standard-k-ω: Durch die Auswahl der Option *„Shear flow corrections"* wird wie beim geraden Freistrahl auch beim Drallstrahl das berechnete Strömungsfeld signifikant beeinflusst. Die Strahlform wird auch hier wesentlich schlanker aber damit einhergehend wird auch die Axialgeschwindigkeit auf der Strahlachse maßgeblich überschätzt (Faktor 1,2 bis 2,0). Es kann gezeigt werden, dass das Modell ohne die Zusatzoptionen für die Axialgeschwindigkeitsverläufe besser mit den Messwerten übereinstimmende Resultate liefern kann. Bei den Verläufen der Tangentialgeschwindigkeiten werden durch die Option *„Shear flow corrections"* deutlich schlechtere Ergebnisse erhalten, als ohne diese Option. Die ermittelten Geschwindigkeiten liegen dabei in nahezu allen Bereichen des Strahls um mindestens das Doppelte über den experimentell ermittelten Geschwindigkeiten und weisen in Summe einen höheren relativen Fehler auf. Auch die Ergebnisse des Radialgeschwindigkeitsfeldes werden durch die Zusatzoption verschlechtert, wenn auch nicht in so großem Ausmaß wie jene der Tangentialgeschwindigkeit. Obwohl die genannte Suboption beim geraden Freistrahl in gewissen Bereichen durchaus eine Verbesserung bringen kann, ist für den analysierten Drallstrahl mit Prallplatte das Gegenteil der Fall. Die Suboption *„Transitional flow"* hat auch hier aufgrund der klar turbulenten Reynoldszahl keinen Einfluss auf die Ergebnisse.

SST-k-ω: Die Funktion *„Transitional flow option"* liefert unter Berücksichtigung der zugrundeliegenden Simulationsgenauigkeit die gleichen Resultate wie das SST-k-ω-Modell

ohne diese Zusatzfunktion. Alle Auswertungen zeigen nahezu deckungsgleiche Kurvenverläufe.

Reynolds-Stress-Modell: Generell bildet das Modell bereits mit Standardeinstellungen den betrachteten Drallstrahl, speziell im Nahfeld und Übergangsgebiet, hervorragend ab. Eine geringfügige Verbesserung im Nahfeld kann durch Anwahl der Option *„Wall reflection"* erzielt werden, jedoch ist dann eine geringfügige Verschlechterung im Fernfeld zu beobachten. Alle anderen Suboptionen liefern im Wesentlichen kein besseres, in vielen Fällen sogar ein schlechteres Ergebnis. Lediglich die Option *„Wall boundary condition from k-equation"* beschreibt den Tangentialgeschwindigkeitsverlauf im Fernfeld mit höherer Genauigkeit, schneidet aber wiederum im Nahfeld schlechter ab. Die Verwendung der höheren Wandfunktion *„Nonequilibrium wall function"* bringt keine Verbesserung der Ergebnisse. Von der Verwendung der Wandfunktion *„Enhanced wall function"* sei an dieser Stelle abgeraten, da nur zwei Fälle (*„Standard"* und *„Pressure gradient effects"*) während der Iteration konvergenten Verlauf zeigten; alle anderen waren sehr stark divergent (speziell bei Diskretisierungen höherer Ordnung) und konnten keine vernünftigen Resultate liefern. Auch die beiden konvergenten Fälle mit dieser Wandfunktion liefern extrem große Abweichungen zum gemessenen Verlauf im gesamten Strömungsfeld. Zusammenfassend kann postuliert werden, dass für den betrachteten Testfall das Reynolds-Stress-Modell in seinem Standard-Setup die verlässlichsten Ergebnisse liefern kann und jedwede Auswahl erweiterter Optionen oder Wandfunktionen den Aufwand nicht lohnt.

Abschließend kann auch für den betrachteten Drallstrahl mit Prallplatte festgehalten werden, dass keine außergewöhnlichen Bedingungen herrschen, die die Auswahl von Zusatzoptionen erfordern oder rechtfertigen. Die Strömungsrotation ist zu gering, die Stromlinien nicht stark genug gekrümmt und die Druckgradienten in der Strömung sind nicht ausgeprägt genug, als dass nicht die Standardeinstellungen der Turbulenzmodelle ausreichend für eine Beschreibung des Strömungsfeldes wären. Dennoch können auch hier eindeutig besser und schlechter geeignete Turbulenzmodelle identifiziert werden. Auch dieser Strahl stellt eine freie Scherströmung dar, die durch höhere Wandfunktionen im Wesentlichen nicht besser beschrieben wird als durch Standardwandfunktionen.

14.5 Validierung des Gasreaktionsmechanismus anhand eines Rohrreaktors

Tabelle 14-22: Eintrittszustand und Betriebsparameter des untersuchten Rohrreaktors

Parameter	Wert und Einheit
Abmessungen LxBxH	120x0,1x0,1 m
Diskretisierung LxBxH	600x8x8 Zellen
Zellzahl	38.400
Strömungsgeschwindigkeit	20 m/s
Gastemperatur	950 – 1.350 K
Reynoldszahl	100.000 – 150.000
Betriebsregime	isotherm sowie adiabat
Massenbruch C_xH_y	0,010
Massenbruch CO	0,050
Massenbruch CO_2	0,065
Massenbruch H_2	0,001
Massenbruch NH_3	$5{,}433*10^{-5}$
Massenbruch HCN	$2{,}843*10^{-4}$
Massenbruch NO	$6{,}614*10^{-4}$
Massenbruch H_2O	0,060
Massenbruch O_2	0,010 – 0,150
Luftverhältniszahl λ	0,13 – 2,00

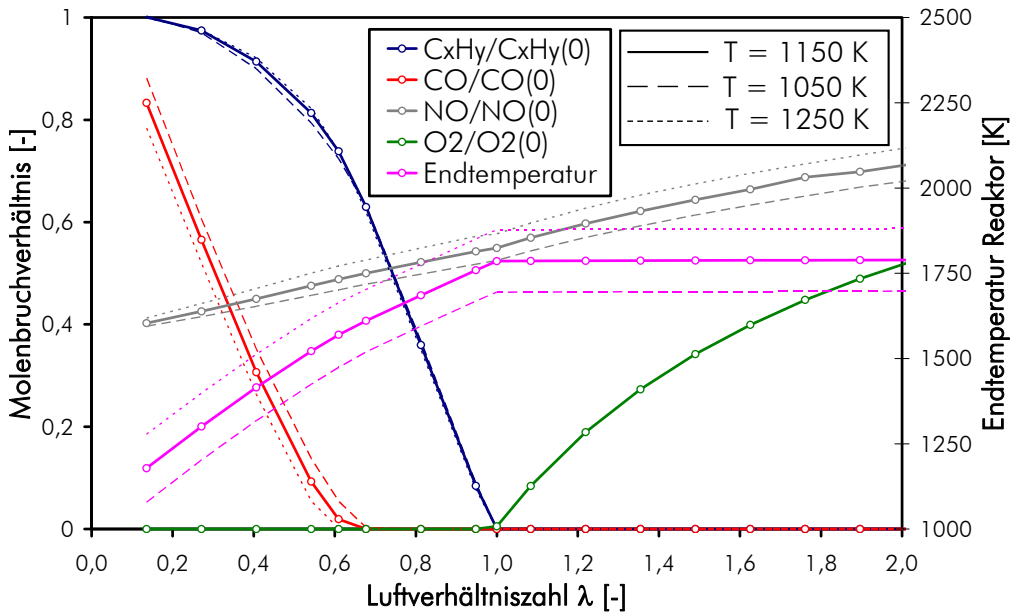


Abbildung 14-51: Molenbrüche für CO, CxHy, NO und O2 sowie Reaktorendtemperatur nach 2 Sekunden Reaktionszeit im adiabaten Rohrreaktor bezogen auf die jeweiligen Molenbrüche bei Reaktionsstart in Abhängigkeit von Reaktorstarttemperatur und Luftverhältniszahl

