

Antrag an die Max-Buchner-Forschungstiftung

Technische Universität Berlin, Fakultät III

Fachgebiet Energieverfahrenstechnik und Umwandlungstechniken regenerativer Energien

Prof. Dr. rer. nat. Frank Behrendt, Dipl.-Ing. Stephan Gerber

1 Aufgabenstellung

Bei der Vergasung von Holz bzw. Resthölzern entsteht sogenannter Holzteer, der die weitere Nutzung des entstehenden Produktgases erheblich erschwert. Ziel dieses Forschungsvorhabens ist daher die Entwicklung eines numerischen Verfahrens zur Untersuchung der physikalisch-chemischen Prozesse der Teerbildung in einer Biomassevergasungsanlage am Beispiel von Holz.

Im Gegensatz zu existierenden Ansätzen mit eindimensionalen Zonenmodellen oder Reynolds-averaged-Navier-Stokes-Modellen (RANS) soll hier die Grobstruktur- oder Large-Eddy-Simulation für die fluide Phase, gekoppelt mit einem Lagrangeschen Ansatz für die Partikelbewegung, eingesetzt werden. Motiviert wird die Anwendung der Grobstruktursimulation anstelle eines RANS-Ansatzes durch das Potential für eine verbesserte Vorhersage und Modellierung von Partikel-Turbulenz-Wechselwirkungen und kohärenten Strukturen, die letztendlich genauere Prognosen für den chemischen Umsatz und die Schadstoffbildung ermöglichen. Chemisch reagierende Partikelströmungen sind messtechnisch sehr schwer zugänglich. Daher existieren kaum zeitlich und räumlich detaillierte Informationen über die komplexen turbulenten Strömungsphänomene. Genau diese Daten können mit einer Large-Eddy-Simulation sowohl für die Strömung, die Partikel als auch chemischen Kinetiken erzeugt werden.

Mit dem Modell sollen qualitative und quantitative Untersuchungen zur Vergasung von Holzpartikeln in (stationären) Wirbelschichten durchgeführt werden. Dabei sollen speziell Vergleiche mit den am Fachgebiet stattfindenden Experimenten zur Holzvergasung in Wirbelschichten und zu den am Fachbereich entwickelten Euler-Euler-Modellen zur Beschreibung reaktiver Wirbelschichten ([1]) angestellt werden.

Die eigentliche Teerbildung soll mit aus der Literatur entnommenen globalen und detaillierten Reaktionsschemata modelliert werden. Dabei sollen sowohl nulldimensionale als auch eindimensionale Modelle zum Einsatz kommen. Insbesondere in Hinsicht auf die eindimensionalen Modelle und deren, durch die detaillierte Modellierung, erhöhten Rechenzeitbedarf gilt es zu klären, welche Einflüsse die Details der Modellierung (Schrumpfung, Trocknung, Diffusion im Partikel etc.) auf die Produktgaszusammensetzung (und damit auch auf die Teerbildung) haben und wie dies mathematisch vereinfacht abgebildet werden kann. Aufgrund der komplexen chemischen Zusammenhänge soll u. U. ein geeignetes Tabellierungsverfahren wie ISAT [2] eingesetzt werden, um die Rechenzeit zu verringern.

Zum Erreichen der gestellten Ziele kann auf die am Fachbereich erstellten Arbeiten [3, 4, 1] aufgebaut werden, da in diesen Arbeiten ein inertes Euler-Lagrange-Modell mit Vier-Wege-Kopplung und eine reaktives Euler-Euler-Modell einer Wirbelschicht erfolgreich implementiert wurden.

2 Wissenschaftliche Bedeutung

Die Bedeutung dieses Projektes liegt in der detaillierten Modellierung des Partikelabbrandes mit Berücksichtigung von Trocknung, Pyrolyse, homogenen Gasphasenreaktion im Partikel und in der das Partikel umgebenden Gasströmung sowie den heterogenen Reaktionen am Partikel (Adsorption, Reaktion, Desorption) zum einen und der Euler-Lagrangen-Beschreibung der zweiphasigen Strömung mit Hilfe einer Grob-Struktur-Simulation zum anderen. Diese Kombination ist unseres Wissens nach bisher in dieser Form nicht publiziert, wobei hier anzumerken bleibt, dass es generell relativ wenige Veröffentlichungen im Bereich reaktiver zweiphasiger Strömungen mit Grob-Struktur-Simulationen gibt.

