



Lehrstuhl für Energieanlagen und Energieprozesstechnik,

Ruhr-Universität Bochum,

Dokumentation der EBS-Modelle

Inhalt

1 Modelle zur Beschreibung des Abbrands- und des Flugverhaltens von EBS (FLUFF)	3
1.1 Charakterisierung von Ersatzbrennstoffen	3
1.1.1 Approximation und Erfassung der Partikelgeometrie	3
1.2 Modellierung des Abbrandverhaltens	5
1.2.1 Massenbilanz des Einzelpartikels	6
1.2.2 Partikelaufheizung	6
1.2.3 Trocknung	10
1.2.4 Pyrolyse	11
1.2.5 Heterogene Restkoksverbrennung	12
1.2.6 Schmelzvorgang	14
1.2.7 Thermische Zersetzung	15
1.2.8 Chemische Reaktionen in der Gasphase	16
1.2.9 Berücksichtigung der Statistik der EBS-Kenngrößen	17
1.3 Modellierung der Partikelbewegung	17
1.3.1 Modellgrundlagen und Bewegungsgleichungen sphärischer Partikel	17
1.3.2 Modellerweiterung zur Beschreibung der Bewegung komplexer Partikel	19
2 Literaturverzeichnis	29
Anhang	31

1 Modelle zur Beschreibung des Abbrands- und des Flugverhaltens von EBS (FLUFF)

Im Folgenden werden die physikalisch/chemischen Grundlagen der FLUENT-UDFs zur Beschreibung der thermochemischen Umsetzung von EBS (FLUFF) beschrieben, die vom Lehrstuhl für Energieanlagen und Energieprozesstechnik entwickelt wurden. Es handelt sich hierbei um den Stand der Modelle nach Abschluss des AiF-IGF-Projektes 20410 N „Bereitstellung von experimentell abgesicherten CFD-Modellen für die thermische Umsetzung von Ersatzbrennstoffen (FLUFF)“ mit Stand vom 31.1.2022. Das Projekt wurde über die AiF im Rahmen des Programms zur Förderung der Industriellen Gemeinschaftsforschung (IGF) vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert. Für den Regelbrennstoff Kohlenstaub, sofern er mitverfeuert wird, werden die Standard-Routinen verwendet, die FLUENT bereitstellt.

1.1 Charakterisierung von Ersatzbrennstoffen

1.1.1 Approximation und Erfassung der Partikelgeometrie

Ersatzbrennstoffpartikel sind gekennzeichnet durch eine unregelmäßige Partikelform mit komplexer Gestalt. Der gewählte Modellierungsansatz für das Abbrand- und Flugverhalten basiert auf einer Approximation der komplexen, häufig flächigen Partikelgeometrie über einen quaderförmigen Körper mit drei definierten Kantenlängen a , b und c entsprechend Abbildung 1.1.

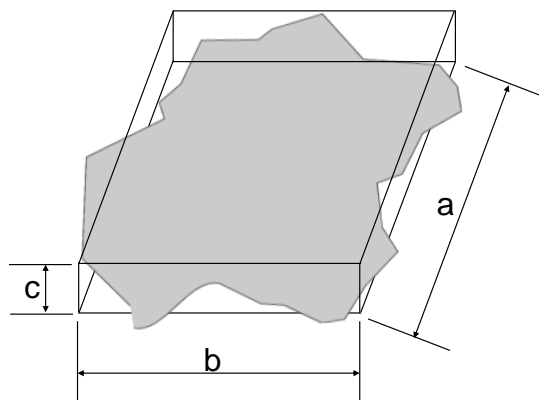


Abbildung 1.1: Approximation einer komplexen Partikelgeometrie durch einen Quader (nach [1])

Die Kantenlängen der Partikel sind zu messen und können anschließend in ein Verhältnis zueinander gesetzt werden. Abbildung 1.2 stellt die gemessenen Seitenverhältnisse ausgewählter EBS-Fractionen in einem Zingg-Diagramm dar. Die Abbildung zeigt die für die Fractionen charakteristischen Bereiche aber auch die Streuung der Partikelgeometrien innerhalb der Fractionen. Aus diesem Grund ist vor allem in Hinblick auf die Simulationen auch die statistische Verteilung der Partikelgeometrien zu berücksichtigen.

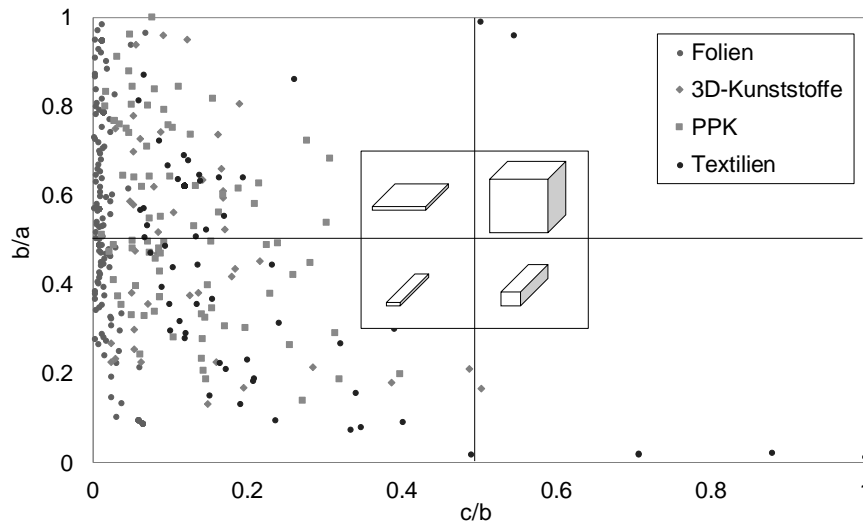


Abbildung 1.2: Zingg-Diagramm gemessener Seitenverhältnisse einiger EBS-Fractionen

In einem weiteren Schritt der Charakterisierung ist die Partikelmasse zu ermitteln. Auf Grundlage der Partikelmassen und der Volumina der Quader lässt sich die resultierende Dichte der Fractionen bestimmen.

Unter Verwendung der mittleren Dichten der Fractionen lassen sich Äquivalentdurchmesser der gemessenen Partikel wie folgt bestimmen:

$$d_V = \left(\frac{6 m_p}{\pi \rho_{p,Frak}} \right) \quad \text{Gl. 1.1}$$

Hierbei ist d_V der Äquivalentdurchmesser einer volumengleichen Kugel, m_p die Partikelmasse und $\rho_{p,Frak}$ die mittlere Dichte der Fraction. Über die Äquivalentdurchmesser wird zur mathematischen Beschreibung der Partikelgrößenverteilung eine Rosin-Rammler-Sperling-Bennett-Funktion (RRSB-Verteilung) generiert werden. Die Rückstandssummenkurve R kann über den Lageparameter x' und der Streubreite n berechnet werden.

$$R(x) = e^{-\left(\frac{x}{x'}\right)^n} \quad \text{Gl. 1.2}$$

Verglichen mit Regelbrennstoffen, wie beispielsweise Braunkohlenstaub mit Partikelgrößen im Mikrometerbereich, weisen Ersatzbrennstoffe deutlich größere Abmessungen auf. Die eigentlichen Kantenlängen der nicht-sphärischen EBS-Partikel betragen zudem häufig das Vielfache des berechneten Äquivalentdurchmessers. Aus den, in den Simulationen

vorzugebenden, RRSB-Verteilungen kann die Hauptkantenlänge a über die Seitenverhältnisse und dem Äquivalentdurchmesser zurückgerechnet werden.

$$a = d_v \cdot \sqrt[3]{\frac{\pi}{6} \cdot \left(\frac{a}{b}\right)^2 \cdot \frac{b}{c}} \quad \text{Gl. 1.3}$$

1.2 Modellierung des Abbrandverhaltens

Die EBS-Fractionen lassen sich in zwei Gruppen einteilen. Die Gruppe der biogenen Fraktionen wie PPK (Pappe-Papier-Karton) und Textilien, die ein Abbrandverhalten ähnlich zu fossilen Festbrennstoffen über einen Pyrolyseprozess und einer heterogenen Reaktion des Restkoks aufweisen. Die andere Gruppe beinhaltet die Kunststoff-Fractionen, deren Umsetzung über eine Phasenumwandlung vom festen in einen flüssigen Zustand mit anschließender thermischer Zersetzung in die Gasphase beschrieben werden kann. Demnach basiert das nachfolgend beschriebene Simulationsmodell auf der Einteilung der Ersatzbrennstofffraktionen in diese beiden Gruppen. Die Berechnung erfolgt in der CFD-Simulation für jede Fraktion separat entsprechend dem der Gruppe zugeordneten Umwandlungsmechanismus.

Tabelle 1.1 zeigt die Zuordnung der wesentlichen Fraktionen zu den unterschiedlichen Gruppen und führt deren in der Modellierung berücksichtigten Umwandlungsprozesse auf. Für die biogenen, koks bildenden Fraktionen erfolgt die Modellierung auf Basis der bekannten Modelle der Kohleverbrennung. Für die Kunststoffe wird angenommen, dass diese keinen Restkoks bilden, auch wenn dies in Einzelpartikelreaktor-Untersuchungen und Immediatanalysen des oben aufgeführten AiF-Projektes teilweise festzustellen war. Die Modellierung der Kunststofffraktionen erfolgt in Anlehnung an ein von Bluhm-Drehnhaus [2] vorgestelltes Modell zur thermischen Umsetzung von Kunststoffen. Eine Besonderheit stellt insbesondere die mit dem Schmelzvorgang einhergehende Veränderung der Partikelgeometrie dar, die neben der Änderung des Wärmeübergangs auch die Partikelbewegung im Gasstrom beeinflusst. Für alle Fraktionen gilt, dass die in Tabelle 1.1 aufgeführten Teilprozesse in einem Brennstoffpartikel gleichzeitig ablaufen können.