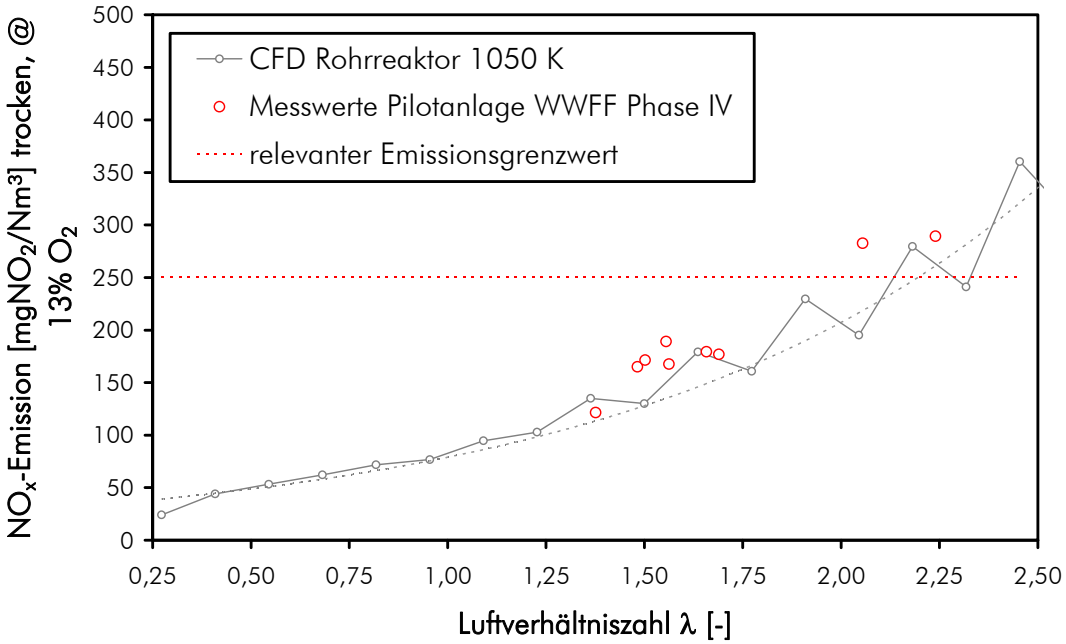


Abbildung 14-52: NO_x-Emissionen des untersuchten adiabaten Rohrreaktors im Vergleich mit experimentellen Ergebnissen sowie dem relevanten Emissionsgrenzwert (Standardeinstellung der Fehlergrenze im ISAT-table mit 10^{-3})

14.6 Validierung des Ballenmodells an vereinfachter Testgeometrie

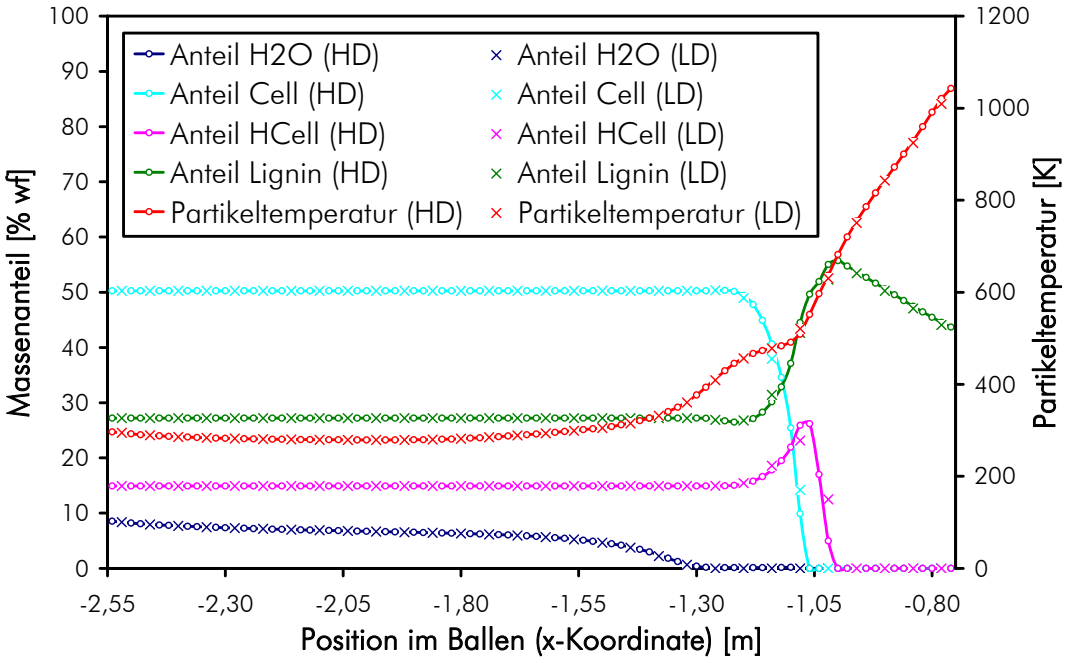


Abbildung 14-53: Verlauf wesentlicher Feststoffparameter im Ballen bei eindimensionaler Simulation mit unterschiedlichen Gitterauflösungen (LD: 6 cm, HD: 2 cm)

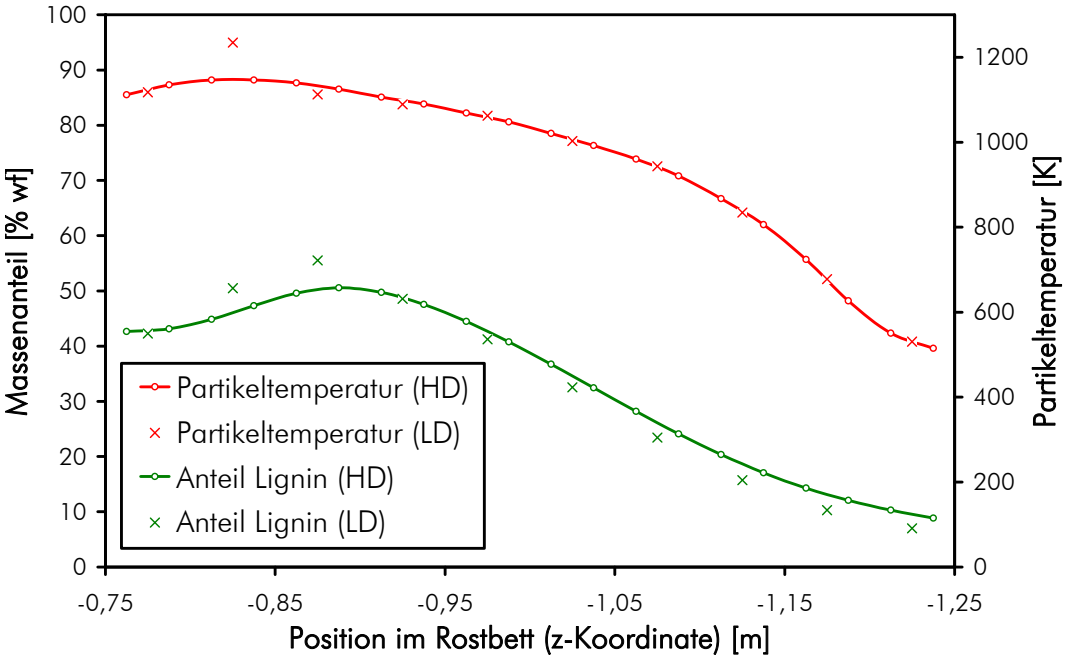


Abbildung 14-54: Verlauf wesentlicher Feststoffparameter im Rostbett bei eindimensionaler Simulation mit unterschiedlichen Gitterauflösungen (LD: 5 cm, HD: 2,5 cm)

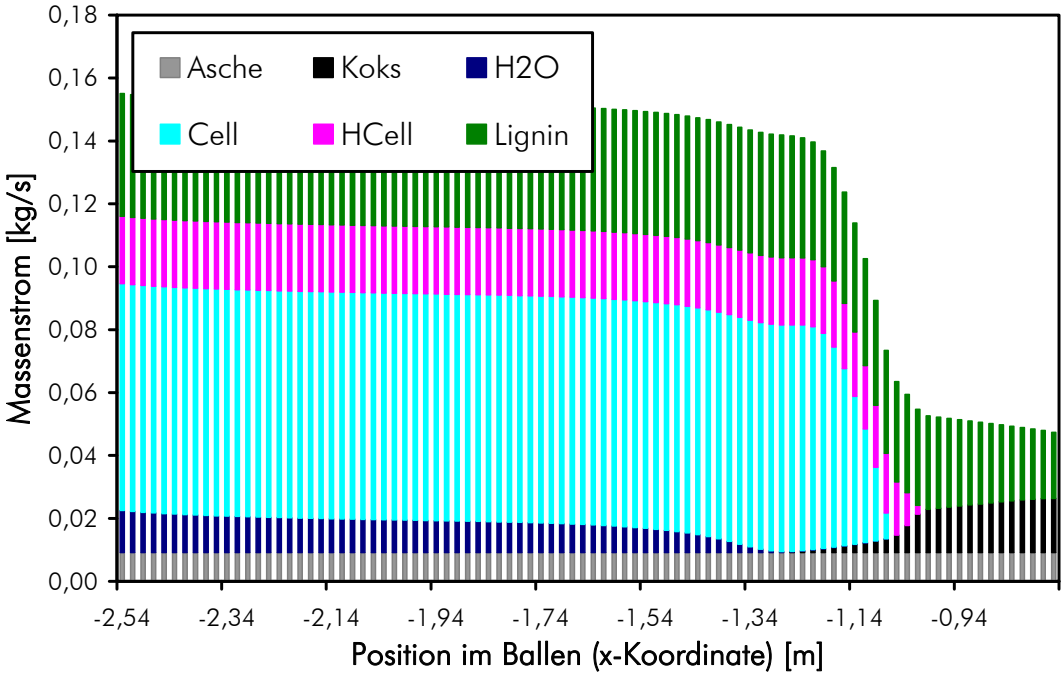


Abbildung 14-55: Verlauf des Massenstroms verschiedener Komponenten der festen Brennstoffphase im Ballen bei eindimensionaler Simulation

