

Schlussbericht FuturePelletSpec - Berichtsteil II
FKZ: 22020917



Projekt „FuturePelletSpec“

**Neuartige und erweiterte Holzpellet-
Charakterisierung und Abbrandmodellierung
Teil 1: Grundlagenuntersuchung**

Berichtsteil II: Modellentwicklung

Autoren

Thomas Brunner
Ingwald Obernberger
Martina Blank
Claudia Benesch
Ali Shiehnejadhesar
Günter Knauss

Förderkennzeichen 22020917

Graz, 27.07.2021

Impressum

Mitarbeiter
Thomas Brunner
Ingwald Obernberger
Martina Blank
Claudia Benesch
Ali Shiehnejadhesar
Günter Knauss

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Verbraucherschutz, Ernährung und Landwirtschaft unter dem Förderkennzeichen 22020917 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren

© 2021
Technologie- und Förderzentrum
im Kompetenzzentrum für Nachwachsende Rohstoffe (TFZ), Straubing

Alle Rechte vorbehalten.
Kein Teil dieses Werkes darf ohne schriftliche Einwilligung des Herausgebers in irgendeiner Form reproduziert oder unter Verwendung elektronischer Systeme verarbeitet, vervielfältigt, verbreitet oder archiviert werden.

ISSN: 1614-1008

Hrsg.: Technologie- und Förderzentrum
im Kompetenzzentrum für Nachwachsende Rohstoffe (TFZ)
Schulgasse 18, 94315 Straubing

E-Mail: poststelle@tfz.bayern.de
Internet: www.tfz.bayern.de

Redaktion: Thomas Brunner (BIOS)
Verlag: Eigenverlag
Erscheinungsort: Straubing
Erscheinungsjahr: 2021
Gestaltung: Thomas Brunner (BIOS)

Fotonachweis: BIOS

Abstract

Ein innovatives Brennstoffbett-Abbrandmodell für Pelletfeuerungen wurde entwickelt und auf der Grundlage von Testläufen an einem Reaktor im Labormaßstab validiert. Das Brennstoffbett-Abbrandmodell wurde mit einem Gasphasenverbrennungsmodell gekoppelt und das Gesamtsimulationspaket wurde anhand von Daten aus Testläufen am Laborreaktor am BIOS validiert. Mit dem neuen Modell können alle brennstoffspezifischen Parameter, die in den experimentellen Arbeiten als relevant angesehen wurden, separat variiert und somit deren Einfluss auf den Verbrennungsprozess untersucht werden.

Insgesamt ist es mit diesem neuen, innovativen CFD-Simulationsmodell möglich, in akzeptabler Simulationszeit eine relativ genaue Übereinstimmung mit den Messergebnissen aus dem Reaktor im Labormaßstab zu erreichen. Das neue Festbettmodell ermöglicht somit eine gute Bewertung des Verbrennungsprozesses und der relevanten Einflussparameter.

Sensitivitätsstudien mit einem Einzelpartikel-Verbrennungsmodell zeigten, dass sowohl die Holzart (Laubholz, Nadelholz) als auch die Pelletlänge und -dichte einen relevanten Einfluss auf das Verbrennungsverhalten der einzelnen Pellets zu haben scheinen. Obwohl die Einzelpartikelsimulationen erste wertvolle Ergebnisse bezüglich der Auswirkungen relevanter Parameter auf die Verbrennung von Pellets lieferten, können diese nicht direkt auf das Verhalten von gepackten Pelletbetten übertragen werden.

Daher wurden die genannten und weitere Einflussparameter mit dem neuen Brennstoffbettverbrennungsmodell detailliert untersucht, um ihren Einfluss auf die Brennstoffbettkonversion bewerten zu können. Aus diesen parametrischen Untersuchungen wurden folgende Erkenntnisse gewonnen:

- Höhere Schüttdichten führen zu längeren Verbrennungszeiten aufgrund kleinerer innerer Oberflächen im Bett.
- Die Pelletlänge hat einen Einfluss auf die Schüttdichte und damit auf die Abbrandzeit. Außerdem beschleunigt die Pelletlänge selbst den Ausbrand. Ein Bett aus längeren Pellets (geringere Schüttdichte) brennt also schneller ab und verursacht somit auch höhere Betttemperaturen.
- Je nach Holzart ergeben sich durch unterschiedliche Kinetik der Holzersetzung und Brennstoffzusammensetzung unterschiedliche Verbrennungseigenschaften, die das Brennstoffbett und den Aufbau einer Ascheschicht beeinflussen. Beim Vergleich von Buchen- und Fichtenholz ist zu erkennen, dass der höhere Aschegehalt von Buchenholz zu einem höheren Aschebett führt und dass aufgrund der schnelleren TGA-abgeleiteten Kinetik für Buchenholz das Bett schneller verbrennt, was zu höheren Temperaturen führt.
- Brennstoffe mit höheren Aschegehalten führen durch die "isolierende" Wirkung der Asche zu einem veränderten Abbrandverhalten (leicht verkürzte Trocknung und Pyro-

lyse und deutlich kürzerer Kohleausbrand bei geringerem Aschegehalt) und zu höheren Betthöhen bei hohen Aschegehalten. Diese können z. B. im Hinblick auf die Luftdüsenpositionen in einem Brennertopf problematisch sein, was mit dem Modell nun besser abgeschätzt werden kann.

- Unterschiedliche Holzkohledichten haben keinen signifikanten Einfluss auf die Betthöhe, wohl aber auf die Pyrolyse- und Holzkohlebrenndauer. Geringere Holzkohledichten führen aufgrund der größeren zur Verfügung stehenden Oberfläche zu einem beschleunigten Betausbrand.
- Ein stärkeres Schrumpfen des Bettes (verursacht durch geringere Aschegehalte oder geringere Holzkohledichten) verlangsamt das Ende des Kohleausbrandes.

Aufgrund der Ergebnisse der CFD-Simulationen mit dem neuen Schüttschichtmodell ist es nun möglich, einen besseren Einblick in die Vorgänge bei der Brennstoffbettumsetzung zu gewinnen und daraus wichtige Hinweise für die Auslegung von Brennertöpfen, Primärluftdüsen, Sekundärluftdüsen und der Verbrennungsregelung zu erhalten sowie die komplexen Wechselwirkungen zwischen einzelnen Einflussparametern besser zu verstehen.

Die Möglichkeit, relevante Einflussparameter direkt im Brennstoffbett-Abbrandmodell zu berücksichtigen, macht es möglich, diese auch gezielt im Zuge einer Technologieentwicklung für Pelletöfen oder Pelletkessel zu berücksichtigen.

An innovative combustion model for packed pellet beds has been developed and validated on the basis of test runs at a laboratory-scale reactor. The packed bed combustion model has been coupled to a gas phase combustion model and the overall simulation package was validated using data from test runs at the laboratory-scale reactor at BIOS. With the new model, all fuel-specific parameters that were considered relevant in the experimental work can be varied separately and thus their influence on the combustion process can be investigated.

Overall, with this new, innovative CFD simulation model, it is possible to achieve a relatively exact agreement with measurement results from the laboratory-scale reactor in acceptable simulation time. The new packed-bed model thus enables a good evaluation of the combustion process and of relevant influencing parameters.

Sensitivity studies with a single-particle combustion model showed that both the wood type (hardwood, softwood) and the pellet length and density seem to have a relevant influence on the combustion behaviour of individual pellets. Although the single particle simulations provided first valuable results regarding the effects of relevant parameters on the combustion of pellets, they cannot be directly transferred to the behaviour of packed pellet beds.

Therefore, the mentioned ones and other influencing parameters were investigated in detail with the new fuel bed combustion model in order to be able to evaluate their influence on fuel bed conversion. The following findings were obtained from these parametric studies:

- Higher bulk densities lead to longer combustion times due to smaller inner surfaces in the bed.
- The pellet length has an influence on the bulk density and thus on the burnout time. Furthermore, the pellet length itself accelerates the burnout. A bed of longer pellets (lower bulk density) thus burns faster and therefore also causes higher bed temperatures.
- Depending on the type of wood, different kinetics of the wood decomposition and fuel compositions result in different combustion characteristics that influence the fuel bed and the build-up of an ash layer. In the case of the comparison of beech and spruce wood, it can be seen that the higher ash content of beech wood results in a higher ash bed and that, due to the faster TGA-derived kinetics for beech wood, the bed burns faster, resulting in higher temperatures.
- Fuels with higher ash contents lead to a changed burning behaviour due to the "insulating" effect of the ash (slightly shortened drying and pyrolysis and clearly shorter charcoal burnout with lower ash content) and to higher bed heights with high ash contents. These can be problematic e.g. with regard to air nozzle positions in a burner pot, which can now be assessed more easily with the model.

- Different charcoal densities do not have a significant influence on the bed height, but they do have an influence on the pyrolysis and charcoal combustion time. Lower charcoal densities lead to accelerated bed burnout due to the larger surface area available.
- A stronger shrinking of the bed (caused by lower ash contents or lower charcoal densities) slows down the end of charcoal burnout.

Based on the results of the CFD simulations with the new packed bed model, it is now possible to gain better insights into the processes going on during fuel bed conversion and from this to obtain important information for the design of burner pots, primary air nozzles, secondary air nozzles and the combustion control, as well as to better understand the complex interactions between individual influencing parameters.

The possibility that relevant influencing parameters can be directly taken into account in the bed combustion model makes it possible to also specifically consider them in the course of a technology development for pellet stoves or pellets boilers.

Inhaltsverzeichnis Berichtsteil II

| | |
|---|-----------|
| Abstract | 6 |
| Abbildungsverzeichnis | 9 |
| Tabellenverzeichnis..... | 13 |
| Abkürzungsverzeichnis | 14 |
| 1 Einleitung | 16 |
| 2 Zielsetzung und Aufbau des Projekts | 19 |
| 3 Stand des Wissens und der Technik..... | 20 |
| 4 Methodik..... | 22 |
| 5 Modellentwicklung und Ergebnisse | 24 |
| 5.1 Basismodellentwicklung | 24 |
| 5.1.1 Basismodell - Einleitung..... | 24 |
| 5.1.2 Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität und Dichte | 24 |
| 5.1.3 Wärmetransport innerhalb der Schüttung..... | 25 |
| 5.1.4 Trocknung..... | 26 |
| 5.1.5 Pyrolyse | 26 |
| 5.1.6 Holzkohlenumsetzung..... | 27 |
| 5.1.7 Gasphasenkonversion | 29 |
| 5.2 Testrechnungen mit dem Basismodell und Vergleich mit Daten von Testläufen am Laborreaktor..... | 30 |
| 5.2.1 Rahmenbedingungen und Anfangsbedingungen..... | 30 |
| 5.2.2 Ergebnisse..... | 31 |
| 5.3 Weiterentwicklung des Modells | 34 |
| 5.3.1 Gasphasenkonversion | 34 |
| 5.3.2 Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität und Dichte | 35 |
| 5.3.3 Zusammensetzung der flüchtigen Komponenten..... | 36 |
| 5.3.4 Strahlungsabsorption | 37 |
| 5.3.5 Holzkohlenumsetzung..... | 38 |
| 5.3.6 Nachsacken der Pellets in Hohlräume im Pelletbett | 39 |
| 5.4 Validierung des weiterentwickelten Modells | 40 |
| 5.4.1 Rahmenbedingungen und Anfangsbedingungen für die Simulationen | 40 |
| 5.4.2 Ergebnisse..... | 41 |
| 5.4.2.1 Massenabbau | 41 |
| 5.4.2.2 Temperaturentwicklung..... | 42 |
| 5.4.2.3 Gasphasenzusammensetzung nach Betaustritt..... | 45 |
| 5.4.2.4 Struktur des Brennstoffbettes | 47 |
| 5.4.3 Schlussfolgerungen..... | 49 |
| 5.5 Finale Modellverbesserungen | 49 |

| | | |
|------------|---|-----------|
| 5.5.1 | Implementierung eines Teermodells | 49 |
| 5.5.2 | Ergebnisse | 50 |
| 6 | Sensitivitätsstudien | 53 |
| 6.1 | Ergebnisse von Sensitivitätsstudien mit einem Einzelpartikelabbrandmodell | 53 |
| 6.1.1 | Kurzbeschreibung des eingesetzten Modells und der Variationsparameter | 53 |
| 6.1.2 | Ergebnisse der Simulationen | 55 |
| 6.1.3 | Aus den Simulationsergebnissen abgeleitete Empfehlungen | 61 |
| 6.2 | Ergebnisse von Sensitivitätsstudien mit dem im Projekt entwickelten Abbrandmodell für Pelletschüttungen..... | 61 |
| 6.2.1 | Rahmenbedingungen und Anfangsbedingungen für die Simulationen.... | 62 |
| 6.2.2 | Ergebnisse der Simulationen | 63 |
| 6.2.2.1 | Vergleich verschiedener Nadelholzpelletsortimente..... | 63 |
| 6.2.2.2 | Variation der Pelletlänge | 68 |
| 6.2.2.3 | Variation des Ausgangsmaterials (Fichte vs. Buche) | 73 |
| 6.2.2.4 | Variation des Aschegehaltes | 78 |
| 6.2.2.5 | Variation der Dichte der Holzkohle..... | 83 |
| 6.2.3 | Zusammenfassung und Schlussfolgerungen..... | 88 |
| 7 | Zusammenfassung | 91 |
| | Quellenverzeichnis | 93 |

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|---------------|---|----|
| Abbildung 1: | Schematische Darstellung einzelner Abbrandmodelle | 21 |
| Abbildung 2: | Prinzipielle Vorgangsweise bei der Modellentwicklung..... | 23 |
| Abbildung 3: | Schematische Darstellung der Umsetzung eines repräsentativen Teilchens im Pelletbett | 24 |
| Abbildung 4: | 3D-Scans von verkohlten Pellets aus den Laborreaktor tests und aus den Verbrennungstests am TFZ | 28 |
| Abbildung 5: | Oberflächenvermessung über 3D-Scans mit dem Mikroskop Keyence VR 5200 (links) und dem hochauflösenden Keyence VK-X1000 (rechts) | 29 |
| Abbildung 6: | Randbedingungen für die Nachsimulation eines Laborreaktor tests | 30 |
| Abbildung 7: | Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem Basismodell mit Messdaten aus einem Laborreaktor testlauf mit Fichtenpellets - relevante Trends | 32 |
| Abbildung 8: | Simulationsergebnisse mit dem Basismodell - Betteigenschaften 420 s nach der Zündung sowie Vergleich mit Laborreaktor tests.... | 33 |
| Abbildung 9: | Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem weiterentwickelten Modell mit Messdaten aus einem Laborreaktor testlauf mit dem marktverfügbaren Pelletsortiment 19 - Massenabbau | 42 |
| Abbildung 10: | Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem weiterentwickelten Modell mit Messdaten aus einem Laborreaktor testlauf mit dem marktverfügbaren Pelletsortiment 19 - Temperaturen | 43 |
| Abbildung 11: | Vergleich der mit Thermoelementen bestimmten Temperaturen mit aus den CFD-Simulationen resultierenden Gastemperaturen (gas) und Strahlungstemperaturen (rad)..... | 44 |
| Abbildung 12: | Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem weiterentwickelten Modell mit Messdaten aus einem Laborreaktor testlauf mit dem marktverfügbaren Pelletsortiment 19 - Gaszusammensetzung nach Betaustritt | 46 |
| Abbildung 13: | Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem weiterentwickelten Modell mit Messdaten aus einem Laborreaktor testlauf mit dem marktverfügbaren Pelletsortiment 19 - Bettstruktur zum Zeitpunkt des Abbruchkriteriums 1 (1000 s nach Versuchsstart) und des Abbruchkriteriums 2 (1600 s nach Versuchsstart) | 48 |
| Abbildung 14: | Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem weiterentwickelten Modell mit Messdaten aus einem Laborreaktor testlauf mit dem marktverfügbaren Pelletsortiment 19 - Masseverlust ohne (oben) und mit (unten) Teermodell..... | 51 |
| Abbildung 15: | Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem weiterentwickelten Modell mit Messdaten aus einem Laborreaktor testlauf mit dem | |

| | | |
|---------------|--|----|
| | marktverfügbaren Pelletsortiment 19 - Temperaturen ohne (oben) und mit (unten) Teermodell | 52 |
| Abbildung 16: | Schematische Darstellung des Schalenmodells..... | 54 |
| Abbildung 17: | Massenverlust über die Zeit bei unterschiedlichen Pellettlängen ... | 57 |
| Abbildung 18: | Massenverlust über die Zeit bei unterschiedlichen Pellettdichten... | 58 |
| Abbildung 19: | Massenverlust über die Zeit bei unterschiedlichen Wassergehalten | 59 |
| Abbildung 20: | Massenverlustüber die Zeit bei unterschiedlichen Zusammensetzungen der Pseudokomponenten | 60 |
| Abbildung 21: | Simulationsergebnisse für wesentliche Prozessgrößen des Bettabbrandes bei Einsatz von zwei unterschiedliche Nadelholzpelletsortimenten | 64 |
| Abbildung 22: | Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von zwei unterschiedliche Nadelholzpelletsortimenten nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Porosität und Wassergehalt..... | 65 |
| Abbildung 23: | Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von zwei unterschiedliche Nadelholzpelletsortimenten nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Anteil an trockenem Holz und Holzkohlegehalt | 66 |
| Abbildung 24: | Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von zwei unterschiedliche Nadelholzpelletsortimenten nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Aschegehalt und Betttemperaturen..... | 67 |
| Abbildung 25: | Simulationsergebnisse für wesentliche Prozessgrößen des Bettabbrandes bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Längen | 69 |
| Abbildung 26: | Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Längen nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Porosität und Wassergehalt | 70 |
| Abbildung 27: | Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Längen nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Anteil an trockenem Holz und Holzkohlegehalt | 71 |
| Abbildung 28: | Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Längen nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Aschegehalt und Betttemperaturen..... | 72 |
| Abbildung 29: | Simulationsergebnisse für wesentliche Prozessgrößen des Bettabbrandes bei Einsatz von Pellets aus unterschiedlichen Ausgangsmaterialien | 74 |
| Abbildung 30: | Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets aus unterschiedlichen Ausgangsmaterialien (Fichte, Buche) nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Porosität und Wassergehalt | 75 |
| Abbildung 31: | Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets aus unterschiedlichen Ausgangsmaterialien (Fichte, Buche) nach | |

| | |
|---|----|
| 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Anteil an trockenem Holz und Holzkohlegehalt..... | 76 |
| Abbildung 32: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets aus unterschiedlichen Ausgangsmaterialien (Fichte, Buche) nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Aschegehalt und Betttemperaturen | 77 |
| Abbildung 33: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets aus unterschiedlichen Ausgangsmaterialien (Fichte, Buche) – Aschebett am Ende des Ausbrandes | 78 |
| Abbildung 34: Simulationsergebnisse für wesentliche Prozessgrößen des Bettabbrandes bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Aschegehalten..... | 79 |
| Abbildung 35: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Aschegehalten nach 800, 1.000, 1.400, 1.800 und 2.400 s - Porosität und Wassergehalt | 80 |
| Abbildung 36: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Aschegehalten nach 800, 1.000, 1.400, 1.800 und 2.400 s - Anteil an trockenem Holz und Holzkohlegehalt | 81 |
| Abbildung 37: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Aschegehalten nach 800, 1.000, 1.400, 1.800 und 2.400 s - Aschegehalt und Betttemperaturen..... | 82 |
| Abbildung 38: Simulationsergebnisse für wesentliche Prozessgrößen des Bettabbrandes bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Dichten der Holzkohle | 84 |
| Abbildung 39: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Dichten der Holzkohle nach 800, 1.000, 1.400, 1.800 und 2.400 s - Porosität und Wassergehalt..... | 85 |
| Abbildung 40: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Dichten der Holzkohle nach 800, 1.000, 1.400, 1.800 und 2.400 s - Anteil an trockenem Holz und Holzkohlegehalt..... | 86 |
| Abbildung 41: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Dichten der Holzkohle nach 800, 1.000, 1.400, 1.800 und 2.400 s - Aschegehalt und Betttemperaturen | 87 |

Tabellenverzeichnis

| | | |
|-------------|--|----|
| Tabelle 1: | Modellparameter für Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität und Dichte..... | 25 |
| Tabelle 2: | Zusammensetzung der im Zuge der Pyrolyse entstehenden Gase | 27 |
| Tabelle 3: | Ergebnisse der Vermessung von einzelnen verkohlten Pellets..... | 28 |
| Tabelle 4: | Überarbeitete Modellparameter für Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität und Dichte..... | 35 |
| Tabelle 5: | Zusammensetzung der im Zuge der Pyrolyse entstehenden Gase | 37 |
| Tabelle 6: | Brennstoffzusammensetzung - marktverfügbares Pelletsortiment | 41 |
| Tabelle 7: | Kinetische Parameter zur Berechnung der thermischen Zersetzung | 41 |
| Tabelle 8: | Zusammenfassung der Parametervariationen | 55 |
| Tabelle 9: | Zusammenfassung der Simulationsergebnisse bzgl. der Abbrandzeiten bei den Parametervariationen | 61 |
| Tabelle 10: | Zusammenfassung der Parametervariationen | 63 |

Abkürzungsverzeichnis

af: aschefrei

E_A : Aktivierungsenergie

FS: bezogen auf Frischsubstanz

m-%: Masseprozent

HK: Holzkohle

$\ln(A)$: Prä-Exponentieller Faktor

RG: Rauchgas

TGA: Thermogravimetrische Analyse

TS: bezogen auf Trockensubstanz

1 Einleitung

Während die meisten Biomasse-Brennstoffe (Hackgut, Rinde, landwirtschaftliche Biomasse) sehr inhomogene Brennstoffeigenschaften und große Variationsbreiten bzgl. einiger feuerungstechnisch relevanter Parameter (z. B. Wassergehalt, Energiedichte) zeigen, bewegen sich diese Schwankungen bei Holzpellets auf Grund der strengen Eingrenzungen durch Brennstoffnormen (DIN EN ISO 17225-2) und Qualitätssiegel in einem engen Band. Diese genaue Spezifikation des Brennstoffes ermöglicht auch eine deutlich weniger komplexe und kompaktere Bauweise von Pellet-Kleinfeuerungen im Vergleich zu z. B. Hackgutkesseln. Darauf aufbauend haben sich Pelletkessel und Pelletkaminöfen in den vergangenen zwei Jahrzehnten als die am häufigsten eingesetzte Biomassefeuerungstechnologie im kleinen Leistungsbereich (bis 100 kW_{th}) etabliert. Im Vergleich zu Pelletkesseln sind Pelletkaminöfen auf Grund ihrer geringeren Nennleistungen und Anschaffungskosten für zukünftige energieeffiziente Gebäude besonders interessant. Dabei kann auch der Umstand, dass Pelletkaminöfen ein Designelement im modernen Wohnbau darstellen, die Konkurrenzfähigkeit vor allem gegenüber Wärmepumpen steigern.

Allerdings stellen ständig sinkende Emissionsgrenzwerte immer wieder neue Herausforderungen für die Hersteller von Pelletkaminöfen dar. Verschärft wird diese Situation dadurch, dass wissenschaftliche Studien gezeigt haben, dass selbst bei ausschließlicher Verwendung von Pellets höchster Qualitätsklasse (ISO 17225-2, A1-Qualität) stark variierende Staubemissionen zu beobachten sind. Welche Brennstoff-Parameter für diese hohen Schwankungen verantwortlich zeichneten, war zu diesem Zeitpunkt nicht bekannt, da keiner der eingesetzten Brennstoffe außerhalb der von der ISO 17225-2 definierten Qualitätskriterien lag. Um dies im Detail zu ergründen, wurde das Projekt FuturePelletSpec initiiert, dessen übergeordnete Zielsetzung es ist, Parameter, die von der aktuellen Pelletnormung nicht erfasst werden, aber einen maßgeblichen Einfluss auf das Verbrennungsverhalten von Holzpellets haben, zu identifizieren. Durch die Identifikation dieser Parameter sollte es auch möglich sein, entsprechende gegensteuernde Maßnahmen, einerseits in der Brennstoffnormung und andererseits im Ofendesign vorzuschlagen, die in weiterer Folge dazu führen sollen, die Emissionen von Pelletkaminöfen generell zu mindern und damit ihre Konkurrenzfähigkeit am Raumheizungsmarkt zu festigen und weiter zu steigern.

Experimentelle Arbeiten zu diesem Thema bildeten einen Schwerpunkt im Projekt FuturePelletSpec. Es war jedoch von Anfang an klar, dass ausschließlich experimentelle Untersuchungen auf Grund der Vielzahl der potentiellen Einflussparameter und ihrer Quereinflussungen nicht alle Fragen beantworten werden können, weshalb ein zweiter Schwerpunkt hinsichtlich der Entwicklung neuer verbesserter Modelle zur Simulation des Abbrandes von Pelletschüttungen gesetzt wurde. Verbesserte Simulationstechniken, im speziellen CFD (Computational Fluid Dynamics – numerische Strömungsberechnung), können wesentlich zu einem besseren Verständnis der Abläufe im Brennstoffbett und der damit im Zusammenhang stehenden Problemstellungen beitragen. Diese Simulationstechniken sind, was die Gasphasenverbrennung anbelangt, Stand der Technik, die Modellierung des Brennstoffbett-Abbrandes und damit die konkrete Einbeziehung von Schwankungen der

Brennstoffqualität konnte zu Beginn des Projektes jedoch noch nicht mit ausreichender Genauigkeit berücksichtigt werden.

Dieser Berichtsteil beschäftigt sich mit der Entwicklung eines neuen Brennstoffbett-Abbrandmodells für Pelletschüttungen, die im Rahmen des Projektes von der BIOS BIO-ENERGIESYSTEME GmbH durchgeführt wurde. Dieses neue Modell sollte es ermöglichen, die Auswirkungen der im experimentellen Teil des Projektes als relevant identifizierten Brennstoffparameter auf den Bettabbrand abzubilden und so tiefere Einblicke in die ablaufenden Mechanismen des Pelletbettabbrands zu ermöglichen. Außerdem sollten relevante Parameter mit dem neuen Modell hinsichtlich ihrer Auswirkungen auf den Abbrand in Form von Sensitivitätsanalysen im Detail untersucht und so, in Kombination mit den durchgeführten experimentellen Arbeiten, die relevantesten Einflussgrößen identifiziert werden. Durch eine Kopplung des Bettabbrandmodells mit einem Gasphasenverbrennungsmodell soll es dann auch möglich sein, die Entwicklung und Optimierung neuer Pelletkaminöfen in Richtung niedrigerer Emissionen bei gleichzeitig höherer Robustheit gegenüber Schwankungen der Pelletqualität durch gezielte Simulationen zu unterstützen.

2 Zielsetzung und Aufbau des Projekts

Die Zielsetzungen des Projektes wie auch seine Struktur sind im Detail im Berichtsteil I beschrieben. Der vorliegende Berichtsteil II setzt sich mit der Zielsetzung auseinander, ein Brennstoffbett-Abbrandmodell für Holzpellet-Festbettfeuerungen zu entwickeln, das erstmals eine transiente (zeitaufgelöste) Simulation des Brennstoffbettabbrandes erlaubt und die als kritisch identifizierten Brennstoffeigenschaften berücksichtigt. Dieses Modell sollte eine deutlich bessere Grundlage für die CFD-gestützte Feuerungsentwicklung darstellen als gängige, in der Regel empirische, Abbrandmodelle.

Die übergeordnete Zielsetzung war dabei die Entwicklung eines transienten CFD-Abbrandmodells für Pelletschüttungen (Schüttungsmodellierung). Die Ergebnisse aus den experimentellen Arbeiten (siehe Berichtsteil I) sollten dabei in Form von Stoffdaten und Verbrennungseigenschaften in die Modellierung eingehen und erstmals die detaillierte Berücksichtigung bekannter und im Projekt identifizierter neuer kritischer Brennstoffcharakteristika bei der Schüttungsmodellierung ermöglichen. Ein dabei wesentlicher Aspekt der realitätsnahen transienten Bettmodellierung ist, dass im Vergleich zu einer stationären Betrachtung des Bettzustandes zusätzlich beachtet werden muss, dass durch den Abbrand einzelner Pelletschichten Hohlräume im Bett entstehen, die von den darüber liegenden Schichten aufgefüllt werden. Um dies abbilden zu können, sollte als weiterer innovativer Aspekt das Nachsacken des Brennstoffes in die entstehenden Hohlräume ebenfalls vom Modell erfasst werden. Dieses neue Modell sollte dann in einem zweiten Schritt mit bereits bestehenden CFD-Gasphasenverbrennungs-Modellen gekoppelt und so einerseits für die Durchführung von Sensitivitätsanalysen zur Untersuchung des Einflusses unterschiedlicher Brennstoffparameter auf den Bettabbrand und die Emissionen und andererseits für die Konzeption von Pelletfeuerungen anwendbar gemacht werden. Um diese Praxistauglichkeit zu erzielen, war es aber auch notwendig, das Modellierungskonzept von Anfang an so zu entwickeln, dass bei ausreichender Genauigkeit deutlich kürzere (industrietaugliche) Berechnungszeiten benötigt werden als bei derzeit üblichen Modellansätzen.

Die detaillierten Zielsetzungen wurden dem entsprechend wie folgt definiert:

- Ermittlung relevanter für die Modellierung notwendiger Brennstoffdaten anhand von Literaturrecherchen und Testläufen an speziellen Laborreaktoren (siehe Berichtsteil I, Abschnitt 5.3 und 8)
- Entwicklung eines neuen transienten Brennstoffbett-Abbrandmodells
- Validierung des Modells anhand von Testläufen an einem Laborreaktor
- Kopplung des Brennstoffbett-Abbrandmodells mit einem bestehenden Gasphasenverbrennungsmodell
- Durchführung von Sensitivitätsanalysen mit dem neu entwickelten und validierten Modell zur detaillierten Untersuchung der Auswirkungen relevanter Parameter auf den Brennstoffbettabbrand

3 Stand des Wissens und der Technik

In vielen industriellen Sparten spielen Computer-gestützte Simulationen eine wesentliche Rolle im Zuge der Produktentwicklung (Computer Aided Development – CAD). Im Fall von Pelletfeuerungen können vor allem numerische Strömungssimulationen (Computational Fluid Dynamics – CFD) dazu eingesetzt werden, um die Strömungsverhältnisse und die Gasphasenverbrennung zu optimieren. Der Einsatz derartiger Simulationstechnik ermöglicht es, durch die Entwicklung voroptimierter Designs und die gezielte Untersuchung des Einflusses einzelner Parameter auf die Verbrennung, die Entwicklungssicherheit zu erhöhen und den Zeitaufwand für den Prototypenbau und die experimentelle Prototypenoptimierung wesentlich zu reduzieren. Ein aktuell bestehender Nachteil derartiger Simulationen ist jedoch, dass keine praktisch anwendbaren detaillierten Modelle verfügbar sind, die das Abbrandverhalten des Brennstoffbettes (= Freisetzung flüchtiger brennbarer Substanzen aus dem Brennstoffbett) im Detail, zeitaufgelöst und abhängig vom eingesetzten Brennstoff beschreiben können.

Bezüglich der Modellierung von Schüttungen werden derzeit im Wesentlichen drei Ansätze verfolgt. Bei der empirischen Modellierung des Abbrandes wird die Konversion der Biomasse entlang des Rostes (eindimensional) anhand von empirisch ermittelten Konversionsfaktoren bilanziert. Die daraus ermittelten Profile von Geschwindigkeit, Spezieskonzentrationen, sowie der Temperatur werden als Randbedingung für die CFD-Simulation am Rost aufgegeben (siehe Abbildung 1). Die Beschreibung des Abbrandes ist stationär (d. h. zeitunabhängig), und die Schüttung selbst wird als nicht reaktive poröse Zone berücksichtigt [1]. Empirische Modelle liefern somit keine detaillierten Informationen zu den Vorgängen im Brennstoffbett und erlauben somit auch keine detaillierte Berücksichtigung unterschiedlicher Brennstoffeigenschaften.

Beim Einzelpartikelmodell hingegen werden die einzelnen Brennstoffpartikel, aus denen die Schüttung besteht, getrennt berücksichtigt. Für jedes Partikel erfolgt, je nach den lokalen Einflüssen, denen es unterliegt, eine genaue Beschreibung der Trocknung, Pyrolyse und der Konversion der Holzkohle, wobei auch die Vorgänge im Inneren der Brennstoffpartikel (z. B. Schalenmodell – siehe Abbildung 1) bzw. zwischen den Partikeln detailliert berücksichtigt werden. Die Beschreibung erfasst neben dem stationären Abbrand auch instationäre Effekte. Zusätzlich muss auch die Bewegung der Partikel entlang des Rostes und deren Schrumpfung entsprechend berücksichtigt werden. Dadurch wird eine dreidimensional aufgelöste Beschreibung der Freisetzung von Gasen aus der Brennstoffschüttung sowie der Temperaturen im Brennstoffbett ermöglicht [13]. Auf Grund des hohen Rechenaufwands (= Zeitaufwand) können Einzelpartikelmodelle in der Regel nicht zur industriellen Feuerungsentwicklung eingesetzt werden.

Die Schüttungsmodellierung (siehe Abbildung 1) betrachtet die Schüttung als ein Kontinuum. Ausgangspunkt ist das Konzept einer porösen Zone, die lokal unterschiedliche Eigenschaften aufweist (z. B. Porosität als Maß für die Partikelgröße und die Form). Auch die Freisetzung aus der Schüttung sowie die Temperaturen unterscheiden sich je nach den lokal vorherrschenden Bedingungen wie z. B. dem Sauerstoffangebot. Der wesentlichste Unterschied zum Einzelpartikelmodell besteht darin, dass die Freisetzung nicht an

ein spezielles Brennstoffteilchen und seine Bahn durch das Brennstoffbett gekoppelt ist. Dieser Ansatz wurde an der Universität Vigo (Spanien) für Brennstoffschüttungen aus feinkörnigem Brennstoff (0,05 bis 0,2 mm) erfolgreich umgesetzt, wobei auch ein Algorithmus implementiert wurde, der das Nachsacken der Schüttung beschreibt [7]. Insgesamt ist so eine transiente, lokal aufgelöste Beschreibung der Schüttung bei deutlich geringerem Rechenaufwand als bei Verwendung eines Einzelpartikelmodells möglich.