Tabelle 1.1: Im Modell berücksichtigte Umwandlungsphasen und Zuweisung der Fraktionen

Umwandlungsprozess	Biogene/koksbildende Fraktionen: PPK, Textil, Feinanteil	Synthetische Fraktionen: Folien, 3D-Kunststoffe
I	Partikelauflösung	Partikelauflösung
II	Intra-Partikel Trocknung	Oberflächentrocknung
III	Pyrolyse	Schmelzvorgang
IV	Koksabbrand	Thermische Zersetzung

1.2.1 Massenbilanz des Einzelpartikels

Die zeitliche Änderung der Partikelmasse ergibt sich während der thermischen Umsetzung aus der Summe der Änderungen der im Brennstoff enthaltenen Komponenten von Wasser (W), flüchtigen Bestandteilen (Fl) und fixem Kohlenstoff (C_{fix}).

$$\frac{\partial m_p}{\partial t} = \frac{\partial m_W}{\partial t} + \frac{\partial m_{Fl}}{\partial t} + \frac{\partial m_{C_{fix}}}{\partial t} \quad \text{Gl. 1.4}$$

Für die Kunststofffraktionen wird ein Anteil des fixen Kohlenstoffs von Null angenommen und der entsprechende Massenanteil wird den flüchtigen Bestandteilen zugerechnet.

1.2.2 Partikelauflösung

Die Änderung der Partikeltemperatur ergibt sich aus der Bilanz der Wärmeströme um das Einzelpartikel. Die Wärmebilanz umfasst zum einen den Wärmeaustausch mit der Umgebung durch Konvektion und Strahlung und zum anderen die endo- und exothermen thermochemischen Prozesse im Partikel.

$$\frac{\partial Q_p(T_p(r, t))}{\partial t} = \sum \dot{Q} = \dot{Q}_{Konv} + \dot{Q}_{Str} + \dot{Q}_{Reak} \quad \text{Gl. 1.5}$$

In der Energiebilanz des Partikels beschreibt \dot{Q}_{Konv} den durch Konvektion übertragenen Wärmestrom, \dot{Q}_{Str} den durch Strahlung übertragenen Wärmestrom und \dot{Q}_{Reak} die resultierenden Wärmeströme aufgrund der im Partikel ablaufenden Umwandlungsprozesse wie Trocknung, Pyrolyse, Schmelzen und Zersetzen.

Konvektiver Wärmestrom

Der Betrag der konvektiv übertragenen Wärmemenge wird durch die Temperaturdifferenz zwischen Gasstrom und Partikeloberfläche ($T_G - T_{p,o}$), durch eine Grenzfläche zwischen Partikel und Gas sowie dem Wärmeübergangskoeffizienten α bestimmt.

$$\dot{Q}_{Konv} = \alpha A_p (T_G - T_{p,0}) \quad \text{Gl. 1.6}$$

Die vom Gas überströmte Grenzfläche wird hier mit der Partikeloberfläche A_p gleichgesetzt, die sich über die Kantenlängen des quaderförmigen Modellpartikels berechnet. Der Wärmeübertragungskoeffizient α wird durch die Größe und die geometrischen Verhältnisse der Kontaktfläche, die Oberflächenbeschaffenheit und die Strömungsgeschwindigkeit bestimmt. Der Wärmeübergangskoeffizient wird über die Nusselt-Zahl unter Berücksichtigung der Wärmeleitfähigkeit des Gases λ_G und der charakteristischen Länge L_c abgeschätzt.

$$\alpha = \frac{Nu \lambda_G}{L_c} \quad \text{Gl. 1.7}$$

Die Berechnung der Nusselt-Zahl erfolgt über die Verknüpfung eines turbulenten und laminaren Teils [3] und einem unteren Grenzwert von 2.

$$Nu = 2 + \sqrt{Nu_{lam}^2 + Nu_{turb}^2} \quad \text{Gl. 1.8}$$

Die laminare und turbulente Nusselt-Zahl, für die im Modell angenommenen quaderförmigen Partikel, werden über Korrelationen für erzwungene Konvektion an einer überströmten Platte berechnet [4,5].

$$Nu_{lam} = 0,664 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \quad \text{Gl. 1.9}$$

$$Nu_{turb} = \frac{0,037 Re_p^{0,8} Pr}{1 + 2,443 Re_p^{-0,1} (Pr^{2/3} - 1)} \quad \text{Gl. 1.10}$$

Die dimensionslose Reynoldszahl Re_p berechnet sich aus der Dichte des Gases ρ_G , der Relativgeschwindigkeit zwischen Gas und Partikel $\vec{v}_p - \vec{v}_G$, der dynamischen Viskosität des Gases η_G und der charakteristischen Länge L_c .

$$Re_p = \frac{\rho_G \cdot |\vec{v}_p - \vec{v}_G| \cdot L_c}{\eta_G} \quad \text{Gl. 1.11}$$

Zur Bestimmung der charakteristischen Länge der Ersatzbrennstoffpartikel wird eine längs überströmte Platte mit der Länge der Seite b des Partikels betrachtet.

$$L_c = b = d_v \cdot \sqrt[3]{\frac{\pi}{6} \cdot \frac{b}{a} \cdot \frac{b}{c}} \quad \text{Gl. 1.12}$$

Strahlungswärmestrom

Der auf das Partikel einfallende Strahlungswärmestrom lässt sich über das Stefan–Boltzmann-Gesetz für graue Strahler wie folgt formulieren:

$$\dot{Q}_{Str} = \sigma \varepsilon_p A_p (T_{Str}^4 - T_{P,o}^4) \quad \text{Gl. 1.13}$$

Die Intensität der übertragenen Strahlungswärmeströme berechnet sich aus der Differenz der vierten Potenz von Partikeloberflächen- und effektiver Strahlungstemperatur T_{Str} der Umgebung, der Partikeloberfläche A_p , des Emissionsgrads der Partikel ε_p und der Stefan-Boltzmann-Konstante σ ($= 5,67040 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$).

Die effektive Strahlungstemperatur ergibt sich aus der Einbindung des EBS-Modells in die CFD-Software ANSYS Fluent® und wird dort in Abhängigkeit der gewählten Einstellungen über das gewählte Strahlungsmodell berechnet (*Spherical-Harmonics-Methoden* oder *Discrete Ordinate*). Die CFD-Software berechnet die Intensität der Einfallsstrahlung G [W/m^2] auf die Partikeloberflächen und betrachtet dabei die Feuerraumwände als grauen Strahler. Weiterhin wird ein Gesamtemissionsgrad der Gase berücksichtigt, der aus der gewichteten Summe aller grauen Gase nach dem *weighted-sum-of-gray-gases-model* (WSGGM) von Hottel & Sarofim [6] mit der Wichtungsfunktion nach Smith [7] berechnet wird. Die Berechnung des Gesamtemissionsgrads schließt auch die lokale Partikelbeladung und deren Emissionsgrade ein. Die Strahlungstemperatur errechnet sich aus der Einfallsstrahlung zu:

$$T_{Str} = \left(\frac{G}{4\sigma} \right)^{\frac{1}{4}} \quad \text{Gl. 1.14}$$

Reaktionswärmeströme

Die während der thermischen Umsetzung der Ersatzbrennstoffpartikel ablaufenden chemischen und physikalischen Prozesse verursachen weitere Wärmequellen bzw. -senken innerhalb des Partikels und beeinflussen so die Wärmebilanz. In Abhängigkeit der den Gruppen zugeordneten Umwandlungsmechanismen (Tabelle 1.1) ergibt sich für die biogenen, koks-bildenden Fraktionen aus der Trocknung (Tr) der Pyrolyse (Pyr) und der heterogenen Restkoksverbrennung ($Koks$)

$$\dot{Q}_{Reak} = \dot{Q}_{Tr} + \dot{Q}_{Pyr} + \dot{Q}_{Koks} = \frac{\partial m_W}{\partial t} \cdot \Delta h_W + \frac{\partial m_{Fl}}{\partial t} \cdot \Delta h_{Fl} + \frac{\partial m_{C_{fix}}}{\partial t} \cdot \Delta h_{C_{fix}} \quad \text{Gl. 1.15}$$

und für die nicht-koksbildenden Kunststofffraktionen aus der Trocknung (Tr), dem Schmelzvorgang ($Schmelz$) und der Zersetzung der geschmolzenen Masse (Zer)

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{Reak} &= \dot{Q}_{Tr} + \dot{Q}_{Schmelz} + \dot{Q}_{Zer} \\ &= \frac{\partial m_W}{\partial t} \cdot \Delta h_W + \frac{\partial m_{fest}}{\partial t} \cdot \Delta h_{Schmelz} + \frac{\partial m_{flüssig}}{\partial t} \cdot \Delta h_{Zer}\end{aligned}\quad \text{Gl. 1.16}$$

Innerer Wärmetransport

Bei Ersatzbrennstoffpartikeln liegen Biot-Zahlen im Bereich von $Bi > 10$ vor und es kommt daher zu Temperaturgradienten im Partikel.

Aus diesem Grund werden die Ersatzbrennstoffpartikel in dieser Arbeit über den Radius r in 30 Schalen diskretisiert und zwischen den Stützstellen die eindimensionale Wärmeleitungsgleichung numerisch gelöst.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_p \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{n}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad \text{Gl. 1.17}$$

In dieser Gleichung bezeichnet α_p die Temperaturleitfähigkeit des Partikels. Die Lösung der eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung erfolgt in Anlehnung an die Arbeit von Bro-sch [8] über das Crank-Nicholson Verfahren [9] für eine Kugel ($n = 2$). Dies stellt hinsichtlich der im Initialzustand eher flachen EBS-Partikel eine gewisse Vereinfachung dar, reduziert jedoch den Implementierungsaufwand erheblich, da das Discrete-Phase-Model stets den Durchmesser einer volumengleichen Kugel berücksichtigt.

Die Verwendung des Schalenmodells ermöglicht es, den Temperaturverlauf innerhalb des Partikels rechnerisch abzubilden. Hierdurch können Reaktionsfronten für die im weiteren Verlauf dieses Kapitels beschriebenen Umsetzungsphasen berechnet werden. Diese Reaktionsfronten unterteilen das Partikel in einen Bereich, dessen Temperatur oberhalb und einen Bereich dessen Temperatur unterhalb einer vordefinierten Grenztemperatur liegt und können so die verfügbaren Massen berechnen, die der entsprechenden Umsetzungsphase zur Verfügung stehen. Die Reaktionsfronten werden über dimensionslose Reaktionsradien $r^+ = r_T/r_p$ beschrieben, die von der Partikeloberfläche in den Partikelkern vorschreiten.