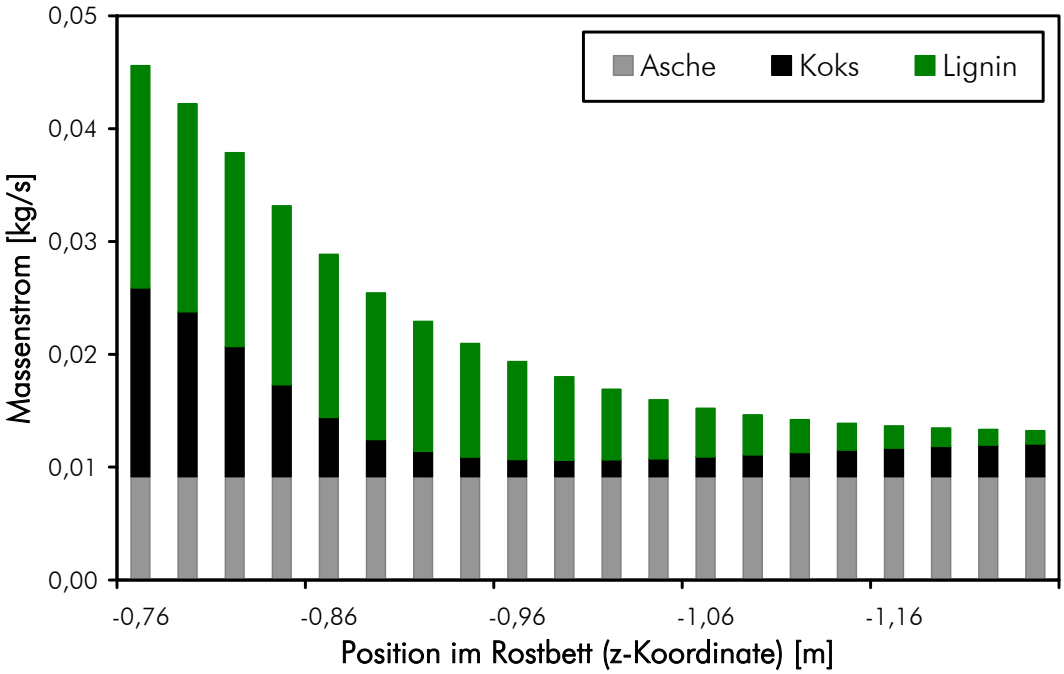


Abbildung 14-56: Verlauf des Massenstroms verschiedener Komponenten der festen Brennstoffphase im Rostbett bei eindimensionaler Simulation

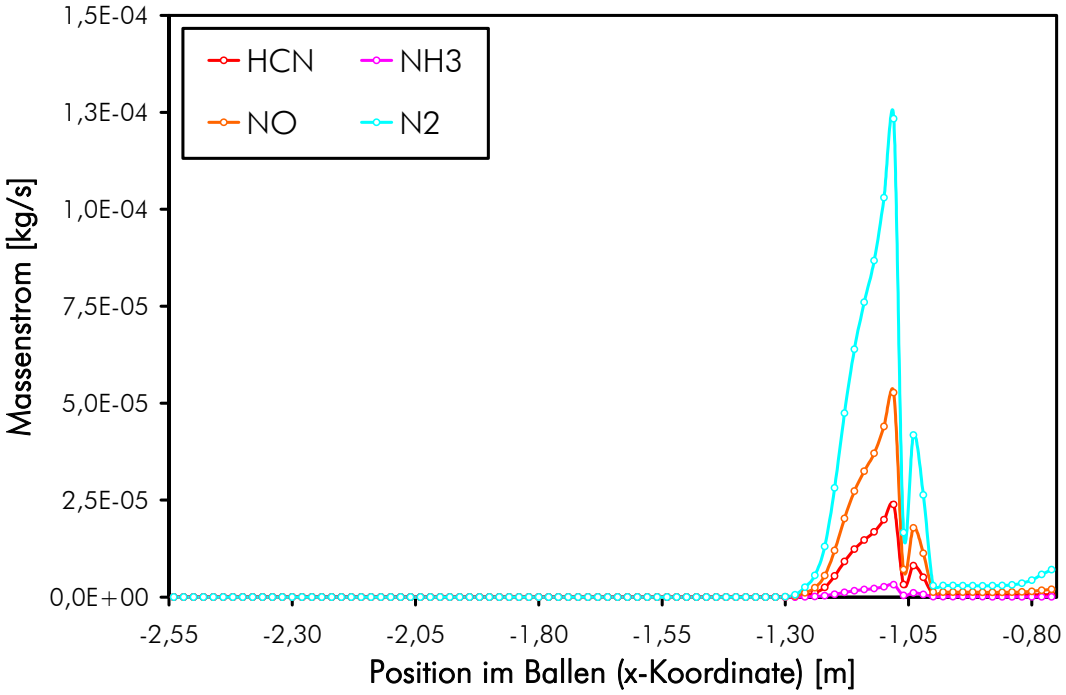


Abbildung 14-57: Verlauf der Massenströme freigesetzter gasförmiger Stickstoff-Spezies im Ballen bei eindimensionaler Simulation

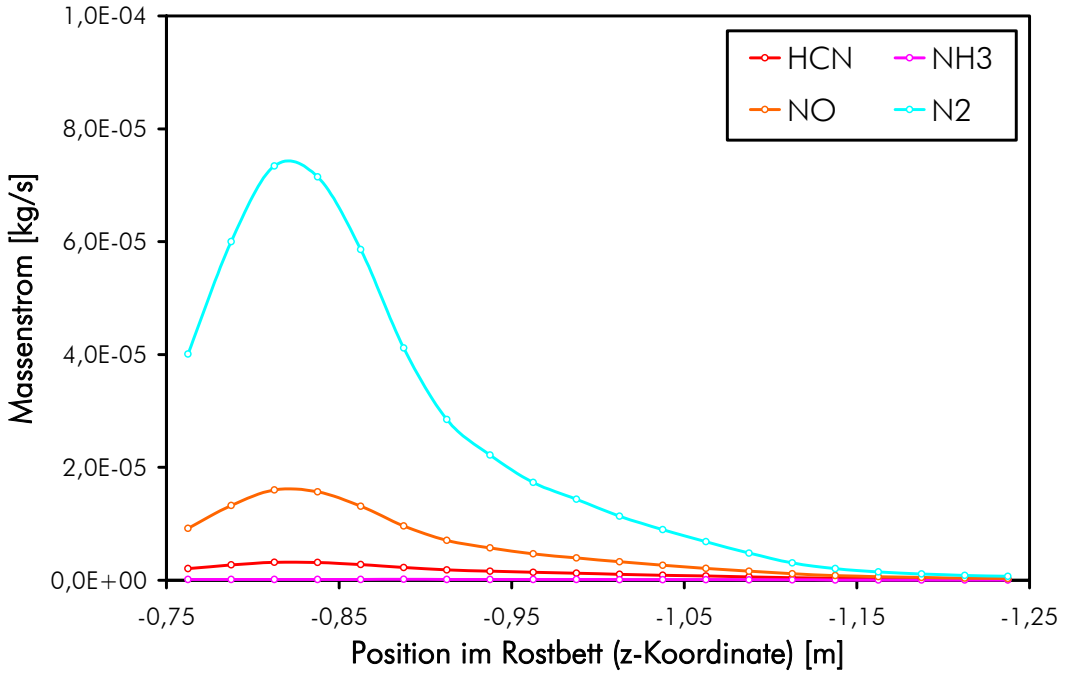


Abbildung 14-58: Verlauf der Massenströme freigesetzter gasförmiger Stickstoff-Spezies im Rostbett bei eindimensionaler Simulation

14.7 Ergebnisse der Globalbilanzierung

Tabelle 14-23: Vergleich von Immediat- sowie Elementaranalyse des verwendeten Maisganzpflanzen-Brennstoffes mit den angenommenen Analysen des Primärzonen- und Rostzonenbrennstoffes aus der Dreizonen-Verbrennungsmodellierung der Globalbilanzierung