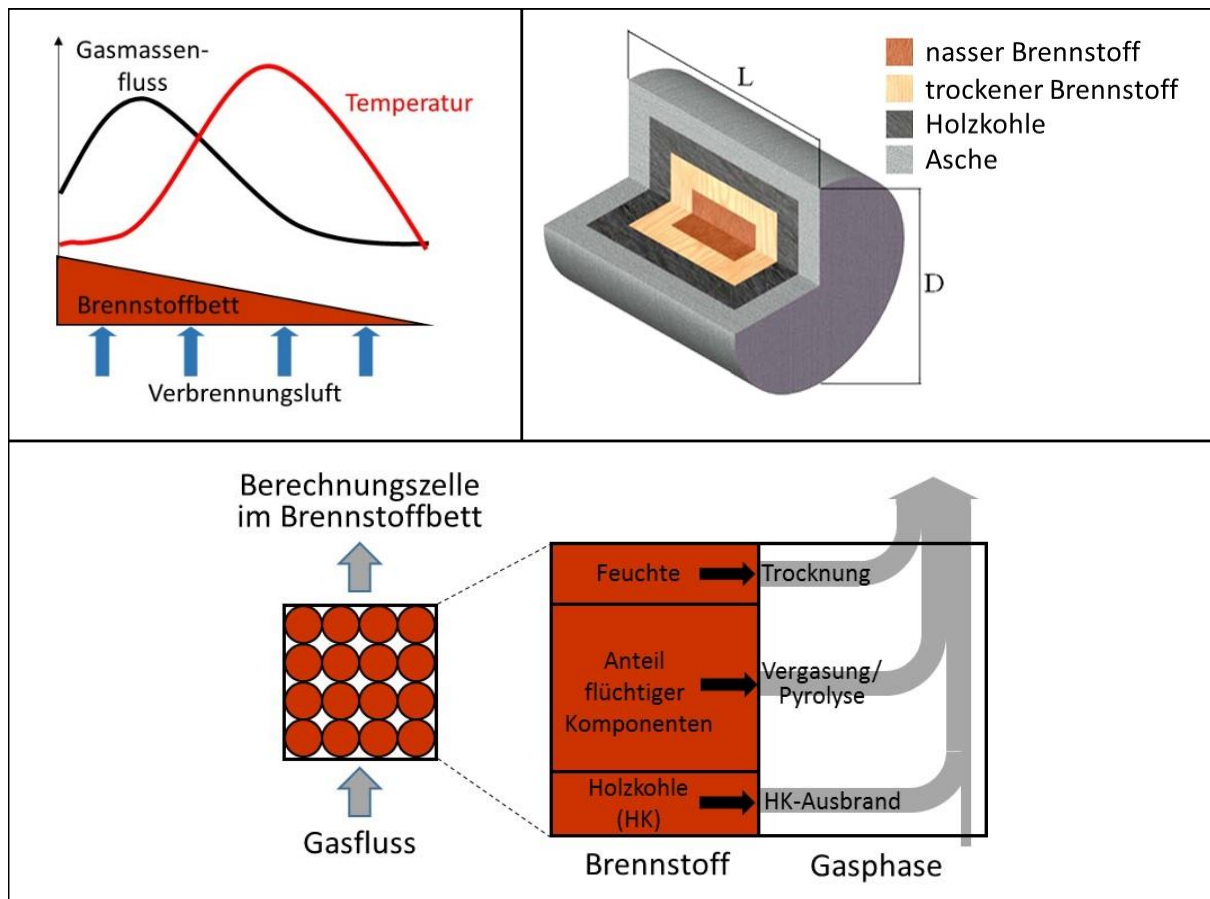


Abbildung 1: Schematische Darstellung einzelner Abbrandmodelle

Erläuterungen: oben links: Empirisches Abbrandmodell; beispielhafte Darstellung des Massenflusses und der Temperatur des aus dem Brennstoffbett austretenden Gases;
oben rechts: Partikel(Schalen)modell; in einem Pellet mit der Länge L und dem Durchmesser D vorliegende Schichten mit unterschiedlichem Reaktionsgrad;
unten: Schematische Darstellung des Konzeptes der Schüttungsmodellierung

Die Schüttungsmodellierung erscheint derzeit als der sinnvollste Ansatz zur Entwicklung eines neuen Abbrandmodells für Holzpellets und wurde daher auch als Basis für die Modellentwicklung im Rahmen von FuturePelletSpec ausgewählt.

4 Methodik

Während die CFD Modellierung der Gasphasenverbrennung als ausgereift angesehen werden kann, sind bzgl. der Modellierung reagierender Schüttungen nur Modellierungsansätze, die eine qualitative Betrachtung erlauben, vorhanden. Derzeit werden im Wesentlichen drei Ansätze verfolgt, nämlich die empirische Modellierung des Abbrandes, Einzelpartikelmodelle und die Schüttungsmodellierung (siehe Abschnitt 3). Für das in FuturePelletSpec entwickelte Brennstoffbett-Abbrandmodell wurde die Schüttungsmodellierung als Ansatz gewählt, da diese kürzere Rechenzeiten als bei Einzelpartikelmodell erwarten lässt, eine genaue, zeitlich aufgelöste Beschreibung des Abbrandes der Pelletschüttung ermöglicht und auch relevante Brennstoffparameter berücksichtigt werden können.

Dabei wird die Brennstoffschüttung als Kontinuum betrachtet, das lokal unterschiedliche Eigenschaften bzgl. Durchströmung (Porosität) und Freisetzung (Temperaturen, Sauerstoffangebot) aufweist. Die Freisetzung ist damit nicht an ein Teilchen und seine Bewegung gebunden, sondern an den Anteil der festen Phase in einer Berechnungszelle. Eine gesonderte Modellierung zum Nachsacken der Schüttung ist allerdings notwendig. Dadurch ergibt sich die Möglichkeit einer transienten, lokal aufgelösten Beschreibung der Schüttung.

Grundsätzlich erfolgt beim gewählten Modellierungsansatz eine Unterteilung der Brennstoffschüttung in kleine Berechnungszellen. Jede Berechnungszelle enthält, je nach Schüttdichte und Porosität, zu Beginn feuchte Biomasse und Gas. Im Verlauf des Abbrandes erwärmt sich zuerst die Schüttung und die Biomasse trocknet bei ca. 100 °C. Bei weiterer Erwärmung setzen dann die Pyrolysereaktionen sowie anschließend die Holzkohleumsetzung ein. Dabei bewirkt die Gasfreisetzung aus dem Brennstoff eine Abnahme der Festsubstanz und eine Erhöhung der Porosität. Überschreitet die Porosität einen kritischen Wert, bricht die Schüttung zusammen, und die Teilchen von oben rutschen in die Hohlräume. Asche sammelt sich unten am Rost. Um die Freisetzung (Trocknung, Pyrolyse, Holzkohle-Umsetzung) zu modellieren, wird für jede Berechnungszelle ein repräsentatives Teilchen berechnet. Die Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität und Dichte des repräsentativen Teilchens werden anteilig über seine Zusammensetzung berechnet.

Auf diesem prinzipiellen Modellierungsansatz aufbauend sind in Abbildung 2 die einzelnen Entwicklungsschritte, die zur Modellentwicklung notwendig waren, schematisch dargestellt. In Abschnitt 5 sind die Arbeiten und Ergebnisse der Modellentwicklung der dargestellten Vorgangsweise folgend dokumentiert.

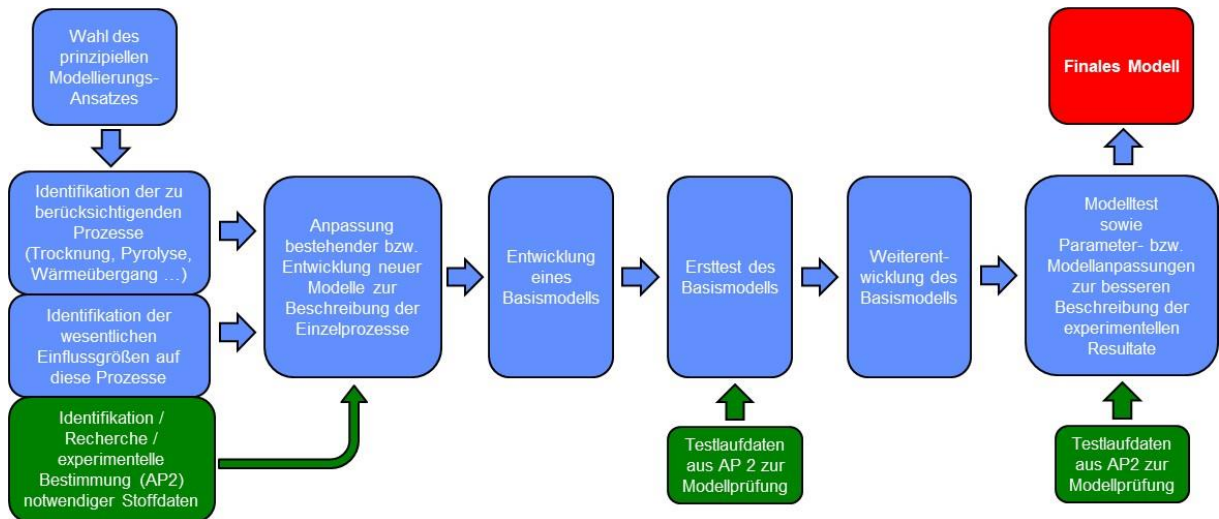


Abbildung 2: Prinzipielle Vorgangsweise bei der Modellentwicklung

5 Modellentwicklung und Ergebnisse

5.1 Basismodellentwicklung

In einem ersten Schritt wurde ein Basismodell entwickelt, das die relevanten Betteigenschaften sowie die Vorgänge im Zuge des Bettabbrandes berücksichtigt, in dem aber das Nachsacken der Pellets in entstehende Hohlräume noch nicht berücksichtigt wird.

5.1.1 Basismodell - Einleitung

Da das Brennstoffbett als Schüttung modelliert wird, sind die Pelletgeometrien die Schüttdichte und Porosität des Bettes von grundlegender Bedeutung. Aus diesen Parametern ergibt sich der Druckverlust über empirische Korrelationen, wie z. B. die Ergun-Gleichung [14], wobei hier eine Schüttung aus Kugeln, die das gleiche Volumen wie die zu betrachtenden Pellets aufweisen, betrachtet wird.

Um die Freisetzung (Trocknung, Pyrolyse, Holzkohle-Umsetzung) zu modellieren, wird für jede Berechnungszelle ein repräsentatives Teilchen berechnet. Der Zersetzungsweg eines Teilchens ist schematisch in Abbildung 3 dargestellt.

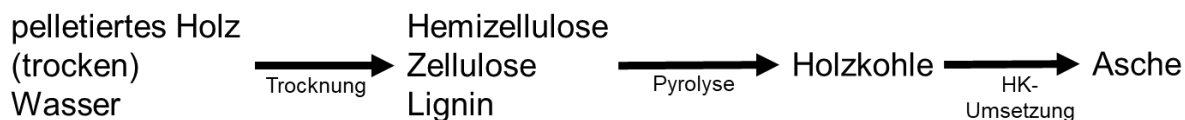


Abbildung 3: Schematische Darstellung der Umsetzung eines repräsentativen Teilchens im Pelletbett

Erläuterungen: HK ... Holzkohle

5.1.2 Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität und Dichte

Die Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität und Dichte des repräsentativen Teilchens wird anteilig über seine Zusammensetzung berechnet. Es wird dabei angenommen, dass das trockene, pelletierte Holz aus den Pseudokomponenten Hemicellulose, Zellulose und Lignin besteht, die nach der Trocknung über die Pyrolysereaktionen umgesetzt werden. Für die Berechnung werden den Pseudokomponenten die gleichen Eigenschaften (Dichte, Wärmekapazität, Wärmeleitfähigkeit) zugewiesen wie dem trockenen, pelletierten Holz. Über Masse und Dichte werden Volumen und Durchmesser bestimmt wobei die Annahme getroffen wird, dass es sich bei den Teilchen um ideale Zylinder handelt, und die Differenz aus Länge und Durchmesser über den ganzen Prozess konstant bleibt. Daraus ergibt sich über die Massenabnahme durch die Freisetzung, die Schrumpfung der Teilchen.

In Tabelle 1 sind die der Modellierung zu Grunde liegenden Modellparameter Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität und Dichte für die einzelnen Ausbrandphasen zusammengefasst. Die Dichte der Holzkohle wurde mittels 3D-Vermessung von Einzelpellets aus den Laborreaktor-Abbruchversuchen (siehe Berichtteil 1, Abschnitt 8) bestimmt. Sie entspricht

der bestimmten Einzelpelletmasse geteilt durch das Pelletvolumen. Die anderen Parameter wurden der Literatur [10] entnommen. Sie beziehen sich auf Nadelholzpellets.

Tabelle 1: Modellparameter für Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität und Dichte

| | Wärmeleitfähigkeit [W/(m*K)] | Wärmekapazität [W/(m*K)] | Dichte [kg/m³] |
|-----------------------------|---------------------------------|--|-------------------|
| pelletiertes Holz (trocken) | 0,056 + 0,00026*T | 1.500 + T | 1.096 |
| Holzkohle | 0,07 | 420,0 + 2,09*T + 6,85e ⁻⁴ *T ² | 398 |
| Asche | 1,2 | 1.100 | 300 |
| Wasser | 0,597 | 4.184 | 998 |

Erläuterungen: T ... Temperatur

5.1.3 Wärmetransport innerhalb der Schüttung

Vorweg sei angemerkt, dass sich die Schüttung nicht im thermischen Gleichgewicht mit der Gasphase befindet. Die Temperaturentwicklung der Schüttung wird über eine Wärmeleitungsgleichung räumlich und zeitlich beschrieben:

$$\frac{\partial \left(\rho_s \int_{T_{ref}}^{T_s} c_p^p(T) dT \right)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x_i} \right) = \dot{Q}_{s,conv} + \dot{Q}_{s,rad} + \dot{Q}_{s,m} \tag{5.1}$$

mit ρ_s : Schüttdichte, $c_p^p(T)$: Wärmekapazität der repräsentativen Teilchen (temperaturabhängig), T_s : Temperatur der Schüttung, T_{ref} : Bezugstemperatur und λ_s : Wärmeleitfähigkeit der Schüttung. $Q_{s,v}$, $Q_{s,rad}$ und $Q_{s,m}$ repräsentieren Energiequellterme für die Konvektion, die Strahlung und den Massentransfer.

Die Wärmeleitfähigkeit der Schüttung wird aus der Wärmeleitfähigkeit der repräsentativen Teilchen sowie den Eigenschaften der Schüttung berechnet [7], wobei die Wärmeleitung nur innerhalb der Schüttung berücksichtigt wird.

Hinsichtlich der Energiequellterme ist anzumerken, dass die Konvektion $Q_{s,v}$ über eine Nusselt-Korrelation berechnet wird [14], wobei Korrekturen für kleine Peclet-Zahlen (bei langsamer Strömung) [9] berücksichtigt werden. Relevante Parameter dabei sind die Teilchengometrie (Durchmesser) und die Porosität. Zur Berücksichtigung der Strahlungsinteraktion von Gas und Schüttung wird eine modifizierte Transportgleichung für die Strahlung verwendet. Die Modifikationen umfassen die Einführung eines Gesamtabsorptionskoeffizienten für das Gas und den Feststoff, sowie die Berücksichtigung der Streuung über den Streukoeffizienten der Schüttung. Durch die Einführung des Gesamtabsorptionskoeffizienten in die ANSYS/Fluent-interne Strahlungstransportgleichung für die Gasphase, ist eine Korrektur mittels eines Energiequellterms erforderlich [3]. Die Stärke der Interak-

tion der Strahlung $Q_{s,rad}$ zwischen Feststoff und Gas wird über die Absorption und Streuung durch die Teilchen der Schüttung [7] bestimmt, wobei auch hier die Teilchengometrie (Durchmesser) und die Porosität wichtige zu berücksichtigende Parameter sind. Der Massentransfer Q_s , berücksichtigt, dass es durch die Freisetzung von Gas aus der festen Phase zu einem Transfer der entsprechenden sensiblen Enthalpie in die Gasphase kommt.

5.1.4 Trocknung

Entsprechend Abbildung 3 ist die Trocknung der erste im Rahmen der Konversion stattfindende Prozess. Im Modell wird die Trocknung der Pellets ab einer Feststofftemperatur von 100 °C berücksichtigt. Die Trocknungsrate wird durch Wärmezufuhr an die Partikel bestimmt (siehe Gleichung 5.2 und [10]). Es wird dabei angenommen, dass die Pellets während der Trocknung nicht schrumpfen.

$$\dot{m}_{H_2O} = \Delta H / H_{dry} \quad (5.2)$$

mit m_{H_2O} : verdampfte Wassermenge in kg pro Sekunde, ΔH : zugeführte Wärmemenge pro Sekunde [W] und H_{dry} : Verdampfungsenthalpie von Wasser bei 100 °C.

Wesentlich für den Ablauf der Trocknung ist die dem (repräsentativen) Partikel zugeführte Wärme, die über die Wärmeübertragungsmechanismen Strahlung und Konvektion erfolgt (siehe Abschnitt 0).

5.1.5 Pyrolyse

Nach erfolgter Trocknung steigen die Feststofftemperaturen weiter an und es setzen Pyrolysereaktionen ein. Die Pyrolyse kann anhand der thermischen Zersetzung der sog. Pseudokomponenten Hemicellulose, Zellulose und Lignin modelliert werden. Dabei werden aus der Festphase folgende flüchtigen Komponenten in die Gasphase freigesetzt:

- Kondensierbare Kohlenwasserstoffe (Teere)
- Nicht-kondensierbare Kohlenwasserstoffe (CH₄, etc.)
- Weitere Permanentgase wie H₂, H₂O, CO und CO₂

Die Zersetzung der Pseudokomponenten kann anhand von Arrhenius-Kinetiken modelliert werden. Die Kinetik kann durch Auswertung von TGA-Versuchen brennstoffspezifisch bestimmt werden. Dabei werden Reaktionen erster Ordnung für Hemicellulose und Zellulose angesetzt während für Lignin auch höhere Reaktionsordnungen berücksichtigt werden (siehe auch Berichtsteil I, Abschnitt 4.3.1 und Abschnitt 5.3). Für die Modellentwicklung dienten TGA-Auswertungen für Fichtenpellets aus der BIOS internen Datenbank als Basis, da zu diesem Zeitpunkt die Ergebnisse der im Projekt durchgeführten TGA-Analysen noch nicht vorlagen. Im Modell sind die Reaktionskinetiken für verschiedene Biomassesortimente verwendbar und können brennstoffspezifisch gewählt werden. Die Berechnung der

Reaktionsraten erfolgt dabei jeweils anhand der gewählten Zersetzungskinetik (brennstoffspezifisch). Die zersetzten Pseudokomponenten werden direkt in flüchtige Bestandteile umgewandelt, die sofort in die Gasphase freigesetzt werden, wobei die Zusammensetzung der freigesetzten Komponenten gesondert modelliert werden muss [7],[10].

Im Basismodell wird für das während der Pyrolyse freigesetzte Gas eine konstante Zusammensetzung angenommen. Es wurde dabei die in [10] verwendete Gaszusammensetzung verwendet (siehe Tabelle 2), da es sich bei dieser Literaturstelle um den gleichen Brennstoff und vergleichbare Rahmenbedingungen handelt. Der chemische Mechanismus für die Modellierung der nachfolgenden Gasphasenreaktionen wurde so gewählt, dass die aus der Pyrolyse freigesetzten Spezies auch umgesetzt werden können, d.h. im Gasphasen-Reaktionsmechanismus enthalten sind (siehe Abschnitt 5.1.7).

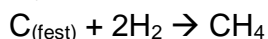
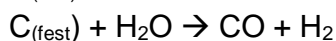
Tabelle 2: Zusammensetzung der im Zuge der Pyrolyse entstehenden Gase

| | m-% |
|-------------------------------|------|
| CO | 39,1 |
| CO ₂ | 17,0 |
| CH ₄ | 8,7 |
| H ₂ | 1,7 |
| H ₂ O | 16,8 |
| C ₂ H ₂ | 0,2 |
| C ₂ H ₄ | 0,2 |
| C ₂ H ₆ | 5,6 |
| CH ₂ O | 10,7 |

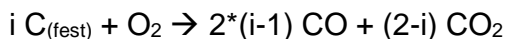
5.1.6 Holzkohlenumsetzung

Die nach der vollständigen Pyrolyse verbleibende Holzkohle $C_{(fest)}$ wird über heterogene Reaktionen unter Energiefreisetzung bzw. Energieaufnahme umgesetzt. Folgende Reaktionen werden dabei berücksichtigt:

Holzkohlevergasung



Holzkohleverbrennung

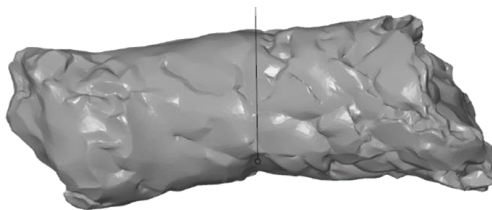


Das CO/CO₂-Verhältnis wird dabei mit einer Korrelation [12] temperaturabhängig modelliert.

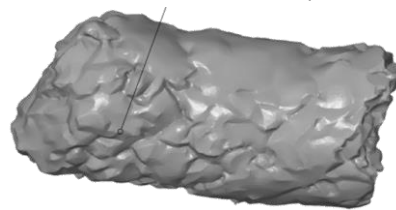
Die Reaktionsgeschwindigkeiten dieser Reaktionen werden wesentlich von der Oberfläche des umgesetzten Pellet bestimmt. Diese berechnet sich aus den Eigenschaften des repräsentativen Teilchens (Masse und Dichte sowie daraus abgeleitet Volumen, Durchmesser und Oberfläche) unter Annahme einer zylindrischen Geometrie.

Die Untersuchungen von verkohlten Pellets aus den Abbruchversuchen von BIOS am Laborreaktor (siehe Berichtsteil I, Abschnitt 8) und aus den spezifischen Testserien beim TFZ am Pelletofen 2 (siehe Berichtsteil I, Abschnitt 7.6) zeigten aber, dass die Form von der eines idealen Zylinders abweicht. Insbesondere ist die Oberfläche durch die „zerklüftete“ Struktur deutlich größer als die eines idealen Zylinders (siehe Abbildung 4). Aus diesem Grund erfolgte auch eine separate Wiegung und 3D-Vermessung (Mikroskop Keyence VR 5200) einzelner Pellets aus den Testläufen am Laborreaktor sowie an Pelletofen 2 zur Bestimmung der Dichte sowie des Verhältnisses von Oberfläche/Volumen. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sind in Tabelle 3 zusammengefasst.

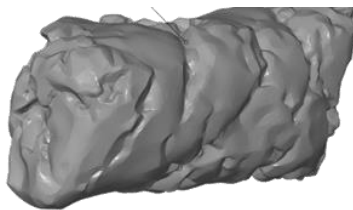
verkohltes Fichtenpellet (Laborreaktor)



verkohltes Pellet (Sortiment 19, Testläufe am Pelletofen 2)



verkohltes Pellet (Sortiment 8, Testläufe am Pelletofen 2)



verkohltes Pellet (Sortiment 14, Testläufe am Pelletofen 2)

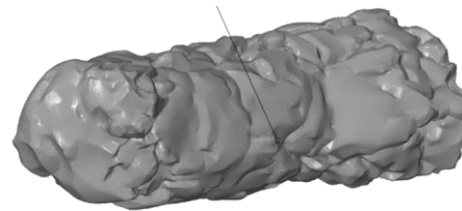


Abbildung 4: 3D-Scans von verkohlten Pellets aus den Laborreaktortests und aus den Verbrennungstests am TFZ

Tabelle 3: Ergebnisse der Vermessung von einzelnen verkohlten Pellets

| | Volumen | Masse | Oberfläche | Pelletdichte | Oberfläche/ Volumen |
|--|--------------------|-------|--------------------|----------------------|------------------------|
| | [mm ³] | [mg] | [mm ²] | [kg/m ³] | [1/mm] |
| <i>AK-2 Test 1 (Laborreaktor)</i> | | | | | |
| <i>Pellet 1</i> | 187,13 | 73,9 | 226,25 | 394,91 | 1,21 |
| <i>Pellet 2</i> | 238,36 | 100,8 | 274,45 | 422,89 | 1,15 |
| <i>Pellet 3</i> | 171,24 | 64,5 | 213,43 | 376,64 | 1,25 |
| <i>Mittelwert</i> | | | | 398,15 | 1,20 |
| <i>Testläufe Pelletofen 2</i> | | | | | |
| <i>Sortiment 14 (Nadelholzpellets)</i> | 141,07 | 49,4 | 182,98 | 350,15 | 1,30 |
| <i>Sortiment 8 (Nadelholzpellets)</i> | 157,14 | 68,0 | 193,63 | 432,68 | 1,23 |
| <i>Sortiment 19 (Nadelholzpellets)</i> | 215,98 | 81,7 | 271,7 | 378,06 | 1,26 |

Zusätzlich zu den in Abbildung 4 präsentierten 3D-Scans wurden die Oberflächen weiterer verkohlter Pellets aus den Testläufen am Pelletofen 2 auch mit einem hochauflösenden Mikroskop (Keyence VK-X1000) untersucht, das ebenfalls 3D-Strukturen digital erfassen kann. Mit diesem hochauflösenden Gerät ist es allerdings nicht möglich, das gesamte Pellet inklusive seiner Unterseite zu erfassen, weshalb Scans über eine Länge von 5 mm an einem Ende der Längsachse bzgl. der Pelletoberfläche ausgewertet wurden (siehe Abbildung 5). Diese Untersuchungen zeigten, dass mit dem Gerät mit geringerer Auflösung die Oberfläche des Pellets um einen Faktor von 1,19 unterschätzt wird (32,7 im Vergleich zu 38,92 mm²). Aus diesem Grund wurden für die Modellierung der Holzkohle-Umsetzung die Oberflächenberechnung angepasst. Und zwar wurde basierend auf dem jeweils aktuellen Pelletvolumen (berechnet aus der Dichte und der Teilchenmasse) und einem Verhältnis von Oberfläche/Volumen von 1,2 mm⁻¹ die Pelletoberfläche berechnet und der erhaltene Wert wurde mit einem Faktor 1,19 multipliziert, um die geringere Auflösung des 3D-Scans zu berücksichtigen.

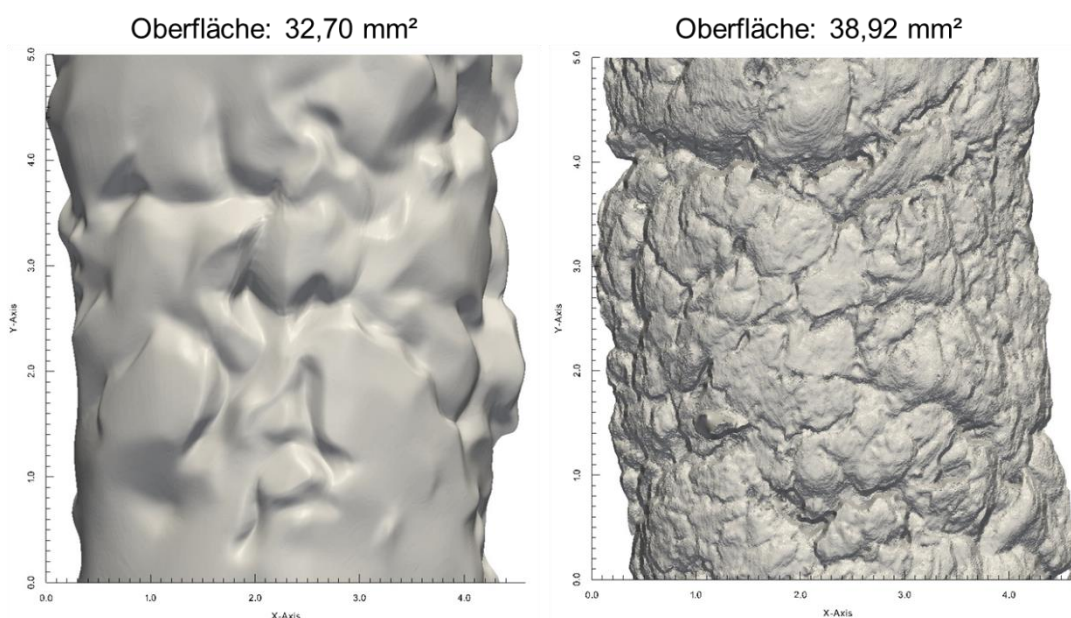


Abbildung 5: Oberflächenvermessung über 3D-Scans mit dem Mikroskop Keyence VR 5200 (links) und dem hochauflösenden Keyence VK-X1000 (rechts)

5.1.7 Gasphasenkonversion

Die aus dem Feststoff freigesetzten chemischen Spezies (siehe Tabelle 2) werden in der Gasphase in Form homogener chemischer Reaktionen umgesetzt. Diese laufen innerhalb und außerhalb des Brennstoffbettes ab. Zur Modellierung ist ein detaillierter chemischer Mechanismus notwendig Für das Basismodell wurde (analog zu [10]) der DRM-22 Mechanismus [1] gewählt, der 22 Spezies und 104 Reaktionen umfasst und eine Reduktion des GRI-Mechanismus [3] repräsentiert. Der Referenztest bzw. die Abbruchversuche am Laborreaktor (siehe Berichtsteil 1, Abschnitt 8) dienen als Testfälle zur Modellentwicklung. In diesem System treten keine hohen Gasgeschwindigkeiten auf, d. h., die Strömung ist laminar. Die Reaktionsraten müssen dem entsprechend berechnet werden, was heißt, dass keine Turbulenz-Chemie-Wechselwirkungen auftreten.

5.2 Testrechnungen mit dem Basismodell und Vergleich mit Daten von Testläufen am Laborreaktor

5.2.1 Rahmenbedingungen und Anfangsbedingungen

Mit dem im Abschnitt 5.1 vorgestellten Basismodell wurden erste Testrechnungen durchgeführt. Als Basis dienten dabei Testläufe, die am Laborreaktor von BIOS mit Fichtenpellets durchgeführt wurden (siehe Berichtsteil I, Abschnitt 8). Die Geometrie des Brennstoffbettes und die Positionen der Temperaturmessstellen im Bett wurden dabei genau mit den tatsächlichen Gegebenheiten im Laborreaktor abgeglichen. Die Berechnung wurde in 2D mit Rotationssymmetrie durchgeführt, was auf Grund der zylindrischen Bauweise des Reaktors zulässig ist.

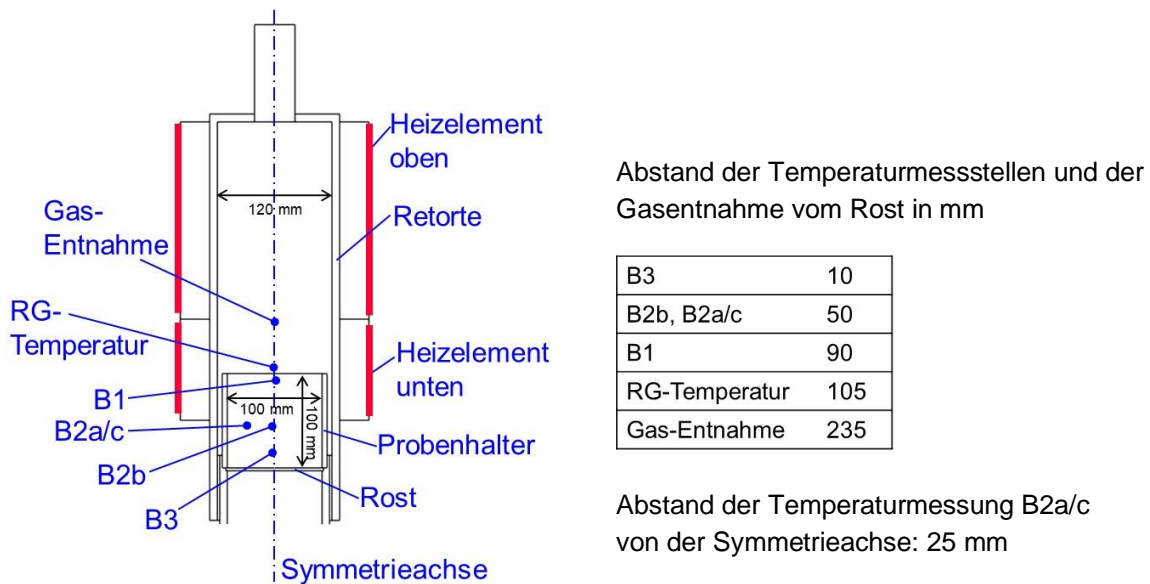


Abbildung 6: Randbedingungen für die Nachsimulation eines Laborreaktortests

Die Brennstoffschüttung füllt zu Versuchsbeginn den gesamten Probenhalter. Das Simulationsgebiet beginnt außen bei den elektrischen Heizelementen. Der Spalt zwischen den Heizelementen und der Retorte wurde als Volumen berücksichtigt; die Isolierung außerhalb der Heizelemente wurde nicht simuliert. Als Randbedingung für die Heizelemente wurde ein Wärmefluss gesetzt, der je nach herrschender Temperatur an der jeweiligen Messstelle angepasst wird (Überschreiten der Zieltemperatur: kein Wärmeeintrag; Unterschreiten der Zieltemperatur: Anpassung des Wärmeeintrags).

Entsprechend den durchgeführten Testläufen wurde die Zieltemperatur oberes Heizelement auf 650 °C gesetzt und die des unteren Heizelements auf 450 °C. Der Primärluftstrom lag beim Testlauf bei 30,2 NI/min und die Temperatur der Primärluft lag bei 23,9 °C. Beim für den Vergleich herangezogenen Testlauf wurde eine Einwaage von 470 g FS Nadelholzpellets mit einem Wassergehalt von 7,5 m-% FS und einem Aschegehalt von 0,3 m-% TS eingesetzt. Auch diese Daten wurden in die Simulation übernommen. Die

Brennstoffzusammensetzung sowie die Zusammensetzung der flüchtigen Komponenten (anhand von Literaturdaten [10] für Nadelholzpellets) wurden ebenfalls berücksichtigt.

Als Anfangsbedingungen der Simulation wurden die Gastemperaturen unter Rost und im Brennstoffbett, die Temperatur der Schüttung und die Materialtemperatur des Probenhalters auf 23,9 °C gesetzt. Die Temperaturen im übrigen Simulationsgebiet berechnen sich dann aus dem thermischen Gleichgewicht mit den Heizelementen bei konstanter Gasströmung. Für die Porosität der Schüttung wurde als Startwert 0,477 verwendet und für die Pelletgeometrie ein Durchmesser von 6 mm und eine Länge von 16 mm.

5.2.2 Ergebnisse

Vorweg sei angemerkt, dass der Zeitpunkt der Zündung im Laborreaktor vom CFD-Basismodell noch nicht reproduziert werden konnte und die Zündung laut Simulation um ca. 2000 s später einsetzte als im Testlauf. Dieser Aspekt wurde bei den nachfolgenden Überarbeitungen des Modells durch die zusätzliche Modellierung des Strahlungseinflusses auf die Oberfläche des Brennstoffbettes, die Zündung der aus dem Brennstoffbett freigesetzten Spezies in der Gasphase und Änderungen bei der Reaktionsgeschwindigkeit der Holzkohle-Umsetzung berücksichtigt.

In Abbildung 7 sind wesentliche Ergebnisse der Simulationen mit dem Basismodell im Vergleich zu Messdaten aus dem Laborreakortest dargestellt. Um einen direkten Vergleich bezüglich der dargestellten Trends (Massenabbau, Temperaturentwicklung, O₂-Gehalt im Rauchgas) zu ermöglichen, wurde die Zeitskala so normiert, dass die Zündung (definiert durch den steilen Anstieg der Freisetzung dm/dt) für die CFD-Simulation und den Testlauf beim selben Zeitpunkt (0 s) liegt. Daher beginnen die CFD-Simulationen ca. 2.400 s vor der Zündung (- 2.400 s) und der Testlauf ca. 450 s vor der Zündung (- 450 s).