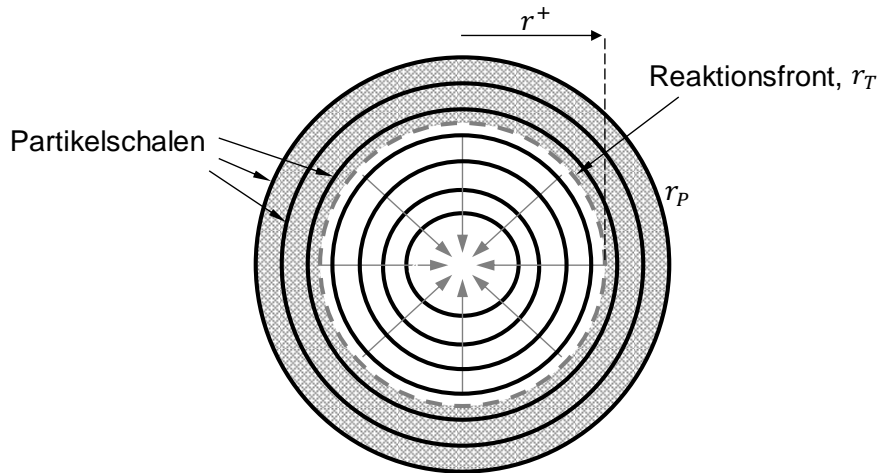


Abbildung 1.3: Verlauf einer Reaktionsfront in einem EBS-Partikel

Abbildung 1.3 zeigt den Verlauf einer Reaktionsfront in einem kugelförmigen Partikel. Mit zunehmender Partikeltemperatur schreitet die Reaktionsfront von der Partikeloberfläche ($r^+ = 1$) in das Partikelinnere ($r^+ = 0$). Der Radius r_T beschreibt den interpolierten Radius einer inneren Schale mit einer Temperatur oberhalb der definierten Reaktionstemperatur. Der Partikelradius r_p stellt hingegen stets den Radius der äußersten Stützstelle dar und ändert sich nur bei einer Massen- bzw. Größenabnahme des Partikels.

1.2.3 Trocknung

Für die koks-bildenden Fraktionen wird von einer konstanten Verteilung der Feuchte innerhalb der porösen und faserigen Zellstrukturen der Partikel ausgegangen. Die Verdampfung wird daher über eine dimensionslose Trocknungsfrent im Partikel berechnet, entlang derer Temperaturen von mindestens $T_{Tr} = 100\text{ °C}$ vorliegen (Intra-Partikelrocknung).

$$r_{Tr}^+ = \frac{r_{T>100^\circ\text{C}}}{r_p} \quad \text{Gl. 1.18}$$

Über die Trocknungsfrent, die initiale Partikelmasse $m_{p,ini}$ und den initialen Wassergehalt Y_W lässt sich somit die maximale Menge an Wasser berechnen, die für den weiteren Trocknungsvorgang zur Verfügung steht.

$$m_{w,max} = m_{p,ini} \cdot Y_W \cdot (1 - r_{Tr}^3) \quad \text{Gl. 1.19}$$

Für die Kunststofffraktionen wird abweichend hierzu angenommen, dass das Wasser nur an der Oberfläche des Partikels vorliegt und die Trocknung beginnt, sobald die Oberflächentemperatur einen Wert von 100 °C überschreitet (Oberflächentrocknung).

Aufgrund der Verdampfungsenthalpie des Wassers Δh_W benötigt der Trocknungsprozess zusätzliche Wärme für den Phasenübergang des Wassers in die Gasphase. Im Modell

wird daher die gesamte auf das Partikel übertragene Wärmemenge zunächst für die Trocknung verwendet. Die Wärmemenge limitiert somit zusätzlich die zeitliche Änderung der Feuchte im oder am Partikel.

$$\frac{\partial m_W}{\partial t} = - \frac{\dot{Q}_{Konv} + \dot{Q}_{Str}}{\Delta h_W} \quad \text{Gl. 1.20}$$

Daraus ergibt sich zum einen eine Limitierung des Trocknungsprozesses auf Grundlage der übertragenen Wärme und zum anderen über die radiale Position der Trocknungsfrent. Da der Verdampfungsvorgang zu einer Abnahme der Partikelmasse führt, wird im Modell von einer Änderung der Dichte bei gleichbleibendem Volumen ausgegangen.

1.2.4 Pyrolyse

Da die Pyrolysegeschwindigkeit großer Partikel zum einen vom Wärmetransport innerhalb des Partikels und zum anderen von der chemischen Rate der Spaltungsreaktionen abhängt, wird ein kombinierter Modellierungsansatz verwendet. Die Limitierung der pyrolysefähigen Masse m_{Fl} erfolgt analog zum Trocknungsmodell über einen dimensionslosen Pyrolyseradius r_{Pyr}^+ , der den Verlauf einer minimalen Pyrolysetemperatur über den Partikelradius beschreibt.

$$r_{Pyr}^+ = \frac{r_{T > T_{Pyr}}}{r_p} \quad \text{Gl. 1.21}$$

Die Pyrolysestarttemperatur wurde für PPK und Textilien in einer TGA-601 der Fa. LECO® unter Inertgasatmosphäre (N₂) ermittelt. Hieraus wurde abgeleitet: Temperaturen für den Reaktionsradius der Fraktion PPK zu $T_{Pyr,PPK} = 240 \text{ °C}$ und der Textilien zu $T_{Pyr,Textilien} = 260 \text{ °C}$.

Die Berechnung der während der Pyrolyse freigesetzten Flüchtigmasse erfolgt über einen Mehrschritt-Reaktionsmechanismus. Dieser Ansatz berücksichtigt die makromolekulare Zusammensetzung der biogenen Fraktionen und berechnet drei unabhängige Parallelreaktionen für die Hauptbestandteile Cellulose, Hemicellulose und Lignin. Der gesamte freigesetzte Massenstrom der flüchtigen Bestandteile ergibt sich somit aus der anteilmäßigen Summe der Einzelkomponenten.

$$\frac{\partial m_{Fl}}{\partial t} = - \sum_i c_i \frac{\partial a_i}{\partial t} \quad \text{Gl. 1.22}$$

Hierbei berücksichtigt der Koeffizient c_i den jeweiligen Anteil der Einzelkomponente an der gesamten Flüchtigmasse. Der jeweils umgesetzte Anteil a_i berechnet sich über einen Arrheniusansatz erster Ordnung.

$$\frac{\partial a_i}{\partial t} = k_{Pyri} \cdot (1 - a_i) \quad \text{Gl. 1.23}$$

mit

$$k_{Pyri} = \frac{k_{0,Pyri}}{V_P} \cdot \sum_S \exp\left(-\frac{E_{Pyri}}{R \cdot T_{P,S}}\right) \cdot V_S \quad \text{Gl. 1.24}$$

In Gl. 1.25 bezeichnen $k_{pyr,0_i}$ die Frequenzkonstanten und E_{pyr_i} die Aktivierungsenergien der jeweiligen Reaktion. Da aufgrund der berechneten Wärmeleitung die Temperaturverteilung innerhalb des Partikels bekannt ist, erfolgt die Berechnung der Pyrolysegeschwindigkeit für jede Schale mit der jeweiligen Temperatur $T_{P,S}$. Die Gewichtung der Pyrolysegeschwindigkeit erfolgt mit dem Volumen V_S der entsprechenden Schale.

Die Wahl der kinetischen Parameter erfolgt auf Basis der Arbeiten von Grammelis et al. [10] und Miranda et al. [11], in denen das Pyrolyseverhalten verschiedener Materialien aus aufbereiteten Ersatzbrennstoffen untersucht wurde. Tabelle 1.2 gibt eine Übersicht der gewählten kinetischen Parameter für die Fraktionen PPK, Textilien und Feinanteil.

Tabelle 1.2: Kinetische Daten für die Pyrolyse von PPK und Textilien

	Hemicellulose			Cellulose			Lignin		
	$k_{0,pyr}$	E_{pyr}	c	$k_{0,pyr}$	E_{pyr}	c	$k_{0,pyr}$	E_{pyr}	c
	[1/s]	[kJ/mol]	[%]	[1/s]	[kJ/mol]	[%]	[1/s]	[kJ/mol]	[%]
PPK & Feinanteil [10]	$1,35 \cdot 10^9$	116,3	27,2	$1,52 \cdot 10^{14}$	198,6	56,9	$5,00 \cdot 10^{-1}$	30,7	9,7
Textilien [11]	$8,33 \cdot 10^1$	41,0	24,0	$8,33 \cdot 10^{14}$	204,1	52,0	$1,66 \cdot 10^{11}$	180,0	14,2

Die Enthalpie der Pyrolyse wird mit $\Delta h_{pyr} = 0 \frac{kJ}{kg}$ angenommen. Analog zu dem in Abschnitt 1.2.3 vorgestellten Trocknungsmodell wird auch bei der Pyrolyse von einem konstanten Volumen bei gleichzeitiger Änderung der Partikeldichte ausgegangen.