Parameter	Einheit	Wert
Rohbrennstoff Maisganzpflanze		
Flüchtige Bestandteile	wt%, TS	74,87
Nichtflüchtige Bestandteile	wt%, TS	25,13
Koksgehalt (reaktiv)	wt%, TS	19,42
Aschegehalt (inert)	wt%, TS	5,71
Oberer Heizwert	kJ/kg, TS	18.116
C	wt%, TS	45,94
H	wt%, TS	6,08
O	wt%, TS	40,54
N	wt%, TS	1,05
Primärzonenbrennstoff		
Flüchtige Bestandteile	wt%, TS	96,59
Nichtflüchtige Bestandteile	wt%, TS	3,41
Koksgehalt (reaktiv)	wt%, TS	3,41
Aschegehalt (inert)	wt%, TS	0,00
Oberer Heizwert	kJ/kg, TS	15.706
C	wt%, TS	45,78
H	wt%, TS	6,80
O	wt%, TS	45,99
N	wt%, TS	1,44
Rostzonenbrennstoff		
Flüchtige Bestandteile	wt%, TS	14,20
Nichtflüchtige Bestandteile	wt%, TS	85,80
Koksgehalt (reaktiv)	wt%, TS	64,14
Aschegehalt (inert)	wt%, TS	21,66
Oberer Heizwert	kJ/kg, TS	24.937
C	wt%, TS	47,65
H	wt%, TS	4,25
O	wt%, TS	26,44
N	wt%, TS	0,00

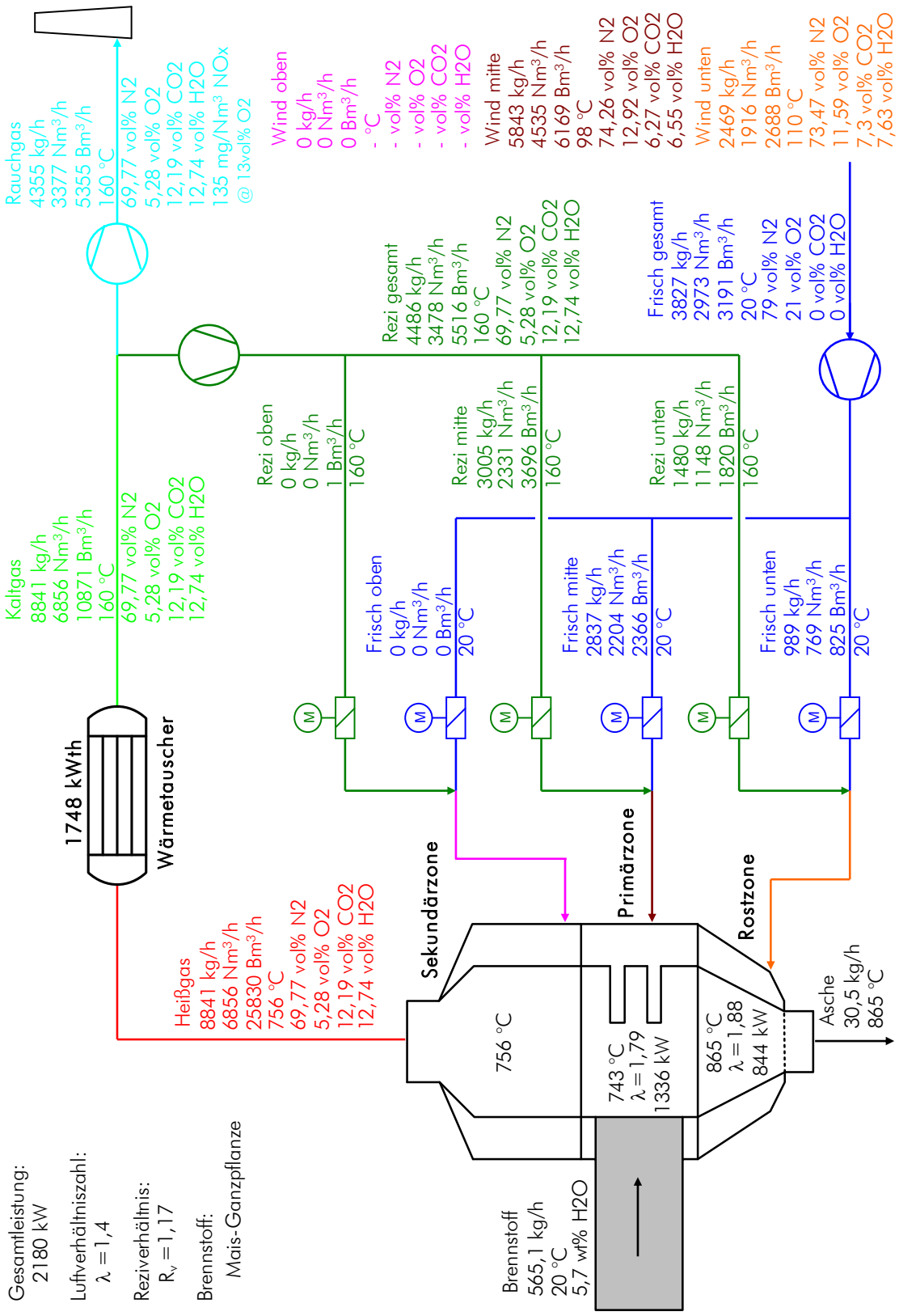


Abbildung 14-59: Verfahrensfließbild der Ganzballen-Verbrennungsanlage zu einem ausgewählten Zeitpunkt während des Hochfahrvorganges im Primärzonenbetrieb

14.8 Ergebnisse der CFD-Simulationen für den Verbrennungsapparat

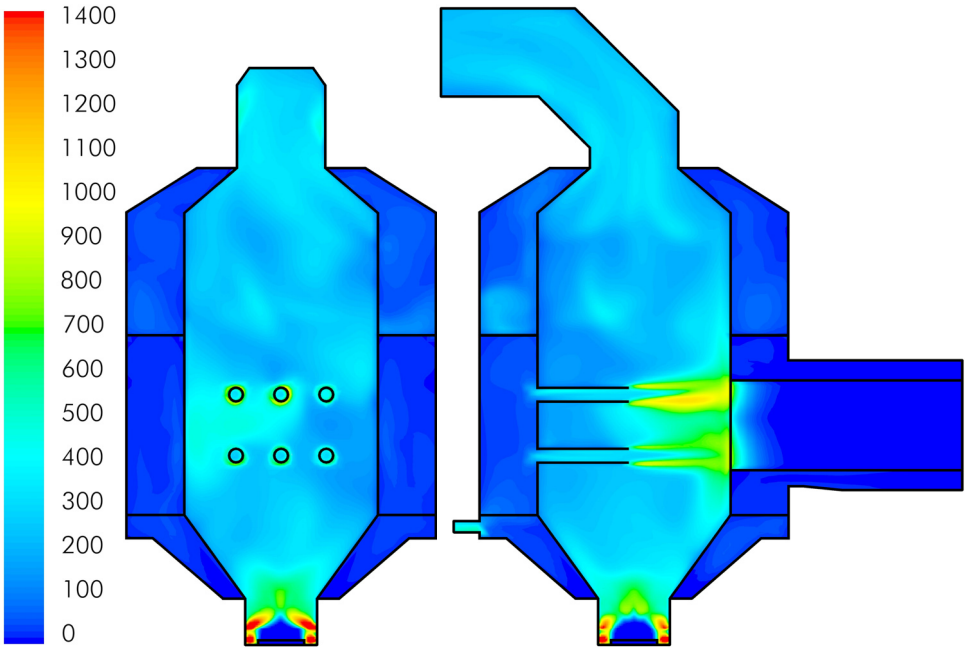


Abbildung 14-60: Contour-Plots der Turbulenzintensität (0 – 1400 %) auf den vertikalen Auswerteebenen (links: y=0; rechts: x=0)

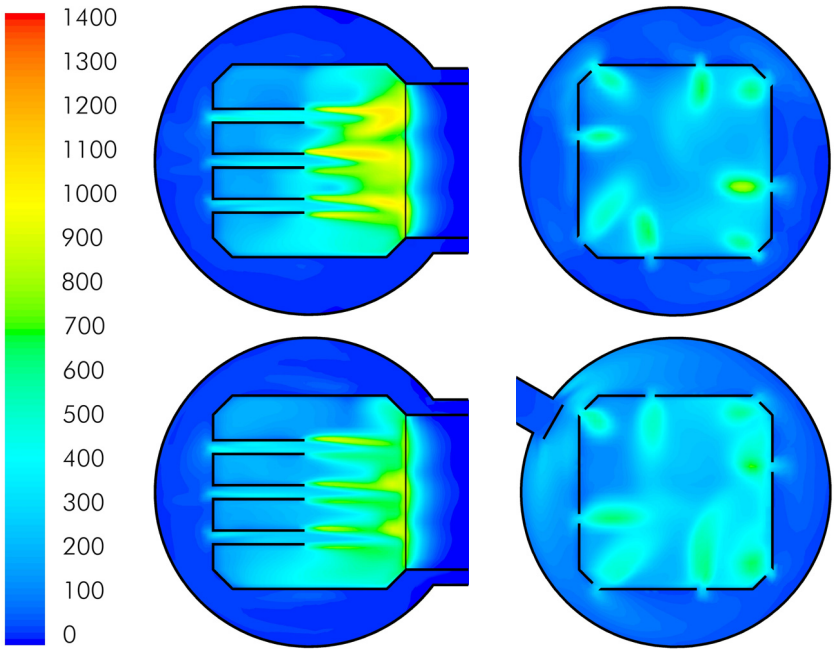


Abbildung 14-61: Contour-Plots der Turbulenzintensität (0 – 1400 %) auf den horizontalen Auswerteebenen (links unten: z=-0,2365; links oben: z=+0,2365; rechts unten: z=0,77; rechts oben: z=1,40)