Abbildung 8 zeigt Simulationsergebnisse hinsichtlich der Struktur des Brennstoffbettes 420 s nach der Zündung. Im Zuge der Laborreakortestläufe wurden so genannte Abbruchtests durchgeführt, bei denen der Bettzustand zu gewissen Abbruchkriterien (AK) eingefroren, das Bett aus dem Reaktor entfernt und dann bzgl. seines Zustandes detailliert beurteilt wurde (Details dazu siehe Berichtsteil I, Abschnitt 4.4.5 und 8). Der Zeitpunkt 420 s nach Zündung entspricht dabei dem Abbruchkriterium 1 (AK-1), das durch den beginnenden Temperaturanstieg an den Sensoren B2a, B2b und B2c charakterisiert ist. Die in Abbildung 8 in der Grafik rechts (Holzkohlengehalt) eingezeichneten grauen Linien entsprechen den (mittleren) experimentell ermittelten Höhen der Brennstoffbett-Oberfläche (a), der teilverkohlten Schicht (b) und der nichtverkohlten Schicht (c) der Pellets bei einem Abbruchversuch gemäß AK-1 mit Fichtenpellets.

Wie Abbildung 7 zeigt, stimmen die Trends der Simulation und die Messergebnisse für den Massenabbau nach der Zündung gut überein. Die mit dem Modell berechnete Freisetzungsrates dm/dt erreicht mit den Messwerten gut vergleichbare Maximalwerte.

In der Schlussphase des Abbrandes (1.100 s nach Zündung) liegt die Freisetzung lt. Testlauf über der simulierten Freisetzung. Dazu muss angemerkt werden, dass insbesondere

in der Schlussphase des Abbrandes das Brennstoffbett bereits schnell zusammensackt und im Basismodell das Nachsacken des Brennstoffbetts noch nicht berücksichtigt wurde. Insbesondere die Porosität der simulierten Schüttung weicht daher stark (ca. um einen Faktor 2) von den realen Gegebenheiten ab, sodass ein wesentlicher Einfluss auf den Abbrand zu erwarten ist.

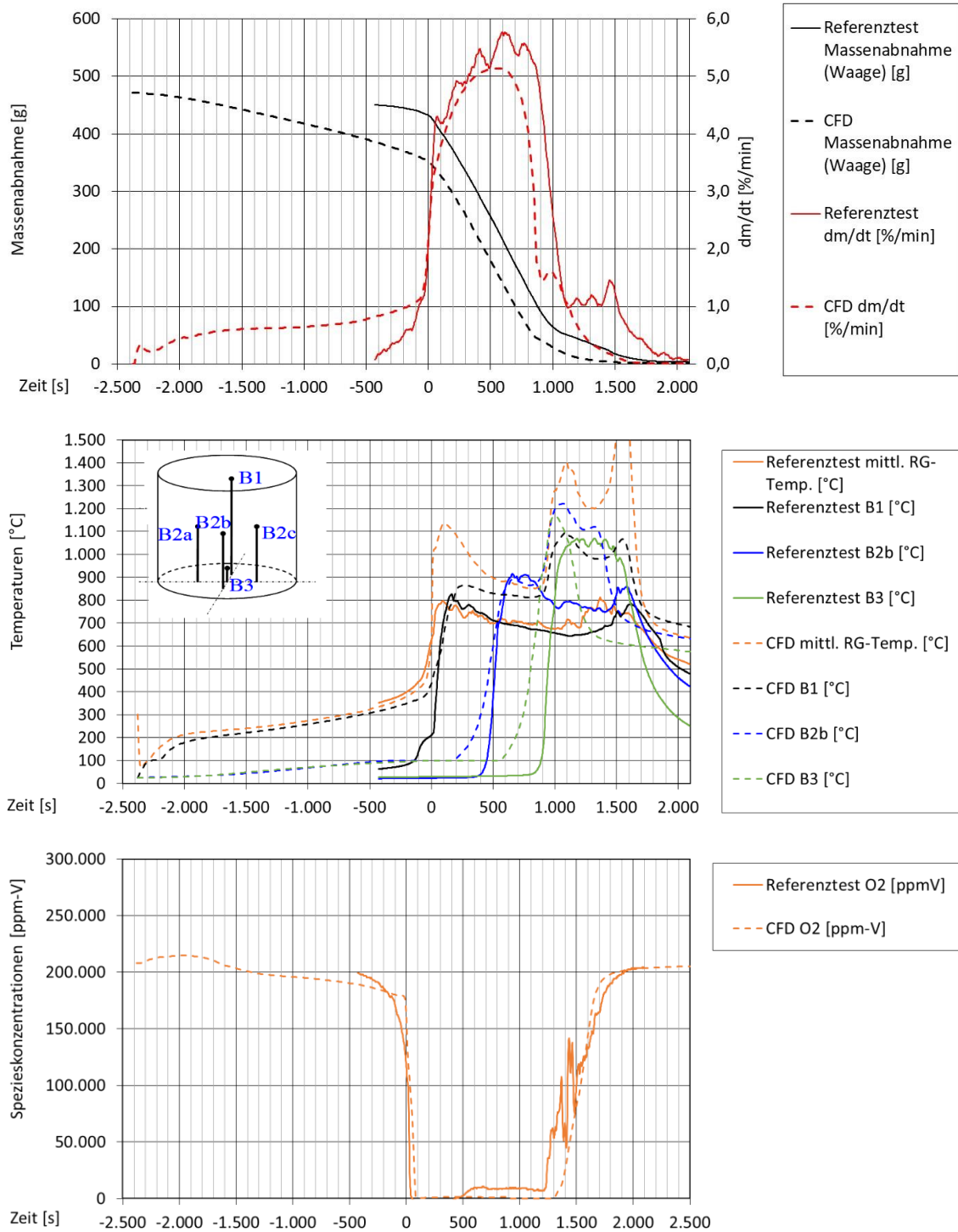


Abbildung 7: Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem Basismodell mit Messdaten aus einem Laborreakortestlauf mit Fichtenpellets - relevante Trends

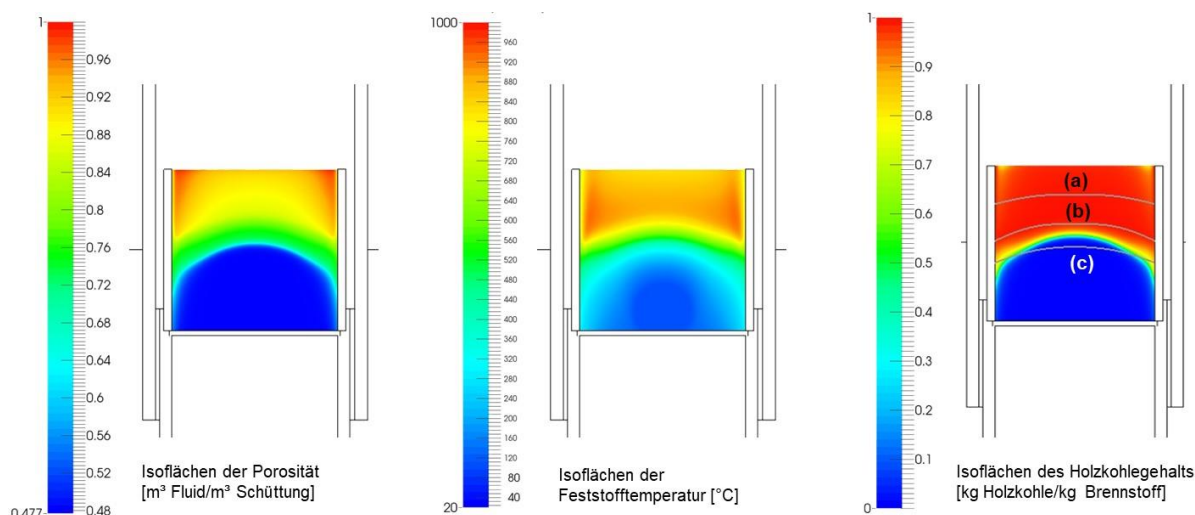


Abbildung 8: *Simulationsergebnisse mit dem Basismodell - Betteigenschaften 420 s nach der Zündung sowie Vergleich mit Laborreaktor tests*

Erläuterungen: Die grauen Linien entsprechen den (mittleren) experimentell ermittelten Höhen der Brennstoffbett-Oberfläche (a), der teilverkohnten Schicht (b), und der nichtverkohnten Schicht (c) in den Abbruchversuchen am Laborreaktor mit AK-1

Die Temperatur des Rauchgases oberhalb des Brennstoffbettes zeigt in der Anfangsphase bis zur Zündung (erster, steiler Anstieg der Temperaturkurve) eine akzeptable Übereinstimmung mit dem experimentell ermittelten Trend. Das erste Maximum der simulierten Temperatur liegt aber mit ca. 1.130 °C deutlich über dem experimentellen Wert (ca. 800 °C). Diese Abweichung lässt sich damit begründen, dass die Messung mit einem Thermoelement durchgeführt wurde, dessen Messwerte durch Strahlung der im Vergleich zur Flamme kühleren Wände beeinflusst werden. Dieser Effekt kann über die CFD-Simulation abgeschätzt werden, da hier eine direkte Auswertung der Strahlungstemperatur möglich ist. Für den Zeitpunkt ca. 420 s nach der Zündung (der in etwa dem AK-1 entspricht) wurden daher an der Messposition der Rauchgastemperatur die Gastemperatur und die Strahlungstemperatur ausgewertet. Die Gastemperatur liegt mit ca. 915 °C deutlich über der Strahlungstemperatur (ca. 740 °C), die eher dem gemessenen Wert von ca. 700 °C entspricht.

Der nacheinander erfolgende Temperaturanstieg an den Messpunkten innerhalb des Brennstoffbettes wird gut wiedergegeben, es treten aber im weiteren Verlauf Abweichungen zu den gemessenen Werten auf. Insbesondere sinken die gemessenen Temperaturen nach dem ersten Maximum wieder ab, was darauf zurückzuführen ist, dass die Brennstoffbettoberfläche durch das Zusammensacken der Schüttung unter das Niveau der Thermolemente absinkt, und die Messwerte durch die von den Wänden ausgehende Temperaturstrahlung beeinflusst werden. Das Absinken der Temperaturmesswerte nach dem ersten Maximum ist am Messpunkt B3 am wenigsten ausgeprägt. Das liegt unter anderem daran, dass sich die Position B3 am längsten innerhalb der Schüttung befindet. Wegen der Bewegung der Brennstoffbettoberfläche sind die simulierten Feststofftemperaturen der Messpositionen B1 und B2 ab ca. 1.000 s nach der Zündung nicht mehr repräsentativ (diese Sensoren liegen nach diesem Zeitpunkt in der Realität außerhalb der Schüttung).

Eine sehr gute Übereinstimmung herrscht (nach der Zündung) zwischen den simulierten und gemessenen Sauerstoffkonzentrationen oberhalb des Brennstoffbettes, was darauf schließen lässt, dass die Verbrennungsreaktionen (homogen und heterogen) in Summe gut abgebildet werden.

Eine detaillierte Untersuchung des Brennstoffbettes 420 s nach der Zündung (entsprechend dem Abbruchkriterium AK-1 bei den Testläufen) zeigt eine schmale Reaktionsfront, wie sie auch bei der experimentellen Bettbewertung gefunden wurde. Der Verlauf des Holzkohlegehalts stimmt sehr gut mit den beim Abbruchversuch mit AK-1 bestimmten Höhenprofilen der verschiedenen Fraktionen im Brennstoffbett (verkohlte Pellets, teilverkohlte Pellets, unverbrannte Pellets) überein. Da im Basismodell ein Nachsacken der Schüttung noch nicht berücksichtigt wird, kann die Geometrie der Brennstoffbettoberfläche in der Simulation nicht bewertet werden.

Der Ersttest zeigte somit, dass die gewählte Strategie zielführend ist, aber noch entsprechende Verbesserungen und Erweiterungen des Basismodells notwendig sind.

5.3 Weiterentwicklung des Modells

Auf den Erkenntnissen aus den ersten Testrechnungen aufbauend erfolgte eine Weiterentwicklung des Basismodells, die in den folgenden Abschnitten im Detail beschrieben ist.

5.3.1 Gasphasenkonversion

Aus dem Feststoff freigesetzte chemische Spezies werden in der Gasphase in Form homogener chemischer Reaktionen innerhalb und außerhalb des Brennstoffbettes umgesetzt. Daher ist eine Kopplung des Abbrandmodells mit einem Gasphasen-Verbrennungsmodell notwendig. Diese war eigentlich erst für einen späteren Zeitpunkt im Projekt vorgesehen, sie wurde aber bereits im Rahmen der ersten Modellüberarbeitung implementiert, da sie für die Nachsimulation der Testläufe am Laborreaktor notwendig war.

Dazu muss ein detaillierter chemischer Mechanismus implementiert werden. Im Basismodell wurde der DRM-22 Mechanismus [1], ein reduzierter Mechanismus für Methan-Verbrennung, eingesetzt. Im Zuge der Überarbeitung des Basismodells wurde dieser Mechanismus durch den BIO-37 Mechanismus [11] ersetzt. BIO-37, der 37 Spezies und 415 chemische Reaktionen umfasst, ist eine, für die Biomasse-Verbrennung angepasste Reduktion des sehr umfangreichen POLIMI-BIO Mechanismus [5], [4] (Version 1311) der CRECK-Modeling Group, der aufgrund seines hohen Detailliertheitsgrades (134 Spezies, 4169 chemische Reaktionen) zu sehr langen Simulationszeiten führen würde. BIO-37 beinhaltet eine Vielzahl von Kohlenwasserstoffen, was bezüglich der korrekten Beschreibung der Gasphasenkonversion sehr wichtig ist.

Bei der Mechanismusreduktion konnte eine sehr gute Übereinstimmung (bei Kalkulationen im idealen Batchreaktor) der Konzentrationen der Hauptkomponenten (H_2 , CO , CO_2 , H_2O ,

CH₄), der Gastemperatur, der Zündzeit und der Summe aller organischen Spezies im Vergleich mit dem vollständigen POLIMI BIO Mechanismus erzielt werden. Außerdem konnte auch eine gute Übereinstimmung von Sub-Sets wie BTX (monocyclische, aromatische Kohlenwasserstoffe) oder gravimetrischem Teer erreicht werden.

5.3.2 Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität und Dichte

Aufbauend auf Daten von in der Zwischenzeit durchgeführten weiteren Verbrennungstests am Laborreaktor sowie von Testläufen am Pelletofen 2 (siehe Berichtsteil I), wurden die Teilcheneigenschaften (siehe Tabelle 1) entsprechend angepasst (Tabelle 4).

Die Wärmeleitfähigkeit der Holzkohle wurde auf Basis der Beobachtung angepasst, dass sie sich linear mit der Dichte entwickelt. Ausgehend von einem Wert von 0,07 ^W/_{m*K} für die Wärmeleitfähigkeit von verkohltem Holz [8] kann damit über das Verhältnis der Dichten von verkohlten Holz und verkohlten Holzpellets die Wärmeleitfähigkeit von verkohlten Holzpellets mit 0,125 ^W/_{m*K} abgeschätzt werden.

Tabelle 4: Überarbeitete Modellparameter für Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität und Dichte

| | Wärmeleitfähigkeit [W/(m*K)] | Wärmekapazität [W/(m*K)] | Dichte [kg/m ³] |
|-----------------------------|---------------------------------|---|--------------------------------|
| pelletiertes Holz (trocken) | 0,056 + 0,00026*T | 1.500 + T | 1.194,2 |
| Holzkohle | 0,125 | 420,0 + 2,09*T + 6,85e-4*T ² | 550,4 |
| Asche | 1,2 | 1.100 | 100 |
| Wasser | 0,597 | 4.184 | 998 |

Erläuterungen: Änderungen zum Basismodell sind farblich hervorgehoben; T ... Temperatur

Die Dichte des pelletierten Holzes (trocken) wurde aus der gemessenen Pelletdichte des Brennstoffes unter Abzug des Wassers berechnet. Bzgl. der Asche wurde die Dichte so gewählt, dass am Ende des Ausbrandes eine ca. 10 mm hohe Ascheschicht auf dem Rost zurückbleibt.

Bei der Dichte der Holzkohle kam es zu einer Anpassung auf Basis der detaillierten 3D-Vermessung sowie der Dichtemessungen im Zuge der Abbruchversuche am Laborreaktor. Es wurde im Zuge der Laborreaktortests das genaue Volumen eines verkohlten Holzpellet mittels 3D-Scan gemessen. Dieses Pellet weicht erheblich von einer zylindrischen Form ab. Die 3D-Daten erlauben aber die Bestimmung einer „Länge“ und eines „Durchmessers“ analog zur Vermessung mit einer Schiebelehre bzw. der fotometrischen Vermessung. Aus dieser „Länge“ und dem „Durchmesser“ wurde das Volumen des entsprechenden Zylinders berechnet und dem tatsächlichen Pelletvolumen aus der Vermessung gegenübergestellt. Daraus ergibt sich, dass die tatsächlichen verkohlten Pellets um einen Faktor von 0,62 weniger Volumen aufweisen als die Zylinder mit vergleichbaren Abmessungen. Es

wurde gefolgert, dass auch die simulierten Zylinder im Vergleich zu den tatsächlichen Pellets ein zu großes Volumen haben. Iterativ wurde dann die gemessene Dichte von 705 kg/m^3 der verkohlten Pellets für die Simulation so angepasst, dass das mit 0,62 skalierte Zylindervolumen beim gemessenen „Durchmesser“ korrekt wiedergegeben wird.

5.3.3 Zusammensetzung der flüchtigen Komponenten

Wie bereits in Abschnitt 5.1.5 erwähnt wurde, muss die Zusammensetzung der Flüchtigen entsprechend der im Gasphasenkonversionsmechanismus verfügbaren Spezies gewählt werden. Für das Basismodell wurde hierfür eine konstante Zusammensetzung auf Basis von Literaturdaten festgelegt.

Als Resultat der Modellüberarbeitung erfolgt nun eine Berechnung der Zusammensetzung aus der Brennstoffzusammensetzung und dem Heizwert des Brennstoffs unter der Annahme, dass die Pyrolyseenthalpie gleich Null ist. Dadurch können die Energie- und die Elementbilanz in Bezug auf den Brennstoff geschlossen werden. Die Basis für die Berechnung ist eine Einzelpartikel-Berechnung mit einem detaillierten Pyrolysemechanismus für die Pyrolyse des Brennstoffs bei $600 \text{ }^\circ\text{C}$. Durch den detaillierteren Pyrolysemechanismus werden laut Einzelpartikel-Berechnung Spezies in die Gasphase freigesetzt, die mit dem gewählten chemischen Gasphasen-Mechanismus (BIO-37, siehe Abschnitt 5.3.1) nicht kompatibel sind, es muss daher eine Anpassung der Zusammensetzung vorgenommen werden.

Dazu werden zunächst die Spezies, die in der berechneten Zusammensetzung und in BIO-37 enthalten sind, auf 100 % normiert. Dann erfolgt eine Anpassung der Zusammensetzung unter folgenden Bedingungen:

- Die Hauptkomponenten (CH_4 , CO_2 , CO , H_2O , H_2) sowie alle Spezies mit einem Massenanteil $> 4 \text{ m-\%}$) werden direkt aus der normierten Zusammensetzung der Modellrechnung übernommen.
- Diese Zusammensetzung verletzt im Allgemeinen die Elementbilanz bezogen auf den eingesetzten Brennstoff, und ist nicht mit der Forderung vereinbar, dass die Pyrolyseenthalpie Null ist.
- Daher werden nun die Anteile der weiteren möglichen Spezies (lt. BIO-37) iterativ so angepasst, dass (i) die Zusammensetzung auf 100 % normiert ist. (ii) die Elementbilanz bezogen auf den Brennstoff geschlossen ist und (iii) sich aus der Energiebilanz über den Brennstoff (Basis: Heizwert) eine Pyrolyseenthalpie von Null ergibt.

Tabelle 5: Zusammensetzung der im Zuge der Pyrolyse entstehenden Gase

| Spezies | | Modellrechnung Zusammensetzung [m-%] | Ergebnis Zusammensetzung [m-%] |
|--------------------|--|--|--------------------------------------|
| Methan | CH ₄ | 4,67 | 4,67 |
| Kohlendioxid | CO ₂ | 17,90 | 17,90 |
| Kohlenmonoxid | CO | 2,38 | 2,38 |
| Wasser (gasf) | H ₂ O | 21,76 | 21,76 |
| Wasserstoff | H ₂ | 0,00 | 0,00 |
| Formaldehyd | CH ₂ O | 4,98 | 4,98 |
| Methanol | CH ₃ OH | 3,86 | 4,63 |
| Ethin | C ₂ H ₂ | 0,00 | 2,44 |
| Keten | CH ₂ CO | 0,00 | 3,24 |
| Glyoxal | C ₂ H ₂ O ₂ | 5,50 | 5,50 |
| Ethylen, Ethen | C ₂ H ₄ | 4,20 | 4,20 |
| Acetaldehyd | CH ₃ CHO | 3,40 | 0,00 |
| Hydroxyacetaldehyd | C ₂ H ₄ O ₂ | 21,61 | 21,61 |
| Ethan | C ₂ H ₆ | 0,00 | 0,00 |
| Ethanol | C ₂ H ₅ OH | 1,53 | 0,00 |
| Aceton | CH ₃ COCH ₃ | 6,69 | 6,69 |
| Cyclopentadien | C ₅ H ₆ | 0,00 | 0,00 |
| Benzol, Benzen | C ₆ H ₆ | 0,00 | 0,00 |
| Phenol | C ₆ H ₅ OH | 1,53 | 0,00 |
| Summe | | 100 | 100 |

Erläuterungen: Die farblich hinterlegten Spezies wurden aus der Modellrechnung übernommen. Die anderen Spezies wurden laut der im Text beschriebenen Vorgehensweise angepasst

5.3.4 Strahlungsabsorption

Die Strahlungsintensität $I(l)$ [W/m²] innerhalb der Schüttung wird in Abhängigkeit von der zurückgelegten Strecke l von einem Exponentialgesetz beschrieben:

$$I(l) = I_0 \exp(-\beta l) \tag{5.3}$$

Hier ist I_0 [W/m²] die Strahlungsintensität bei Eintritt in die Schüttung, und β [1/m] der so genannte Extinktionskoeffizient, der sich aus Absorption und Streuung der Strahlung innerhalb der Schüttung ergibt. Beim Basismodell wurde die Absorption und Streuung der Strahlung abhängig von Porosität und Partikeldurchmesser berücksichtigt.

Es zeigte sich, dass im Vergleich mit experimentellen Daten die Eindringtiefe der Strahlung zu groß war. Deshalb wurde im weiterentwickelten Modell bzgl. der Strahlungsabsorption die Randbedingung hinterlegt, dass die Strahlung nur über eine Länge entsprechend dem Partikelradius in die Schüttung eindringen darf.

5.3.5 Holzkohlenumsetzung

Bei der Holzkohle-Vergasung und Verbrennung treten nicht vernachlässigbare Reaktionswärmern auf, insbesondere die Verbrennung setzt große Mengen an Energie frei. Im Basismodell erwärmte die Reaktionswärme nur das Gas. Im weiterentwickelten Modell wird die Reaktionswärme nun auf die Schüttung und Gas aufgeteilt. Dies geschieht auf Grund der Überlegung, dass durch die Fragmentierung der Holzkohle mikroskopisch kleine Holzkohle-Teilchen aus den Brennstoffpartikeln in die Gasphase ausgetragen werden, und erst dort verbrennen.

Die Aufteilung der Reaktionswärme erfolgt dabei über einen Faktor τ_{char} . Dieser Faktor beträgt 1 für niedrige Feststofftemperaturen (<650 °C) und 0,5 für hohe Feststofftemperaturen (>950 °C), was bedeutet, dass bei niedrigen Temperaturen keine und bei hohen Temperaturen 50 % der Reaktionswärme in die Gasphase übergehen. Im Bereich zwischen 650 °C und 950 °C wird τ_{char} wie folgt berechnet:

$$\tau_{char} = \frac{1}{1 + \alpha} \quad (5.4)$$

mit

$$\alpha = \frac{\text{Feststofftemperatur} - 650}{950 - 650} \quad (5.5)$$

Dieser Verlauf von τ_{char} über der Feststofftemperatur wurde basierend auf Einzelpartikel-Modellrechnungen im Vergleich mit experimentellen Daten zur Verbrennung von Holzpellets und durch die Daten (Zündzeiten) aus den aktuellen Laborreaktorversuchen ermittelt.

Zusätzlich wurden hinsichtlich der Berechnung der Reaktionsraten bei der Holzkohleverbrennung Anpassungen bzgl. der Berechnung der Sherwood-Zahl sowie der Partikeloberfläche vorgenommen. Im überarbeiteten Modell wird die Sherwood-Zahl analog zur Nusselt-Zahl inklusive Korrekturen für kleine Strömungsgeschwindigkeiten (d. h. Peclet-Zahlen) berechnet. Bezüglich der Partikeloberfläche wurden die bereits erwähnten Abweichungen der verkohlten Pellets von der idealen Zylinderform ebenfalls berücksichtigt.

5.3.6 Nachsacken der Pellets in Hohlräume im Pelletbett

In einem realen Pelletbett sinkt das Volumen der Schüttung durch die Schrumpfung der Pellets während der Pyrolyse. In weiterer Folge löst sich im Zuge des Holzkohle-Abbrandes die Struktur der Pellets auf. Wenn die innere Porosität der Pellets einen kritischen Wert erreicht hat, brechen diese zusammen. Beide Effekte führen dazu, dass sich Material in der Schüttung von oben nach unten bewegt, bzw. in entstehende Hohlräume nachrutscht. Wie die Vergleiche von Simulationen mit dem Basismodell und Messdaten in Abschnitt 5.2.2 deutlich zeigen, spielen diese Effekte, d. h. das Nachsacken von Pellets in durch die Konversion entstehende Hohlräume im Pelletbett, eine wesentliche Rolle. Aus diesem Grund wurde ein entsprechender Mechanismus, der diesen Effekt abbildet, entwickelt und in das Modell implementiert.

Es wurden zwei Modellierungsansätze geprüft, nämlich (i) die Modellierung der Bewegung der Schüttung analog zur Modellierung der Strömung eines Fluids (Euler-Euler-Ansatz) und (ii) die schrittweise Modellierung des Nachsackens, bei der nach Berechnung eines Zeitschritts für Freisetzung, Strömung, und Gasphasen-Chemie die Schüttung zusammensackt, wenn entsprechende Bedingungen erfüllt sind. Der erste Ansatz wurde verworfen, da sich diese Methode nicht in das gegebene Modell integrieren lässt und der zweite Ansatz wurde nach der im Folgenden beschriebenen Vorgangsweise weiterverfolgt.

Nach jedem Zeitschritt wird für jede Berechnungszelle geprüft, ob die Porosität der Schüttung den für das momentane Abbrandstadium erlaubten Maximalwert (Eingabeparameter - siehe folgender Absatz) überschreitet. Ist das der Fall, wird ermittelt, wie viel Volumen an Feststoff die Berechnungszelle aufnehmen kann. Dieses Volumen wird anteilig aus den Berechnungszellen oberhalb in die betreffende Zelle transferiert und der Vorgang wird wiederholt, bis sich keine Änderungen mehr ergeben. Kritische Punkte dabei sind die Definition der Zellen oberhalb der betreffenden Zelle, die Einhaltung der Massen- und Energiebilanz sowie die Berechnung der Eigenschaften des neuen repräsentativen Teilchens in der Berechnungszelle (Zusammensetzung, Volumen/Durchmesser), die von zentraler Bedeutung für die Beschreibung der Freisetzung sind und die numerische Stabilität.

Wesentlich für das Modell ist die Festlegung des Maximalwerts der Porosität der Schüttung. Dieser bestimmt, wie weit sich die Schüttung in einem Schritt verdichten kann. Ein vollständig homogenes Zusammensacken der Schüttung, entsprechend einer konstanten maximalen Porosität ϵ_m , ist in der Realität nicht zu erwarten. Daher wurde für ϵ_m eine Gauß'sche Zufallsverteilung angenommen:

$$\epsilon_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\epsilon-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (5.6)$$

Der Mittelwert $\mu=0,7426$ der Verteilung entspricht der Porosität der Schüttung aus verkohlten Holzpellets (experimentell ermittelt aus den Abbruchversuch am Laborreaktor - siehe Berichtsteil I, Abschnitt 8). Es wird angenommen, dass sich dieser Wert für die Schüttung

aus verkohlten Holzpellets über den gesamten Abbrand nicht wesentlich ändert. Die Breite der Verteilung wird mit $\sigma = 0,1$ angenommen. Um numerische Probleme (Instabilität) zu vermeiden, wird die Verteilung auf $0,4 \leq \epsilon_m \leq 0,95$ eingeschränkt. Aus dieser Verteilung wird ϵ_m vor jedem Kompaktierungsschritt in jeder Berechnungszelle neu ermittelt.

5.4 Validierung des weiterentwickelten Modells

Zur Validierung des weiterentwickelten Bettmodells erfolgte eine Nachsimulation eines Laborreaktor-testlaufes, der mit dem marktverfügbaren Pelletsortiment 19 (Nadelholzpellets, siehe Tabelle 3 in Berichtsteil I) durchgeführt wurde. Relevante Ergebnisse dieses Laborreaktor-tests sind auch in Abschnitt 8.3 im Berichtsteil I angeführt.

5.4.1 Rahmenbedingungen und Anfangsbedingungen für die Simulationen

Die brennstoffbezogenen Rahmenbedingungen wurden aus Analysen des im Zuge des Testlaufes eingesetzten Pelletsortiments 19 abgeleitet. In Tabelle 6 sind die aus den chemischen Analysen erhaltenen Daten sowie hinsichtlich der Zusammensetzung der Pseudokomponenten und der Anteile an Holzkohle und flüchtigen Komponenten aus TGA-Daten abgeleitete Werte (siehe Berichtsteil I, Abschnitt 5.1.3) angeführt. Tabelle 7 enthält die für die Zersetzung von Hemicellulose, Zellulose und Lignin angesetzten kinetischen Parameter.

Die Teilchendichte der Pellets beträgt 1.288 kg FS/m^3 . Die Brennstoff-Einwaage lag bei 490 g FS . Daraus ergibt sich zusammen mit der Geometrie des Laborreaktors eine Porosität der Schüttung von $0,5$ vor Beginn der Konversion.

Die Brennstoffpartikel wurden als Zylinder angenähert und weisen eine Länge von $14,3 \text{ mm}$ und einen Durchmesser von $6,2 \text{ mm}$ auf (Ermittlung mit dem von BIOS entwickelten fotometrischen Verfahren - siehe Berichtsteil I, Abschnitt 4.3.3). Es wird, wie schon beim Basismodell, angenommen, dass die Differenz aus Länge und Durchmesser $L - D = 8,1 \text{ mm}$ über den gesamten Konversionsprozess konstant bleibt, was für Pellets auch nach bereits durchgeführten Versuchen in guter Näherung gilt.

Tabelle 6: Brennstoffzusammensetzung - marktverfügbares Pelletsortiment 19

| Analysenergebnisse | | |
|-------------------------------|-------------|-------|
| Wassergehalt | [m-% FS] | 7,28 |
| C-Anteil | [m-% TS] | 49,22 |
| H-Anteil | [m-% TS] | 6,10 |
| O-Anteil | [m-% TS] | 44,31 |
| N-Anteil | [m-% TS] | 0,00 |
| Aschegehalt | [m-% TS] | 0,37 |
| Brennstoffkomponenten lt. TGA | | |
| Hemicellulose | [m-% TS af] | 25,17 |
| Zellulose | [m-% TS af] | 32,77 |
| Lignin | [m-% TS af] | 15,97 |
| Summe flüchtige Komponenten | [m-% TS af] | 73,92 |
| Holzkohle bei 500 °C | [m-% TS af] | 26,08 |

Erläuterungen: FS ... Frischsubstanz; TS ... Trockensubstanz; af ... aschefrei

Tabelle 7: Kinetische Parameter zur Berechnung der thermischen Zersetzung

| | E_A [kJ/mol] | $\ln(A)$ [s ⁻¹] | Reaktionsordnung [-] |
|---------------|-------------------|--------------------------------|-------------------------|
| Hemicellulose | 100,27 | 15,88 | 1 |
| Zellulose | 225,41 | 39,06 | 1 |
| Lignin | 107,40 | 14,98 | 2.5 |

Erläuterungen: E_A ... Aktivierungsenergie; $\ln(A)$... Prä-Exponentieller Faktor; Quelle: TGA Datenbank der BIOS BIOENERGIE-SYSTEME GmbH

Die geometrischen Rahmenbedingungen bzgl. des Reaktors und der Messpunkte entsprechend den in Abbildung 6 dargestellten. Auch die weiteren Randbedingungen hinsichtlich des Reaktors entsprechen denen des Testlaufes, der für die ersten Validierungsrechnungen herangezogen wurde. Das heißt, dass 650 °C als Zieltemperatur des oberen Heizelements und 450 °C als Zieltemperatur des unteren Heizelements vorgegeben waren und ein Primärluftstrom von 30,2 NI/min vorlag.

5.4.2 Ergebnisse

5.4.2.1 Massenabbau

In Abbildung 9 sind die Simulationsergebnisse hinsichtlich des Massenabbaus mit den experimentellen Daten verglichen. Es sei darauf hingewiesen, dass im Gegensatz zu den

Vergleichen in Abschnitt 5.2.2, keine Anpassung der Zeitachse (Synchronisierung der Zündung) erfolgte. Aus den Massenabbaukurven ist ersichtlich, dass insbesondere die Zündung mit dem weiterentwickelten Modell sehr gut abgebildet werden kann. Der Knick in der Massenabnahme und der steile Anstieg der dm/dt Kurven stimmen zwischen Testlauf- und Simulationsergebnissen sehr gut überein.

Die dm/dt -Kurve ist im Vergleich zu den Testlaufdaten plausibel, und die Kurve folgt bis ca. 1300 s sehr gut dem experimentell ermittelten Verlauf. Auch der steile Abfall nach ca. 1400 s, der mit dem Beginn der Holzkohle-Abbrandphase zusammenfällt, deckt sich mit dem Experiment. Der Knickpunkt im Massenabbau zu Beginn der Holzkohle-Abbrandphase bei ca. 1600 s kann ebenfalls gut wiedergegeben werden.

Nach 1600 s zeigen die simulierten Verläufe Abweichungen von den experimentellen Daten. Sowohl die Kurve der Massenabnahme als auch der dm/dt -Verlauf liegen unter den experimentellen Verläufen. Grund dafür ist, dass bereits zwischen 1300 s und 1500 s nach Versuchsstart das simulierte dm/dt über dem gemessenen liegt. Das deutet darauf hin, dass im Modell der Abbau von Holzkohle während der Pyrolysephase überschätzt wird, da jener in dieser Phase des Abbrandes zunehmend an Einfluss gewinnt. Daher wird während der Pyrolyse laut Modell bereits etwas Holzkohle abgebaut, die dann gegenüber dem Testlauf in der späteren Phase (nach 1600 s) fehlt.