1.2.5 Heterogene Restkoksverbrennung

Die Restkoksverbrennung wird über einen kinetisch-/diffusionslimitierten Ansatz modelliert. Dabei wird eine effektive Reaktionsrate der Restkoksverbrennung $k_{C_{fix}}$ auf Basis einer chemischen Reaktionsrate k_c und einer Diffusionsrate k_d berechnet. Die Änderungsrate der Restkoksmasse ergibt sich demnach aus der effektiven Reaktionsrate, der Partikeloberfläche und dem Sauerstoffpartialdruck in der Gasphase $p_{O_2,G}$.

$$\frac{\partial m_{C_{fix}}}{\partial t} = -A_p \cdot p_{O_2,G} \cdot \frac{k_c \cdot k_d}{k_c + k_d} = -A_p \cdot p_{O_2,G} \cdot k_{C_{fix}} \quad \text{Gl. 1.25}$$

mit

$$p_{O_2,G} = \frac{\rho_G R T_G Y_{O_2,G}}{M_{O_2}} \quad \text{Gl. 1.26}$$

Die Geschwindigkeitskonstante der chemischen Reaktion wird über einen Arrheniusansatz formuliert.

$$k_c = C_{1,C_{fix}} \cdot \exp\left[-\frac{E_{C_{fix}}}{RT_{P,O}}\right] \quad \text{Gl. 1.27}$$

Die für die Ersatzbrennstofffraktionen verwendeten Konstanten werden wiederum auf Basis von Literaturdaten [12] zu $C_{1,C_{fix}} = 204 \cdot 10^{-5} \frac{kg}{m^2 s Pa}$ und $E_{C_{fix}} = 7,94 \cdot 10^{-5} J/mol$ gewählt. Für die Oberflächentemperatur $T_{P,O}$ wird die Temperatur der äußersten Schale gewählt.

Die Diffusionsrate limitiert die Restkoksverbrennung über die an die Partikeloberfläche transportierte Sauerstoffmenge.

$$k_d = \frac{C_{2,C_{fix}}}{2} \cdot Sh \cdot \Phi_{C_{fix}} \cdot \frac{[(T_{P,O} + T_G)/2]^{0,75}}{d_V} \quad \text{Gl. 1.28}$$

mit $C_{2,C_{fix}} = 5 \cdot 10^{-12} \frac{kg}{m \cdot s \cdot Pa \cdot K^{0,75}}$ [13].

Die Sherwood-Zahl kann näherungsweise über die Reynolds-Zahl und die Schmidt-Zahl dargestellt werden [14].

$$Sh = 2 + 0,654 \cdot Re_p^{\frac{1}{2}} \cdot Sc^{\frac{1}{3}} \quad \text{Gl. 1.29}$$

Die Schmidt-Zahl ergibt sich zu:

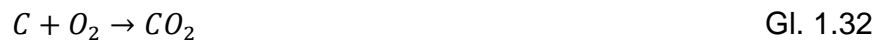
$$Sc = \frac{\eta_G}{\rho_G \cdot D_{O_2}} \quad \text{Gl. 1.30}$$

Für die Berechnung des Diffusionskoeffizienten D_{O_2} kann unter der Annahme der Diffusion des Sauerstoffs in einem CO-N₂-Gemisch folgende Korrelation angewendet werden [15]:

$$D_{O_2} = D_{O_2,0} \cdot \frac{p_0}{p} \cdot \left(\frac{(T_{P,O} + T_G)/2}{T_0}\right)^{1,75} \quad \text{Gl. 1.31}$$

mit $D_{O_2,0} = 3,49 \cdot 10^{-4} \frac{m^2}{s}$, $T_0 = 1.327 \text{ °C}$ und $p_0 = 1 \text{ bar}$ [12].

Da die Partikel relativ groß sind, wird die Bildung von C aus der heterogenen Reaktion vernachlässigt und von einer direkten Umsetzung zu CO_2 ausgegangen.



1.2.6 Schmelzvorgang

Die Modellierung der thermischen Umsetzung der Kunststofffraktionen basiert in dieser Arbeit auf der Annahme, dass alle Partikel ein Umsetzungsverhalten von Thermoplasten aufweisen. Überschreitet die Partikeltemperatur die Schmelztemperatur der Partikel, erfolgt ein reversibler Übergang der Partikelmasse in den flüssigen Aggregatzustand [16]. Der Modellierungsansatz geht von einer Gesamtmasse des Partikels aus, die sich aus einem festen (fest) und einem geschmolzenen (flüssig) Teil zusammensetzt.

$$m_p = m_{\text{fest}} + m_{\text{flüssig}} \quad \text{Gl. 1.33}$$

Der Phasenübergang innerhalb des Partikels wird, analog zur Pyrolyse, über eine von außen nach innen laufende dimensionslose Schmelzfront beschrieben. Die Schmelzfront liefert die dem Schmelzvorgang zur Verfügung stehende Masse und ergibt sich aus dem Überschreiten einer vordefinierten Schmelztemperatur T_{Schmelz} entlang des Partikelradius.

$$r_{\text{Schmelz}}^+ = \frac{r_{T > T_{\text{Schmelz}}}}{r_p} \quad \text{Gl. 1.34}$$

Die Änderung der festen Masse berechnet sich aus der Änderung der Schmelzfront.

$$\frac{\partial m_{\text{fest}}}{\partial t} = -\rho_p \cdot \frac{\partial V_{\text{fest}}}{\partial t} = -\rho_p \cdot A_{\text{Grenz}}(r_{\text{Schmelz}}^+) \cdot \frac{\partial r_{\text{Schmelz}}^+}{\partial t} \quad \text{Gl. 1.35}$$

Hier beschreibt A_{Grenz} die an der Schmelzfront vorliegende Phasengrenzfläche. Die für den endothermen Schmelzvorgang aufzubringende Wärme ergibt sich unter Berücksichtigung der spezifischen Schmelzenthalpie $\Delta h_{\text{Schmelz}}$ zu:

$$\dot{Q}_{\text{Schmelz}} = \frac{\partial m_{\text{fest}}}{\partial t} \cdot \Delta h_{\text{Schmelz}} \quad \text{Gl. 1.36}$$

Die tatsächlich geschmolzene Partikelmasse limitiert sich neben dem Schmelzradius zusätzlich über die auf das Partikel übertragene Wärmemenge, um die Energiebilanz (Gl. 1.5) für jeden Zeitschritt zu erfüllen. Die Werte für die Schmelztemperatur und die spezifische Schmelzenthalpie werden anhand der in einem Einzelpartikelreaktor bestimmten mittleren Schmelztemperatur zu $T_{\text{Schmelz}} = 218^\circ\text{C}$ und $\Delta h_{\text{Schmelz}} = 150 \text{ kJ/kg}$ angenommen.

Während des Schmelzvorgangs kommt es aufgrund der Zunahme der flüssigen Masse zu einer Veränderung der Partikelform. Auf Basis von Versuchen werden für die Geometrie

rieänderung der Partikel der Fraktion 3D-Kunststoffe und Folien lineare Funktionen angenommen. Die Funktionen beschreiben die Änderung der initialen Seitenverhältnisse (*ini*) in Abhängigkeit des Schmelzradius, sobald dieser einen Wert von $r_{Schmelz}^+ = 0,5$ überschreitet. Für die Fraktion der 3D-Kunststoffe erfolgt aufgrund der relativ geringen initialen Seitenverhältnisse:

$$a/b = \frac{a/b_{ini} - 1,0}{0,5} \cdot r_{Schmelz}^+ + 1,0 \quad \text{Gl. 1.37}$$

$$a/c = \frac{a/c_{ini} - 2,0}{0,5} \cdot r_{Schmelz}^+ + 2,0 \quad \text{Gl. 1.38}$$

und für die Fraktion der Folien:

$$a/b = \frac{a/b_{ini} - 1,5}{0,5} \cdot r_{Schmelz}^+ + 1,5 \quad \text{Gl. 1.39}$$

$$a/c = \frac{a/c_{ini} - 8,0}{0,5} \cdot r_{Schmelz}^+ + 8,0 \quad \text{Gl. 1.40}$$

Zur Veranschaulichung der Geometrieänderung zeigt Abbildung 1.4 ein Partikel der Fraktion 3D-Kunststoffe während des Schmelzvorgangs. Die Änderung beginnt ab einem Schmelzradius von $r_{Schmelz}^+ = 0,5$ und endet, sobald das Partikel vollständig geschmolzen ist ($r_{Schmelz}^+ = 0,0$). Die zunächst flächige Partikelform (18,9 x 6,3 x 1,0 mm) übergeht entsprechend der linearen Funktion (Gl. 1.37 – Gl. 1.38) in einen Körper mit gleichmäßigeren Kantenlängen (6,1 x 6,1 x 3,1 mm).

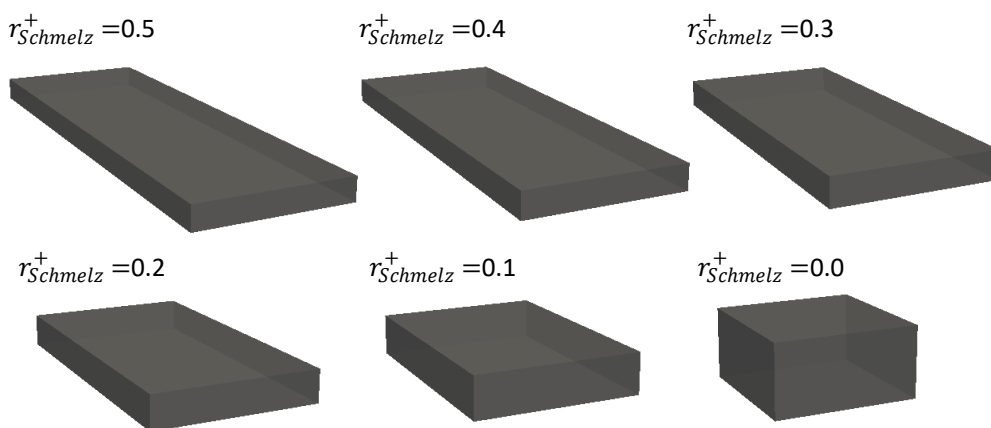


Abbildung 1.4: Änderung der Geometrie eines 3D-Kunststoffpartikels während des Schmelzvorgangs

1.2.7 Thermische Zersetzung

Die Massenänderung der flüssigen Phase im Partikel ergibt sich aus einem Arrheniusansatz erster Ordnung über eine temperaturabhängige Reaktionsrate.

$$\frac{\partial m_{flüssig}}{\partial t} = -k_{zer} \cdot m_{flüssig} \quad \text{Gl. 1.41}$$

Analog zur Modellierung der Pyrolyse wird auch für die Zersetzungsgeschwindigkeit für jede Schale mit der entsprechenden lokalen Temperatur berechnet und anschließend über das Partikelvolumen gemittelt.

$$k_{zer} = \frac{k_{0,Zer}}{V_P} \cdot \sum_S \exp\left(-\frac{E_{Zer}}{R \cdot T_{P,S}}\right) \cdot V_S \quad \text{Gl. 1.42}$$

Die gewählten kinetischen Parameter $k_{0,Zer} = 3,943 \cdot 10^{13} [1/s]$ und $E_{Zer} = 224,9 \text{ kJ/mol}$ wurden von Bluhm-Drehnhaus [17] für PE auf Basis von experimentell bestimmten Zersetzungsraten von Bockhorn et al. [18] berechnet.