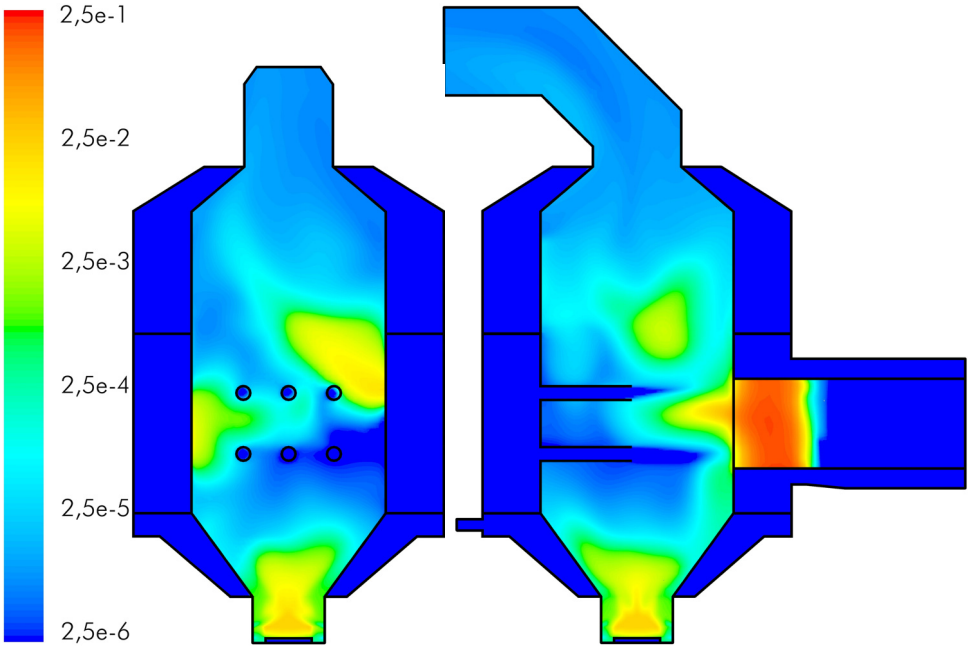


Abbildung 14-62: Contour-Plots des CxHy-Molenbruchs (logarithmische Darstellung, $2{,}5 \cdot 10^{-6}$ – $2{,}5 \cdot 10^{-1}$) auf den vertikalen Auswerteebenen (links: y=0; rechts: x=0)

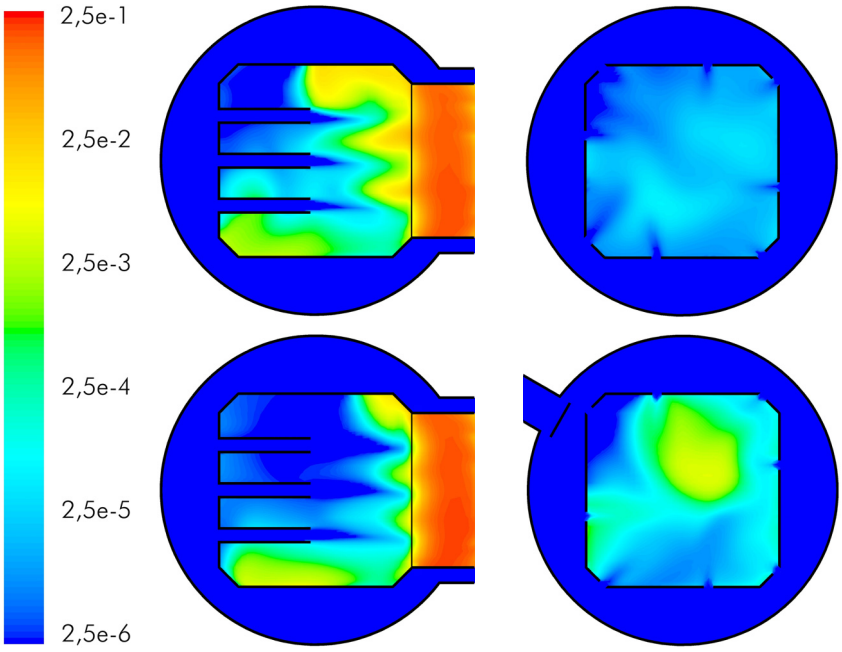


Abbildung 14-63: Contour-Plots des CxHy-Molenbruchs (logarithmische Darstellung, $2{,}5 \cdot 10^{-6}$ – $2{,}5 \cdot 10^{-1}$) auf den horizontalen Auswerteebenen (links unten: z=-0,2365; links oben: z=+0,2365; rechts unten: z=0,77; rechts oben: z=1,40)

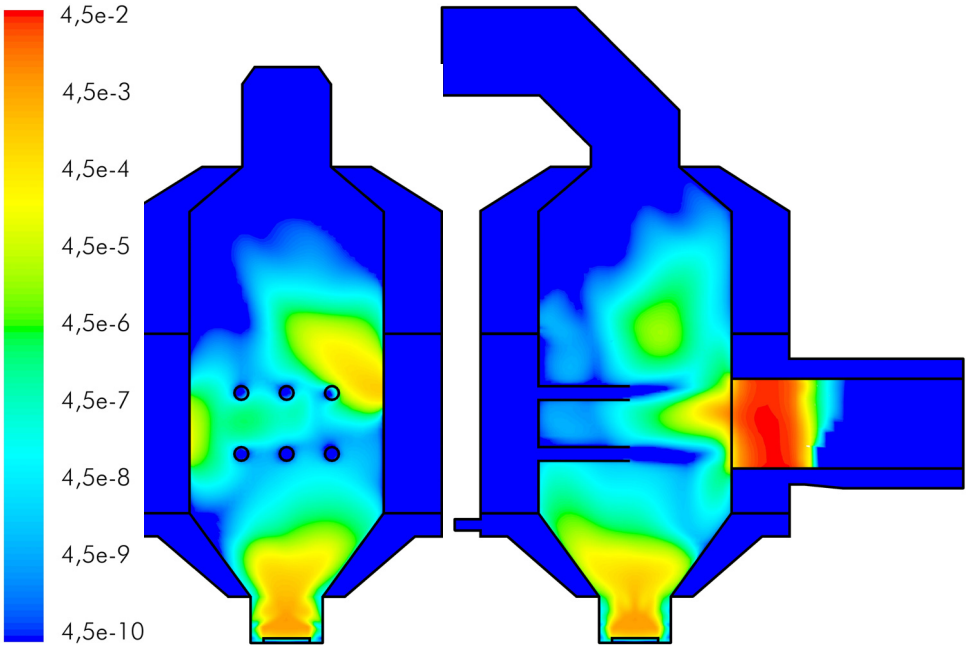


Abbildung 14-64: Contour-Plots des H2-Molenbruchs (logarithmische Darstellung, $4{,}5 \cdot 10^{-10}$ – $4{,}5 \cdot 10^{-2}$) auf den vertikalen Auswerteebenen (links: y=0; rechts: x=0)

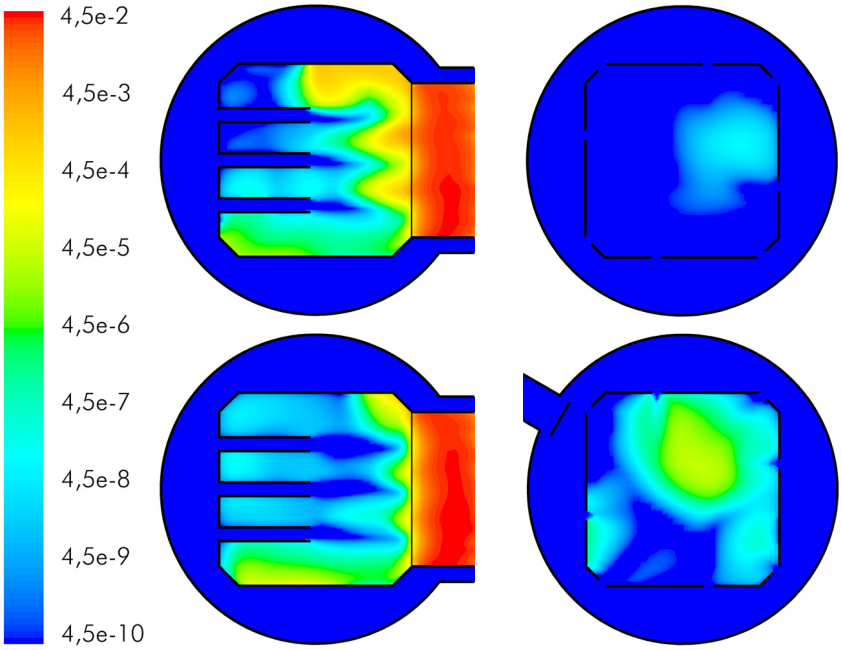


Abbildung 14-65: Contour-Plots des H2-Molenbruchs (logarithmische Darstellung, $4{,}5 \cdot 10^{-10}$ – $4{,}5 \cdot 10^{-2}$) auf den horizontalen Auswerteebenen (links unten: z=-0,2365; links oben: z=+0,2365; rechts unten: z=0,77; rechts oben: z=1,40)