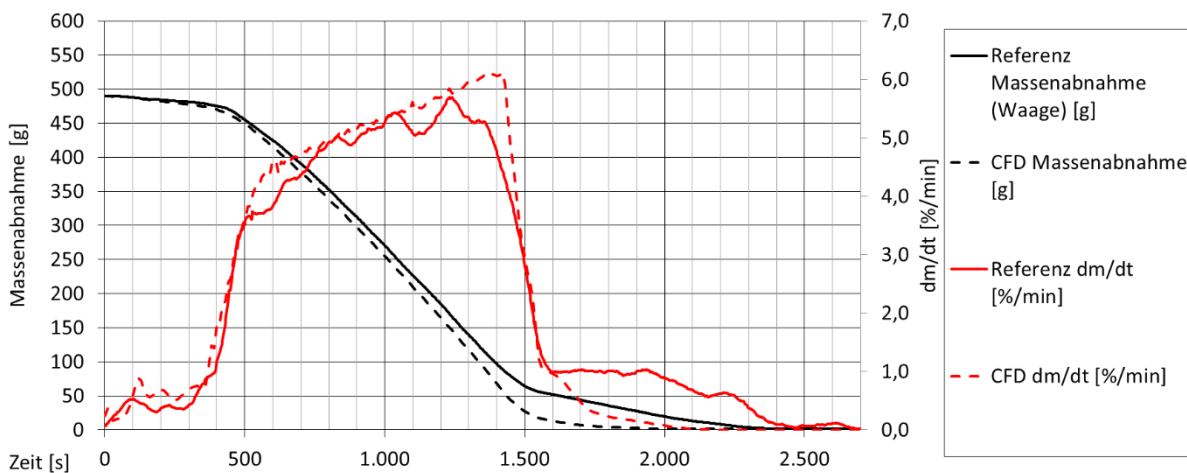


Abbildung 9: Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem weiterentwickelten Modell mit Messdaten aus einem Laborreakortestlauf mit dem marktverfügbaren Pelletsortiment 19 - Massenabbau

5.4.2.2 Temperaturentwicklung

Abbildung 10 zeigt einen Vergleich der simulierten und der gemessenen Temperaturentwicklung im Pelletbett. Generell ist in Bezug auf die im Folgenden dargestellten Temperaturen anzumerken, dass alle Messungen (sowohl innerhalb des Probenhalters als auch im Rauchgas) mit Thermoelementen vorgenommen wurden. Die gemessenen Temperaturen setzen sich daher aus mehreren Einflüssen zusammen, nämlich der Gastemperatur, der

Feststofftemperatur (wenn sich das Thermoelement in der Schüttung befindet) und der Strahlung.

Es wurden in Abbildung 10 keine Korrekturen an den gemessenen Temperaturen vorgenommen. Bei der Darstellung der Simulationsergebnisse werden daher in detaillierten Diagrammen die Gastemperatur an der jeweiligen Messstelle, die Feststofftemperatur (wenn sich die Messposition noch innerhalb der Schüttung befindet), und die Strahlungstemperatur (definiert als die Temperatur, die der lokalen Intensität der Strahlung entspricht) dargestellt und mit den Messwerten verglichen (siehe Abbildung 11).

Wenn die Messposition durch das Nachsacken der Schüttung aus dieser hinauswandert, wird in der Simulation anstelle der Feststofftemperatur die Gastemperatur ausgegeben.

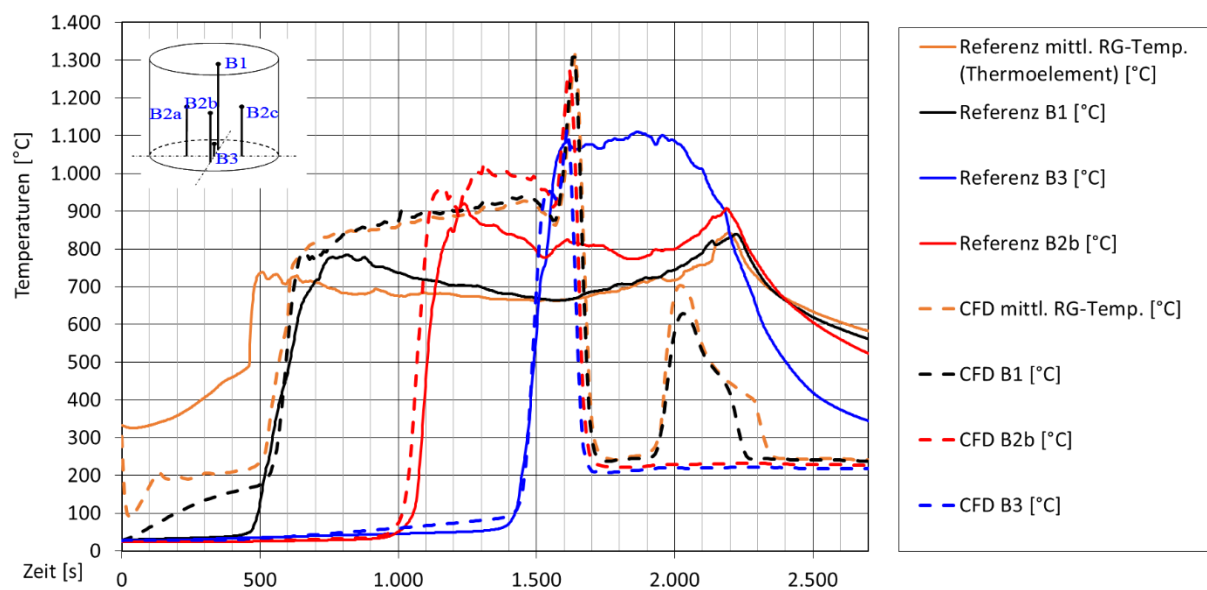


Abbildung 10: Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem weiterentwickelten Modell mit Messdaten aus einem Laborreakortestlauf mit dem marktverfügbaren Pelletsortiment 19 - Temperaturen

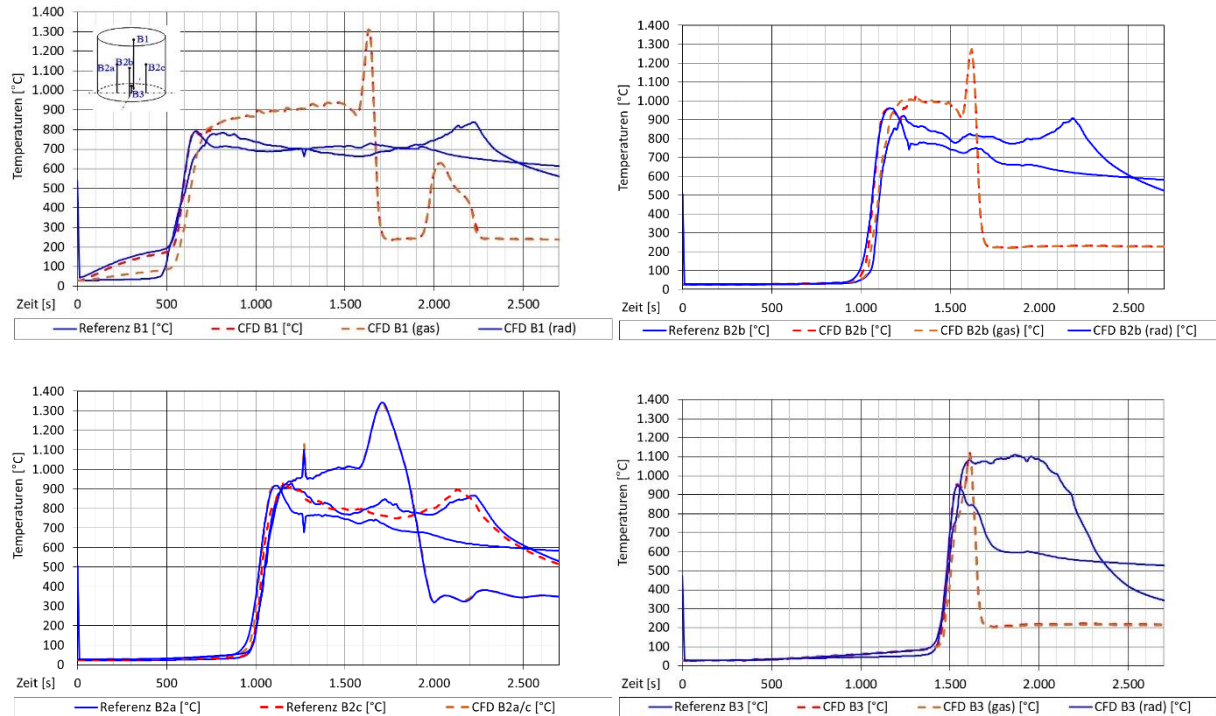


Abbildung 11: Vergleich der mit Thermoelementen bestimmten Temperaturen mit aus den CFD-Simulationen resultierenden Gasttemperaturen (gas) und Strahlungstemperaturen (rad)

Anhand der Verläufe der Temperaturkurven lässt sich u. a. der Fortschritt der Reaktionsfront von oben nach unten durch das Brennstoffbett gut verfolgen. Die Simulation zeigt hier in Bezug auf die zeitliche Abfolge der Temperaturanstiege an den einzelnen Messpositionen eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messungen. Auch stimmen die jeweils gemessenen Maximaltemperaturen am Ende des Temperaturanstiegs gut mit den Simulationsergebnissen überein.

Generell werden auch die Temperaturverläufe bis zum Zeitpunkt von 1600 s nach Versuchsstart sehr gut wiedergegeben. Danach steigen die Temperaturen in der Simulation kurzzeitig stark an, während laut Testlauf nur das Thermoelement B3 auf einem hohen Temperaturniveau bleibt. Diese Abweichungen sind konsistent mit den Abweichungen der Massenabbaukurven, und zeigen ebenfalls einen zu schnellen Abbau der Holzkohle, der mit einem starken Temperaturanstieg einhergeht, da zu viel Energie freigesetzt wird.

Betrachtet man die Rauchgastemperaturen im Detail, so fällt auf, dass an der Messposition für die Rauchgastemperatur über den gesamten Versuchsverlauf ein starker Einfluss der Strahlung auf die Temperaturmessung gegeben ist. Im Vergleich zwischen simulierter Strahlungstemperatur, Gastemperatur und gemessener Temperatur zeigt die Strahlungstemperatur eine viel bessere Übereinstimmung mit der gemessenen Temperatur als die Gastemperatur, insbesondere was den Verlauf und das Temperaturniveau in der Haupt-Abbrandphase betrifft.

Solange sich die jeweilige Messposition im Probenhalter lt. Simulation innerhalb der Schüttung befindet, sind die Feststofftemperaturen und die Strahlungstemperatur im Gleichgewicht. Wandert die Brennstoffbett-Oberfläche unter die Messposition, wird anstatt der Feststofftemperatur die Gastemperatur an dieser Stelle ausgegeben. In diesem Fall sind die Kurven der Gas- und „Feststofftemperatur“ deckungsgleich, da die separate „Feststofftemperatur“ oberhalb der Brennstoffbettoberfläche nicht definiert ist.

Die Verläufe an den Messpositionen B1, B2a/c und B2b sind sich (abgesehen vom unterschiedlichen Zeitpunkt des Temperaturanstiegs) sehr ähnlich. Befindet sich die Messposition innerhalb des Brennstoffbettes, liegen die Strahlungs- und die Feststofftemperatur über der Gastemperatur. Sobald sich die Messposition außerhalb des Bettes befindet, kann die Temperatur mittels Thermoelement nicht mehr richtig wiedergegeben werden, da sie durch die Strahlung dort beeinflusst wird. Alle Kurven zeigen kurz nach dem charakteristischen Anstieg einen Peak. Die Höhe des Peaks ist in allen Fällen ähnlich dem gemessenen Temperaturmaximum.

An Messposition B3 ist die Abweichung zu den Messwerten am größten, da der Abbau der Holzkohle in der Simulation schneller voranschreitet als gemessen. Demzufolge sinkt die Brennstoffbett-Oberfläche sehr schnell nach dem Temperaturanstieg unter die Messposition ab, und das gemessene Plateau wird in der Simulation nicht abgebildet.

Ca. 2.000 s nach dem Versuchsstart zeigen sich Peaks bei den Temperaturen an der Messposition oberhalb des Brennstoffbettes (Rauchgastemperatur) sowie an der knapp darunter liegenden Messstelle B1. Diese sind darauf zurückzuführen, dass zu diesem Zeitpunkt des Abbrandes im äußeren Bereich des Brennstoffbettes (nahe der Wand des Probenhalters) die letzte noch verbliebene Holzkohle umgesetzt wird. Die im Reaktor herrschenden Strömungsverhältnisse zeigen einen Rezirkulationswirbel, der die entstehende heiße Strähne vom Rand der Retorte aus in der Mitte wieder nach unten zu den erwähnten Messpositionen lenkt. Das ist insofern konsistent mit den Erkenntnissen aus dem Abbruchkriterium AK-3, als auch dort die Bettbewertung zeigt, dass die letzte verbliebene Holzkohle nicht in der Mitte des Brennstoffbettes, sondern im wandnahen Bereich zu finden ist. Die experimentell gefundene Asymmetrie des Brennstoffbettes kann in der Simulation durch die radialsymmetrische Rechnung nicht abgebildet werden.

5.4.2.3 Gasphasenzusammensetzung nach Betaustritt

Abbildung 12 zeigt einen Vergleich der simulierten Gasphasenzusammensetzung nach Betaustritt mit den Messdaten.

Der Sauerstoffgehalt an der Gasentnahmestelle bleibt in der Simulation zunächst weitgehend konstant und fällt dann ca. 100 s nach der Zündung (Anstieg der Massenabnahme) steil auf null ab. Laut Messung erfolgt das Absinken der Konzentration zunächst eher graduell, und startet beinahe sofort nach Beginn des Versuchs. Diese Abweichungen zu Beginn können durch leichtflüchtige Komponenten im Brennstoff bedingt sein, die in der Simulation nicht berücksichtigt sind (z.B. extraktive Stoffe).

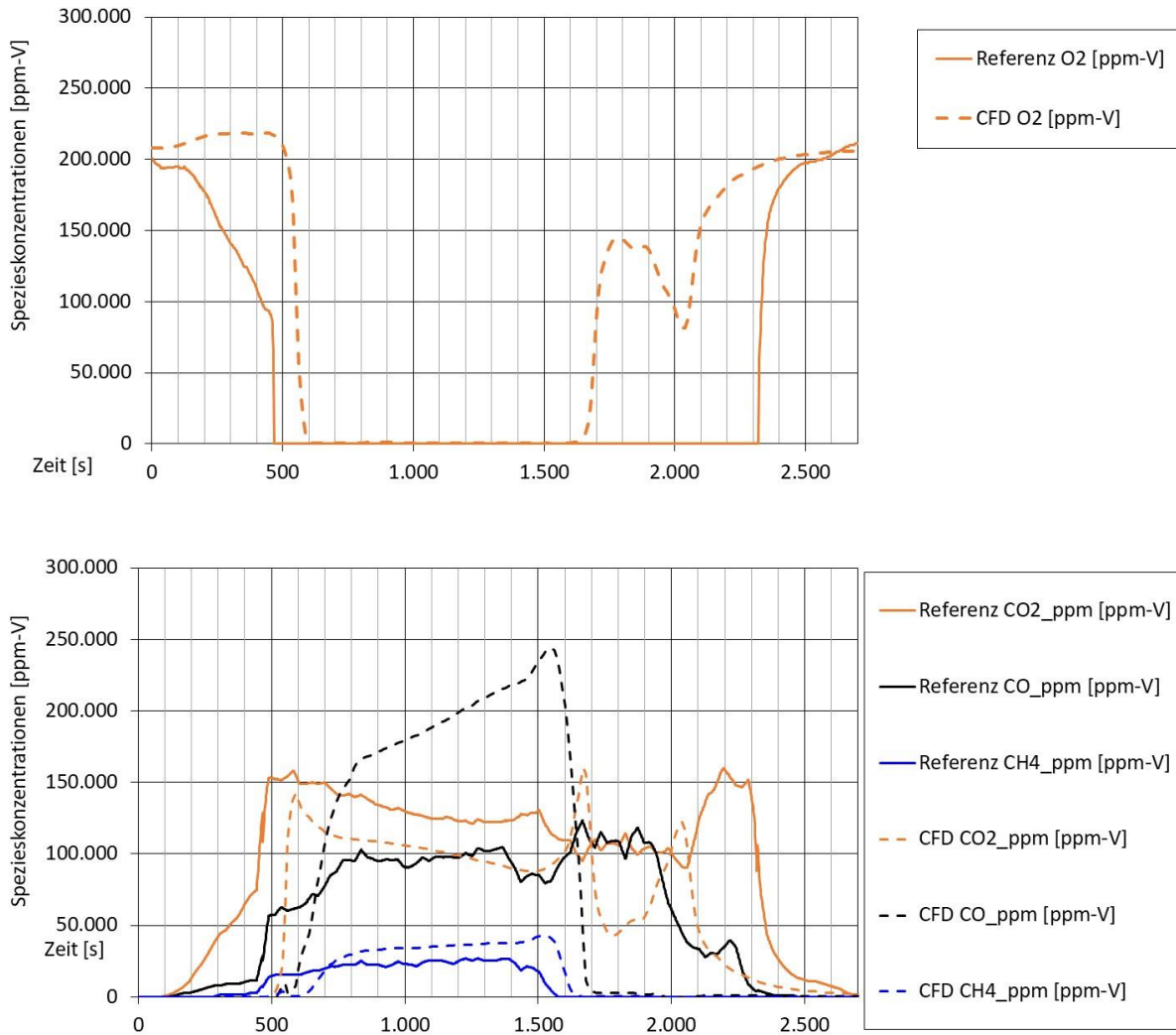


Abbildung 12: Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem weiterentwickelten Modell mit Messdaten aus einem Laborreaktorlauf mit dem marktverfügbaren Pelletsortiment 19 - Gaszusammensetzung nach Betaustritt

Das Erreichen des Nullpunktes der O₂-Konzentrationen stimmt in Simulation und Messung relativ gut überein. Der nach ca. 1.600 s frühere O₂-Anstieg in der Simulation ist durch die verkürzte Holzkohle-Abbrandphase erklärbar. Ca. 2.000 s nach Versuchsbeginn zeigt die Simulation nach einem ersten Ansteigen einen erneuten Abfall der Sauerstoffkonzentration an der Messstelle. Dieser Effekt ist konsistent mit dem Ansteigen der Temperaturen an den Messstellen der Rauchgastemperatur sowie dem Thermoelement B1, und auf die Umsetzung der letzten verbliebenen Holzkohle im wandnahen Bereich der Retorte zurückzuführen.

Die Verläufe von CH₄ und CO₂ zeigen akzeptable Übereinstimmungen zwischen Simulation und Testlauf. Die Konzentrationen an CO laut Simulation sind in der Hauptabbrandphase im Vergleich zu den Testlaufergebnissen zu hoch. Der Grund dafür liegt in der hier verwendeten Modellierung. Die Pyrolysegaszusammensetzung wurde auf Basis einer Mo-

dellrechnung mit einem Einzelpartikelmodell bestimmt, wofür ein detaillierter Pyrolysemechanismus eingesetzt wurde. Um die entsprechenden freigesetzten Spezies in der Gasphase zu modellieren, ist ein passender, umfangreicher Gasphasen-Verbrennungsmechanismus nötig (POLIMI-BIO), der zu sehr langen Simulationszeiten führen würde. Stattdessen wurde ein reduzierter chemischer Reaktionsmechanismus verwendet. Der Nachteil der Reduktion ist es, dass langkettige Spezies (Teere) nicht genau abgebildet werden können, und daher einfachere Verbindungen vorherrschen. Diese werden schneller zu CO abgebaut, und sorgen oberhalb des Brennstoffbettes dafür, dass die Konzentrationen von CO im Vergleich zur Messung zu hoch liegen.

Konsistent mit der Umsetzung der letzten verbliebenen Holzkohle (siehe Diskussion der Temperaturen und O₂-Verteilung) zeigt sich am Ende des Ausbrandes noch ein CO₂ Peak.

5.4.2.4 Struktur des Brennstoffbettes

In Abbildung 13 ist der Bettzustand laut Simulationen hinsichtlich Porosität, Holzkohlegehalt und Feststofftemperatur für die Zeitpunkte der beiden Versuchsabbrüche bei den Laborreaktortests mit dem marktverfügbaren Pelletsortiment 19 dargestellt. Die Versuchsabbrüche erfolgten ca. 1.000 s (AK-1) und 2.000 s (AK-2) nach dem Testlaufstart.

Durch die Modellierung des Nachsackens wandert die Brennstoffbettoberfläche im Verlauf der Simulation nach unten. Das ist anhand der Verläufe der Porosität innerhalb des Probenhalters erkennbar: Oberhalb der Brennstoffbettoberfläche ist die Porosität gleich 1 (kein festes Material vorhanden). Nach ca. der Hälfte der Flüchtigenfreisetzung (Abbruchkriterium AK-1) liegt die Brennstoffbettoberfläche leicht unterhalb der gemessenen (konsistent mit einem zu schnellen Abbau der Holzkohle im Modell) und zeigt sonst eine gute Übereinstimmung. Am Ende der Phase der Flüchtigenfreisetzung (AK-2) liegt die simulierte Oberfläche des Brennstoffbettes deutlich unterhalb des gemessenen Niveaus.

Anhand der Porosität ist auch zu erkennen, inwieweit das Brennstoffbett bereits aus verkohlten Pellets besteht, da dort die Schüttung bereits zusammengesackt ist. Die Porosität im Holzkohlebett ist lt. Modellierung zufallsverteilt, mit einem Mittelwert von 0,74. Die Schüttung aus frischen Pellets (bei AK-1 im unteren Bereich des Probenhalters) ist nicht zusammengesackt (die Porosität entspricht dem Anfangswert von 0,5). Nach ca. der Hälfte der Flüchtigenfreisetzung (AK-1) stimmt die Grenze zwischen dem verkohlten und dem nicht-verkohlten Teil des Brennstoffbettes sehr gut mit den Beobachtungen aus den Testläufen mit den Referenzpellets überein. Bei AK-2 besteht das Brennstoffbett beinahe ausschließlich aus verkohlten Pellets (konsistent mit den Testläufen).

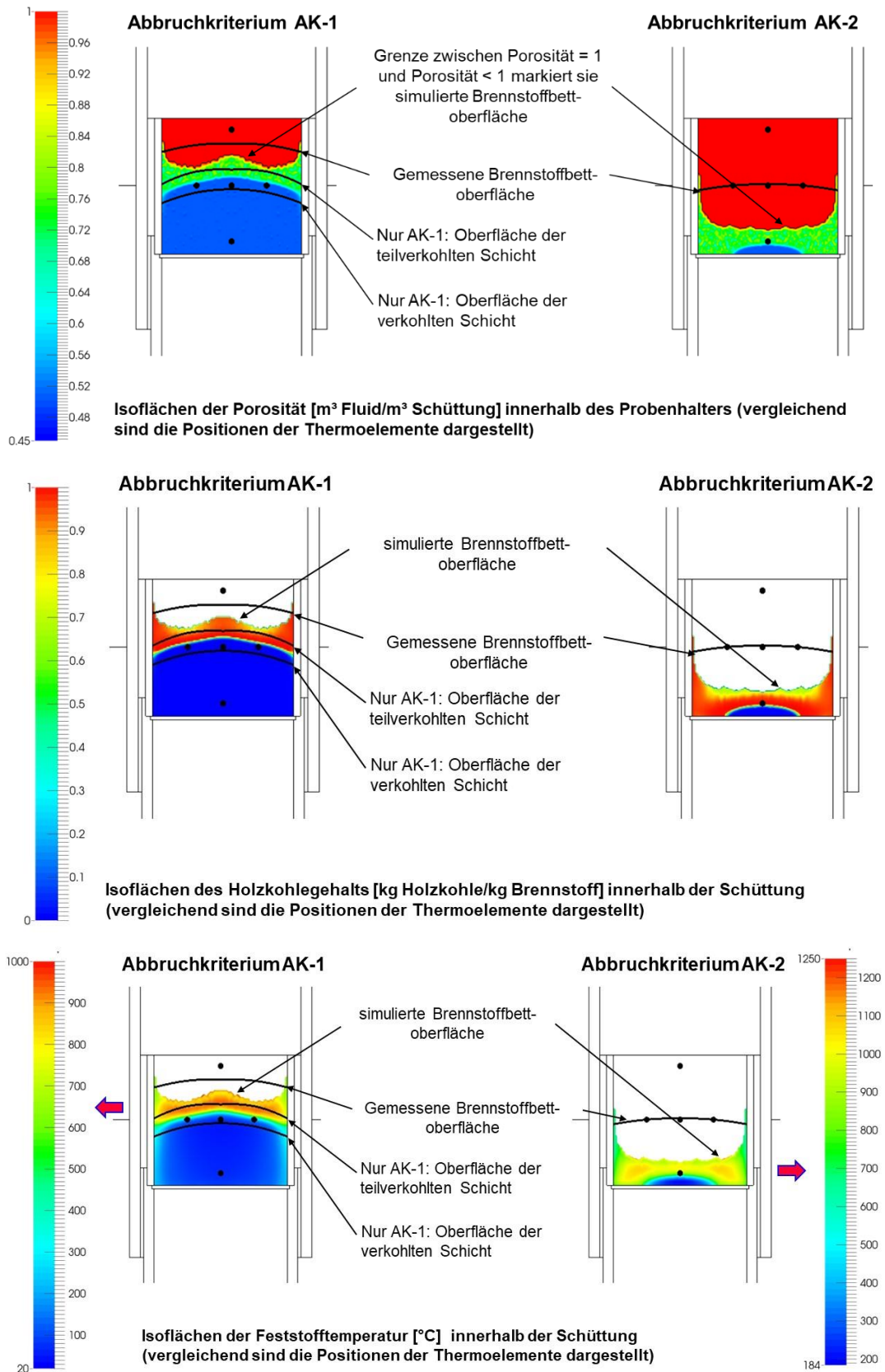


Abbildung 13: Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem weiterentwickelten Modell mit Messdaten aus einem Laborreakortestlauf mit dem marktverfügbaren Pelletsortiment 19 - Bettstruktur zum Zeitpunkt des Abbruchkriteriums 1 (1000 s nach Versuchsstart) und des Abbruchkriteriums 2 (1600 s nach Versuchsstart)

Die Abbruchkriterien AK-1 und AK-2 wurden experimentell über den Anstieg der Temperaturen an den Thermoelementen B2a – B2c (für AK-1) und dem Erreichen eines Temperaturmaximums an Thermoelement B3 (für AK-2) definiert. Das ist an den Temperaturverläufen innerhalb der Schüttung zu den zwei dargestellten Zeitpunkten zu erkennen. Außerdem zeigt die Temperaturverteilung innerhalb der Schüttung, dass die maximale Feststofftemperaturen unterhalb der Brennstoffbettoberfläche ein Maximum erreicht, um dann zur Oberfläche hin wieder leicht zu sinken. Dieses Verhalten spiegelt sich auch in den zeitlichen Verläufen der Temperaturen (in der Messung wie auch in der Simulation) wider: Nach dem Temperaturanstieg am jeweiligen Thermoelement wird ein Maximum erreicht, und kurz bevor die Brennstoffbettoberfläche unter die Position des jeweiligen Thermoelements absinkt, sinken die Temperaturen wieder.

5.4.3 Schlussfolgerungen

Die Validierungsrechnung zeigt in der Hauptabbrandphase eine sehr gute Übereinstimmung mit den Massenabbaukurven. Auch der Fortschritt der Reaktionsfront durch das Brennstoffbett wird sehr gut abgebildet. Der Abbau der Holzkohle wird im Modell etwas zu schnell vorhergesagt. Das äußert sich in Abweichungen der Brennstoffbettform. Insbesondere die Brennstoffbettoberfläche ist niedriger als in der Messung.

Die CO-Konzentrationen an der Messposition werden in der Simulation überschätzt, da eine detaillierte Abbildung von langkettigen Kohlenwasserstoffen (Teere) nicht mit handhabbaren Simulationszeiten vereinbar ist.

Insgesamt ist es mit diesem neuen CFD-Simulationsmodell möglich, in akzeptabler Simulationszeit eine relativ genaue Übereinstimmung mit den Messergebnissen aus dem Laborreaktor zu erzielen. Es zeigte sich auch, dass die Kopplung des Abbrandmodells mit einem Gasphasen-Verbrennungsmodell für die Nachsimulation der Testläufe am Laborreaktor notwendig war und ebenfalls plausible Ergebnisse liefert.

5.5 Finale Modellverbesserungen

5.5.1 Implementierung eines Teermodells

Das weiterentwickelte Modell ermöglicht eine gute semi-qualitative Beschreibung des Pellet-Abbrandes. Die Unterschiede im Holzkohlen-Abbau sind durch die Komplexität der Einflussgrößen bedingt, sollten das Gesamtergebnis einer Abbrandmodellierung aber nicht wesentlich beeinflussen, da sie nur ca. 15 – 20 % der Gesamtmasse betreffen. Der Abbrand wird durch die Flüchtigensfreisetzung dominiert und diese wird sehr gut vom Modell beschrieben.

Die Konzentrationen von CO in der Hauptabbrandphase waren in den bisher durchgeführten Validierungsrechnungen im Vergleich zu den Testlaufergebnissen zu hoch. Der Grund dafür wurde in der Berechnungsweise der Pyrolysegaszusammensetzung vermutet. Die

Pyrolysegaszusammensetzung resultiert auf Basis einer Modellrechnung mit einem Einzelpartikelmodell, wofür ein detaillierter Pyrolysemechanismus (Ranzi-Pyrolyse) eingesetzt wird. Um die entsprechenden freigesetzten Spezies in der Gasphase zu modellieren, ist ein umfangreicher Gasphasen-Verbrennungsmechanismus nötig (POLIMI-BIO), der zu sehr langen Simulationszeiten führen würde. Stattdessen wird ein reduzierter chemischer Reaktionsmechanismus verwendet. Der Nachteil der Reduktion ist es, dass langkettige Spezies (Teere) nicht genau abgebildet werden können, und daher einfachere Verbindungen vorherrschen. Die Annahme war, dass diese schneller zu CO abgebaut werden und oberhalb des Brennstoffbettes zu CO-Konzentrationen führen, die im Vergleich zur Messung erhöht sind. Da eine detaillierte Abbildung von langkettigen Kohlenwasserstoffen (Teere) nicht mit handhabbaren Simulationszeiten vereinbar ist, wurden die Teere zur näherungsweise Berücksichtigung des Einflusses eines verzögerten Teerzerfalls als Pauschalsummenteere berücksichtigt.

5.5.2 Ergebnisse

Mit dem um den Mechanismus zur Beschreibung des Teerzerfalls erweiterten Modell wurden die im Abschnitt 5.4 beschriebenen Simulationen wiederholt. In Abbildung 14 und Abbildung 15 sind die Ergebnisse der Simulationen mit und ohne dem Teermodell jeweils im Vergleich zu den experimentellen Daten hinsichtlich Massenverlust und Betttemperaturen dargestellt.

Durch die Berücksichtigung des Teermodells kommt es aufgrund der langsameren Zerfallsreaktionen zu einer verzögerten Energiefreisetzung, wodurch im Bett niedrigere Temperaturen resultieren. Aufgrund der nun im Bett verringerten Temperaturen verschiebt sich die Massenabbaukurve im Vergleich zur Simulation ohne Teerspezies leicht nach hinten. Im Fall ohne Teermodell zeigt sich am Beginn der Pyrolyse eine leicht höhere Abbaurate als für den Fall mit Teerspezies, wobei sich der Trend am Ende der Hauptpyrolysephase umkehrt. Am Ende der Hauptpyrolysephase bildet sich in der Massenabbaukurve für den Fall mit Teerspezies ein kurzes Plateau (1.600 s) aus, das auch in den Messwerten erkannt werden kann.

Sowohl die mittlere Rauchgastemperatur als auch die Temperatur auf der Brennstoffbettoberfläche und den einzelnen Messfühlern im Bett zeigen für den Fall mit dem Teermodell eine noch bessere Übereinstimmung mit den Messwerten als in der Basissimulation (insbesondere bezüglich der Fühler B1 und B2b).

Generell verbessert die Berücksichtigung der Teere das Modell und soll somit beibehalten werden.