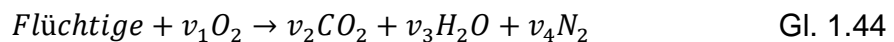
Da während der thermischen Zersetzung Energie benötigt wird, um die chemischen Bindungen der Polymere zu brechen, handelt es sich um einen endothermen Prozess. Die für die Zersetzung benötigte Energie muss daher in der Energiebilanz des Partikels berücksichtigt werden.

$$\dot{Q}_{Zer} = \frac{\partial m_{flüssig}}{\partial t} \cdot h_{Zer} \quad \text{Gl. 1.43}$$

Die Energiebilanz limitiert zugleich, neben der Reaktionsrate, die maximal zu zersetzende Masse innerhalb eines Zeitschritts. Für die spezifische Zersetzungsenthalpie wird analog zu Bluhm-Drehnhaus unter Annahme der Zersetzung von PE zu Dodecan ($C_{12}H_{26}$) ein Wert von $h_{Zer,25^\circ C} = 230 \text{ kJ/kg}$ verwendet.

1.2.8 Chemische Reaktionen in der Gasphase

Zur Umsetzung der Pyrolyse-/Zersetzungsgase in der Gasphase wird das Eddy-Dissipation-Concept (EDC) verwendet. Dabei reagieren die überführten Gase entsprechend dem folgenden Reaktionsschema.



Die Zusammensetzung der freigesetzten Pyrolysegase wird in diesem Ansatz über Pseudospezies $C_xH_yO_z$ auf Basis der Elementar- und Immediatanalyse berechnet. Dazu wird ausgehend von den ermittelten Heizwerten, der Immediatanalyse und der berechneten Zusammensetzung der Pseudospezies eine Standardbildungsenthalpie ΔH_f^0 berechnet. Die molaren Massen, die Standardbildungsenthalpien und die stöchiometrischen Koeffizienten der Reaktionsgleichung sind für die flüchtigen Bestandteile der einzelnen EBS-Fractionen nachstehend in Tabelle 1.3 aufgelistet.

Für die Berechnung des kinetisch kontrollierten Umsatzes wird auf einen globalkinetischen Ansatz nach Westbrook & Dryer [19] mit $k_0 = 2,119 \cdot 10^{11} \text{ 1/s}$ und $E = 2,027 \cdot 10^8 \text{ kJ/mol}$ zurückgegriffen.

Tabelle 1.3: Parameter für die Gasphasenreaktionen flüchtiger Bestandteile der EBS-Fractionen (pro mol Flüchtige)

Fraktion	$M \left[\frac{g}{mol} \right]$	$\Delta H_f^0 \left[\frac{J}{mol} \right]$	v_1	v_2	v_3	v_4
Feinanteil	78,782	$-1.100697 \cdot 10^6$	4,398	3,269	4,117	0,052
Folien	100,000	$-2.578132 \cdot 10^4$	9,862	6,695	6,379	0,008
3D-Kunststoffe	100,000	$-1.168794 \cdot 10^5$	9,122	6,521	5,819	0,002
PPK	83,564	$-5.793398 \cdot 10^5$	2,632	2,438	3,343	0,009
Textilien	88,435	$-5.153357 \cdot 10^5$	5,480	4,445	3,705	0,050

1.2.9 Berücksichtigung der Statistik der EBS-Kenngrößen

Um die Heterogenität der Ersatzbrennstoffe in Simulationen industrieller Anlagen abbilden zu können, können neben der Vorgabe einer (RRSB-) Partikelgrößenverteilung zusätzliche Partikeleigenschaften über statistisch verteilte Zufallswerte jedem Partikel individuell zugewiesen. Der statistisch zugewiesene Wert P_i wird über eine normalverteilte Zufallszahl ξ und der aus den Messdaten bestimmten Standardabweichung σ_{P_i} sowie dem arithmetischen Mittelwert \bar{P}_i , berechnet.

$$P_i = \bar{P}_i + \xi \cdot \sigma_{P_i} \quad \text{Gl. 1.45}$$

1.3 Modellierung der Partikelbewegung

1.3.1 Modellgrundlagen und Bewegungsgleichungen sphärischer Partikel

In dieser Arbeit wird für die Beschreibung der Regel (Kohelstaub)- und Ersatzbrennstoffe das Discrete-Phase-Model (DPM) verwendet. Das DPM basiert auf der Beschreibung der dispersen Zweiphasenströmung nach dem Euler-Langrange-Prinzip und berechnet repräsentative Trajektorien unter Berücksichtigung der auf das Partikel wirkenden Kräfte im turbulenten Strömungsfeld.

Die Änderung der Partikelgeschwindigkeit \vec{v}_p in der Gasströmung wird im Discrete-Phase-Model über die Lösung der Newton'schen Bewegungsgleichungen berechnet. Für die in dieser Arbeit als Massepunkte angenommenen Kohlenstaubpartikel und Partikel der Feinfraktion reduziert sich die Kräftebilanz eines Einzelpartikels für Gas-Feststoffdispersionen mit niedriger Volumenbeladung und großem Partikel-Fluid-Dichteunterschied zu:

$$m_p \frac{\partial \vec{v}_p}{\partial t} = \sum \vec{F} = \vec{F}_g + \vec{F}_W + \vec{F}_{A_{stat}} \quad \text{Gl. 1.46}$$

Demnach werden hier nur die Gewichtskraft \vec{F}_g , die statische Auftriebskraft $\vec{F}_{A_{stat}}$ und die Widerstandskraft \vec{F}_W berücksichtigt. Die Gewichtskraft (oder Schwerkraft) stellt das Produkt der auf die Partikelmasse m_p wirkenden Erdbeschleunigung \vec{g} dar.

$$\vec{F}_g = m_p \cdot \vec{g} \quad \text{Gl. 1.47}$$

Die resultierende Auftriebskraft beschreibt die Verdrängung des Partikelvolumens in einem Fluid und ergibt sich aus dem Verhältnis von Fluidichte ρ_G zu Feststoffdichte ρ_P .

$$\vec{F}_{A_{stat}} = m_p \cdot \vec{g} \cdot \frac{\rho_G}{\rho_P} \quad \text{Gl. 1.48}$$

Die Widerstandskraft bewirkt eine Beschleunigung oder Verzögerung des Partikels parallel zum Relativgeschwindigkeitsvektor $\vec{v}_p - \vec{v}_G$ aufgrund von Reibungs- und Formwiderständen. Der Betrag der Kraft ist abhängig von der Projektionsfläche des Partikels $A_{P\perp}$ in Richtung der Relativgeschwindigkeit und einem Widerstandsbeiwert c_W .

$$\vec{F}_W = \frac{1}{2} A_{P\perp} \rho_G c_W |\vec{v}_p - \vec{v}_G| \cdot \vec{v}_p - \vec{v}_G \quad \text{Gl. 1.49}$$

Für die als sphärisch angenommenen Kohlenstaubpartikel wird die Korrelation nach Schiller & Naumann [20] verwendet.

$$c_W = \begin{cases} 24 \frac{1 + 0,15 Re_p^{0,687}}{Re_p} & Re_p \leq 1000 \\ 0,44 & Re_p > 1000 \end{cases} \quad \text{Gl. 1.50}$$

Für die partikelbezogene Reynolds-Zahl Re_p wird als charakteristische Länge L_c der Äquivalenzdurchmesser d_V herangezogen.

$$Re_p = \frac{\rho_G \cdot |\vec{v}_p - \vec{v}_G| \cdot d_V}{\eta_G} \quad \text{Gl. 1.51}$$

Die Modellierung der Feinfraktion erfolgt über eine Anpassung der Widerstandsbeiwerte nach der Korrelation von Haider & Levenspiel [21] für nicht-sphärische Partikel.

$$c_W = \frac{24}{Re_p} (1 + b_1 \cdot Re_p^{b_2}) + \frac{b_3}{1 + \frac{b_4}{Re_p}} \quad \text{Gl. 1.52}$$

mit den Koeffizienten $b_1 \dots b_4$:

$$b_1 = e^{2,3288-6,4581 \phi+2,4486 \phi^2} \quad \text{Gl. 1.53}$$

$$b_2 = 0,0964 + 0,5565 \phi \quad \text{Gl. 1.54}$$

$$b_3 = e^{4,905-13,8944 \phi+18,4222 \phi^2-10,2599 \phi^3} \quad \text{Gl. 1.55}$$

$$b_4 = e^{1,4681+12,2584 \phi-20,7322 \phi^2+15,8855 \phi^3} \quad \text{Gl. 1.56}$$

Die Sphärizität ϕ beschreibt das Verhältnis der Oberfläche einer volumengleichen Kugel A_V zur tatsächlichen Oberfläche des nicht-sphärischen Partikels A_P .

$$\phi = \frac{A_V}{A_P} = \frac{\pi \cdot d_V^2}{2 \cdot (a \cdot b + a \cdot c + b \cdot c)} \quad \text{Gl. 1.57}$$

1.3.2 Modellerweiterung zur Beschreibung der Bewegung komplexer Partikel

Koordinatensysteme und Partikelorientierung

Die Partikelbewegung ist abhängig von deren Ausrichtung im Strömungsfeld. Aus diesem Grund muss die Partikelorientierung kontinuierlich berechnet werden. Zur Beschreibung der Partikelausrichtung wird ein globales Inertialsystem der Simulationsumgebung $[x, y, z]$ und ein lokales Partikelkoordinatensystem $[x', y', z']$ mit Ursprung im geometrischen Partikelmittelpunkt eingeführt. Zusätzlich wird ein Koordinatensystem $[x'', y'', z'']$ definiert, dessen Achsen parallel zu dem Inertialsystem sind, sich jedoch ebenfalls im Partikelmittelpunkt befindet und mit dem Partikel bewegt wird. Abbildung 1.5 gibt eine Übersicht der Koordinatensysteme und deren Ausrichtung.