Die Grobstruktur-Simulation für zweiphasige Strömungen wurde bereits in einigen Arbeiten implementiert (z. B. [5, 6]). Betrachtet werden allerdings meist Probleme der Turbulenzmodulation, Partikeldispersion und Modifikation der Sub-Grid-Scale-Modelle (SGS) im Rahmen der Zwei-Wege-Kopplung. Auch reaktive Arbeiten wurden veröffentlicht (z. B. [7, 8]), jedoch meist mit geringer numerischer Auflösung und stark vereinfachten Partikelabbrandmodellen oder für Spray-Verbrennungen ([9]). Diese Einschränkungen sollen in dieser Arbeit fallen gelassen werden, um ein tiefer gehendes Verständnis zu ermöglichen.

Das Abbrandmodell aus [10, 11] soll bezüglich der Komplexität der Modellierung eines Einzelpartikels die obere Grenze dieser Arbeit darstellen und gegebenenfalls vereinfacht werden. Desweiteren soll ein direkter Vergleich verschiedener Modelle (null- und eindimensional) erstellt werden. Bezüglich der enorm langen Rechenzeiten des Abbrandmodells von [10, 11] besteht die Möglichkeit die chemischen Quellterme des Partikelmodells mit einem Tabellierungsverfahren wie In Situ Adaptive Tabulation (ISAT) [2] zu behandeln, da dies eine Beschleunigung des Modelles um den Faktor 5-10 erwarten läßt. Eine Tabellierung würde sich, allein aufgrund der großen Anzahl von Eizelpartikeln, auch für nulldimensionale Abbrandmodelle anbieten. Die chemischen Modelle der Pyrolyse können zum Beispiel aus den Arbeiten [12, 13, 14, 15, 16] entnommen werden. Es gibt eine Vielzahl dieser Modelle, wobei einige auch in der Arbeit von [1] erfolgreich zur Beschreibung des Partikelabbrandes in einem Wirbelbettes eingesetzt wurden.

Um auch die Strömungsmechanik und deren Wechselwirkung mit den chemischen Vorgängen beurteilen zu können, soll das Euler-Lagrange-Modell mit einem am Institut entwickelten Euler-Euler-Modell verglichen werden. Dabei erhoffen wir uns Aussagen über die Notwendigkeit der Lagrange'schen-Modellierung für verschiedene Größenklassen von Partikeln und verschiedene Modellansätze, die wiederum in der Entwicklung eines Euler-Euler-Lagrange-Modelles in einer späteren Arbeiten münden sollen. Dieser Ansatz bietet insbesondere in Bezug auf die Rechenzeit Vorteile.

3 Nutzen für die Chemische Technik, Verfahrenstechnik und Biotechnologie

Die Kombination aus komplexer strömungsmechanischer Modellierung und detaillierter Betrachtung der chemischen Vorgänge ist zur Zeit noch selten und daher existieren nur wenige Daten. Die zu erstellende Arbeit wird nicht nur numerische Daten liefern können sondern bietet zugleich einen direkten Vergleich mit experimentellen Ergebnissen und anderen Simulationsergebnissen. Dabei können Experiment und Simulation aufeinander abgestimmt werden.

Der Grad der Modellierung bei solch verwickelten Vorgängen wie der Teerbildung in Wirbelschichten ist in diesem Ausmaße notwendig und wird in absehbarer Zeit auch unter Berücksichtigung der Rechenzeit für die direkte Optimierung von Anlagen nutzbar sein, d.h. das es durchaus vorstellbar ist, derartige Modelle in der Zukunft zum Entwurf von Vergasungsanlagen zu nutzen. Zusätzlich wird erwartet, dass das Simulationswerkzeug zu einem besseren Verständnis über den Einfluß der Einzelmodelle auf die Simulationsergebnisse beitragen kann.

Durch die umfangreichen Implementationsarbeiten verschiedenster, zum Teil sehr detailreicher Partikelabbrandmodelle soll herausgefunden werden, inwieweit die Tiefe der Modellierung eines Einzelpartikels Einfluss auf das Gesamtverhalten hat. Offene Fragen sind diesbezüglich zum Beispiel die notwendige strömungsmechanische Modellierung innerhalb eines Partikels und deren Wechselwirkung auf die Teerentstehung bzw. den Teerabbau in der Gasphase.