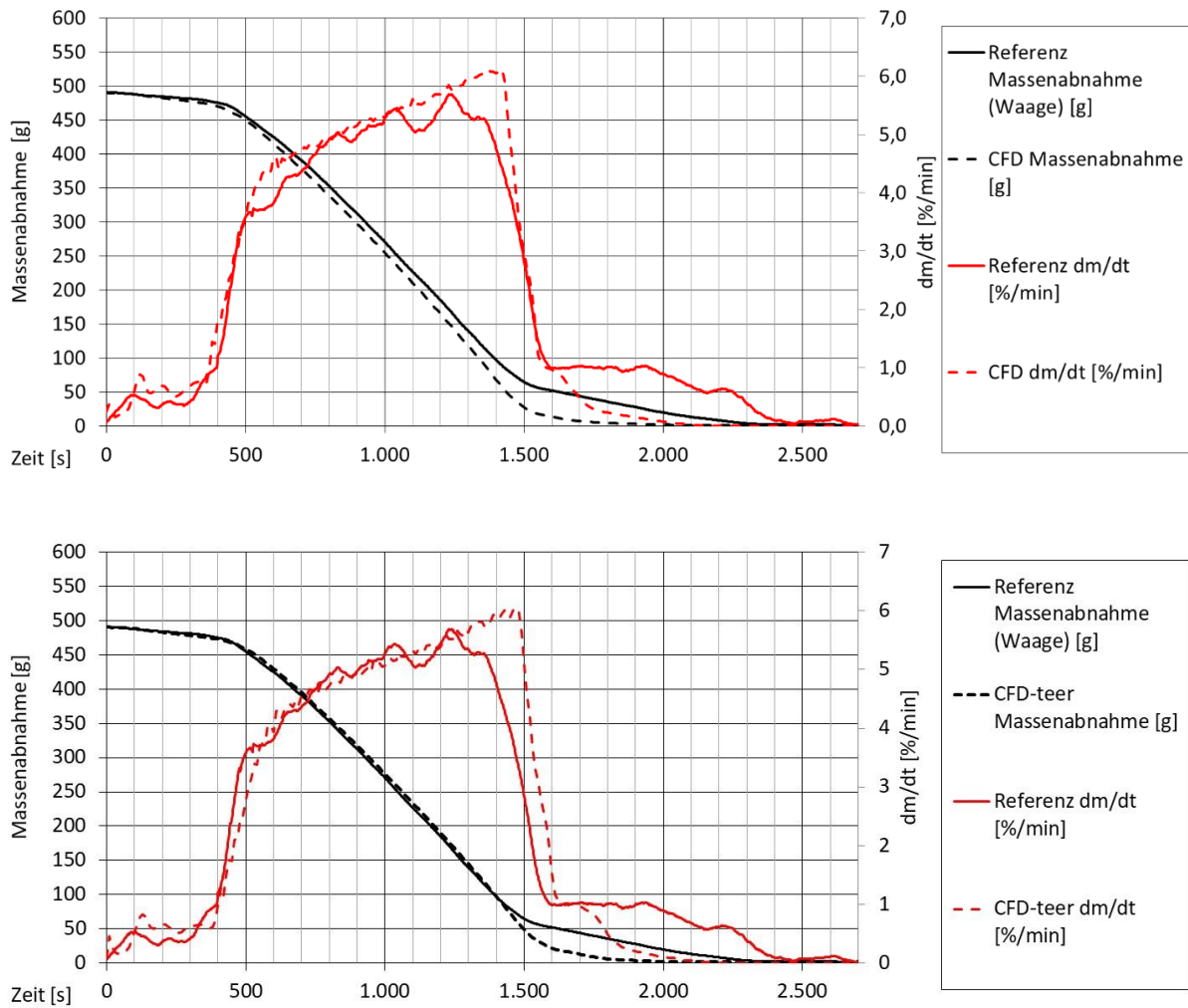


Abbildung 14: Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem weiterentwickelten Modell mit Messdaten aus einem Laborreakortestlauf mit dem marktverfügbaren Pelletsortiment 19 - Masseverlust ohne (oben) und mit (unten) Teermode

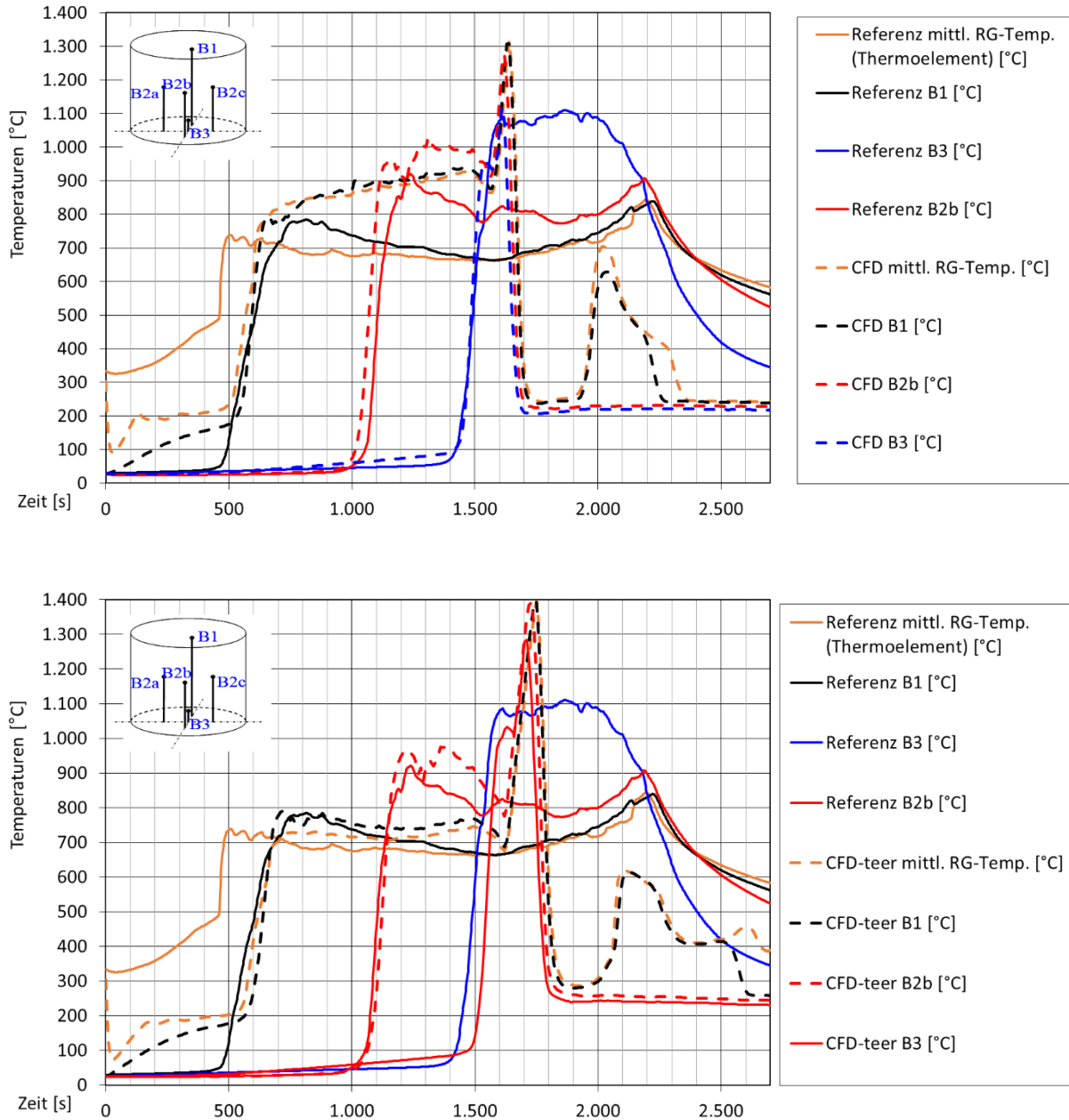


Abbildung 15: Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem weiterentwickelten Modell mit Messdaten aus einem Laborreakortestlauf mit dem marktverfügbaren Pelletsortiment 19 - Temperaturen ohne (oben) und mit (unten) Teermmodell

6 Sensitivitätsstudien

Mit den neu entwickelten Modellen sollten Sensitivitätsstudien bzgl. der Auswirkungen kritischer Brennstoffparameter auf den Verbrennungsprozess durchgeführt werden. Dabei wurden zwei Hauptzielsetzungen verfolgt.

- Simulationsrechnungen und Sensitivitätsstudien mit dem neuen Modell bzgl. des Abbrandverhaltens unterschiedlicher Holzpelletqualitäten zur Ermittlung genereller Trends und zur Untersuchung von Ursachen-Wirkungs-Ketten zwischen den Brennstoffeigenschaften und dem Verbrennungsprozess.
- Auf den Auswertungen der Sensitivitätsstudien aufbauende Ableitung möglicher Gegenmaßnahmen, die zur Minimierung negativer Auswirkungen der identifizierten kritischen Parameter auf den Verbrennungsprozess eingesetzt werden können.

Zur Vorevaluierung einzelner Einflussfaktoren auf den Partikelabbrand wurden in einem ersten Schritt Simulationen mit einem, von BIOS in einem Vorprojekt entwickelten, Einzelpartikelabbrandmodell durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Simulationen sind in Abschnitt 6.1 zusammengefasst.

Aufbauend auf diesen Ergebnissen sowie den Erkenntnissen aus den Abbrandtests (siehe Berichtsteil I) wurden dann Sensitivitätsanalysen mit dem neuen Abbrandmodell für Pelletschüttungen durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Simulationen sind in Abschnitt 6.2 zusammengefasst.

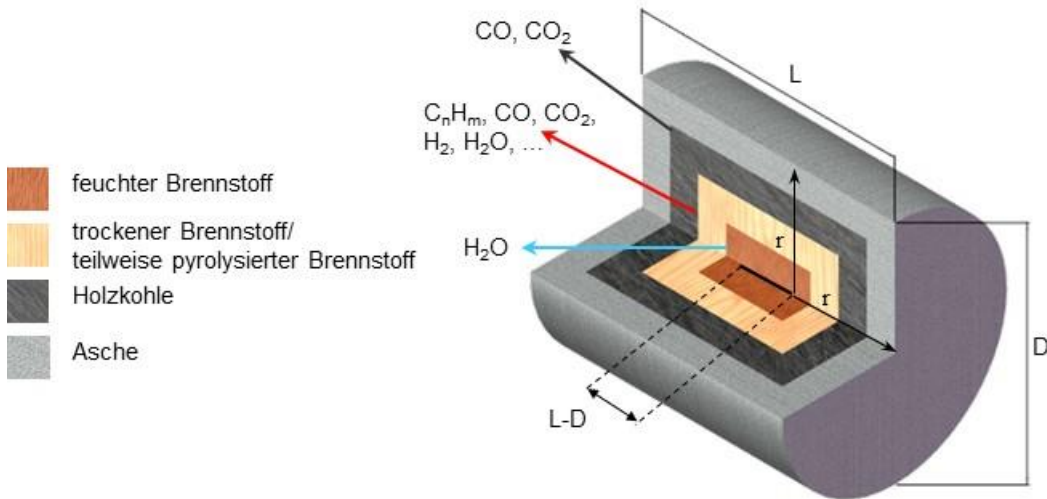
6.1 Ergebnisse von Sensitivitätsstudien mit einem Einzelpartikelabbrandmodell

6.1.1 Kurzbeschreibung des eingesetzten Modells und der Variationsparameter

Die Berechnungen wurden mit einem Berechnungsmodell für die thermische Umsetzung (Trocknung, Pyrolyse, Verbrennung) von einzelnen Biomassepartikeln durchgeführt (Einzelpartikel – Schalenmodell/Layermodell, siehe Abbildung 16). In diesem Modell wird ein Brennstoffteilchen wahlweise als kugelförmiges oder zylinderförmiges Partikel behandelt. Es wird in sechs Schalen (Layer) unterteilt, die jeweils einem Schritt in der Verbrennung entsprechen (feuchter Brennstoff, trockener Brennstoff, teilweise pyrolysiertes Brennstoff, Holzkohle, Asche). Die Grenzflächen zwischen den einzelnen Schalen entsprechen den Reaktionsfronten der ablaufenden Prozesse (Trocknung, Pyrolyse, Holzkohleausbrand/Holzkohlevergasung), die sich während des Abbrandes in Richtung der Mitte des Partikels bewegen.

Ein wesentlicher Vorteil des Modells ist es, dass die verschiedenen Prozesse zeitgleich ablaufen können. Auch werden Gradienten innerhalb des Partikels berücksichtigt, was zu einer besseren Beschreibung des Abbrandverhaltens führt. Es ist somit möglich, das Verhalten einzelner thermisch dicker Partikel realitätsnah zu simulieren.

In der hier verwendeten Version des Modells wurde ein reduzierter detaillierter Mechanismus zur Beschreibung der Pyrolyse nach [2], basierend auf dem Pyrolysemechanismus nach Ranzi [4], verwendet. Nach diesem Mechanismus besteht die (trockene) Biomasse aus Zellulose (CELL), Hemizellulose (HCE) und 3 Arten von Lignin (LIG-C, LIG-H und LIG-O), die sich unabhängig voneinander zersetzen. Die Flüchtigen werden durch 18 chemische Verbindungen repräsentiert, wobei die wichtigsten die Permanentgase und kondensierbare Verbindungen umfassen.



| Verbindungen in jedem Layer: | | | | | |
|--|-------------------|------------------------------|------------------|---|---------|
| Symmetrie-Bedingung in der Partikelmitte | Wasser | Zellulose | HEMA2 | Holzkohle | Asche |
| | Trockene Biomasse | Hemicellulose | LIG-CC | G{CO ₂ } | |
| | | LIG-C | LIG-OH | G{CO} | |
| | | LIG-H | | G{COH ₂ } | |
| | | LIG-O | | G{H ₂ } | |
| Reaktionen: | | | | | |
| | Trocknung | R1 R5 R9 R10 R11 | R8 R12 R13 | Holzkohleverbrennung Holzkohlevergasung mit H ₂ O Holzkohlevergasung mit CO ₂ | |
| | Layer 0 | Layer 1 | Layer 2 | Layer 3 | Layer 4 |

Abbildung 16: Schematische Darstellung des Schalenmodells

Die festen Verbindungen in der Biomasse werden in zwei Schalen (Layer 1 und Layer 2) berücksichtigt. Die flüchtigen Bestandteile der Holzkohle (G{-Spezies) befinden sich im gleichen Layer wie die Holzkohle. Die Pyrolysereaktionen R1 – R13, die Holzkohleverbrennung und Holzkohlevergasung sowie auch die Freisetzung der G{-Spezies (R16 – R19) finden jeweils an den Grenzflächen der einzelnen Layer statt.

Das Layermodell kann wahlweise für detaillierte Berechnungen mit der CFD-Software ANSYS/Fluent gekoppelt werden, oder als Einzelpartikelmodell verwendet werden. Für die

hier präsentierten Untersuchungen wurde der Einzelpartikel-Modus genutzt. Dabei werden für das Partikel definierte Umgebungsbedingungen für die thermische Umsetzung vorgegeben, nämlich eine Umgebungstemperatur von 900 °C (entspricht in etwa der Verbrennungstemperatur im Laborreaktor), die Zusammensetzung des umgebenden Gases (Luft mit 21 vol-% Sauerstoff) sowie die Umströmungsgeschwindigkeit (0,5 m/s, entspricht in etwa einer typischen Strömungsgeschwindigkeit in einem Brennstoffbett).

Es wurden folgende Parameter variiert:

- Pelletlänge: Referenz: 18 mm, Variation 1: 12 mm, Variation 2: 24 mm
- Pelletdichte: Die Dichte (trocken) der Referenzpellets wurde um 10 % erhöht und verringert.
- Wassergehalt: Referenz: 7,8 m-%; Variation 1: 3 m-% FS, 10 m-% FS (diese Streubreite deckt die für A1-Pellets erlaubten Wassergehalte ab)
- Hemicellulose, Zellulose und Ligningehalt; Referenz: Nadelholz, Variation: Laubholz; die Zusammensetzungen entstammen Datenbankwerten von BIOS)

In Tabelle 8 sind die Eckdaten bzgl. der durchgeführten Parametervariationen zusammengefasst. Die variierten Parameter sind dabei farblich hervorgehoben

Tabelle 8: Zusammenfassung der Parametervariationen

| | | Referenz (Nadelholz) | Länge- 12mm | Länge- 24mm | Dichte- Faktor1,1 | Dichte- Faktor0,9 | WG- 10% | WG- 3% | PK Laubholz |
|--------------------|-------------|-------------------------|----------------|----------------|----------------------|----------------------|------------|-----------|-------------|
| Dichte - trocken | [kg/m³] | 1.180 | 1.180 | 1.180 | 1.298 | 1.062 | 1.180 | 1.180 | 1.180 |
| Dichte - Holzkohle | [kg/m³] | 425,0 | 425,0 | 425,0 | 467,5 | 382,5 | 425,0 | 425,0 | 425,0 |
| Länge | [mm] | 18,0 | 12,0 | 24,0 | 18,0 | 18,0 | 18,0 | 18,0 | 18,0 |
| Durchmesser | [mm] | 6,0 | 6,0 | 6,0 | 6,0 | 6,0 | 6,0 | 6,0 | 6,0 |
| Hemizellulose | [m-% TS af] | 26,0 | 26,0 | 26,0 | 26,0 | 26,0 | 26,0 | 26,0 | 34,0 |
| Zellulose | [m-% TS af] | 44,0 | 44,0 | 44,0 | 44,0 | 44,0 | 44,0 | 44,0 | 44,0 |
| Lignin gesamt | [m-% TS af] | 30,0 | 30,0 | 30,0 | 30,0 | 30,0 | 30,0 | 30,0 | 22,0 |
| Lignin-C | [m-% TS af] | 17,5 | 17,5 | 17,5 | 17,5 | 17,5 | 17,5 | 17,5 | 6,0 |
| Lignin-H | [m-% TS af] | 9,5 | 9,5 | 9,5 | 9,5 | 9,5 | 9,5 | 9,5 | 7,0 |
| Lignin-O | [m-% TS af] | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 9,0 |
| Wassergehalt | [m-% FS] | 7,8 | 7,8 | 7,8 | 7,8 | 7,8 | 10,0 | 3,0 | 7,8 |

Erläuterungen: TS ... Trockensubstanz; FS ... Frischsubstanz; af ... aschefrei; PK ... Pseudokomponenten; WG ... Wassergehalt

6.1.2 Ergebnisse der Simulationen

In Abbildung 17 bis Abbildung 20 sind die Auswirkung der einzelnen Parametervariationen auf den Massenabbau zusammengefasst. Es sind jeweils der Massenverlust über die Zeit,

die Ableitung des Massenverlustes über die Zeit und der Massenverlust über die Zeit normiert mit der feuchten Anfangsmasse dargestellt. In Tabelle 9 sind die Auswirkungen der Parametervariationen auf die Abbrandzeiten in absoluten Werten und bezogen auf die feuchte und trockene Anfangsmasse sowie die Abweichungen zum Referenzfall zusammengefasst.

Die absolute Abbrandzeit zeigt dabei bzgl. des Wassergehaltes mit 4,7 % die geringste Variationsbreite im Vergleich zum Referenztest. Die Variationsbreiten steigen über die Variation der Pseudokomponenten Zusammensetzung (9,5 %), und die Pelletdichte (16,4 %) zur Pelletlänge (32,8 %) hin an.

Bezogen auf die feuchte Ausgangsmasse lässt sich ein ähnlicher Trend ablesen. Die Variationsbreiten steigen vom Wassergehalt (2,7 %) über die Variation der Zusammensetzung der Pseudokomponenten (7,6 %) und die Pelletdichte (9,6 %) zur Pelletlänge (117,4 %) hin an. Dasselbe gilt für die Daten bezogen auf die trockene Ausgangsmasse, wobei hier der Wert für die Variationsbreite bei unterschiedlichen Wassergehalten auf 4,7 % ansteigt.

In jeder Betrachtungsweise hat die Variation der Pelletlänge den deutlichsten Einfluss auf die Abbrandzeit. Die Holzkohlenkonversionsrate ist direkt proportional zur Oberfläche. Das alleine würde noch keine Beschleunigung des Massenabbaus bedingen, da die Masse (bzw. das Volumen) stärker steigt als die Oberfläche. Allerdings bedingt die höhere Holzkohlenkonversionsrate höhere Temperaturen und diese beschleunigen die Vergasungsreaktionen, da diese stark temperaturabhängig sind (Arrhenius-Gleichung). Das führt zu einer Beschleunigung des Abbaus. Dieser Trend wird von den Ergebnissen aus den Laborreakortests mit Pellets unterschiedlicher Längenverteilungen bestätigt (siehe Berichtsteil I, Abschnitt 8), die Schüttung scheint den Effekt aber etwas abzupuffern (insbesondere im Holzkohlenausbrandstadium). Dieser Parameter ist insbesondere relevant, da er nicht nur von den produzierten Pellets sondern auch von der Fördertechnik abhängt.

Die Pseudokomponenten-Anteile des Holzes stellen ebenfalls einen wichtigen Einfluss auf den Abbrand dar, insbesondere wenn die Abbrandzeit auf die Masse bezogen wird. Im Rahmen des Projekts ist es daher wichtig, diesen Einfluss genauer zu betrachten, da die Holzart in die momentanen Qualitätskriterien für Pellets nicht eingeht.

Der Einfluss der Pelletdichte wirkt sich naturgemäß bei der Betrachtung der absoluten Abbrandzeit stärker aus als bei den massebezogenen Abbrandzeiten. Es soll hier angemerkt werden, dass die Pelletdichte (bei gleicher Pelletgeometrie) einen direkten Einfluss auf die Schüttdichte der Pellets hat. Im gegebenen Einzelpartikel-Modell kann jedoch der Einfluss der Schüttdichte nicht separat untersucht werden. In den Schüttungstests zeigte sich ebenfalls kaum ein Einfluss (ist massebezogen zu vergleichen), aber eine Tendenz, dass sich bei größerer Pelletdichte ein höheres Kohlebett bildet, was auf die bessere Stabilität der Pellets zurückzuführen sein könnte (dieser Effekt kann bei Einzelpartikelsimulationen nicht bewertet werden).

Den geringsten Einfluss aller untersuchten Parameter hat der Wassergehalt (auch deshalb, da die definierte erlaubte Schwankungsbreite gering ist).

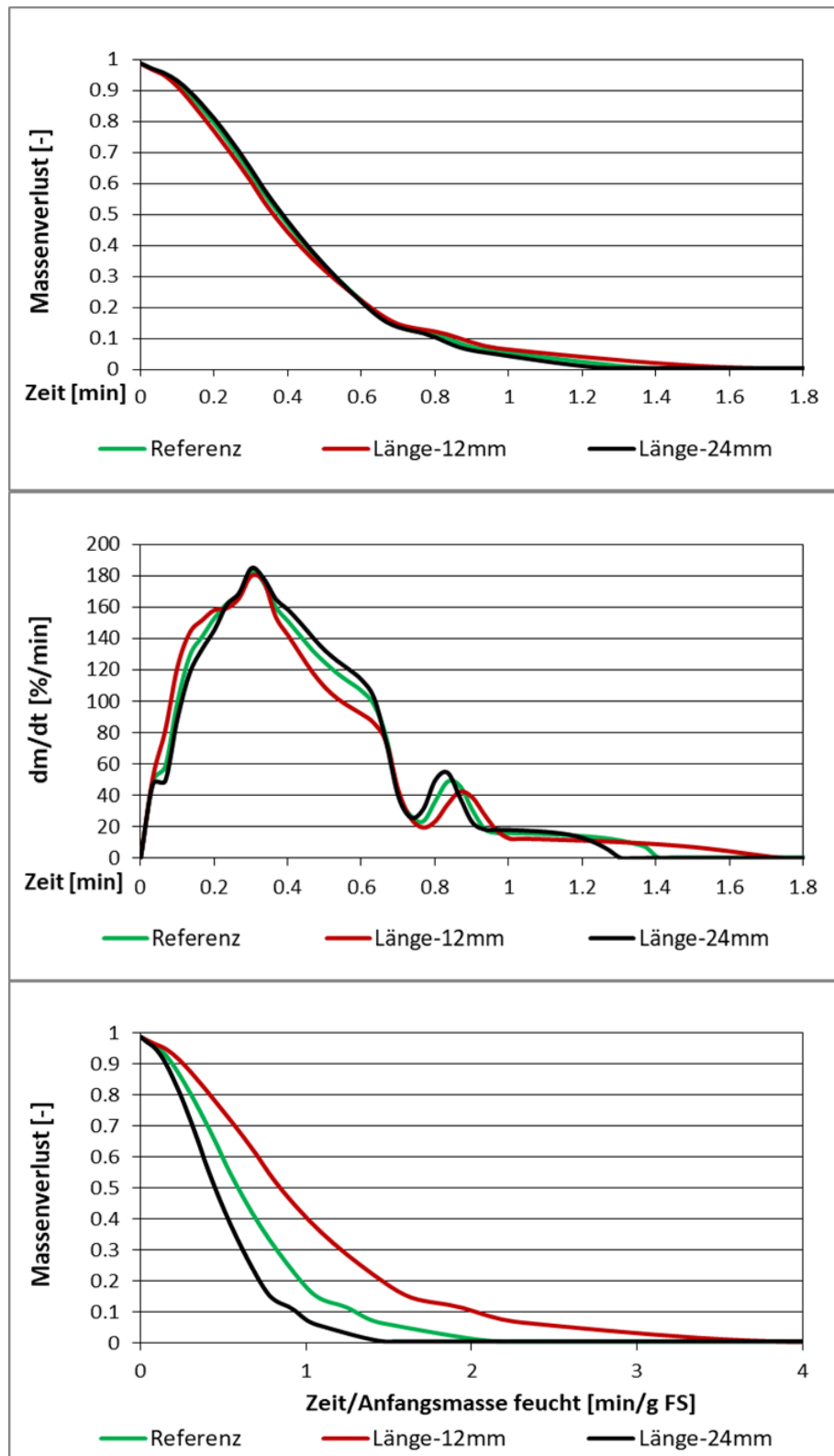


Abbildung 17: Massenverlust über die Zeit bei unterschiedlichen Pelletlängen

Erläuterungen: oben: aktuelle Masse (feucht)/Anfangsmasse (feucht) (oben)

Mitte: dm/dt in % der Anfangsmasse (feucht)/min

unten: aktuelle Masse (feucht)/Anfangsmasse (feucht) über die Zeit bezogen auf die feuchte Anfangsmasse

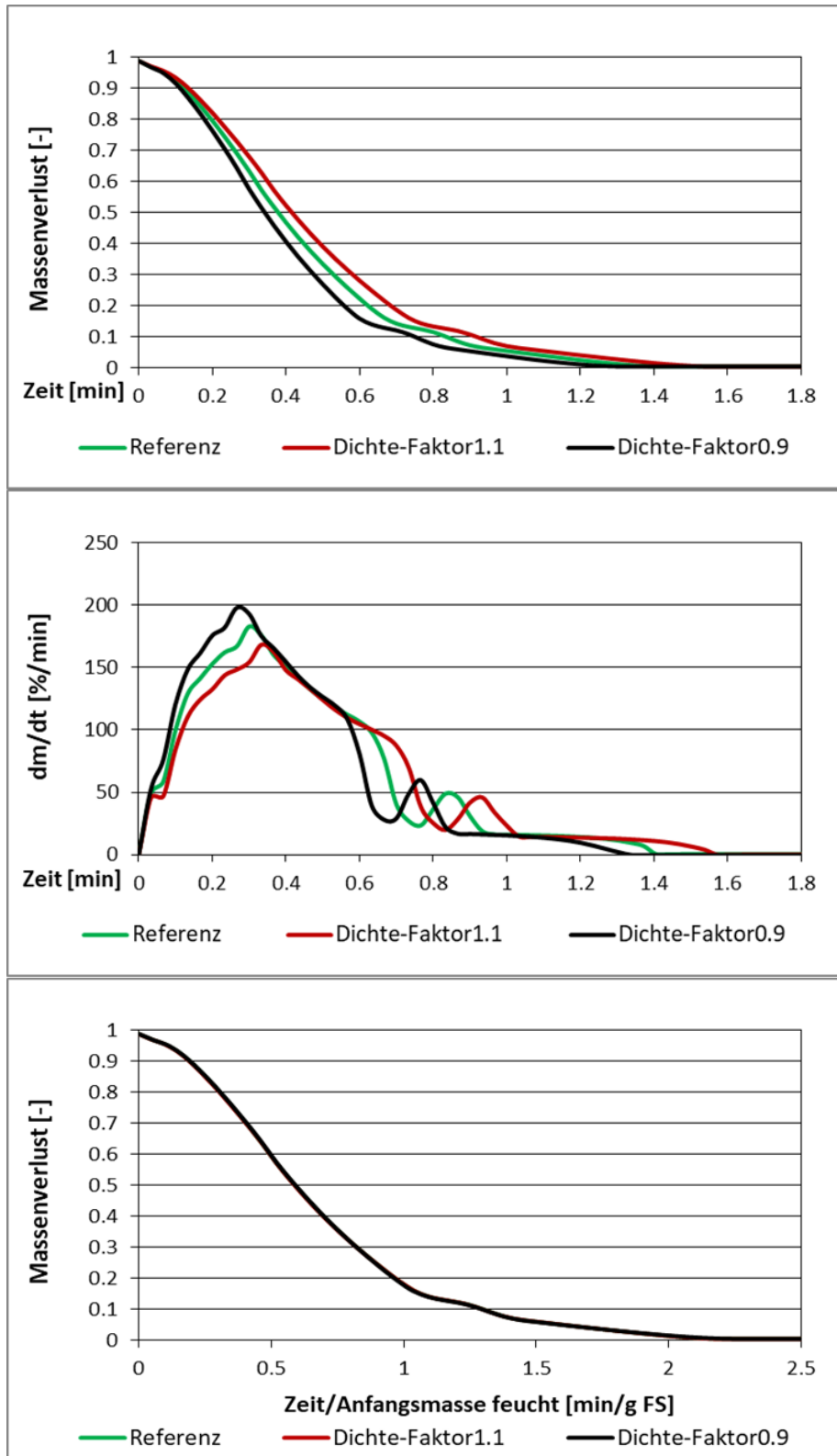


Abbildung 18: Massenverlust über die Zeit bei unterschiedlichen Pelletdichten

Erläuterungen: oben: aktuelle Masse (feucht)/Anfangsmasse (feucht) (oben)

Mitte: dm/dt in % der Anfangsmasse (feucht)/min

unten: aktuelle Masse (feucht)/Anfangsmasse (feucht) über die Zeit bezogen auf die feuchte Anfangsmasse

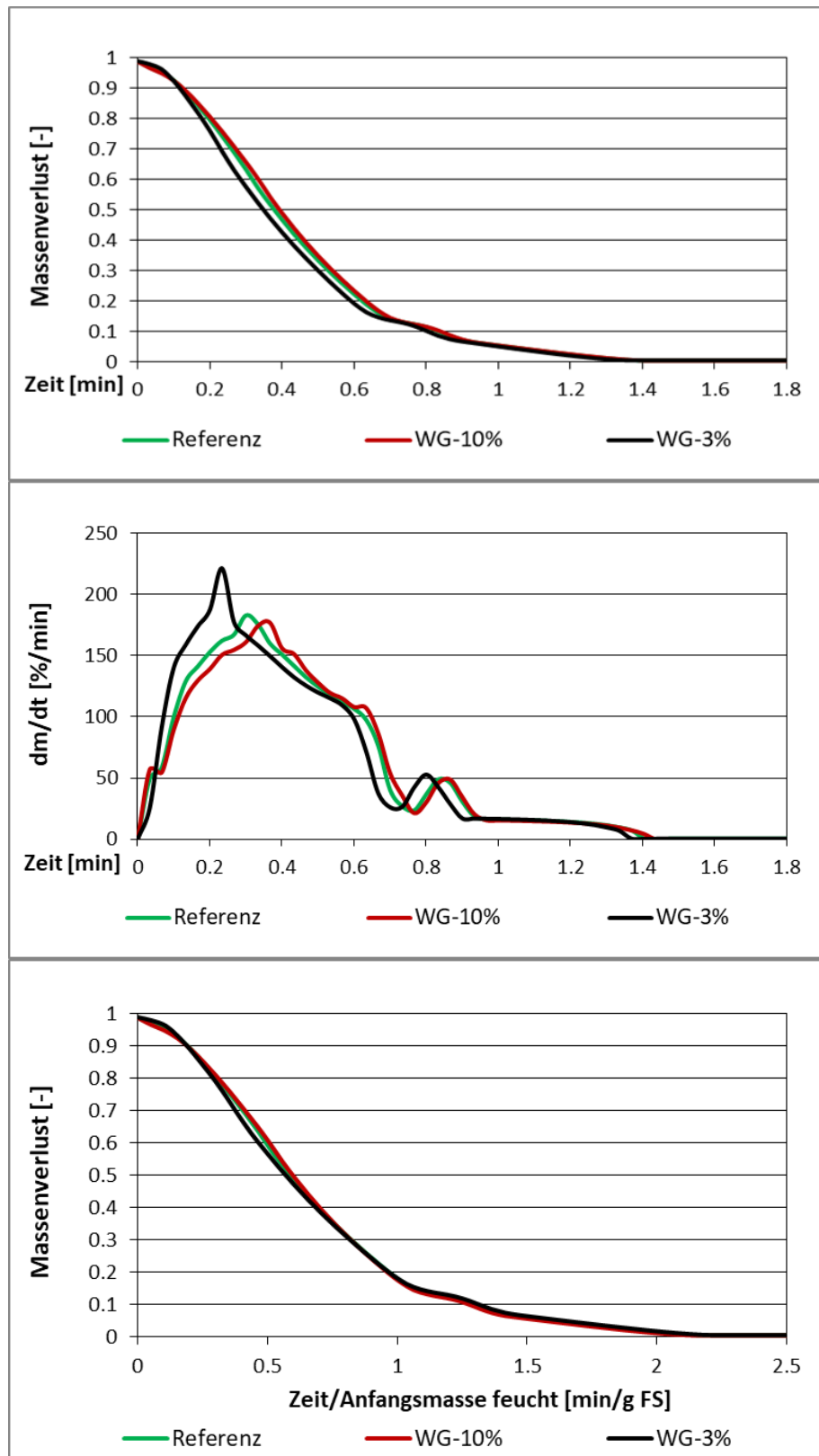


Abbildung 19: Massenverlust über die Zeit bei unterschiedlichen Wassergehalten

Erläuterungen: oben: aktuelle Masse (feucht)/Anfangsmasse (feucht) (oben)

Mitte: dm/dt in % der Anfangsmasse (feucht)/min

unten: aktuelle Masse (feucht)/Anfangsmasse (feucht) über die Zeit bezogen auf die feuchte Anfangsmasse

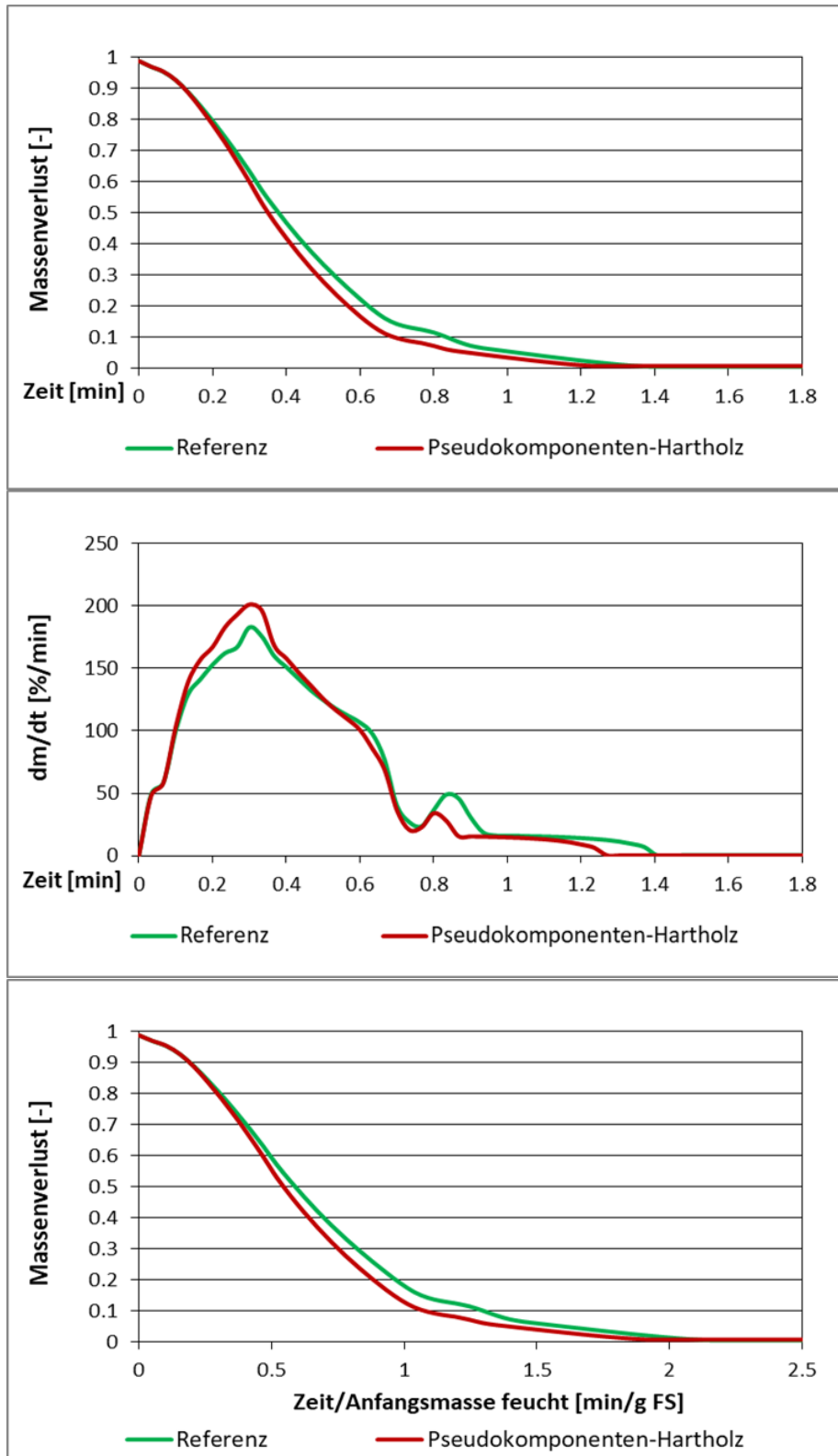


Abbildung 20: Massenverlust über die Zeit bei unterschiedlichen Zusammensetzungen der Pseudokomponenten

Erläuterungen: oben: aktuelle Masse (feucht)/Anfangsmasse (feucht) (oben)

Mitte: dm/dt in % der Anfangsmasse (feucht)/min

unten: aktuelle Masse (feucht)/Anfangsmasse (feucht) über die Zeit bezogen auf die feuchte Anfangsmasse

Tabelle 9: Zusammenfassung der Simulationsergebnisse bzgl. der Abbrandzeiten bei den Parametervariationen

| | absolut | | bez. auf Anfangsmasse feucht | | bez. auf Anfangsmasse trocken | |
|------------------------------|---------|--------------------------|---------------------------------|--------------------------|----------------------------------|--------------------------|
| | [min] | Abw. von Referenz [%] | [min/g FS] | Abw. von Referenz [%] | [min/g TS] | Abw. von Referenz [%] |
| Referenz (Nadelholz) | 1,41 | 0,0 | 2,19 | 0,0 | 2,37 | 0,0 |
| Länge-12mm | 1,75 | 24,5 | 4,09 | 86,9 | 4,43 | 86,9 |
| Länge-24mm | 1,30 | -7,3 | 1,52 | -30,5 | 1,65 | -30,5 |
| Dichte-Faktor 1,1 | 1,57 | 11,8 | 2,22 | 1,7 | 2,41 | 1,7 |
| Dichte-Faktor 0,9 | 1,34 | -4,6 | 2,32 | 5,9 | 2,51 | 5,9 |
| Wassergehalt 10% | 1,44 | 2,2 | 2,18 | -0,2 | 2,42 | 2,2 |
| Wassergehalt 3% | 1,37 | -2,5 | 2,24 | 2,5 | 2,31 | -2,5 |
| Pseudokomponenten - Laubholz | 1,27 | -9,6 | 1,98 | -9,6 | 2,14 | -9,6 |

6.1.3 Aus den Simulationsergebnissen abgeleitete Empfehlungen

Aus den Einzelpartikelsimulationen ergaben sich die folgenden Empfehlungen:

Die Holzart hat Einfluss auf den Pelletabbrand. Daher sollte im Rahmen des weiteren Verlauf des Projektes Wert auf die Untersuchung von Pellets aus unterschiedlichen Hölzern gelegt werden, was dann auch in Form von Laborreakortests und Testläufen am Pelletofen 2 in Form von Testläufen mit Pelletsortimenten aus unterschiedlichen Holzarten umgesetzt wurde (siehe Berichtsteil I). Eine entsprechende Spezifikation könnte auch in zukünftige Normen bzgl. der Pelletqualität eingehen.