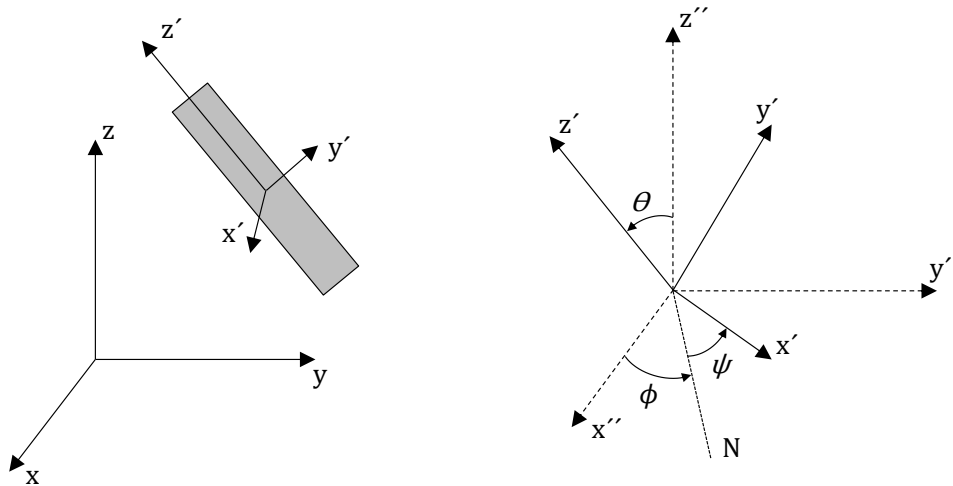


Abbildung 1.5: Definition der Koordinatensysteme und der Euler-Winkel (in Anlehnung an [22])

Die Drehung des Partikelkoordinatensystems gegenüber dem Inertialsystem kann über drei Eulerwinkel (θ, ϕ, ψ) beschrieben werden. Die Drehung des Koordinatensystems erfolgt in einer festen Reihenfolge: Zuerst wird mit dem Winkel ϕ um die z'' -Achse in Ausgangslage gedreht, anschließend eine Drehung mit dem Winkel θ um die x'' -Achse in deren Lage nach der ersten Drehung (N) und zuletzt eine Drehung mit ψ um die x' -Achse in deren Lage nach den ersten zwei Drehungen.

Die Transformation zwischen Inertial- und Partikelkoordinatensystem erfolgt über eine Transformationsmatrix A bzw. der transponierten Matrix A^T .

$$\vec{x} = A \cdot \vec{x}' \quad \text{Gl. 1.58}$$

$$\vec{x}' = A^T \cdot \vec{x} \quad \text{Gl. 1.59}$$

Die Transformationsmatrix A ergibt sich aus der Multiplikation der drei Drehmatrizen der Eulerwinkel im dreidimensionalen Raum.

$$A = \begin{bmatrix} \cos \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \sin \psi & \cos \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \sin \psi & \sin \psi \sin \theta \\ -\sin \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \cos \psi & -\sin \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \cos \psi & \cos \psi \sin \theta \\ \sin \theta \sin \phi & -\sin \theta \cos \phi & \cos \theta \end{bmatrix} \quad \text{Gl. 1.60}$$

Die zeitliche Änderung der Eulerwinkel steht in direktem Zusammenhang zu den Winkelgeschwindigkeiten.

$$\begin{bmatrix} \frac{d\theta}{dt} \\ \frac{d\phi}{dt} \\ \frac{d\psi}{dt} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega_{x'} \cos \psi - \omega_{y'} \sin \psi \\ (\omega_{x'} \sin \psi + \omega_{y'} \cos \psi) / \sin \theta \\ \omega_{z'} - \left(\frac{d\phi}{dt}\right) \cos \theta \end{bmatrix} \quad \text{Gl. 1.61}$$

Hier sind $[\omega_{x'}, \omega_{y'}, \omega_{z'}]$ die Winkelgeschwindigkeiten des Partikels bezogen auf das Partikelkoordinatensystem. Anstelle der Drehung der Koordinatensysteme um drei Achsen, kann die Drehung auch um eine Achse im Raum beschrieben werden. Dies ermöglicht die Verwendung von Quaternionen, in diesem Fall den Euler-Parametern nach Hughes [23] $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ und η .

$$A = \begin{bmatrix} 1 - 2(\varepsilon_2^2 + \varepsilon_3^2) & 2(\varepsilon_1\varepsilon_2 + \varepsilon_3\eta) & 2(\varepsilon_1\varepsilon_3 - \varepsilon_2\eta) \\ 2(\varepsilon_2\varepsilon_1 - \varepsilon_3\eta) & 1 - 2(\varepsilon_3^2 + \varepsilon_1^2) & 2(\varepsilon_2\varepsilon_3 + \varepsilon_1\eta) \\ 2(\varepsilon_3\varepsilon_1 + \varepsilon_2\eta) & 2(\varepsilon_3\varepsilon_2 - \varepsilon_1\eta) & 1 - 2(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2) \end{bmatrix} \quad \text{Gl. 1.62}$$

mit

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \cos \frac{\phi - \psi}{2} \sin \frac{\theta}{2}, & \varepsilon_2 &= \sin \frac{\phi - \psi}{2} \sin \frac{\theta}{2} \\ \varepsilon_3 &= \sin \frac{\phi + \psi}{2} \cos \frac{\theta}{2}, & \eta &= \cos \frac{\phi + \psi}{2} \cos \frac{\theta}{2} \end{aligned} \quad \text{Gl. 1.63}$$

Die Eulerwinkel dienen der initialen Zuweisung der Partikelorientierung. Anschließend wird für jeden Zeitschritt dt die Änderung der Euler-Parameter über die Winkelgeschwindigkeiten $[\omega_{x'}, \omega_{y'}, \omega_{z'}]$ berechnet.

$$\begin{bmatrix} \frac{d\varepsilon_1}{dt} \\ \frac{d\varepsilon_2}{dt} \\ \frac{d\varepsilon_3}{dt} \\ \frac{d\eta}{dt} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \eta\omega_{x'} - \varepsilon_3\omega_{y'} + \varepsilon_2\omega_{z'} \\ \varepsilon_3\omega_{x'} + \eta\omega_{y'} - \varepsilon_1\omega_{z'} \\ -\varepsilon_2\omega_{x'} + \varepsilon_1\omega_{y'} + \eta\omega_{z'} \\ -\varepsilon_1\omega_{x'} - \varepsilon_2\omega_{y'} - \varepsilon_3\omega_{z'} \end{bmatrix} \quad \text{Gl. 1.64}$$

Kräfte und Momente am Partikel

Abbildung 1.6 veranschaulicht in einer zweidimensionalen Ansicht die an einem quaderförmigen Partikel in einer gleichmäßigen Gasströmung angreifenden Kräfte und Momente. Durch die Relativgeschwindigkeit zwischen Partikel und Gasphase \vec{v}_{rel} entstehen an der Partikeloberfläche in Strömungsrichtung unterschiedliche Druckbereiche (+ hoher Druck, - niedriger Druck). Da sich das Partikel nicht in seiner Gleichgewichtslage befindet, also der Normalenvektor der Partikeloberfläche nicht in Richtung des Relativgeschwindigkeits-

vektors zeigt, verschiebt sich der Angriffspunkt P_D der Widerstandskraft und der dynamischen Auftriebskraft $\vec{F}_{A,dyn}$ gegenüber dem Schwerpunkt P_m um die Länge δ . Da die Gewichtskraft hingegen im Schwerpunkt des Partikels angreift, wirkt so ein Drehmoment \vec{M}_1 auf das Partikel. Das Drehmoment induziert eine Drehung des Partikels um seinen Schwerpunkt.

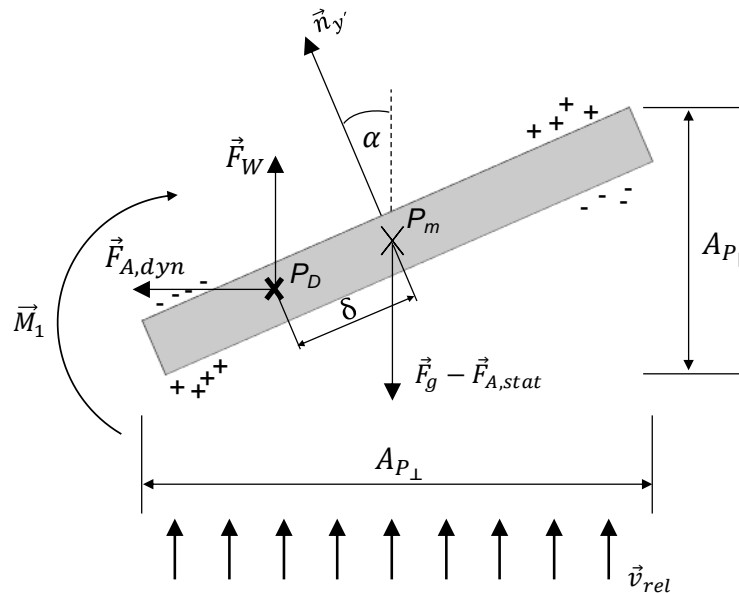


Abbildung 1.6: Angreifende Kräfte und Momente an einem nicht-sphärischem Partikel in einer gleichmäßigen Strömung (nach [24])

Die Kräftebilanz (Gl. 1.46) erweitert sich für das quaderförmige Partikel entsprechend um die dynamische Komponente der Auftriebskraft.

$$m_P \frac{\partial \vec{v}_P}{\partial t} = \sum \vec{F} = \vec{F}_g + \vec{F}_W + \vec{F}_{A,stat} + \vec{F}_{A,dyn} \quad \text{Gl. 1.65}$$

Die dynamische Auftriebskraft entsteht aufgrund des durch die Umströmung des Partikels erzeugten Druckgradienten an der Partikeloberfläche und steht dabei stets senkrecht zur Widerstandskraft, beziehungsweise zur Anströmrichtung.

$$\vec{F}_{A,dyn} = \frac{1}{2} A_{P_{\parallel}} \rho_G c_A |\vec{v}_P - \vec{v}_G| \cdot \vec{v}_P - \vec{v}_G \quad \text{Gl. 1.66}$$

Der Betrag der Auftriebskraft ergibt sich aus der Relativgeschwindigkeit, der orthogonal zur Strömungsrichtung projizierten Fläche $A_{P_{\parallel}}$ und von dem durch die Partikelgeometrie bestimmten Auftriebsbeiwert c_A .