Letztendlich soll diese Arbeit mit dazu beitragen, regenerative Energien sauberer und damit auch wirtschaftlicher nutzen zu können, indem sie ein Simulationswerkzeug zur Verfügung stellt, welches sich in Zukunft zur Optimierung einer Biomassevergasungsanlage eignet.

Literatur

- [1] HOFFMANN, M.: *Simulation der Holzvergasung im Wirbelschichtreaktor*, Technische Universität Berlin, Fakultät III– Prozesswissenschaften, Institut für Energietechnik, Studienarbeit, 2007
- [2] SINGER, M.A. ; POPE, S.B. ; NAJM, H.N.: Operator-Splitting with ISAT to model reacting flow with detailed chemistry. In: *Combustion Theory and Modelling* 10 (2006), S. 199–217
- [3] GERBER, S.: *Implementierung eines Euler-Lagrange-Verfahrens zur Modellierung einer inerten Fluid-Feststoff-Strömung*, Technische Universität Berlin, Fakultät III– Prozesswissenschaften, Institut für Energietechnik, Diplomarbeit, 2006
- [4] GERBER, S.: *Implementierung und Test einer Vier-Wege-Kopplung zur Berechnung dichter inerter Partikelströmungen*, Technische Universität Berlin, Fakultät III– Prozesswissenschaften, Institut für Energietechnik, Diplomarbeit, 2006
- [5] BOIVIN, M. ; SIMONIN, O. ; SQUIRES, K. D.: On the prediction of gas-solid flows with two-way coupling using large eddy simulation. In: *Phys. Fluids* 12 (2000), Nr. 8, S. 2080–2090
- [6] GROH, B. ; SADIKI, A. ; JANICKA, J.: Large eddy simulation of particle-laden vertical channel flow under consideration of consistent modeling of turbulence modulation. In: *3rd International Symposium on Two-Phase Flow Modelling and Experimentation*. Pisa, 2004
- [7] ZHOU, H. ; FLAMANT, G. ; GAUTHIER, D.: DEM-LES of coal combustion in a bubbling fluidized bed. Part I: gas-particle turbulent flow structure. In: *Chemical Engineering Science* 59 (2004), S. 4193–4203
- [8] ZHOU, H. ; FLAMANT, G. ; GAUTHIER, D.: DEM-LES of coal combustion in a bubbling fluidized bed. Part II: coal combustion at the particle level. In: *Chemical Engineering Science* 59 (2004), S. 4205–4215

- [9] SANKARAN, V. ; MENON, S.: LES of spray combustion in swirling flow. In: *J. of Turbulence* 3 (2002), Nr. 1
- [10] WILMES, B. ; BEHRENDT, F.: Modelling the gasification of wood particles. In: *Combustion and Atmospheric Pollution*. G. D. Roy, S. M. Frolov, A. M. Starik, Torus Press, Moskau, 2003, S. 257–261
- [11] WILMES, B. ; MIESKE, K. ; BEHRENDT, F.: Vergasung eines Holzpartikels - Simulation und Experiment. In: *DGMK - Fachbereichstagung Energetische Nutzung von Biomassen*. Velen/Westf., 2004, S. 121–128
- [12] RATH, J. ; STAUDINGER, G.: Cracking reactions of tar from pyrolysis of spruce wood. In: *Fuel* 80 (2001), S. 1379–1389
- [13] RATH, J. ; STEINER, G. ; WOLFINGER, M. G. ; STAUDINGER, G.: Tar cracking from fast pyrolysis of large beech wood particles. In: *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis* 62 (2002), S. 83–92
- [14] RATH, J. ; WOLFINGER, M. G. ; STEINER, G. ; KRAMER, G. ; BARONTINI, F. ; COZZANI, V.: Heat of wood pyrolysis. In: *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis* 82 (2003), S. 81–91
- [15] DI BLASI, Colomba: Kinetic and Heat Transfer Control in the Slow and Flash Pyrolysis of Solids. In: *Ind. Eng. Chem. Res.* 35 (1996), S. 83–92
- [16] AHUJA, P. ; KUMAR, S. ; SINGH, P. C.: A model for primary and heterogeneous secondary reactions of wood pyrolysis. In: *Chemical Eng. and Tech.* 19 (2004), S. 272–282