Die Pelletlänge scheint einen relevanten Einfluss auf die Abbrandzeit zu haben. Dieser Parameter hat auch Einfluss auf die Schüttdichte des Bettes, welche nur mit dem neuen Abbrandmodell bewertet werden kann. Es ist daher relevant, diesbezügliche Sensitivitätsanalysen durchzuführen. Des Weiteren ist zu beachten, dass die Fördertechnik die Pelletlänge ebenfalls beeinflussen kann.

6.2 Ergebnisse von Sensitivitätsstudien mit dem im Projekt entwickelten Abbrandmodell für Pelletschüttungen

Nach erfolgter Validierung des neuen Bettabbrandmodells (siehe Abschnitt 5) wurden umfangreiche Modellrechnungen zur Evaluierung des Einflusses verschiedener Einflussparameter auf den Pelletbettabbrand mit diesem Modell durchgeführt. Derartige CFD-gestützte Sensitivitätsstudien haben gegenüber experimentellen Ansätzen den großen Vorteil, dass gezielt einzelne Parameter variiert werden können während die restlichen konstant gehalten werden, was bei experimentellen Untersuchungen meist nur im eingeschränkten Ausmaß möglich ist. Außerdem nehmen die Simulationen deutlich weniger

Zeit in Anspruch als ein vergleichbares Testlaufprogramm. Außerdem können durch die Visualisierung der Ergebnisse sehr tiefe Einblicke in die ablaufenden Prozesse gewonnen werden, was die Interpretation der Ergebnisse deutlich erleichtert.

Neben der Evaluierung der Einflüsse unterschiedlicher Parameter auf das Abbrandverhalten sollten aus diesen Sensitivitätsstudien in Kombination mit den Ergebnissen der durchgeführten Testläufe auch mögliche Gegenmaßnahmen erarbeitet/abgeleitet werden, die zur Minimierung negativer Auswirkungen der identifizierten kritischen Parameter auf den Verbrennungsprozess eingesetzt werden können.

6.2.1 Rahmenbedingungen und Anfangsbedingungen für die Simulationen

Die Sensitivitätsanalyse erfolgte auf Basis der Rahmenbedingungen und der Geometrie des Laborreaktors (siehe Abschnitt 5.2.1). Die Randbedingungen, wie Luftmengen (30,2 NI/min) und Heizleistungen / Temperaturen (650 °C bzw. 450 °C am oberen und unteren Heizelement) sind für alle Simulationen identisch. Für alle Simulationen wurde der Probenbehälter am Simulationsbeginn als komplett gefüllt angenommen. Durch die unterschiedlichen Schüttdichten ergeben sich damit leicht unterschiedliche Brennstoffmengen.

Zum Vergleich der Simulationsresultate wurden die Massenabbaukurven, relevante Temperaturen im Brennstoffbett, sowie die wichtigsten Spezieskonzentrationen ausgewertet und in Bezug zueinander gestellt. Als Vergleichsbasis mit den CFD-Ergebnissen der Sensitivitätsanalyse diente die Simulation basierend auf dem Brennstoff Fichtenpellets mit einer durchschnittlichen Pelletlänge von 13,4 mm (Details dazu siehe auch Abschnitt 5.4).

Als Anfangsbedingungen wurden die Gastemperaturen unter Rost, im Brennstoffbett, sowie Temperatur der Schüttung mit 24 °C festgelegt und die Materialtemperatur des Probenhalters mit 24 °C. Die Temperaturen im übrigen Simulationsgebiet berechnen sich aus dem thermischen Gleichgewicht mit den Heizelementen bei konstanter Gasströmung

Die Pyrolysegaszusammensetzungen der unterschiedlichen Brennstoffe basieren auf Basis einer Modellrechnung mit einem Einzelpartikelmodell, wofür ein detaillierter Pyrolysemechanismus (Ranzi-Pyrolyse) eingesetzt wurde. Dabei wurden die Umströmung eines Einzelpartikels mit Stickstoff bei einer Geschwindigkeit von 0,5 m/s und eine Gastemperatur der umströmenden Gasphase von 600 °C als Randbedingungen gewählt. Außerdem wurden die Brennstoffeigenschaften wie Elementarzusammensetzungen, Dichten, Wärmeleitfähigkeiten, Porosität berücksichtigt. Um die entsprechenden freigesetzten Spezies in der Gasphase zu modellieren, wäre ein umfangreicher Gasphasen-Verbrennungsmechanismus nötig (POLIMI-BIO), der zu sehr langen Simulationszeiten führen würde. Stattdessen wird ein reduzierter chemischer Reaktionsmechanismus verwendet. Ein gewisser Nachteil der Reduktion ist es, dass langkettige Spezies (Teere) nicht genau abgebildet werden können, und daher einfachere Kohlenwasserstoffverbindungen vorherrschen.

Da eine detaillierte Abbildung von langkettigen Kohlenwasserstoffen (Teere) nicht mit handhabbaren Simulationszeiten vereinbar ist, wurden die Teere zur näherungsweisen

Berücksichtigung des Einflusses eines verzögerten Teerzerfalls als Pauschalsummentee berücksichtigt (siehe auch Abschnitt 5.5.1).

Folgende Parameter wurden für die Sensitivitätsstudien mit dem neuen Abbrandmodell ausgewählt (siehe auch Tabelle 10):

- Pelletlänge / Schüttdichte: Der Einfluss dreier Pellettlängen mit drei unterschiedlichen Schüttdichten wurde auf Basis des Brennstoffs Fichte untersucht.
- Holzart: Bewertung des Abbrandverhaltens von Buchen- und Fichtenpellets gleicher Abmessungen und Wassergehalte
- Aschegehalt: Bewertung des Einflusses eines schwankenden Aschegehalts auf den Abbrandvorgang (3 Varianten)
- Dichte der Holzkohle: Einfluss der Holzkohledichte auf den Abbrand (3 Varianten)

Tabelle 10: Zusammenfassung der Parametervariationen

| | Pelletlänge [mm] | Pelletdurchmesser [mm] | Schüttdichte [kg/m ³] | Dichte Holzkohle [kg/m ³] | Aschegehalt [m-% TS] |
|--|---------------------|---------------------------|--------------------------------------|--|-------------------------|
| Variation Pelletlänge | | | | | |
| Marktverfügbare Pellets (Sortiment 19) | 14,3 | 6,2 | 643,2 | 550 | 0,37 |
| Fichte-Basis | 13,4 | 6,1 | 696,6 | 550 | 0,38 |
| Variation 1 | 17,6 | 6,1 | 681,3 | 550 | 0,38 |
| Variation 2 | 20,6 | 6,1 | 662,6 | 550 | 0,38 |
| Variation Holzart | | | | | |
| Buchenpellets | 13,4 | 6,1 | 696,6 | 550 | 0,61 |
| Variation Aschegehalt | | | | | |
| Variation 1 | 13,4 | 6,1 | 696,6 | 550 | 0,30 |
| Variation 2 | 13,4 | 6,1 | 696,6 | 550 | 0,70 |
| Variation Dichte Holzkohle | | | | | |
| Variation 1 | 13,4 | 6,1 | 696,6 | 660 | 0,38 |
| Variation 2 | 13,4 | 6,1 | 696,6 | 440 | 0,38 |

Erläuterungen: TS ... Trockensubstanz

6.2.2 Ergebnisse der Simulationen

6.2.2.1 Vergleich verschiedener Nadelholzpelletsortimente

In einem ersten Fall wurden die Auswirkungen des Einsatzes zweier unterschiedlicher Nadelholzpelletsortimente (marktverfügbares Sortiment 19 (PS 19), siehe Berichtsteil I, Tabelle 3, und Fichte-Basissimulationsfall) untersucht. In Abbildung 21 sind die Simulationsergebnisse bzgl. wesentlicher Prozessgrößen über den Bettabbrand dargestellt.

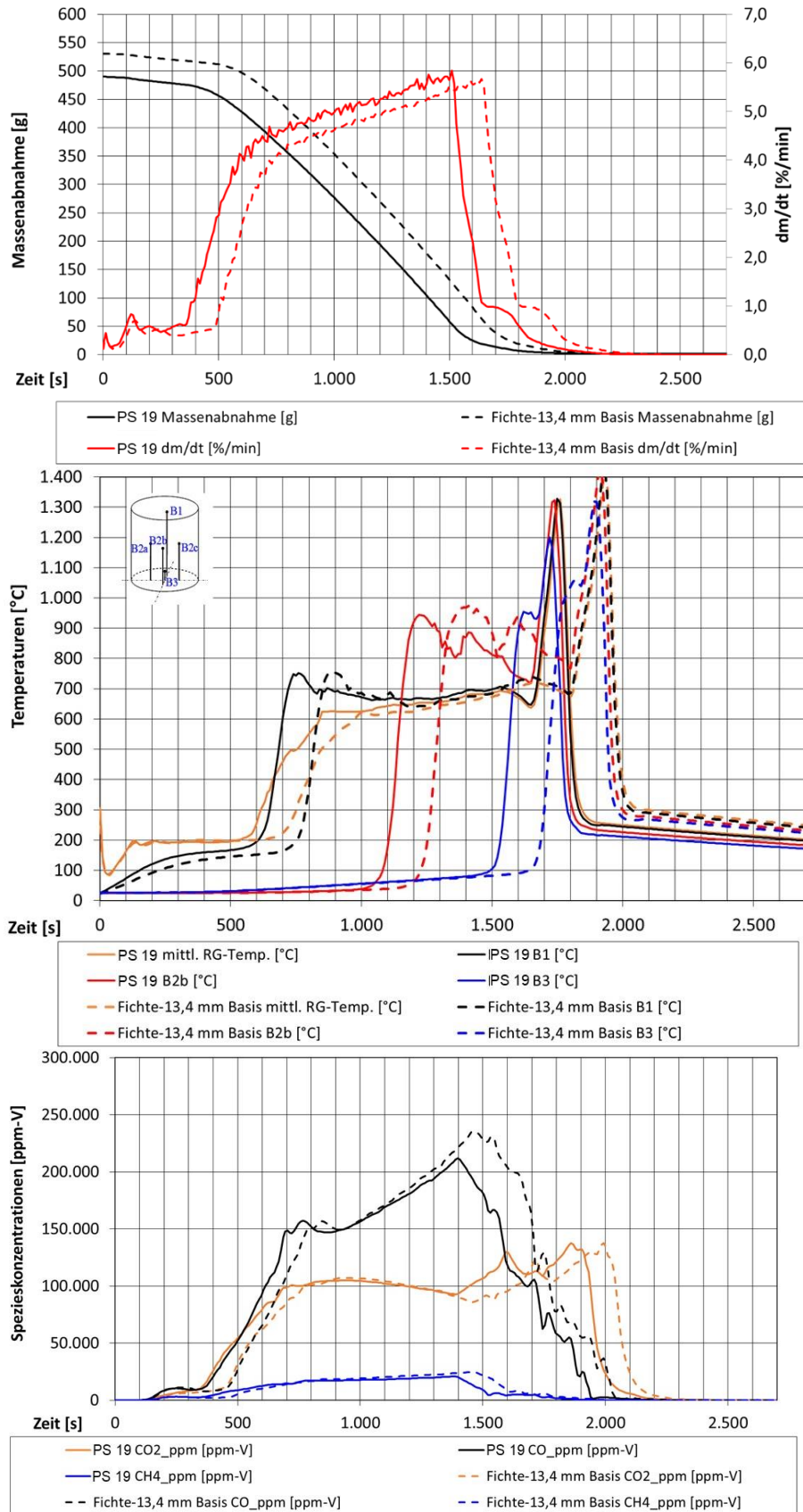


Abbildung 21: Simulationsergebnisse für wesentliche Prozessgrößen des Bettabbrandes bei Einsatz von zwei unterschiedliche Nadelholzpelletsortimenten

In Abbildung 22 bis Abbildung 24 sind wesentliche Bettcharakteristika für Simulationszeiten von 800 s, 1.000 s, 1.400 s und 2.000 s dargestellt. Wo verfügbar, sind Ergebnisse der

Laborreaktortests mit diesen Sortimenten hinsichtlich der Zonen mit verkohlten, teilverkohlten und unreaktierten Pellets in den Grafiken vermerkt (schwarze Linien im Brennstoffbett).

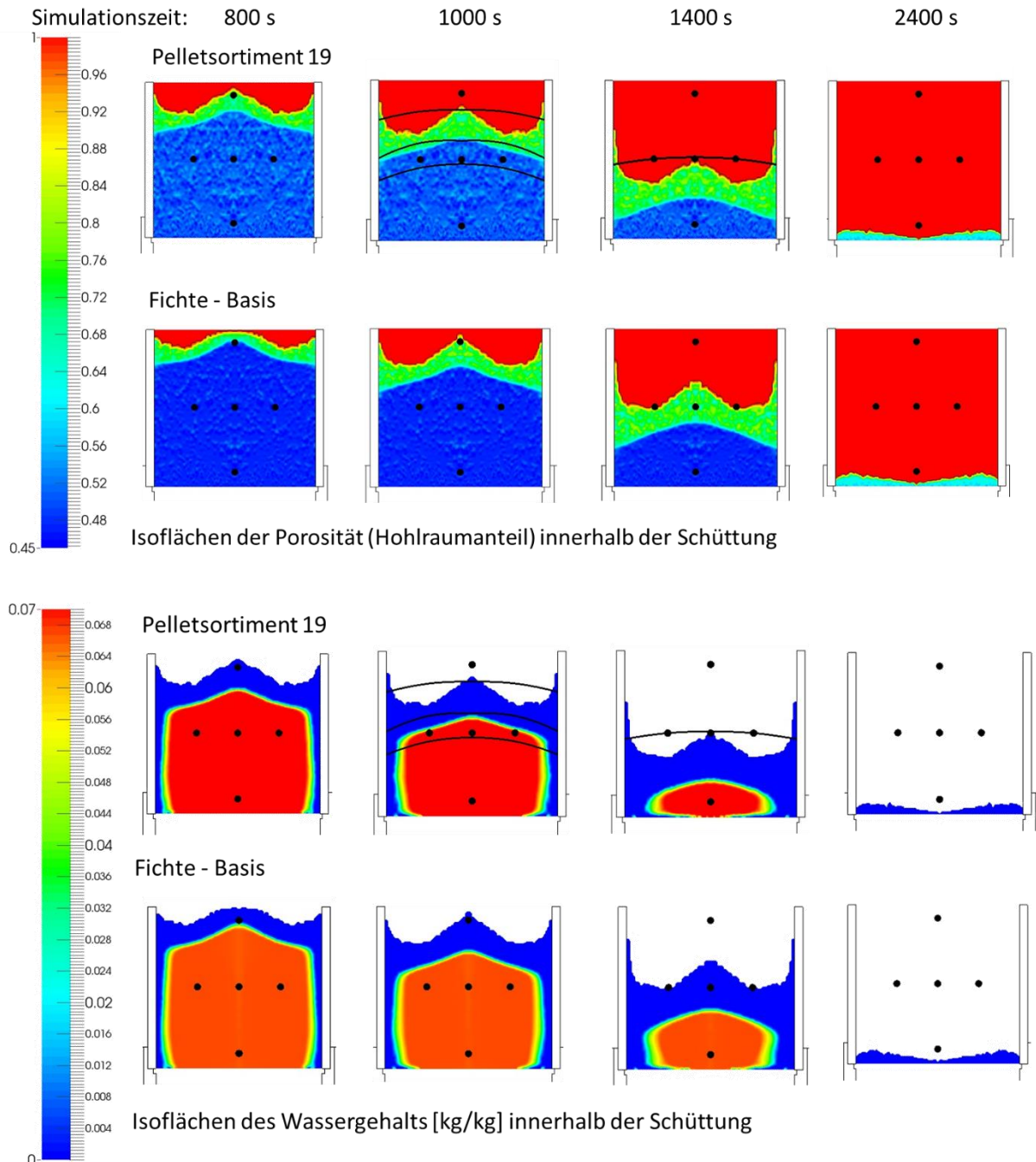


Abbildung 22: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von zwei unterschiedliche Nadelholzpelletsortimenten nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Porosität und Wassergehalt

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

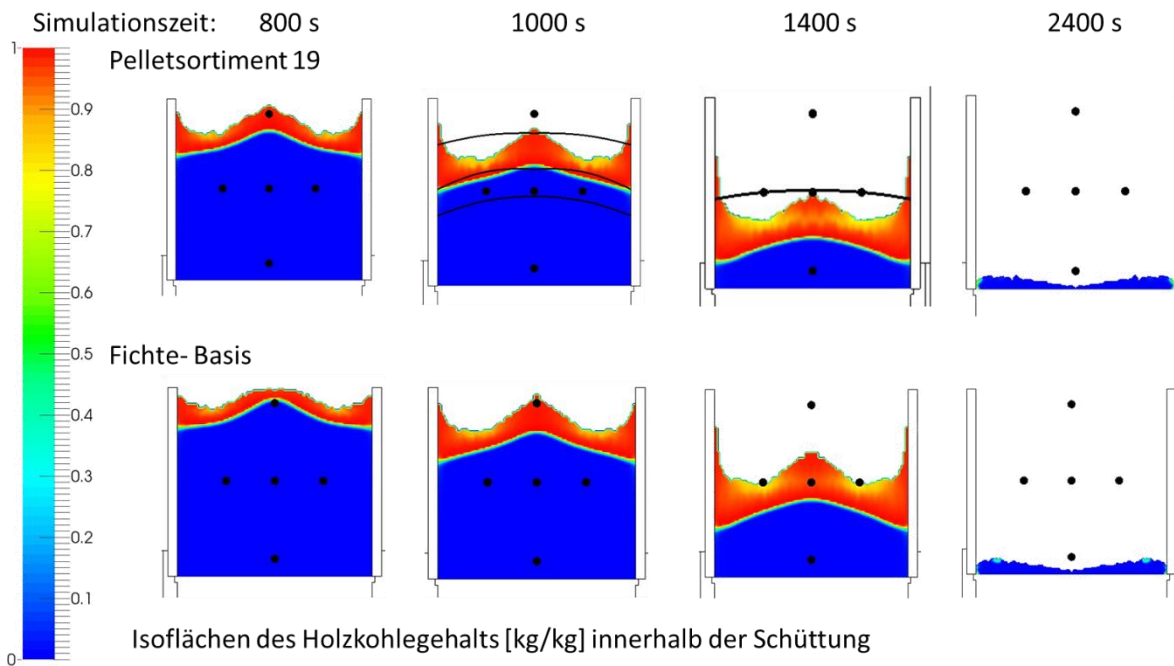
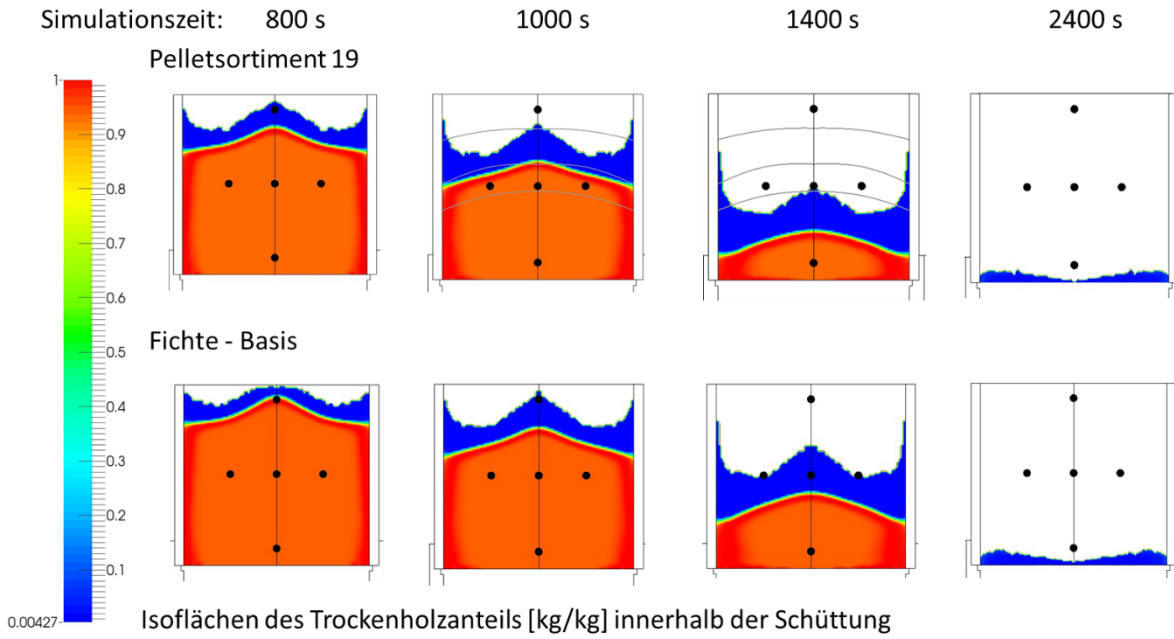


Abbildung 23: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von zwei unterschiedliche Nadelholzpelletsortimenten nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Anteil an trockenem Holz und Holzkohlegehalt

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermolemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

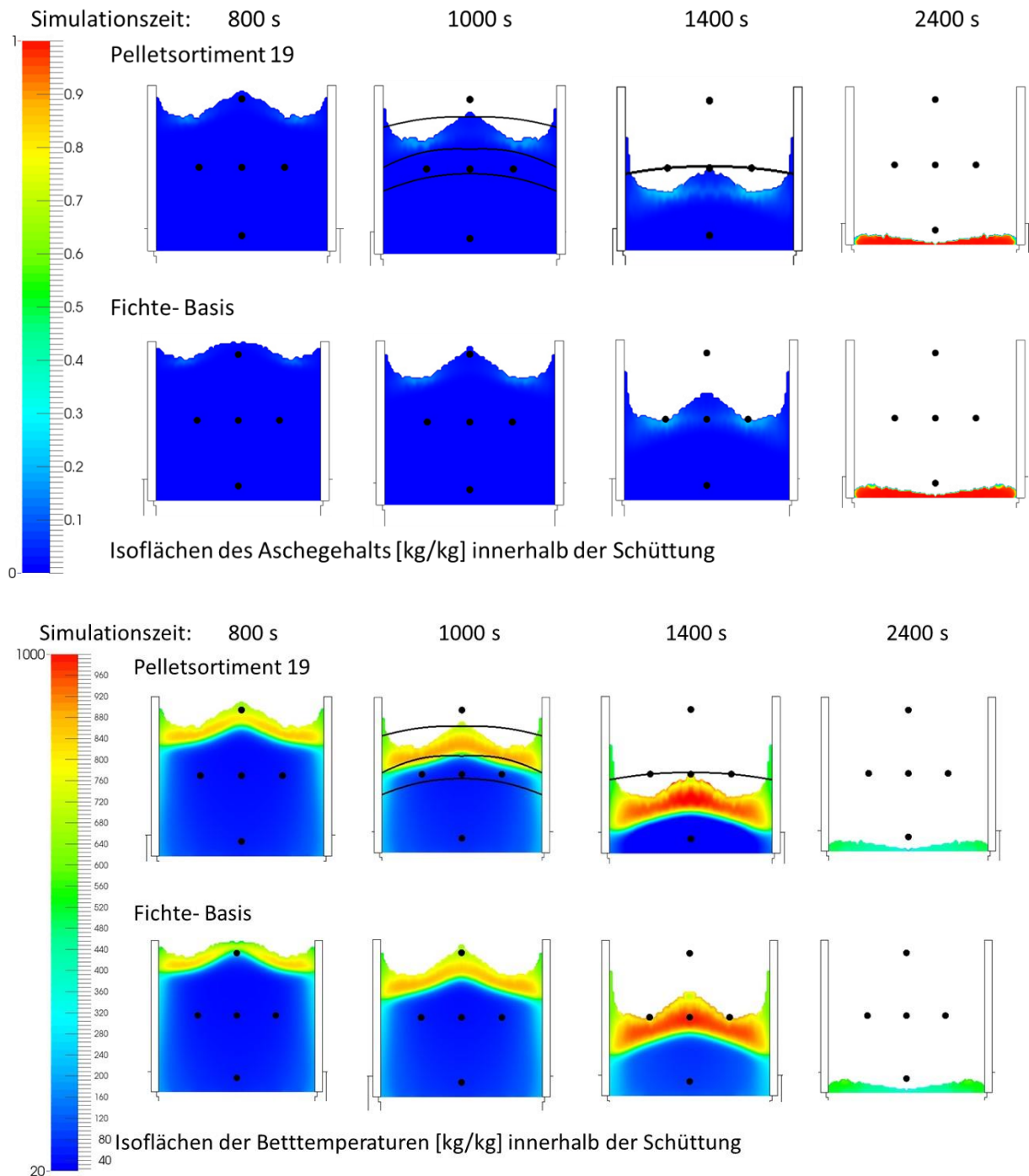


Abbildung 24: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von zwei unterschiedliche Nadelholzpelletsortimenten nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Aschegehalt und Bettemperaturen

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

Die untersuchten Brennstoffe weisen eine relativ stark abweichende Schüttdichte auf (Sortiment 19: 643 kg/m^3 und Fichte-Basis: 697 kg/m^3), wodurch die Füllmenge im Probenbehälter für das Sortiment 19 mit $0,49 \text{ kg}$ um ca. 8 % geringer ist als für den Fichte-Basisfall ($0,53 \text{ kg}$). Trotz des etwas höheren Wassergehalts von Sortiment 19 (7,3 m-% FS; Fichte-

Basis: 6,3 m-% FS) sind die Anfangszeitpunkte der Flüchtigenfreisetzung für beide Brennstoffe nahezu identisch. Hauptsächlich aufgrund der geringeren Probenmenge verkürzen sich die Hauptpyrolysephase für Pelletsortiment 19 um ca. 9 % und der Abbrand um 6 %.

Die bildlichen Auswertungen zeigen, dass das porösere Brennstoffbett für Pelletsortiment 19 schneller in sich zusammensackt. Die Auswertung der Zündzeitpunkte (siehe Abbildung 21) zeigt an allen Messpositionen eine Verzögerung der Zündung um ca. 150 s für den Brennstoff Fichte-Basis. Die Prozesse der Trocknung, Pyrolyse und des Holzkohlenausbrands laufen bei geringeren Schüttdichten schneller ab (siehe Abbildung 22 und Abbildung 23).

Aufgrund der schnelleren Bettverdichtung für Pelletsortiment 19 treten die Messfühler rascher aus dem Brennstoffbett aus, was durch das Annähern der gemessenen Gastemperatur über dem Bett an die Temperatur des jeweiligen Messfühlers erkennbar ist (siehe Simulationszeit 1.400 s in Abbildung 24 und Temperaturverläufe in Abbildung 21).

Die für die Simulation „Fichte-Basis“ um ca. 100 °C höheren Spitzentemperaturen an den Messpositionen zum Zeitpunkt des Holzkohlenausbrands (2.000 s) resultieren einerseits aus dem geringeren Abstand der zum Teil bereits aus dem Brennstoffbett ausgetretenen Messfühler zum Brennstoffbett (da Bett weniger zusammengesackt) und andererseits aus der höheren Energiefreisetzung des Holzkohlenausbrands aufgrund der anfangs höheren Brennstoffmenge und damit höheren Holzkohlenmenge (höhere Freisetzung zum Zeitpunkt des Holzkohlenausbrands siehe Abbildung 23).

6.2.2.2 Variation der Pelletlänge

Die Pelletlänge wurde ausgehend vom Fichte-Basisfall in zwei Variationsrechnungen geändert (siehe Tabelle 10). In Abbildung 25 sind die Simulationsergebnisse bzgl. wesentlicher Prozessgrößen über den Bettabbrand dargestellt.

Abbildung 26 bis Abbildung 28 zeigen wesentliche Bettcharakteristika für Simulationszeiten von 800 s, 1.000 s, 1.400 s und 2.000 s. Wo verfügbar, sind Ergebnisse der Laborreaktortests mit diesen Sortimenten hinsichtlich der Zonen mit verkohlten, teilverkohlten und unreaktierten Pellets in den Grafiken vermerkt (schwarze Linien im Brennstoffbett).

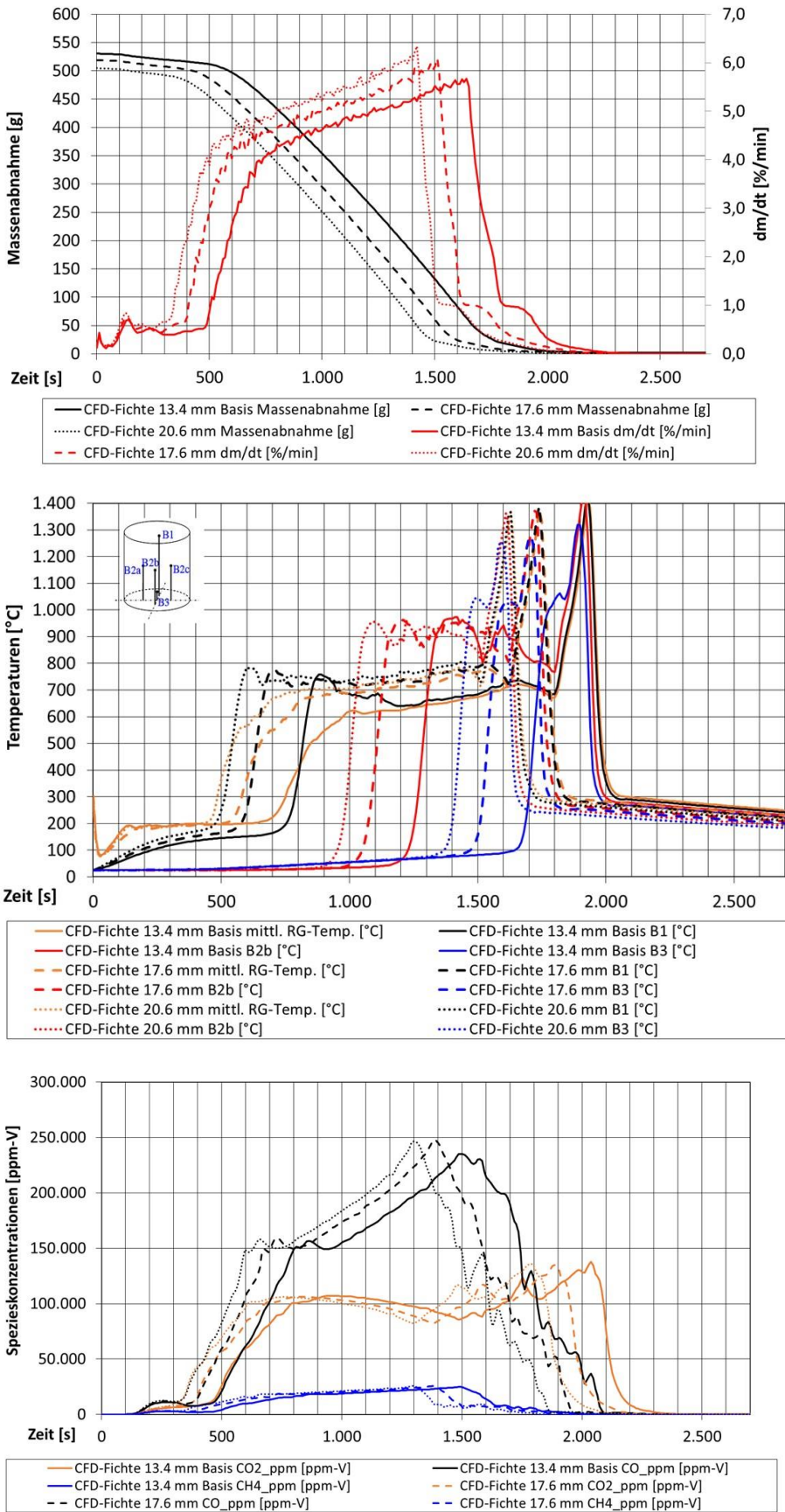


Abbildung 25: Simulationsergebnisse für wesentliche Prozessgrößen des Bettabbrandes bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Längen