Auftriebs- und Widerstandsbeiwerte hängen neben der Reynolds-Zahl bei nicht-sphärischen Körpern auch von der Partikelausrichtung in der Strömung ab und fluktuieren dementsprechend bei Rotationsbewegungen. Die Widerstands- und Auftriebsbeiwerte für komplexe asphärische Partikel werden dabei in einem Fallschacht bestimmt.

Die experimentellen Werte gelten den Newtonbereich der Reynolds-Zahl. Daher erfolgt eine Anpassung für den Stokes- und Übergangsbereich bei Reynolds-Zahlen <1000 über die Gleichung nach Kaskas [25].

$$c'_W = \frac{24}{Re_p} + \frac{4}{\sqrt{Re_p}} + c_W \quad \text{Gl. 1.67}$$

Die aus den Fallschachtuntersuchungen ermittelten Widerstandsbeiwerte gelten in Simulationen industrieller Feuerungen für Fraktionen, die eine Formänderung beschreiben, lediglich für den Initialzustand beim Eintritt in die Brennkammer. Dieser Initialzustand ist oftmals nur von kurzer Dauer, kann jedoch durch die am Brenneraustritt vorliegenden hohen Impulse die weitere Flugbahn entscheidend bestimmen.

Die während der Verbrennung durchlaufende Formänderung einiger Fraktionen wird in Kapitel 1.2 genauer erläutert. Tritt bei entsprechenden Fraktionen eine Formänderung auf, wird ab diesem Zeitpunkt nicht mehr auf die aus den Experimenten hergeleiteten statistischen Verteilungen der Widerstandsbeiwerte zugegriffen. Vielmehr werden die Widerstandsbeiwerte anhand der Korrelation von Hölzer & Sommerfeld [26] für nicht-sphärische Körper berechnet. Diese empirische Korrelation berücksichtigt die Form der Partikel und deren Orientierung über den gesamten Bereich der Reynolds-Zahlen.

$$c_W = \frac{8}{Re_p} \cdot \frac{1}{\sqrt{\phi_{\parallel}}} + \frac{16}{Re_p} \cdot \frac{1}{\sqrt{\phi}} + \frac{3}{\sqrt{Re_p}} \cdot \frac{1}{\phi^{\frac{3}{4}}} + 0,42 \cdot 10^{0,4 \cdot (-\log \phi)^{0,2}} \cdot \frac{1}{\phi_{\perp}} \quad \text{Gl. 1.68}$$

In dieser Korrelation bezeichnet die Längssphärizität ϕ_{\parallel} das Verhältnis der Querschnittsfläche einer volumengleichen Kugel zu der Differenz zwischen der halben Oberfläche und der in Anströmrichtung projizierten Fläche des Partikels. Die Quersphärizität ϕ_{\perp} ergibt sich aus dem Verhältnis der Querschnittsfläche einer volumengleichen Kugel zur projizierten Fläche des Partikels orthogonal zur Anströmrichtung. Der entsprechende Auftriebsbeiwert wird unter Anwendung des Querstrom-Prinzips (engl.: cross-flow-principle) nach Hoerner [27] abgeschätzt.

$$c_A = c_W \cdot \sin \alpha \cdot \cos \alpha^2 \quad \text{Gl. 1.69}$$

In obenstehender Gleichung bezeichnet α den Winkel zwischen dem Normalenvektor der Partikeloberfläche und der Anströmrichtung. Die zugrunde gelegte Partikeloberfläche ergibt sich aus der Länge a und Breite b des Partikels. Für Werte von $\alpha \neq 0$ verschiebt sich der Druckpunkt an der Partikeloberfläche gegenüber dem Schwerpunkt und es wird ein Drehmoment induziert.

Zur Veranschaulichung der Hebelarme der wirkenden Kräfte, zeigt Abbildung 1.7 die dreidimensionale Ansicht eines Quaders mit den entsprechenden Winkeln α, β, γ zwischen den Partikelhauptachsen und der Anströmrichtung.

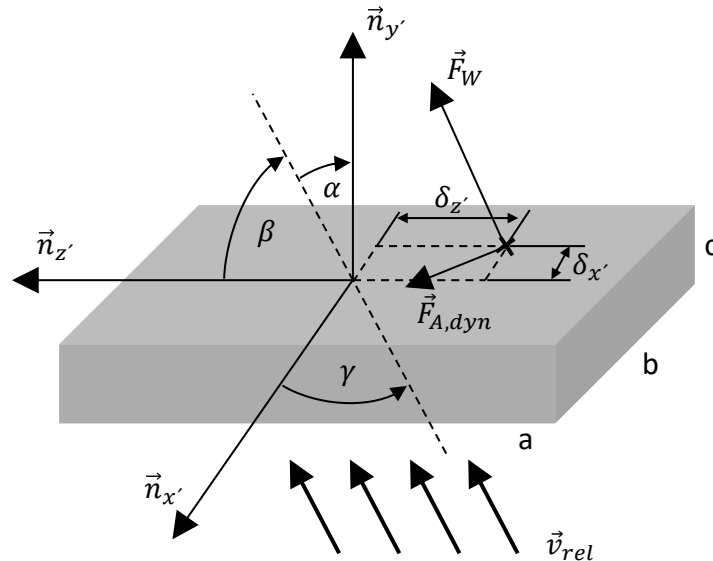


Abbildung 1.7: Definition der Winkel und Hebelarme im dreidimensionalen Modell

Für die Berechnung des Hebelarms $\vec{\delta}$ wird folgende Gleichung verwendet:

$$\vec{\delta} = 0.25 \cdot \begin{pmatrix} b \cdot \cos \gamma^3 \\ 0 \\ a \cdot \cos \beta^3 \end{pmatrix} \quad \text{Gl. 1.70}$$

Der Hebelarm über die Partikelhöhe (Seite c) wird hierbei aufgrund der flachen Partikelgeometrie nicht berücksichtigt.

Das durch die resultierenden Kräfte angreifende Drehmoment um den Partikelschwerpunkt ergibt sich folglich aus dem Kreuzprodukt von Hebelarm- und Kraftvektor.

$$\vec{M}_1 = \vec{\delta} \times (\vec{F}_w + \vec{F}_{A_{dyn}}) \quad \text{Gl. 1.71}$$

Durch die hier angenommene Approximation der Partikelform als Quader, fällt der geometrische Mittelpunkt unweigerlich mit dem Schwerpunkt zusammen. Bei realen Ersatzbrennstoffpartikeln hingegen sind, aufgrund der komplexen Geometrie mit unterschiedlichen Dicken (z. B. teilweise gefaltete Folien), beide Punkte häufig zueinander verschoben. Dies führt zu einer Gleichgewichtslage des realen Partikels, die von der angenommenen Gleichgewichtslage des Quaders ($\alpha = 0$) abweicht. Folglich wirkt selbst dann ein Drehmoment am realen Partikel, wenn am Modellpartikel eigentlich der Gleichgewichtszustand vorläge. Aus diesem Grund wird analog ein zusätzliches Korrekturmoment \vec{M}_2 berechnet.

$$\vec{M}_2 = \vec{\delta}_g \times \vec{F}_g \quad \text{Gl. 1.72}$$

Der Vektor $\vec{\delta}_g$ zwischen Schwerpunkt und geometrischen Mittelpunkt des Partikels wird ebenfalls über einen Zufallsgenerator aus einer in den Fallschachtmessungen ermittelten Normalverteilung entnommen. Aufgrund der durch die Drehmomente induzierten Winkelbeschleunigung wirkt zusätzlich ein Widerstandsmoment entgegen der Drehrichtung, das sich aus dem Strömungswiderstand für einen rotierenden Quader ergibt.

$$M_{3,x'} = \frac{1}{64} \cdot c_w \cdot \rho_G \cdot b \cdot \vec{\omega}_x \cdot a^4 \quad \text{Gl. 1.73}$$

$$M_{3,y'} = \frac{1}{64} \cdot c_w \cdot \rho_G \cdot c \cdot \vec{\omega}_y \cdot a^4 \quad \text{Gl. 1.74}$$

$$M_{3,z'} = \frac{1}{64} \cdot c_w \cdot \rho_G \cdot a \cdot \vec{\omega}_z \cdot b^4 \quad \text{Gl. 1.75}$$

Durch die Massenträgheit des Partikels muss zuletzt noch das Massenträgheitsmoment berücksichtigt werden. Dies kann für einen Quader über die jeweils zur Trägheitsachse parallelen Kantenlängen bestimmt werden.

$$I_{x'} = \frac{1}{12} \cdot \rho_p \cdot V_p \cdot (a^2 + c^2) \quad \text{Gl. 1.76}$$

$$I_{y'} = \frac{1}{12} \cdot \rho_p \cdot V_p \cdot (a^2 + b^2) \quad \text{Gl. 1.77}$$

$$I_{z'} = \frac{1}{12} \cdot \rho_p \cdot V_p \cdot (b^2 + c^2) \quad \text{Gl. 1.78}$$

Aus der Momentenbilanz um den Partikelschwerpunkt lassen sich die Änderung der Winkelgeschwindigkeiten über die Eulerschen-Kreisgleichungen beschreiben.