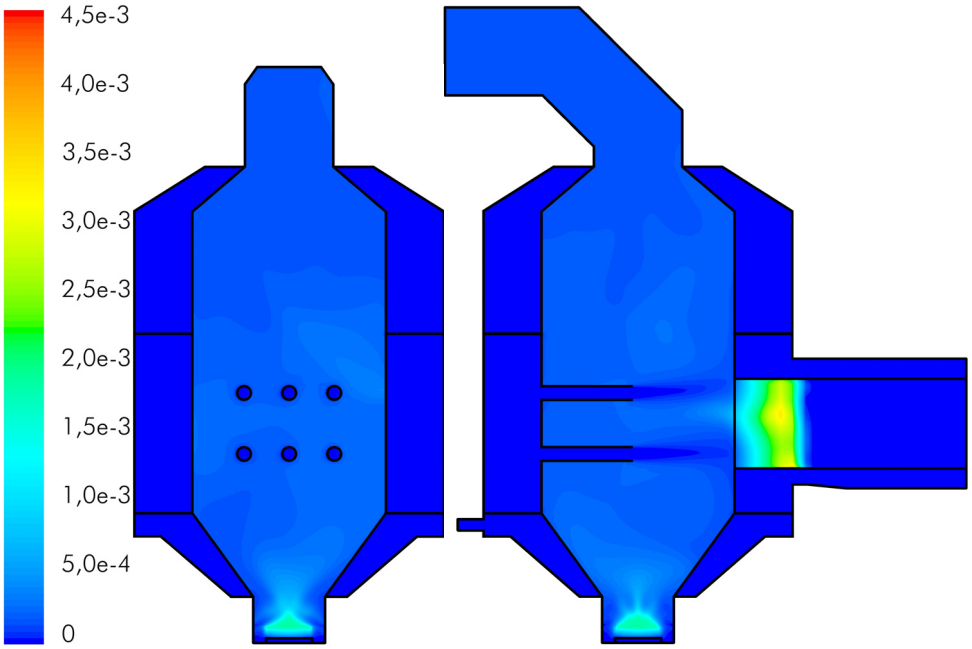


Abbildung 14-66: Contour-Plots des NO-Molenbruchs (0 – 4,5·10^{-3}) auf den vertikalen Auswerteebenen (links: y=0; rechts: x=0)

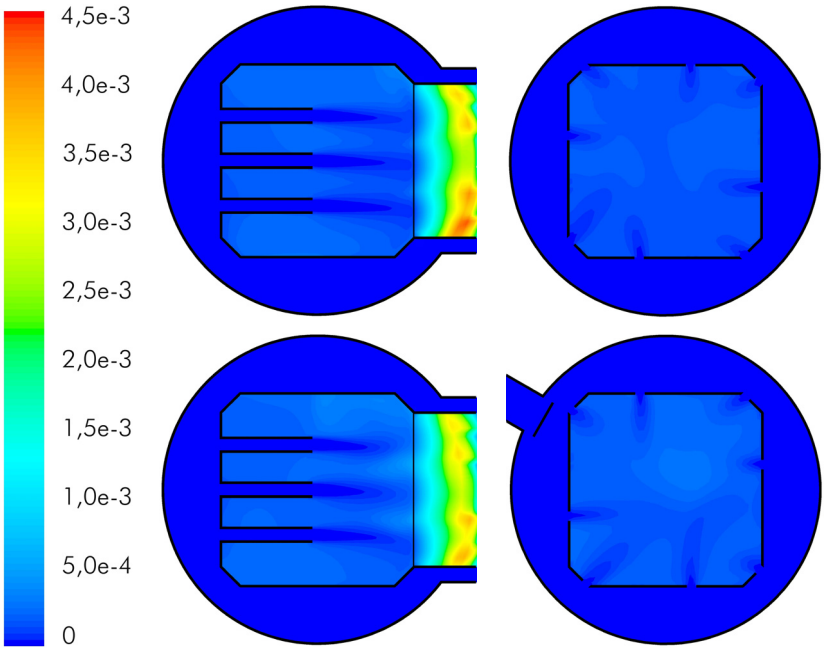


Abbildung 14-67: Contour-Plots des NO-Molenbruchs (0 – 4,5·10^{-3}) auf den horizontalen Auswerteebenen (links unten: z=-0,2365; links oben: z=+0,2365; rechts unten: z=0,77; rechts oben: z=1,40)

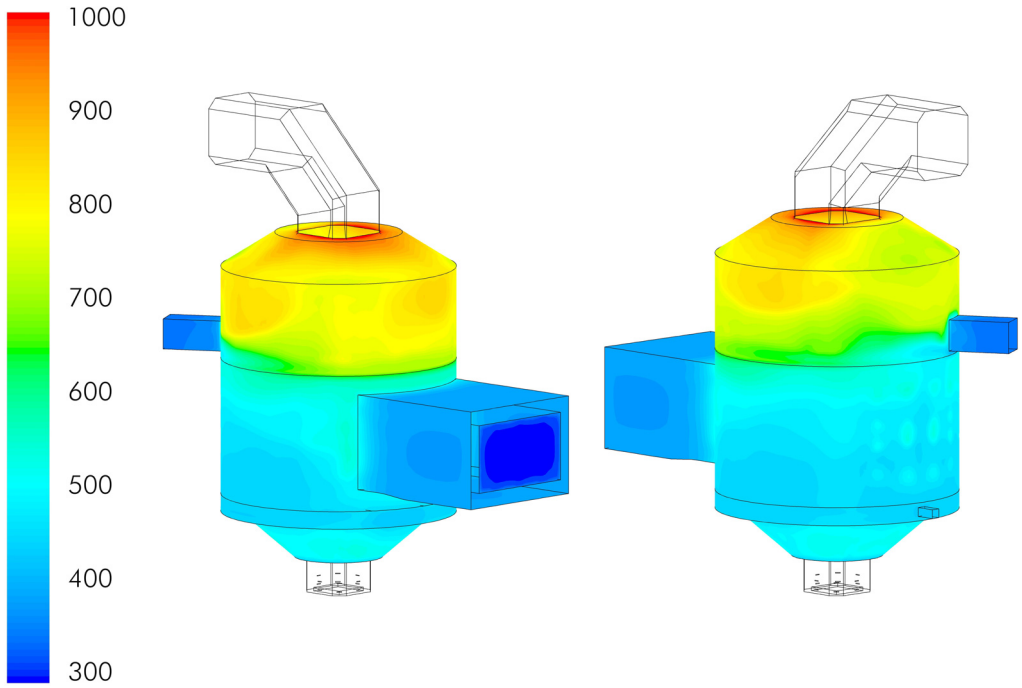


Abbildung 14-68: Blechtemperaturen (300 – 1000 K) des äusseren Brennkammermantels der Primär- und Sekundärzone

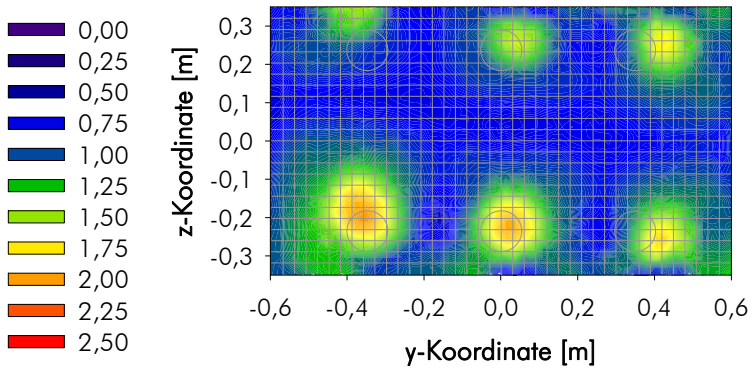


Abbildung 14-69: Contour-Plot des Betrages der Gas-Leerrohrgeschwindigkeit an der Ballenoberfläche als Mittelwert aus acht verschiedenen Iterations-Zeitpunkten (0 - 2,5 m/s)