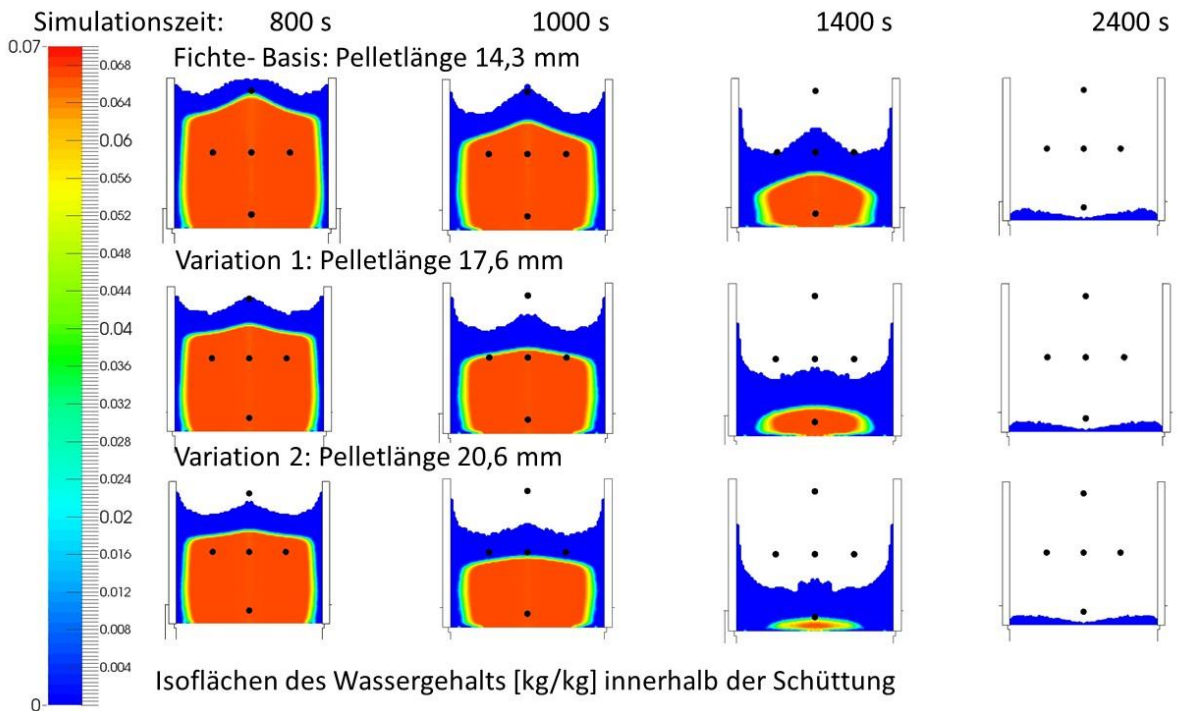
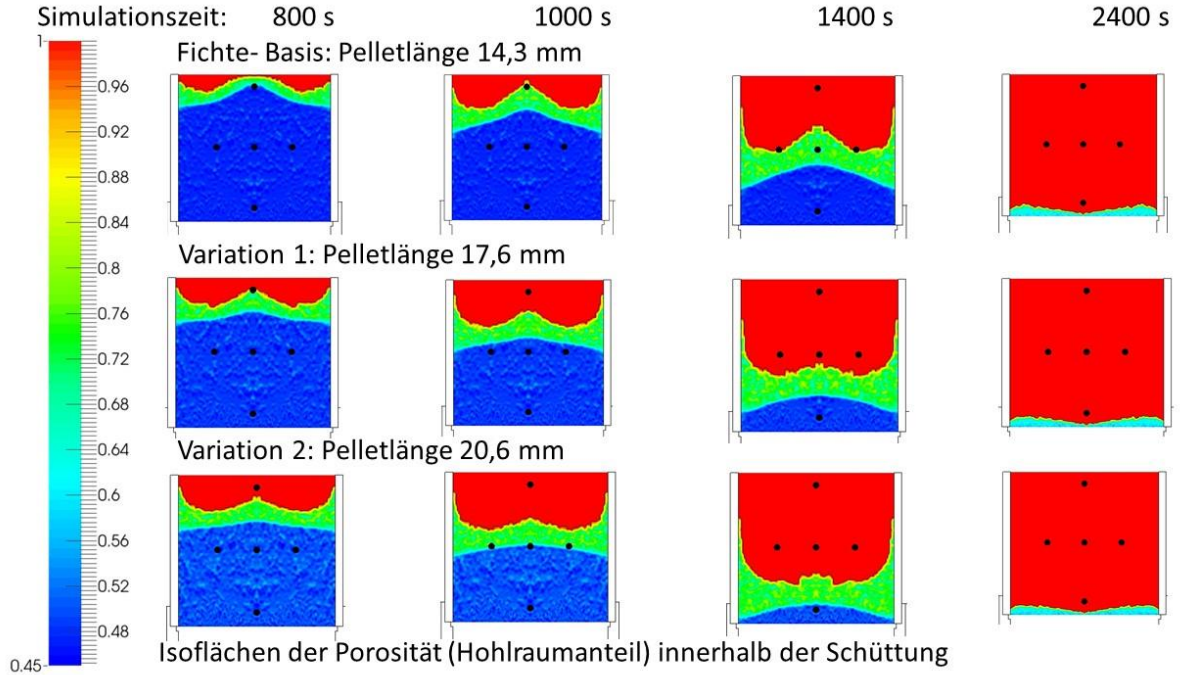


Abbildung 26: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Längen nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Porosität und Wassergehalt

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

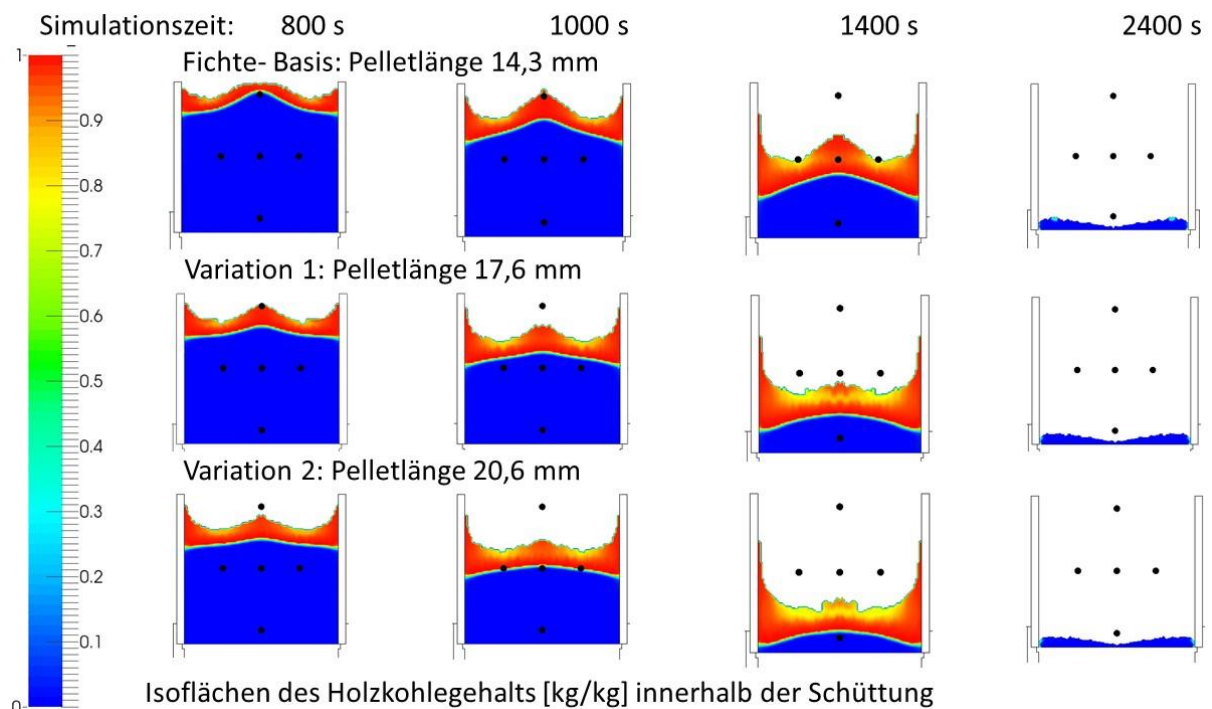
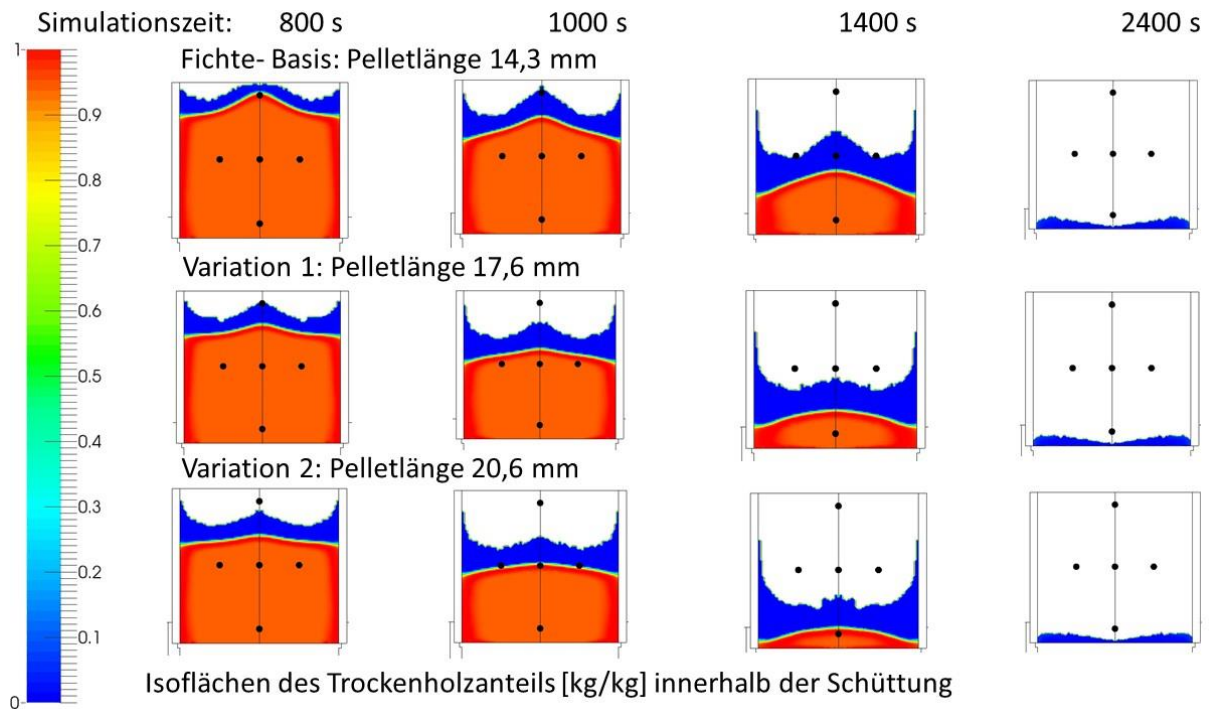


Abbildung 27: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Längen nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Anteil an trockenem Holz und Holzkohlegehalt

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

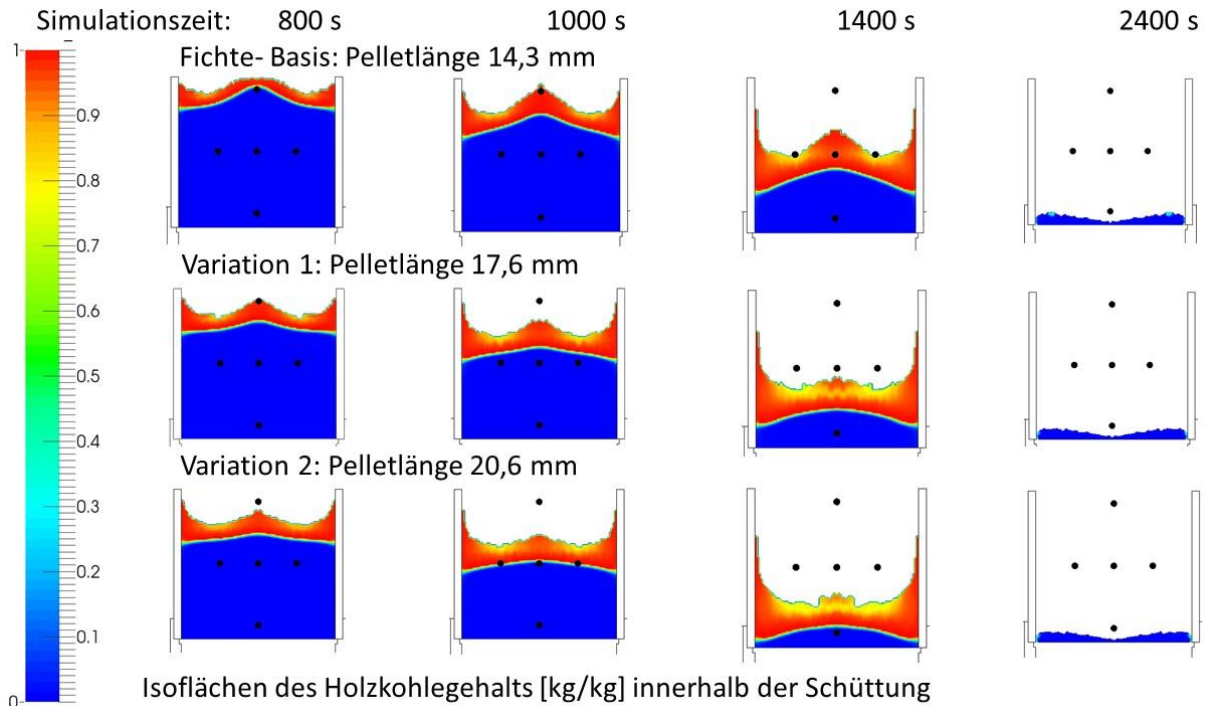
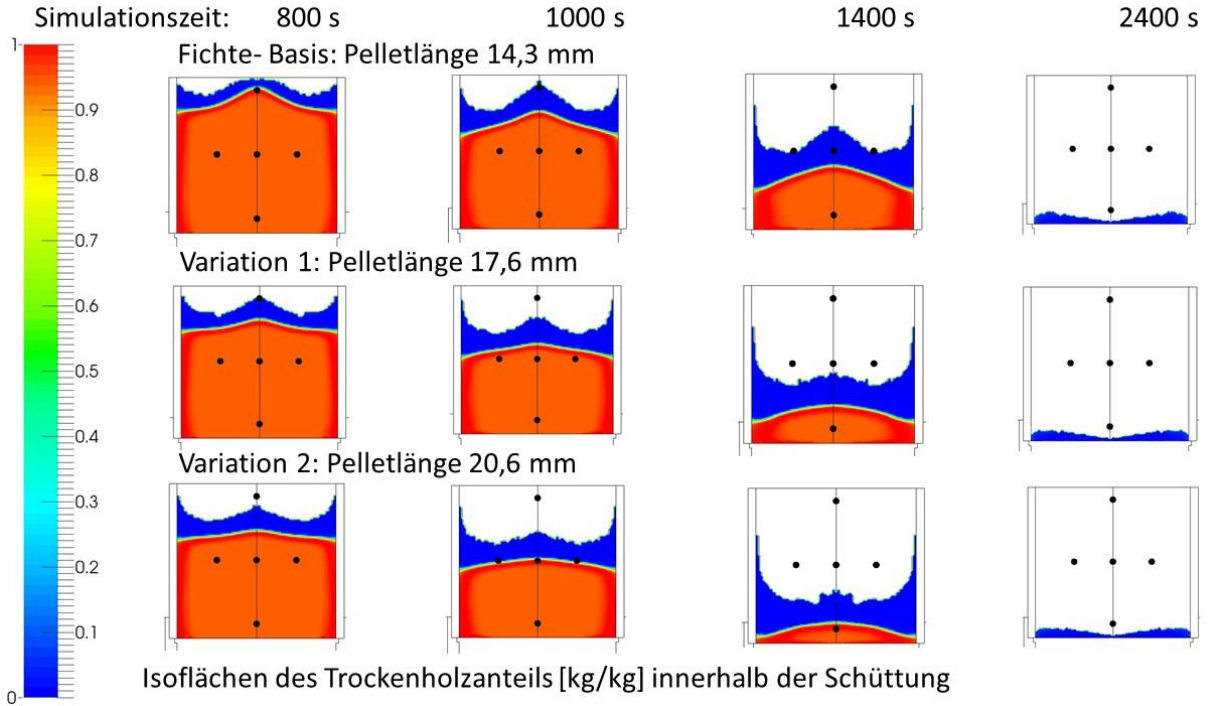


Abbildung 28: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Längen nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Aschegehalt und Betttemperaturen

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

Längere Pellets weisen geringere Schüttdichten auf, wodurch die Füllmengen im Probenbehälter mit der Pelletlänge sinken. Durch die geringeren Füllmengen, die porösere Schüttung und das spezifische, längenabhängige Abbrandverhalten der Partikel verkürzt sich die Pyrolysephase für die Pellets mit 20,6 mm um ca. 18 % und die gesamte Abbranddauer um ca. 11 % gegenüber den Pellets Fichte-Basis (13,4 mm). Eine Abhängigkeit bezüglich der Dauer des Holzkohlenabbrands kann aus den Ergebnissen nicht abgeleitet werden. Die Pellets mit der mittleren Länge von 17,6 mm liegen erwartungsgemäß im Mittelfeld.

Längere Pellets brennen somit schneller ab und führen zu höheren Temperaturen im Brennstoffbett. Dies deckt sich auch mit Erkenntnissen aus Einzelpartikelsimulationen. Trotz der nur um 2 % – 5 % abweichenden Schüttdichten resultiert ein relativ großer Unterschied von 6 % – 11 % bei der Abbranddauer. Während des Holzkohlenausbrands vergleichmäßig sich die Abbrandzeit, da die hohe Betttemperatur bei längeren Pellets durch das verstärkte Zusammensacken der Schüttung (Oberflächenreduktion) gegenkompensiert wird.

6.2.2.3 Variation des Ausgangsmaterials (Fichte vs. Buche)

Zur Untersuchung des Einflusses der Holzart auf den Abbrand wurde eine Simulation mit Buchenpellets durchgeführt und mit dem Fichte-Basisfall verglichen. Wesentliche Unterschiede sind dabei die Änderungen der Zusammensetzung der Pseudokomponenten, die damit verbundenen geänderten kinetischen Parameter der Hemicellulose-, Zellulose- und Ligninzersetzung sowie der höhere Aschegehalt von Buche (siehe Tabelle 10). In Abbildung 29 sind die Simulationsergebnisse bzgl. wesentlicher Prozessgrößen über den Bettabbrand dargestellt.

Abbildung 30 bis Abbildung 33 zeigen wesentliche Bettcharakteristika für Simulationszeiten von 800 s, 1.000 s, 1.400 s und 2.000 s. Wo verfügbar, sind Ergebnisse der Laborreakortests mit diesen Sortimenten hinsichtlich der Zonen mit verkohlten, teilverkohlten und unreaktierten Pellets in den Grafiken vermerkt (schwarze Linien im Brennstoffbett).

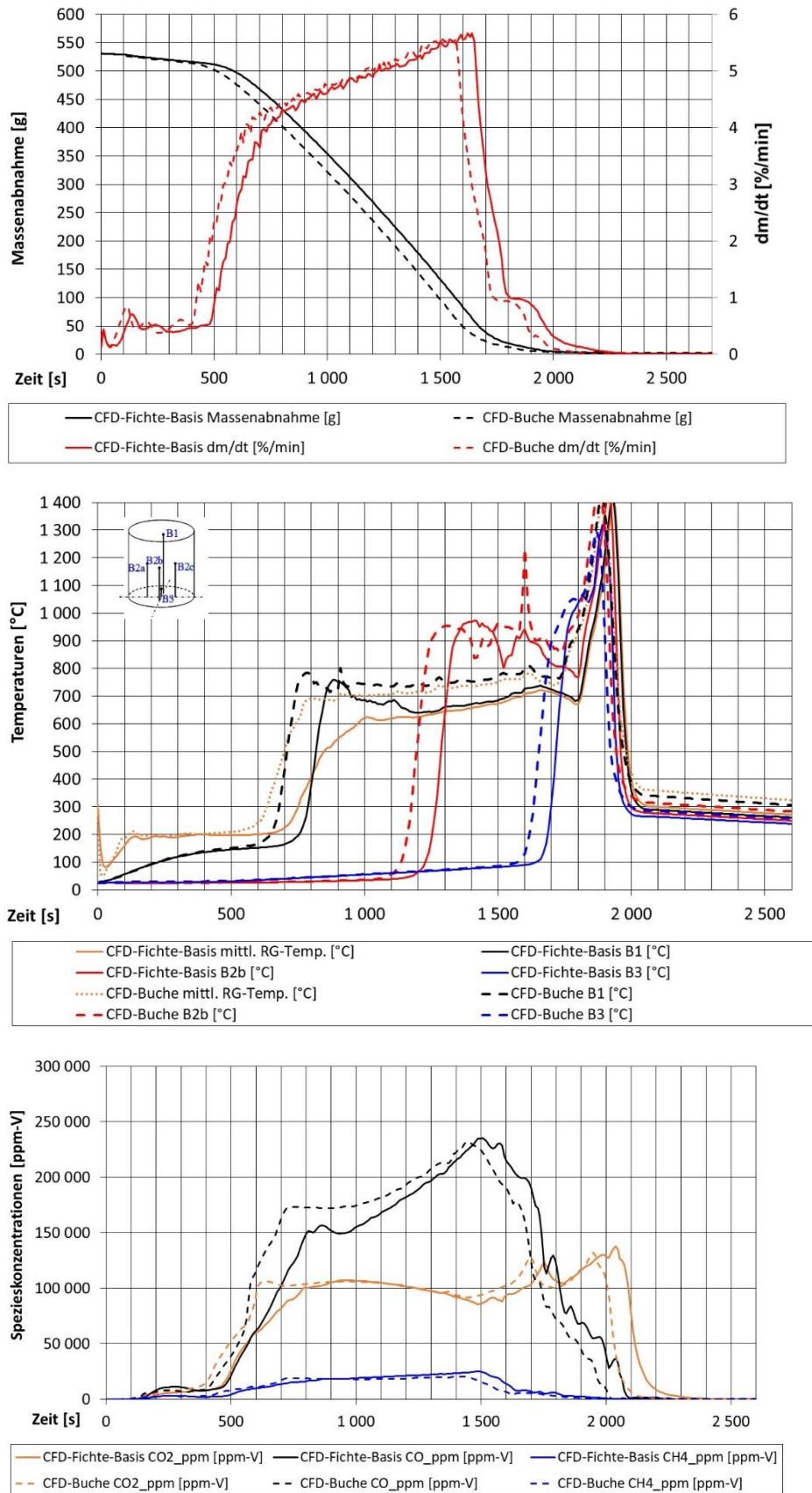


Abbildung 29: Simulationsergebnisse für wesentliche Prozessgrößen des Bettabbrandes bei Einsatz von Pellets aus unterschiedlichen Ausgangsmaterialien

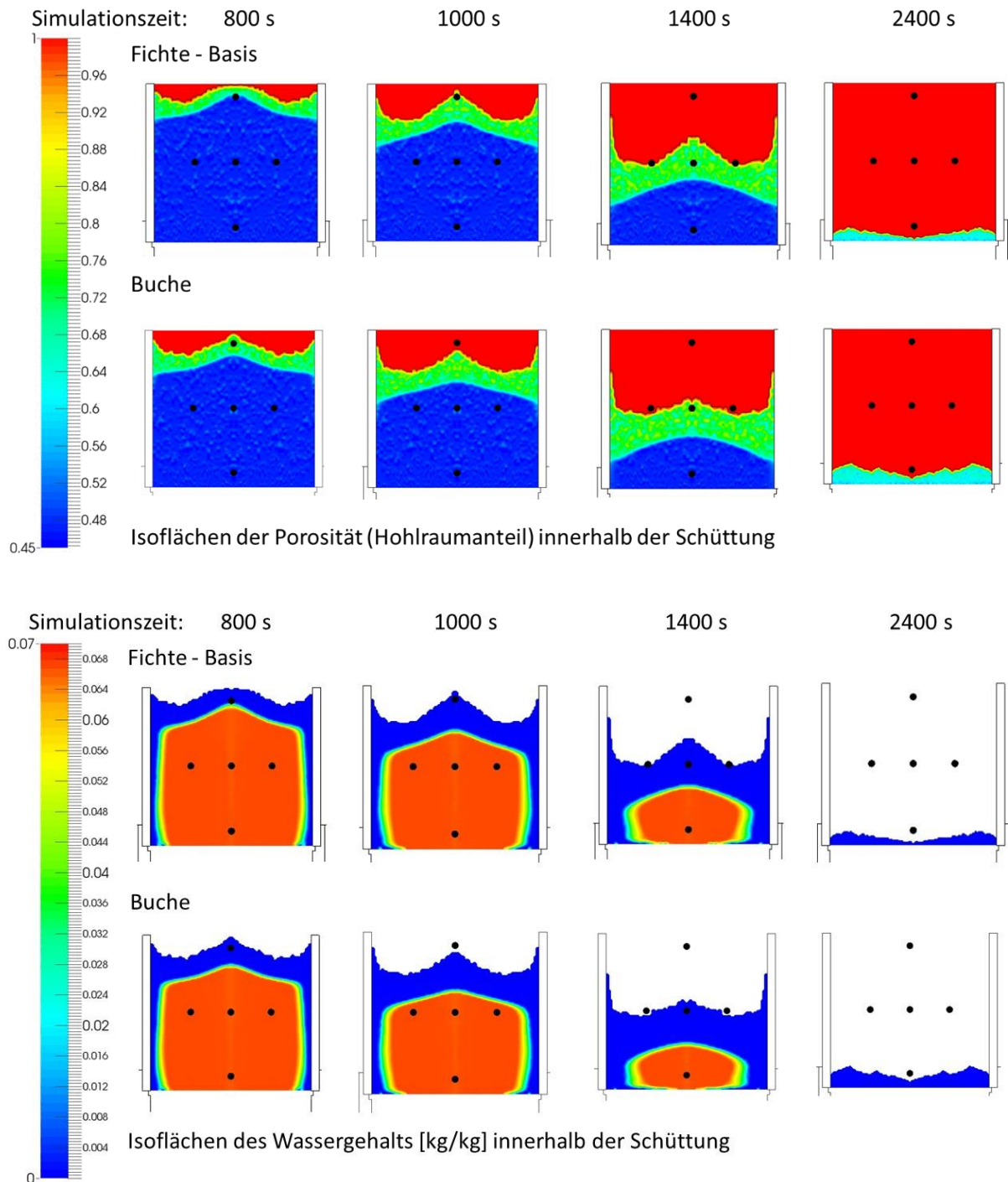


Abbildung 30: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets aus unterschiedlichen Ausgangsmaterialien (Fichte, Buche) nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Porosität und Wassergehalt

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

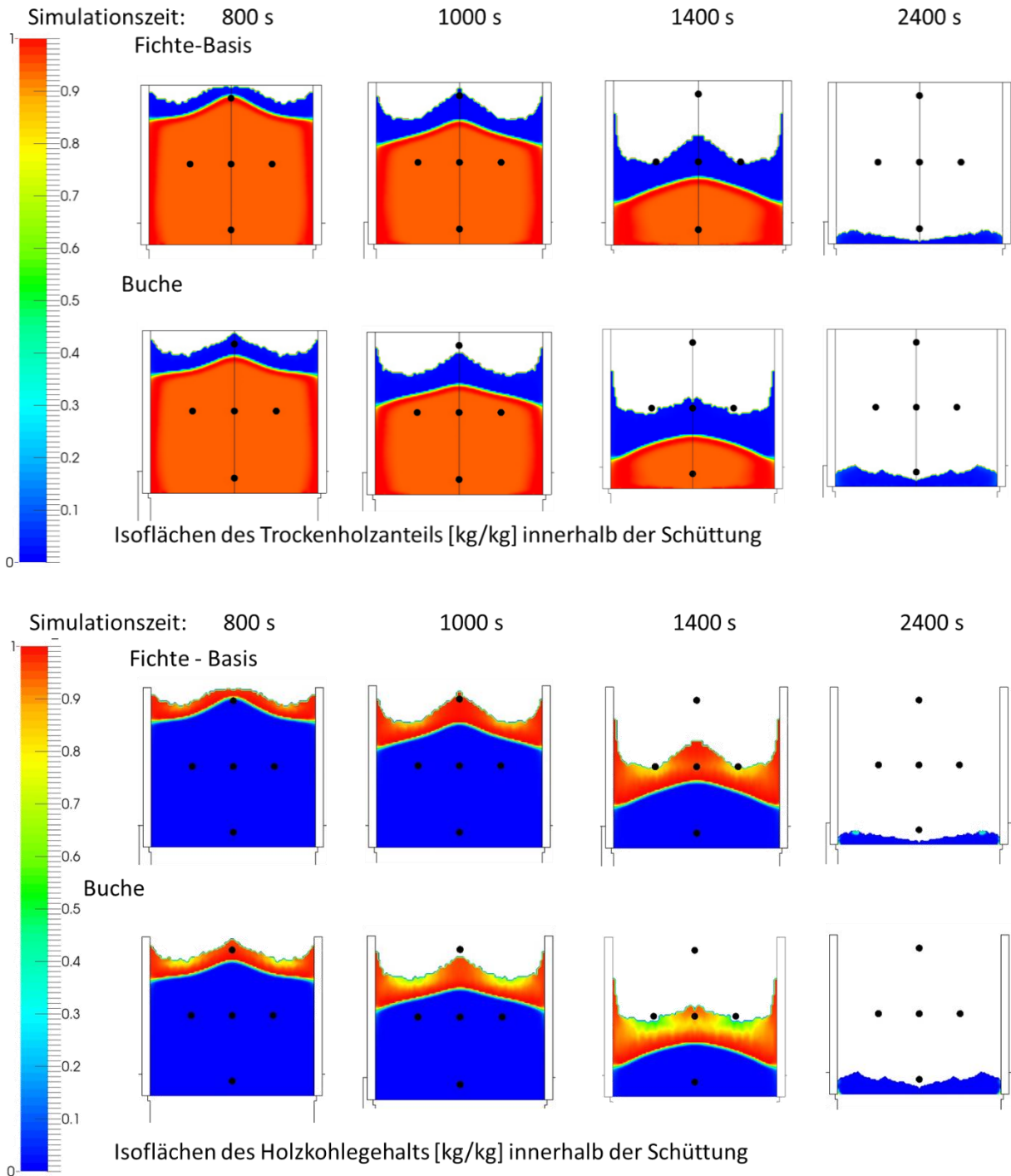


Abbildung 31: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets aus unterschiedlichen Ausgangsmaterialien (Fichte, Buche) nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Anteil an trockenem Holz und Holzkohlegehalt

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

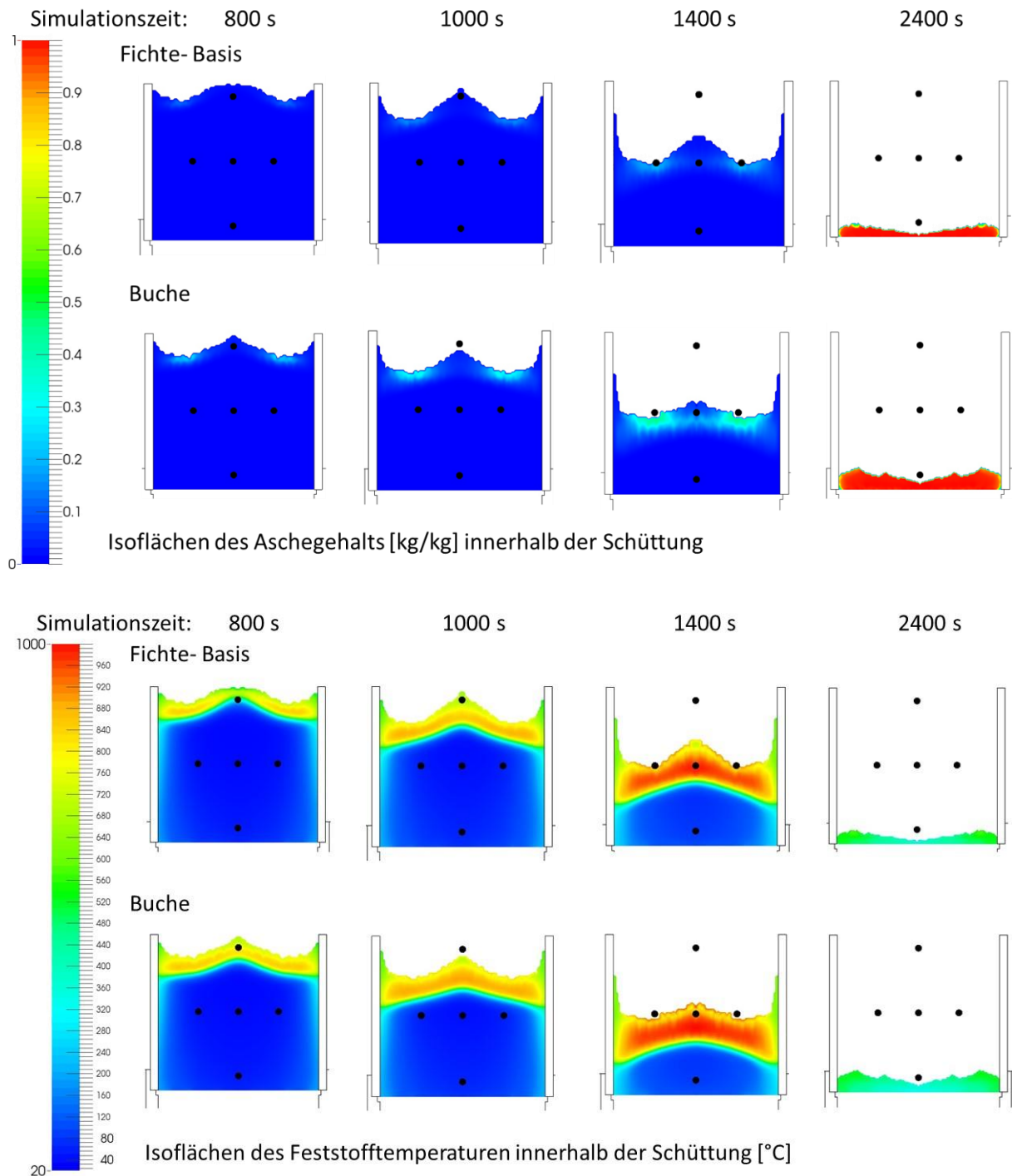


Abbildung 32: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets aus unterschiedlichen Ausgangsmaterialien (Fichte, Buche) nach 800, 1.000, 1.400 und 2.400 s - Aschegehalt und Betttemperaturen

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

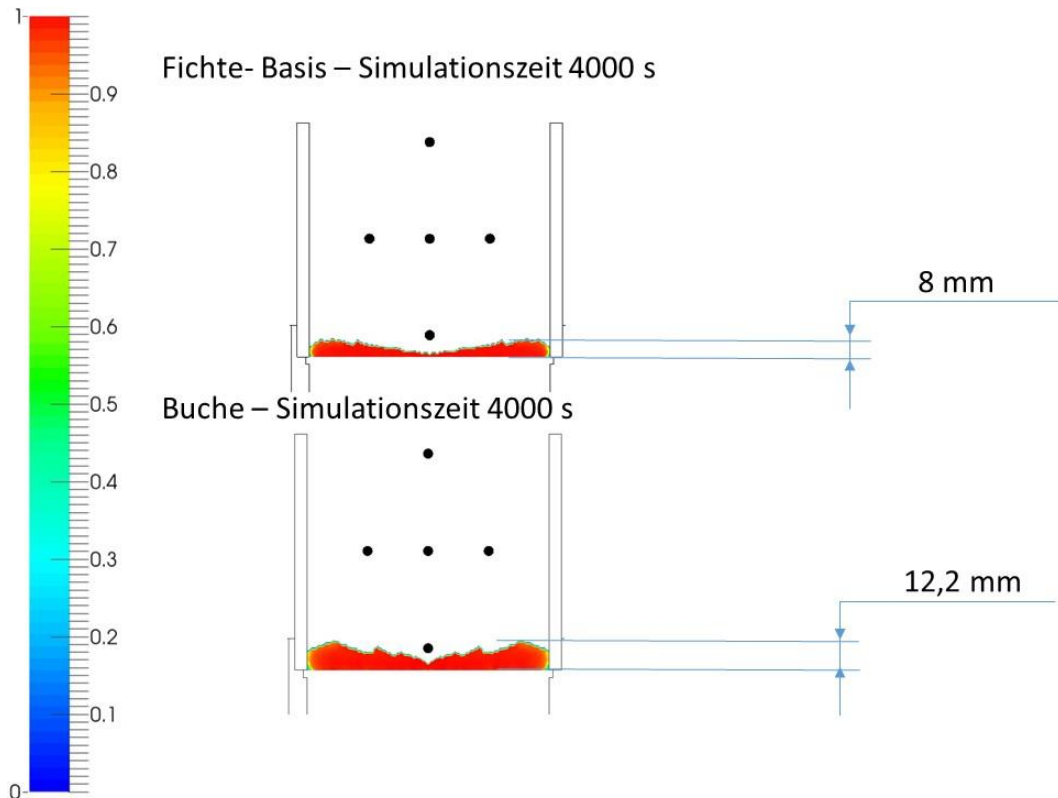


Abbildung 33: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets aus unterschiedlichen Ausgangsmaterialien (Fichte, Buche) – Aschebett am Ende des Ausbrandes

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

Aufgrund der etwas schnelleren Zersetzungskinetiken des Buchenholzes zeigt die Simulation auf Basis der Buchenpellets eine geringfügig verkürzte (um ca. 1 %) Hauptpyrolysephase. Durch die schnellere Energiefreisetzung aufgrund der früher ablaufenden Gasphasenreaktionen (siehe Abbildung 29), steigen im Fall der Buchenpellets die Betttemperaturen schneller an und verbleiben auch auf einem höheren Niveau, wodurch sich im Vergleich zu den Fichtenpellets der Holzkohlenabbrand um ca. 20 % und die Gesamtabbranddauer um 7 % verkürzen.