$$\frac{\partial \omega_{x'}}{\partial t} = \frac{M_{1,x'} + M_{2,x'} + M_{3,x'} + \omega_{y'} \cdot \omega_{z'} (I_{y'} - I_{z'})}{I_{x'}} \quad \text{Gl. 1.79}$$

$$\frac{\partial \omega_{y'}}{\partial t} = \frac{M_{1,y'} + M_{2,y'} + M_{3,y'} + \omega_{x'} \cdot \omega_{z'} (I_{z'} - I_{x'})}{I_{y'}} \quad \text{Gl. 1.80}$$

$$\frac{\partial \omega_{z'}}{\partial t} = \frac{M_{1,z'} + M_{2,z'} + M_{3,z'} + \omega_{y'} \cdot \omega_{x'} (I_{x'} - I_{y'})}{I_{z'}} \quad \text{Gl. 1.81}$$

2 Literaturverzeichnis

- [1] **Liedmann B., Arnold W., Krüger B., Becker A., Krusch S., Wirtz S. et al.:** *An approach to model the thermal conversion and flight behaviour of Refuse Derived Fuel*, Fuel, Vol. 200, DOI: 10.1016/j.fuel.2017.03.069, 2017.
- [2] **Bluhm-Drenhaus T., Becker A., Wirtz S., Scherer V.:** *A model for the devolatilisation of large thermoplastic particles under co-firing conditions*, Fuel, Vol. 101, pp. 161–170, DOI: 10.1016/j.fuel.2012.05.041, 2012.
- [3] **Verein Deutscher Ingenieure VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemie-ingenieurwesen (GVC):** *VDI-Wärmeatlas*, 10. ed., Springer Berlin, Heidelberg, Düsseldorf, ISBN: 9783540255048, 2006.
- [4] **Pohlhausen E.:** *Der Wärmeaustausch zwischen festen Körpern und Flüssigkeiten mit kleiner reibung und kleiner Wärmeleitung*, ZAMM - Zeitschrift Für Angewandte Mathematik Und Mechanik, Vol. 1 (2), pp. 115–121, DOI: 10.1002/zamm.19210010205, 1921.
- [5] **Gnielinski V.:** *Berechnung mittlerer Wärme- und Stoffübergangskoeffizienten an laminar und turbulent überströmten Einzelkörpern mit Hilfe einer einheitlichen Gleichung*, Forschung Im Ingenieurwesen, Vol. 41 (5), pp. 145–153, DOI: 10.1007/BF02560793, 1975.
- [6] **Hottel H.C., Sarofim A.F.:** *Radiative Transfer*, McGraw-Hill, New York, 1967.
- [7] **Smith T.F., Shen Z.F., Friedman J.N.:** *Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of Gray Gases Model*, Journal of Heat Transfer, Vol. 104 (4), pp. 602–608, DOI: 10.1115/1.3245174, 1982.
- [8] **Brosch B.:** *Erweiterung der Diskreten Elemente Methode zur Simulation bewegter und reagierender Feststoffschüttungen mit der Anwendung auf Rostfeuerungs-systeme*, Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, 2012.
- [9] **Crank J., Nicolson P.:** *A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type*, Advances in Computational Mathematics, Vol. 6 (1), pp. 207–226, DOI: 10.1007/BF02127704, 1996.
- [10] **Grammelis P., Basinas P., Malliopoulou A., Sakellaropoulos G.:** *Pyrolysis kinetics and combustion characteristics of waste recovered fuels*, Fuel, Vol. 88 (1), pp. 195–205, DOI: 10.1016/j.fuel.2008.02.002, 2009.
- [11] **Miranda R., Sosa-Blanco C., Bustos-Martínez D., Vasile C.:** *Pyrolysis of textile wastes. I. Kinetics and yields*, Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, Vol. 80 (2), pp. 489–495, DOI: 10.1016/j.jaap.2007.03.008, 2007.
- [12] **Görner K.:** *Technische Verbrennungssysteme - Grundlagen, Modellbildung, Simulation*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1991.
- [13] **Wall, T.F., Phelan, W.J., Bartz S.:** *The Prediction and Scaling of Burn-out in Swirled Pulverized Coal Flames: An Analysis and Mathematical Modelling of the AP11, AP12 and AP13 Trials*, IJmuiden, The Netherland, 1986.

-
- [14] **Smoot L.D., Pratt D.T., editors:** *Pulverized-Coal Combustion and Gasification*, Springer US, Boston, MA, ISBN: 978-1-4757-1698-6, 1979.
- [15] **Zelkowski J.:** *Kohlecharakterisierung und Kohleverbrennung*, 2. Ed. ed., VGB TowerTech e.V., Essen, ISBN: 978-3-86875-216-8, 2004.
- [16] **Ruge J., Wohlfahrt H.:** *Technologie der Werkstoffe*, Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, ISBN: 978-3-658-01880-1, 2013.
- [17] **Bluhm-Drenhaus T.:** *Numerische Simulation der thermischen Zersetzung von Kunststoffen am Beispiel von Ersatzbrennstoffen in Calcinatoren der Zementindustrie*, Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, 2011.
- [18] **Beyler C.L., Hirschler M.M.:** *Thermal Decomposition of Polymers*, SPE Handbook of Fire Protection Engineering, pp. 110–131, DOI: 10.1021/cm200949v, 2001.
- [19] **Dryer F.L., Westbrook C.K.:** *Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames*, Combustion Science and Technology, Vol. 27 (1–2), pp. 31–43, DOI: 10.1080/00102208108946970, 1981.
- [20] **Schiller L., Naumann A.:** *A drag coefficient correlation*, Zeitschrift Des Vereins Deutscher Ingenieure, Vol. 77, pp. 318–320, 1935.
- [21] **Haider A., Levenspiel O.:** *Drag Coefficient and Terminal Velocity of Spherical and Nonspherical Particles*, Powder Technology, Vol. 58, pp. 63–70, 1989.
- [22] **Goldstein H., Poole C., Safko J., Addison S.R.:** *Classical Mechanics, 3rd ed.*, American Journal of Physics, Vol. 70 (7), pp. 782–783, DOI: 10.1119/1.1484149, 2002.
- [23] **Hughes P.C.:** *Spacecraft Attitude Dynamics*, Wiley, New York, ISBN: 978-0486439259, 1986.
- [24] **Krüger B.:** *Experimentelle Charakterisierung und Modellierung der Flugbewegung von asphärischen Partikeln*, Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, 2016.
- [25] **Kaskas A.:** *Schirmgeschwindigkeiten in Mehrkornsuspensionen am Beispiel der Sedimentation*, Dissertation, TU Berlin, 1970.
- [26] **Hölzer A., Sommerfeld M.:** *New simple correlation formula for the drag coefficient of non-spherical particles*, Powder Technology, Vol. 184 (3), pp. 361–365, DOI: 10.1016/j.powtec.2007.08.021, 2008.
- [27] **Hoerner S.F.:** *Fluid-Dynamic Drag*, Hoerner Fluid Dynamics, Bricktown, New Jersey, ISBN: 9993623938, 1965.

Anhang

Tabelle A1: Eigenschaften des eingesetzten Modellbrennstoffs

	Einheit	3D	Folien	PPK	Textilien	Feinanteil	Gesamt
Zusammensetzung	[m.-%]	25,70	30,50	11,70	10,20	21,90	100
H_o (wf)	[MJ/kg]	40,69	39,79	15,96	23,58	16,06	30,38
H_u (roh)	[MJ/kg]	37,79	36,72	10,78	20,61	10,22	26,51
Immediatanalyse (roh)							
Wasser	[m.-%]	1,05	0,95	25,68	6,26	28,48	10,44
Asche	[m.-%]	1,04	5,09	10,68	10,99	17,51	8,03
Fixer Kohlenstoff	[m.-%]	0,00	0,00	10,46	9,57	11,46	4,71
Flüchtige, Mittelwert	[m.-%]	97,91	93,96	53,19	73,18	42,55	76,83
Flüchtige, Std. Abw. (σ)	[m.-%]	2,44	2,86	2,56	3,05	13,90	-
Elementaranalyse (waf)							
C	[m.-%]	78,93	80,42	45,72	64,96	60,48	66,88
H	[m.-%]	12,03	12,86	6,74	7,47	8,30	9,85
N	[m.-%]	0,07	0,22	0,24	1,39	1,47	0,62
O	[m.-%]	8,98	6,50	47,30	26,18	29,75	22,65
RRSB (Standard)							
d _{v,max}	[m]	1,27E-02	8,30E-03	1,48E-02	9,28E-03	3,00E-03	-
d _{v,min}	[m]	3,30E-03	1,48E-03	1,39E-03	1,82E-03	3,00E-04	-
d _{v,mittel}	[m]	9,40E-03	4,60E-03	7,70E-03	6,30E-03	1,56E-03	-
N	[-]	5,11	3,27	3,57	2,96	2,19	-
RRSB (fein)							
d _{v,max}	[m]	1,02E-02	6,70E-03	9,00E-03	7,77E-03	2,00E-03	-
d _{v,min}	[m]	2,90E-03	1,40E-03	2,00E-03	1,60E-03	3,00E-04	-
d _{v,mittel}	[m]	7,50E-03	3,80E-03	5,60E-03	4,80E-03	1,30E-03	-
N	[-]	4,76	3,65	3,89	3,61	2,19	-
Geometrie							
a/b _{mittel}	[-]	2,73	2,86	2,25	4,63	2,55	-
a/b _σ	[-]	1,63	2,94	1,16	11,20	1,20	-
a/C _{mittel}	[-]	34,80	202,00	29,83	19,40	14,86	-
a/C _σ	[-]	40,20	161,1	25,81	15,67	3,86	-
Weitere Parameter							
Dichte	[kg/m ³]	812	822	640	362	800	-
Wärmeleitfähigkeit	[W/m/K]	0,35	0,35	0,10	0,08	0,31	-
Spez. Wärmekapazität	[J/kg/K]	1.900	1.900	1.258	1.325	1.844	-
Emissivität	[-]	0,80	0,80	0,85	0,85	0,85	-