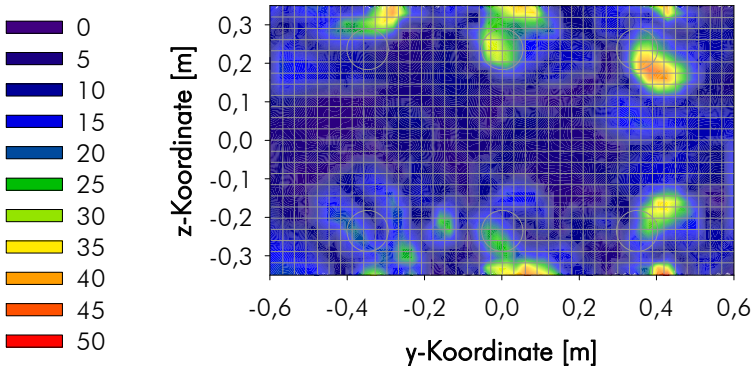


Abbildung 14-70: Contour-Plot der maximalen Abweichung des Betrages der Gas-Leerrohrgeschwindigkeit an der Ballenoberfläche vom errechneten Mittelwert aus acht verschiedenen Iterations-Zeitpunkten (0 - 50 %)

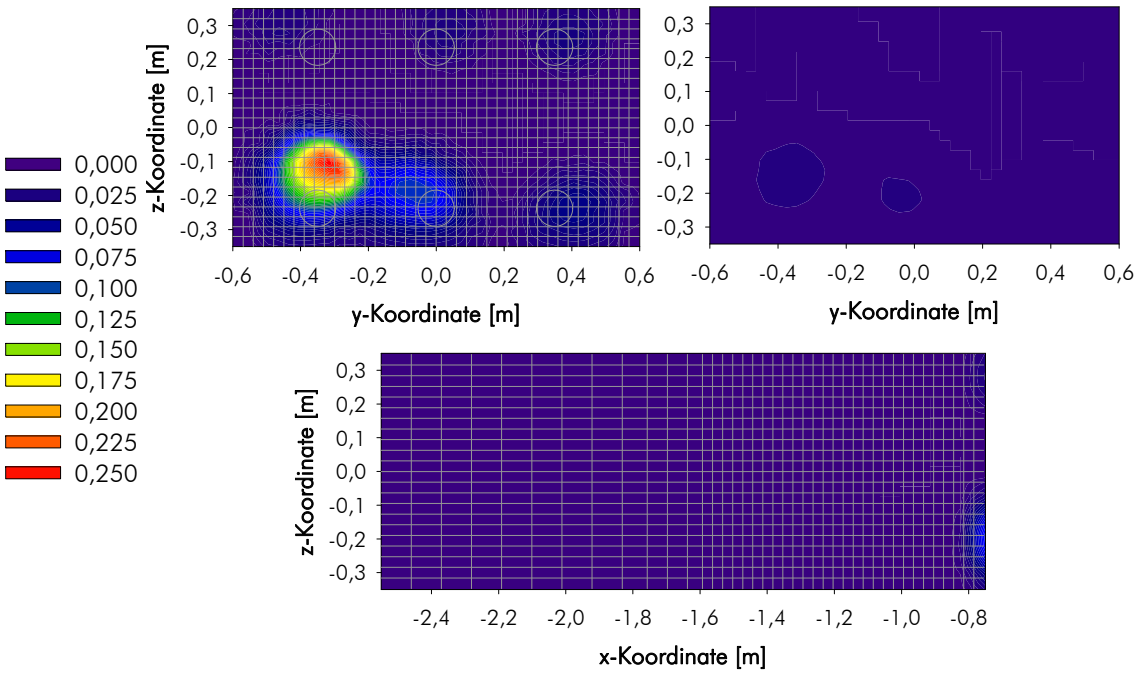


Abbildung 14-71: Contour-Plots der Koks-Abbrandrate (0 – 0,25 kg/m³.s) im porösen Biomasseballen als Querschnitt (links oben: an der Ballenoberfläche; rechts oben: Oberfläche -6 cm) sowie als Längsschnitt (unten: Schnitt durch mittlere Primärdüsenebene)

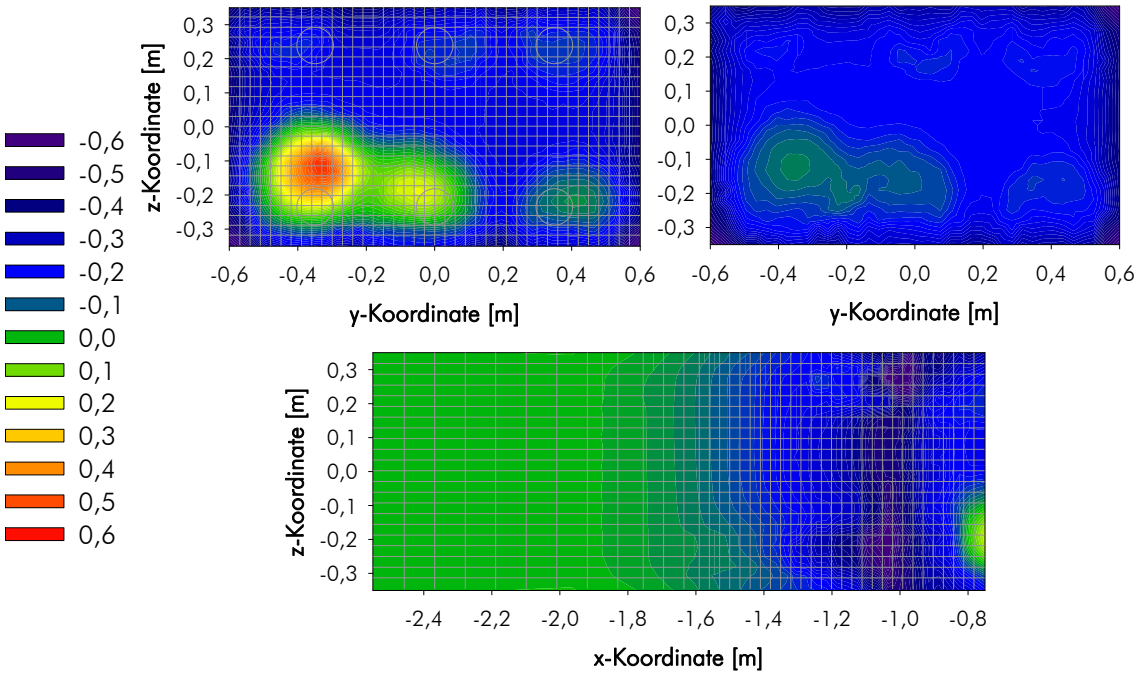


Abbildung 14-72: Contour-Plots des konvektiven Wärmeübergangs (-0,6 – 0,6 MW/m³) im porösen Biomasseballen als Querschnitt (links oben: an der Ballenoberfläche; rechts oben: Oberfläche -6 cm) sowie als Längsschnitt (unten: Schnitt durch mittlere Primärdüsenebene)

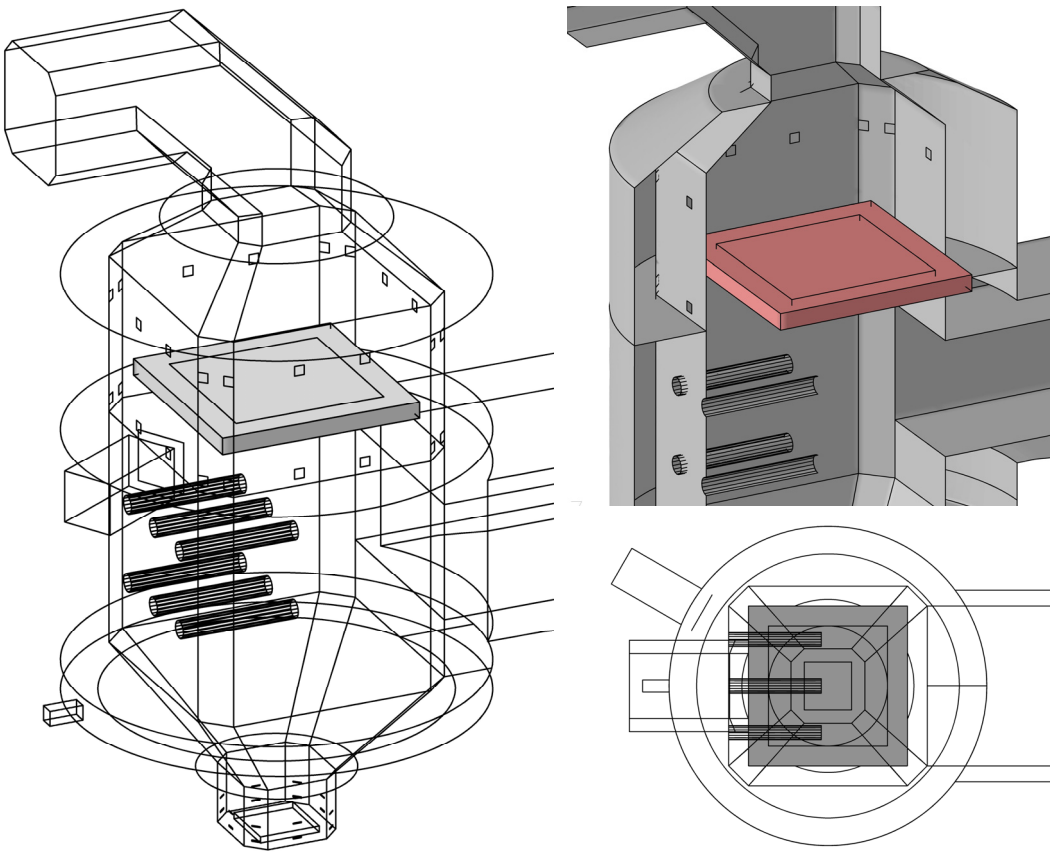


Abbildung 14-73: Darstellung der Geometrievariation durch einen Einhang in der Nachbrennzone

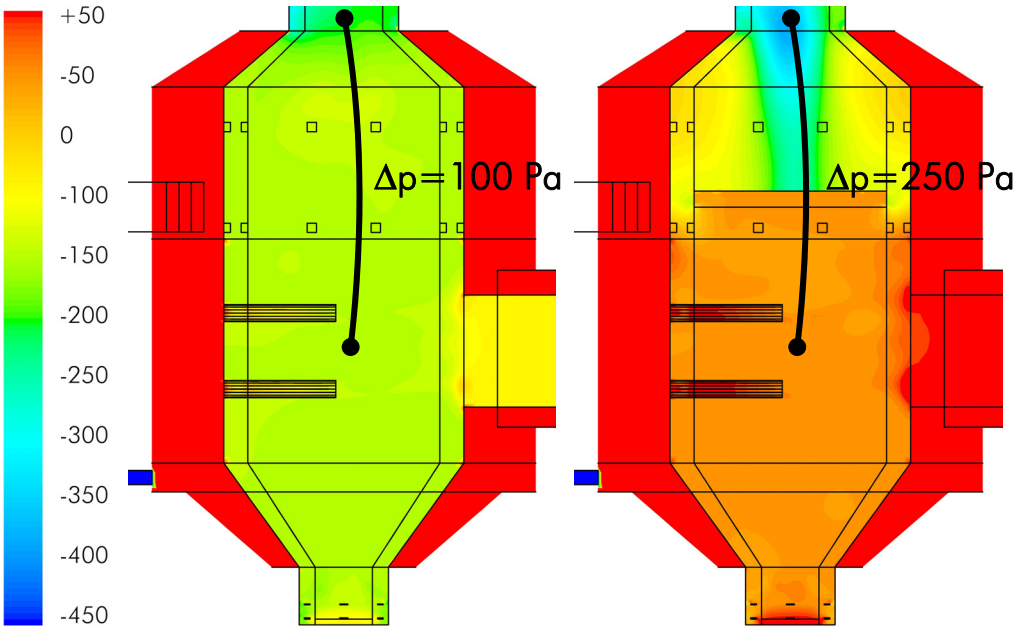


Abbildung 14-74: Contourplots des statischen Drucks (-450 – 50 Pa) für die unveränderte Geometrie (links) und die adaptierte Geometrie mit Einhang in der Nachbrennzone (rechts)

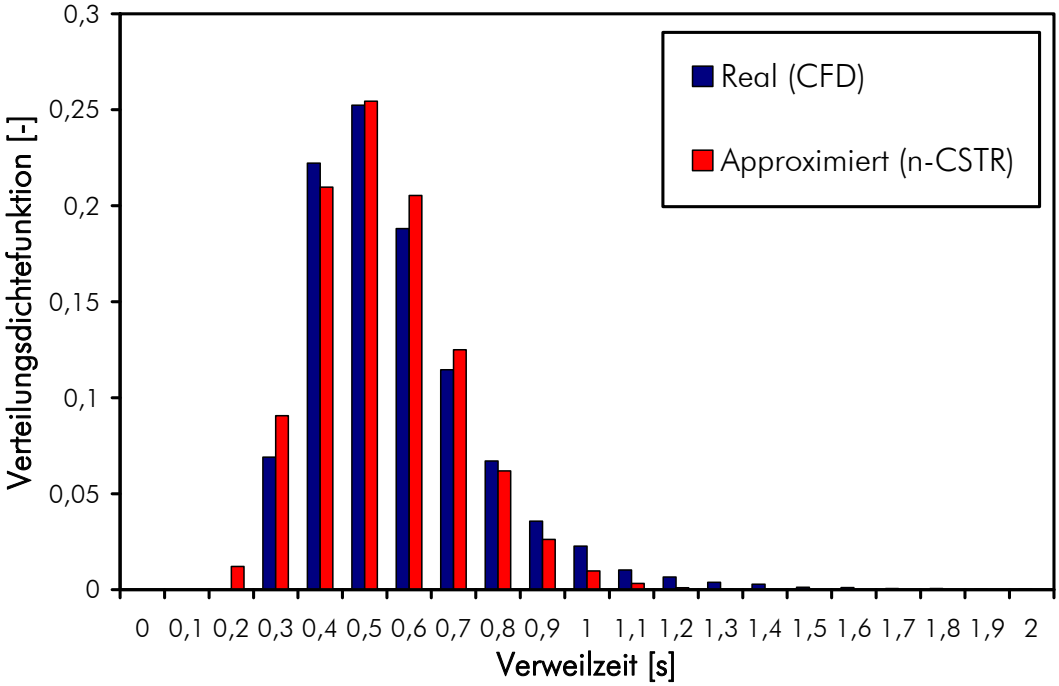


Abbildung 14-75: Verweilzeitverteilungen der realen Gasnachverbrennungszone (CFD) und der Approximation mittels 11-stufiger Rührkesselkaskade im Standardbetriebszustand

Lebenslauf

Dipl.-Ing. Martin Miltner
Mozartgasse 603
3034 Maria Anzbach

Geburtsdatum und -ort: 14. September 1975, Wien, Österreich
Staatsbürgerschaft: Österreich
Familienstand: verheiratet, 1 Sohn (geboren 2010)

Ausbildung:

1990-1995	Höhere Technische Bundeslehr- und Versuchsanstalt, Abteilung für Bautechnik & Umwelttechnik in Mödling, Reifeprüfung mit Auszeichnung bestanden
1995	Verleihung des „Ehrenringes des Absolventenvereins der HTL Mödling“
1995-2002	Diplomstudium Verfahrenstechnik, Studienzweig Chemieingenieurwesen an der Technischen Universität Wien sowie an der Technischen Universität Karlsruhe, Diplomprüfung mit Auszeichnung bestanden
seit 2002	Doktoratsstudium der Technischen Wissenschaften auf dem Gebiet der Verfahrenstechnik, Schwerpunkt Thermische Verfahrenstechnik

Berufserfahrung:

seit 04/2003	Projektassistent am Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften der Technischen Universität Wien, Forschungsbereich Thermische Verfahrenstechnik und Simulation
2009-2012	Junior Researcher im K1-Zentrum Bioenergy 2020+

Tätigkeitsbereiche (auszugsweise):

04/2003-05/2005	Nationale Projekte „Versuchsanlage zur energetischen Nutzung von ballenförmigen, biogenen Brennstoffen“ sowie „Versuche zur Serienreife einer Brennkammer für ballenförmige Biomassen (Anlagenbetrieb, Versuchsauswertung, CFD-Simulation)
04/2003-12/2005	EU-Projekt „NESSIE – New Small Scale Innovative Energy Biomass Combustor“ (Anlagenbetrieb, Versuchsauswertung, Entwicklung der Automatisierungstechnik, CFD-Simulation)
10/2006-12/2009	Nationales Projekt „Virtuelles Biogas – Aufbereitung und Netzeinbindung“ (basic und detail engineering, Anlagenaufbau, Anlagenbetrieb, Entwicklung und Implementierung der Automatisierungstechnik, Versuchsauswertung)
01/2010-08/2014	Nationale Projekt e „BiogasOxiSulf – Hochverfügbares, innovatives Entschwefelungsverfahren für Biogas“ sowie „SHOCOTEC – Kurzzeitkontaktor zur Entschwefelung emeuerbarer gasförmiger Energieträger“ (detail engineering, Anlagenaufbau, Automatisierungstechnik)
05/2011-04/2014	EU-Projekt „Biomethane Regions – Promotion of biomethane and ist market development thtough local and regional partnerships“ (Bereitstellung technischer Expertise und Publikation von Werkzeugen zur Analyse und Verbreitung von Biogasaufbereitung)
05/2011-05/2012	Nationales Projekt „Grenn Energy Conversion & Storage – Umwandlung von Grünstrom in speicherbare Energieträger in Smart Grids“ (Techno-ökonomische Studie)
01/2012-12/2014	Nationales Projekt „Decentral Green H2 – Wasserstoff aus Biomasse“ (basic und detail engineering, Anlagenaufbau, Entwicklung und Implementierung der Automatisierungstechnik)