Aufgrund des höheren Aschegehalts der Buchenpellets (Buche 0,62 m-% FS; Fichte 0,38 m-% FS) bildet sich für Buchenpellets am Simulationseende ein um ca. 50 % höheres Aschebett aus (siehe Abbildung 33). Aufgrund des hohen Aschegehalts von Buchenholz und der damit schneller anwachsenden Ascheschicht, ist bei der Dimensionierung von Brennerschalen, der Definition von Düsenpositionen und der Definition von erforderlichen Entschungsintervallen der Einfluss der Brennstoffart sehr wichtig.

6.2.2.4 Variation des Aschegehaltes

Ausgehend vom Fichte-Basisfall wurde je eine Simulation für einen niedrigeren und einen höheren Aschegehalt durchgeführt (siehe Tabelle 10). In Abbildung 34 sind die Simulationsergebnisse bzgl. wesentlicher Prozessgrößen über den Bettabbrand dargestellt.

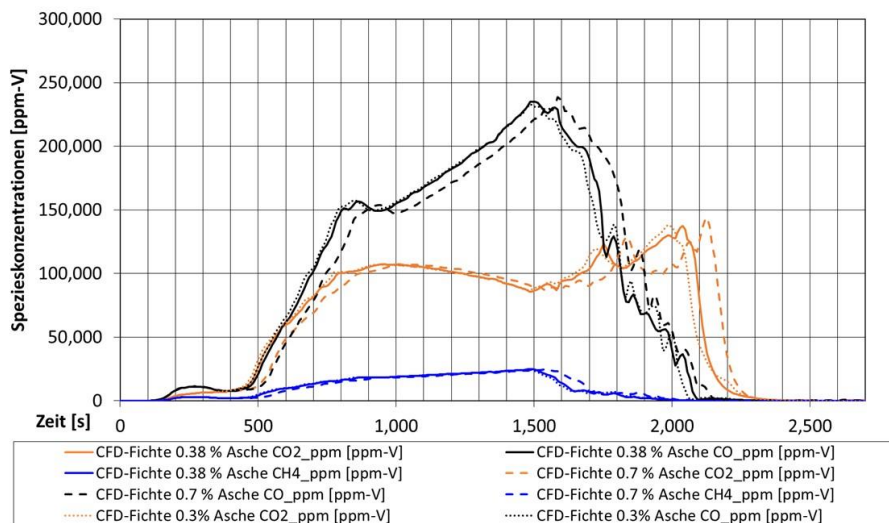
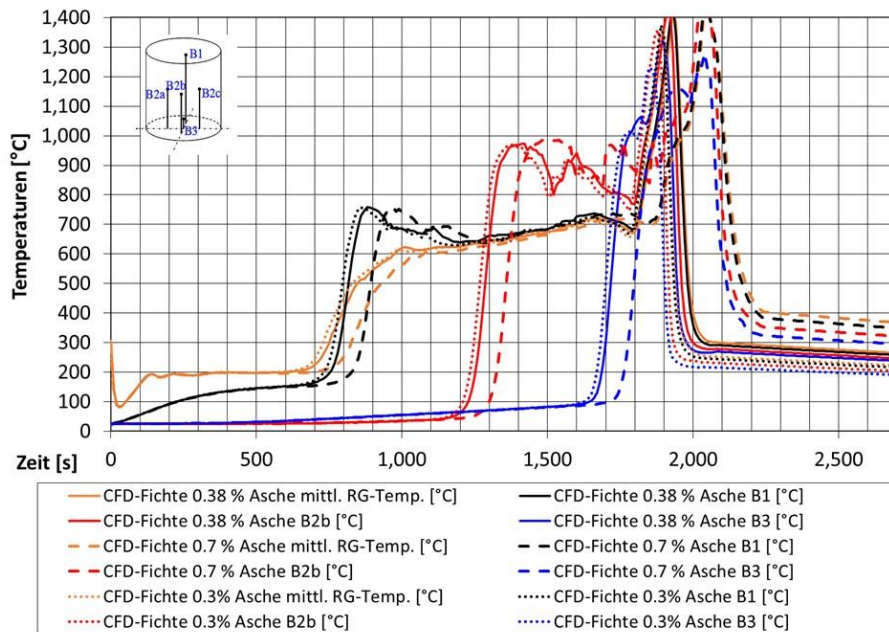
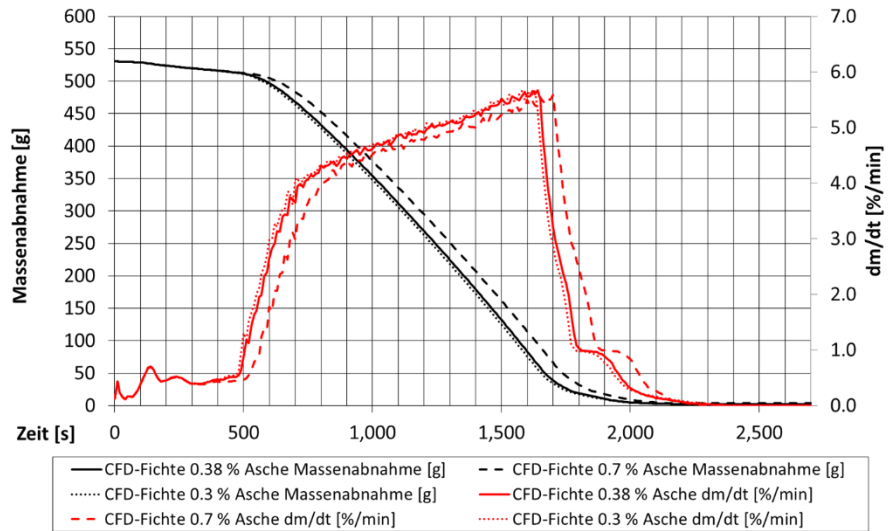


Abbildung 34: Simulationsergebnisse für wesentliche Prozessgrößen des Bettabbrandes bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Aschegehalten

Abbildung 35 bis Abbildung 37 zeigen wesentliche Bettcharakteristika für Simulationszeiten von 800 s, 1.000 s, 1.400 s, 1.800 s und 2.400 s. Wo verfügbar, sind Ergebnisse der Laborreaktor tests mit diesen Sortimenten hinsichtlich der Zonen mit verkohlten, teilverkohlten und unreaktierten Pellets in den Grafiken vermerkt (schwarze Linien im Brennstoffbett).

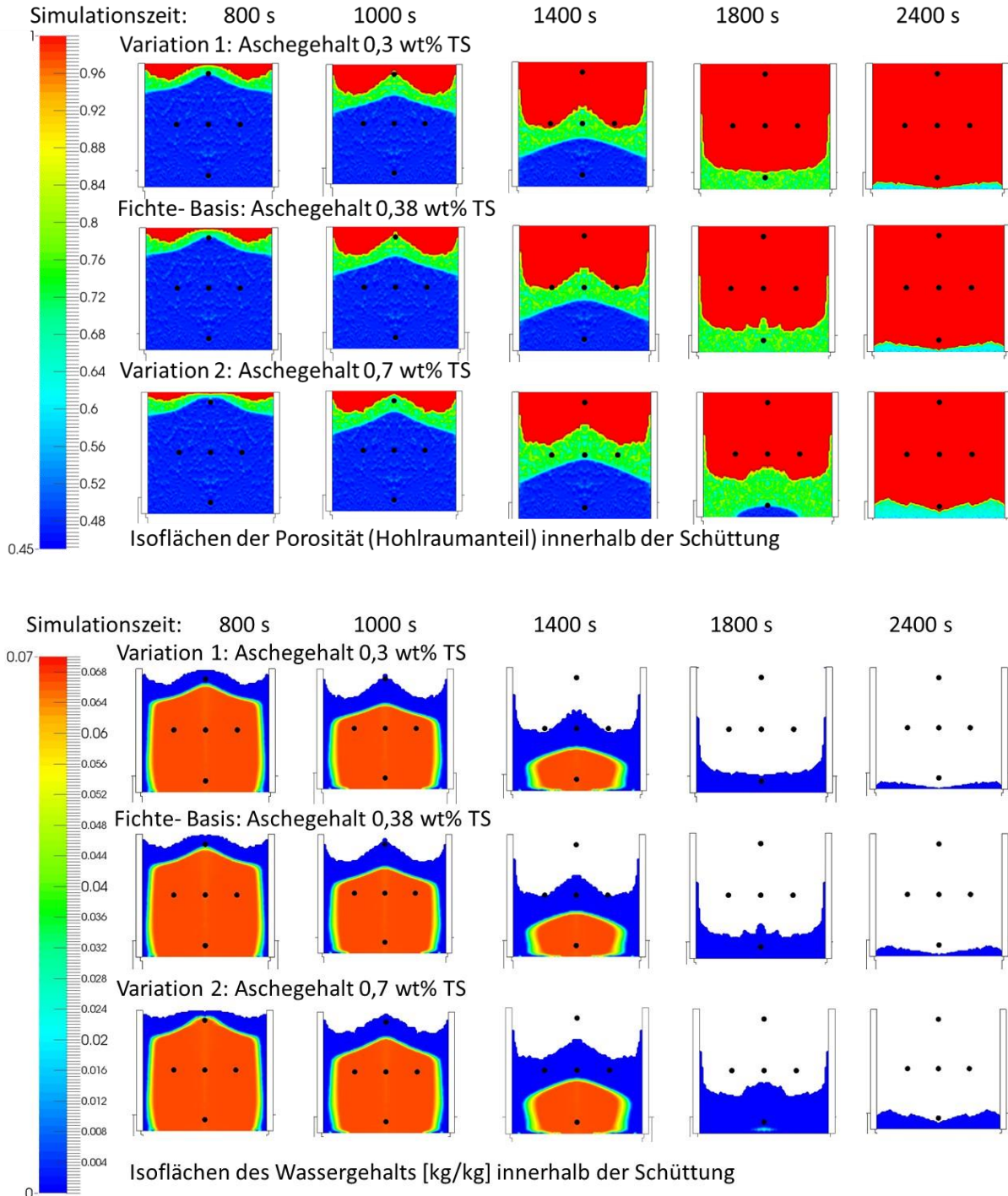


Abbildung 35: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Aschegehalten nach 800, 1.000, 1.400, 1.800 und 2.400 s - Porosität und Wassergehalt

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

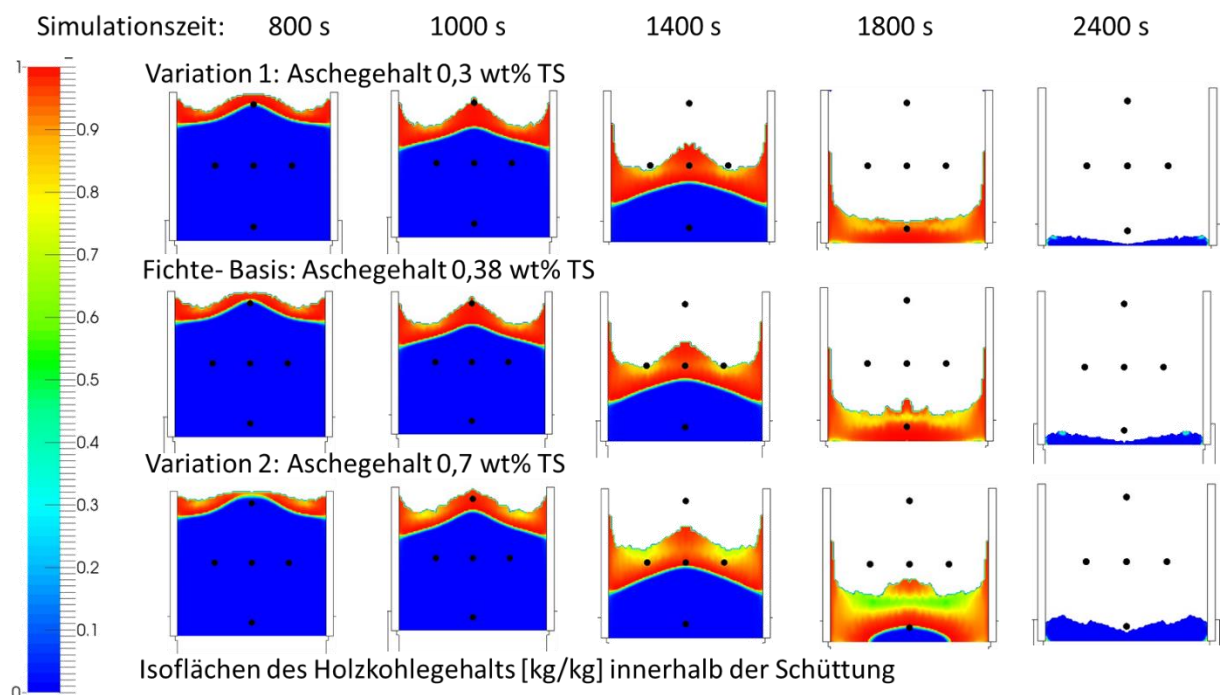
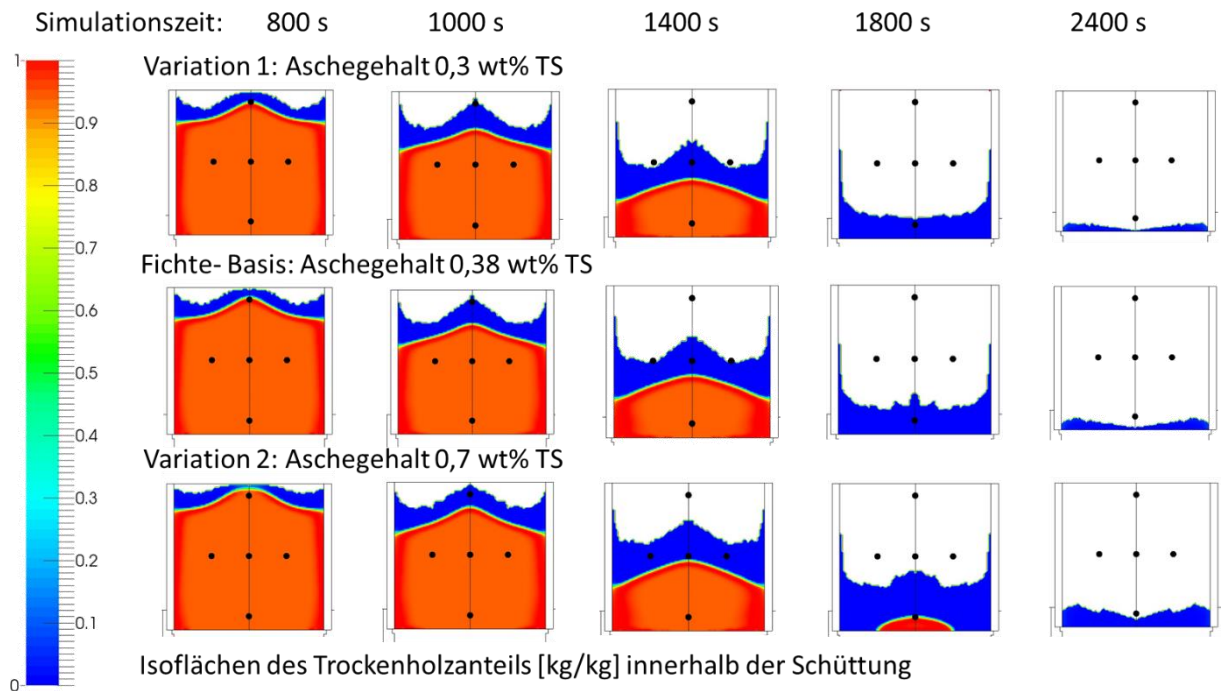


Abbildung 36: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Aschegehalten nach 800, 1.000, 1.400, 1.800 und 2.400 s - Anteil an trockenem Holz und Holzkohlegehalt

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

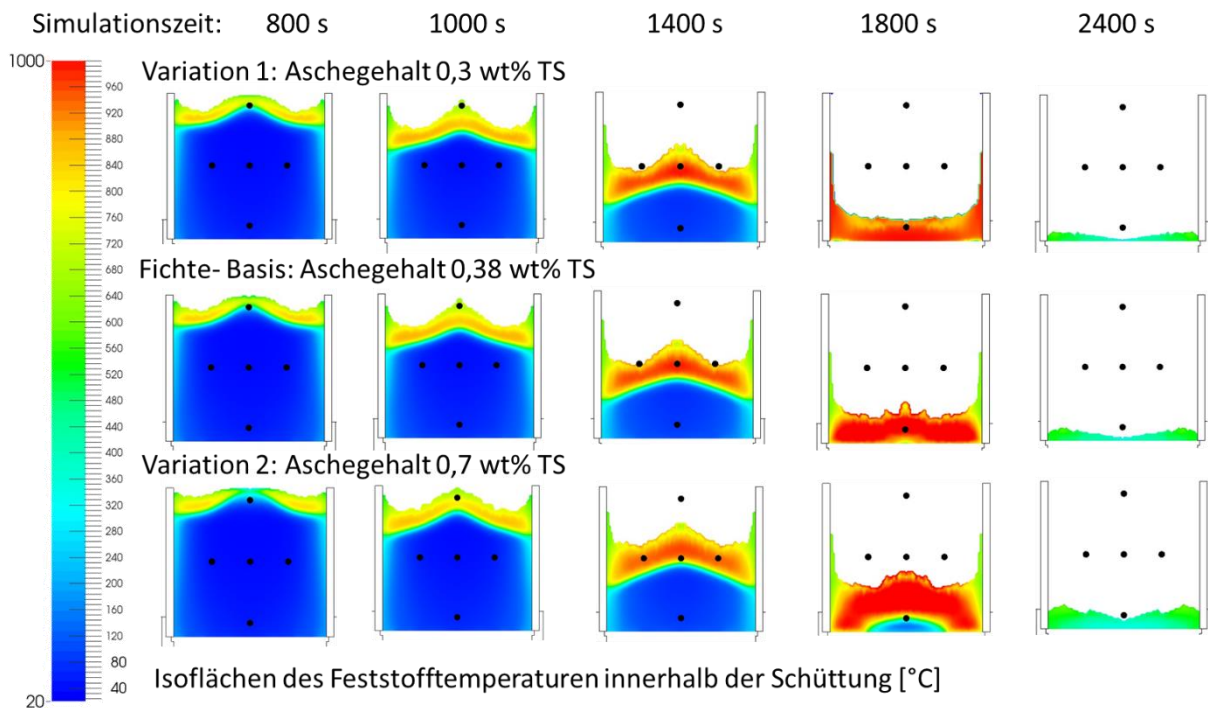
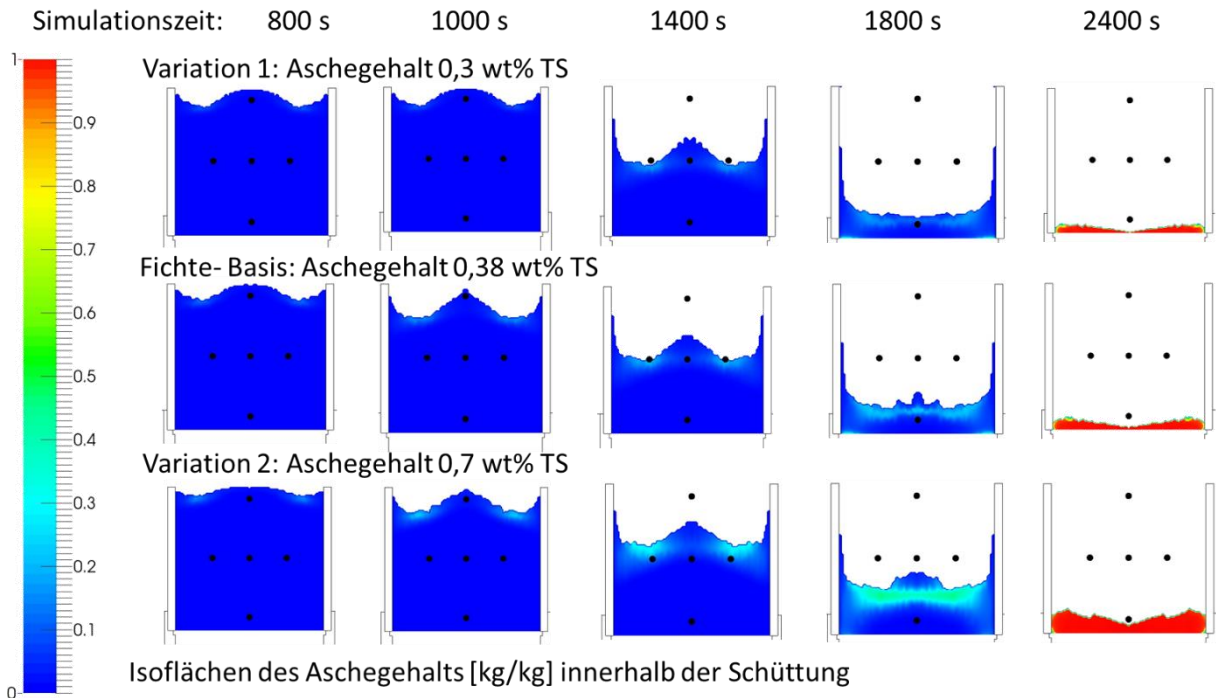


Abbildung 37: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Aschegehalten nach 800, 1.000, 1.400, 1.800 und 2.400 s - Aschegehalt und Betttemperaturen

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

Der Brennstoffaschegehalt hat einen gewissen Einfluss auf die Dauer der Pyrolyse. Für die Pellets mit 0,7 % Aschegehalt verlängert sich die Pyrolysephase um 5 % gegenüber den beiden Brennstoffen mit geringeren Aschegehalten (0,3 % und 0,38 %). Die Ursache hierfür liegt höchstwahrscheinlich in der „isolierenden“ Wirkung der Ascheschicht (abschirmend gegen Strahlung).

Aus der Auswertung der Speziesfreisetzung (siehe Abbildung 34) zeigt sich eine klare Tendenz für ein schnelleres Ende des Holzkohlenausbrands bei geringeren Aschegehalten, was durch die höheren Betttemperaturen im Holzkohlebett aufgrund des etwas schneller ablaufenden Abbrands („isolierende“ Wirkung und diffusionslimitierende Wirkung der Ascheschicht bei höheren Aschegehalten). erklärbar ist.

Das vergleichsweise schnelle Ende des Holzkohlenausbrands am Ende der Ausbrandphase könnte bei hohen Aschegehalten durch die dichtere Struktur der Holzkohle begünstigt sein (geringeres Zusammensacken).

Der Aschegehalt des Brennstoffs hat einen Einfluss auf die Betthöhe während des Abbrands (siehe Abbildung 35). Am Simulationsende (nach 4.000 s) zeigt sich für den asche-reichsten Brennstoff eine deutlich dickere Ascheschicht (nicht in den Abbildungen dargestellt).

6.2.2.5 Variation der Dichte der Holzkohle

Ausgehend vom Fichte-Basisfall wurde je eine Simulation für eine niedrigere und eine höhere Dichte der Holzkohle durchgeführt (siehe Tabelle 10). In Abbildung 38 sind die Simulationsergebnisse bzgl. wesentlicher Prozessgrößen über den Bettabbrand dargestellt.

Abbildung 39 bis Abbildung 41 zeigen wesentliche Bettcharakteristika für Simulationszeiten von 800 s, 1.000 s, 1.400 s, 1.800 s und 2.400 s. Wo verfügbar, sind Ergebnisse der Laborreaktortests mit diesen Sortimenten hinsichtlich der Zonen mit verkohlten, teilverkohlten und unreaktierten Pellets in den Grafiken vermerkt (schwarze Linien im Brennstoffbett).

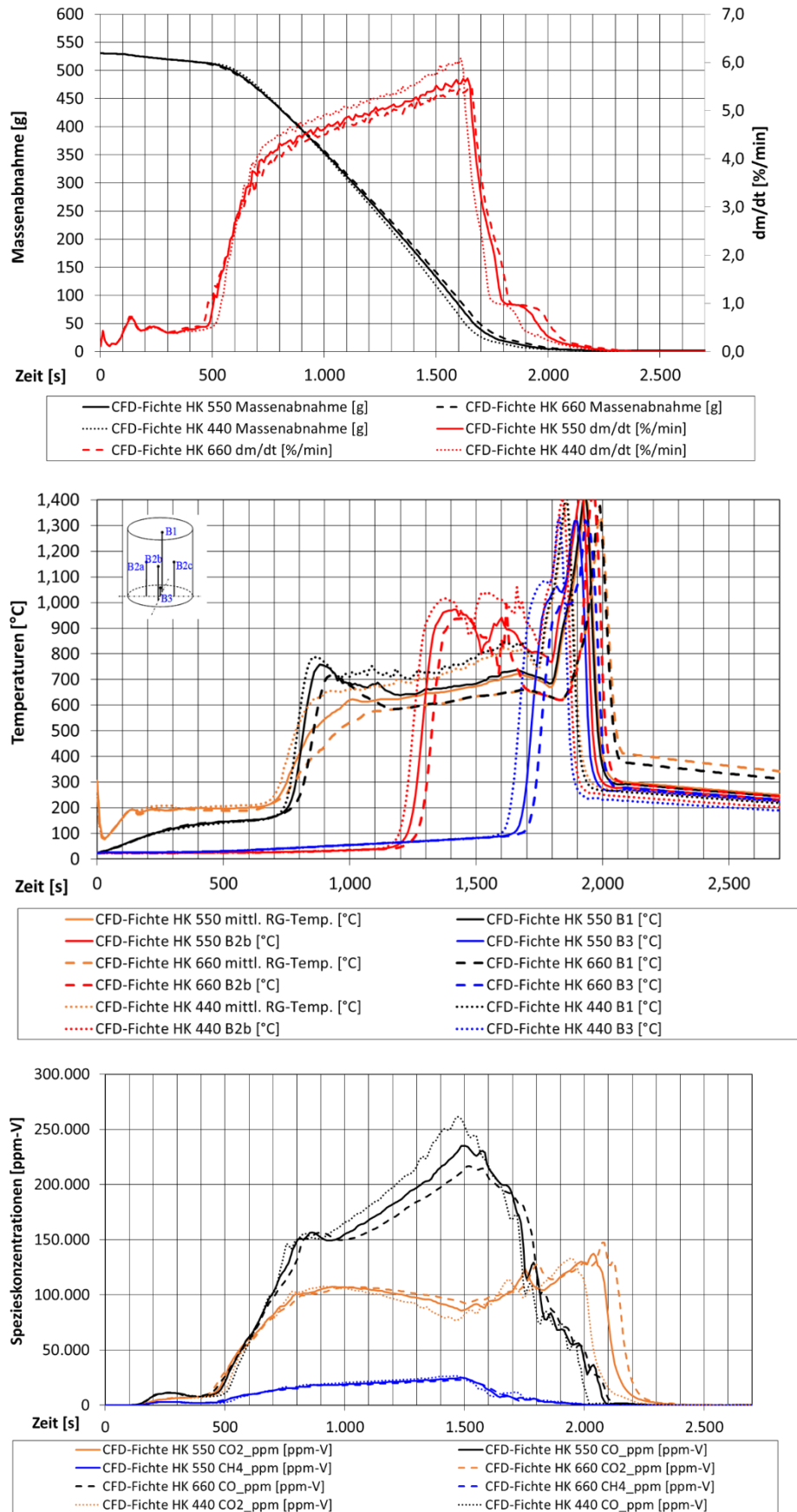


Abbildung 38: Simulationsergebnisse für wesentliche Prozessgrößen des Bettabbrandes bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Dichten der Holzkohle

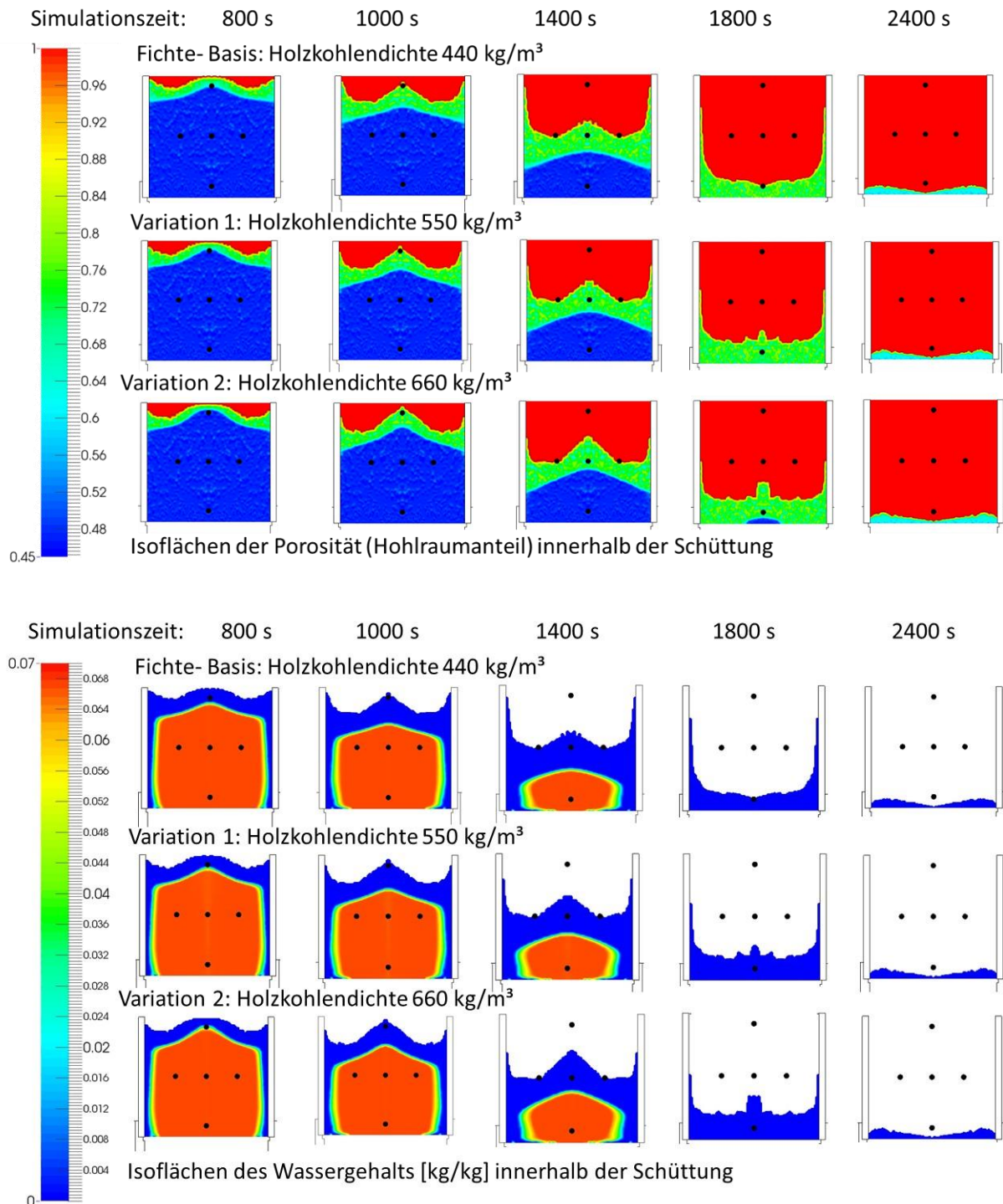


Abbildung 39: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Dichten der Holzkohle nach 800, 1.000, 1.400, 1.800 und 2.400 s - Porosität und Wassergehalt

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

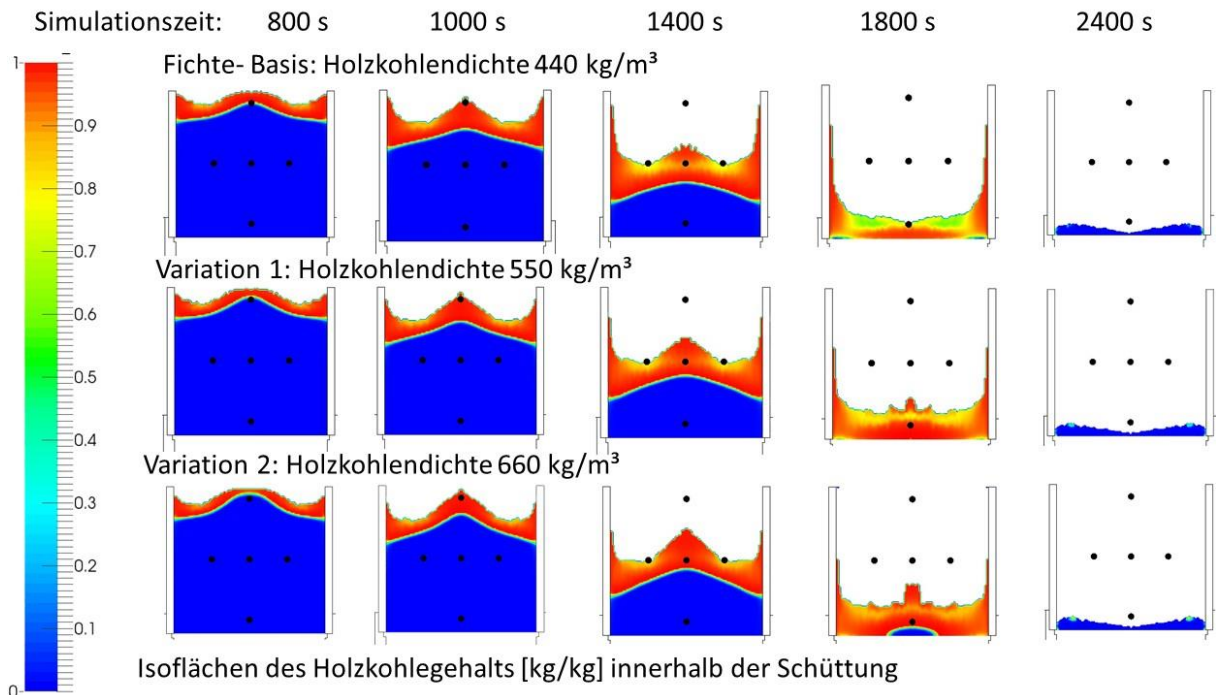
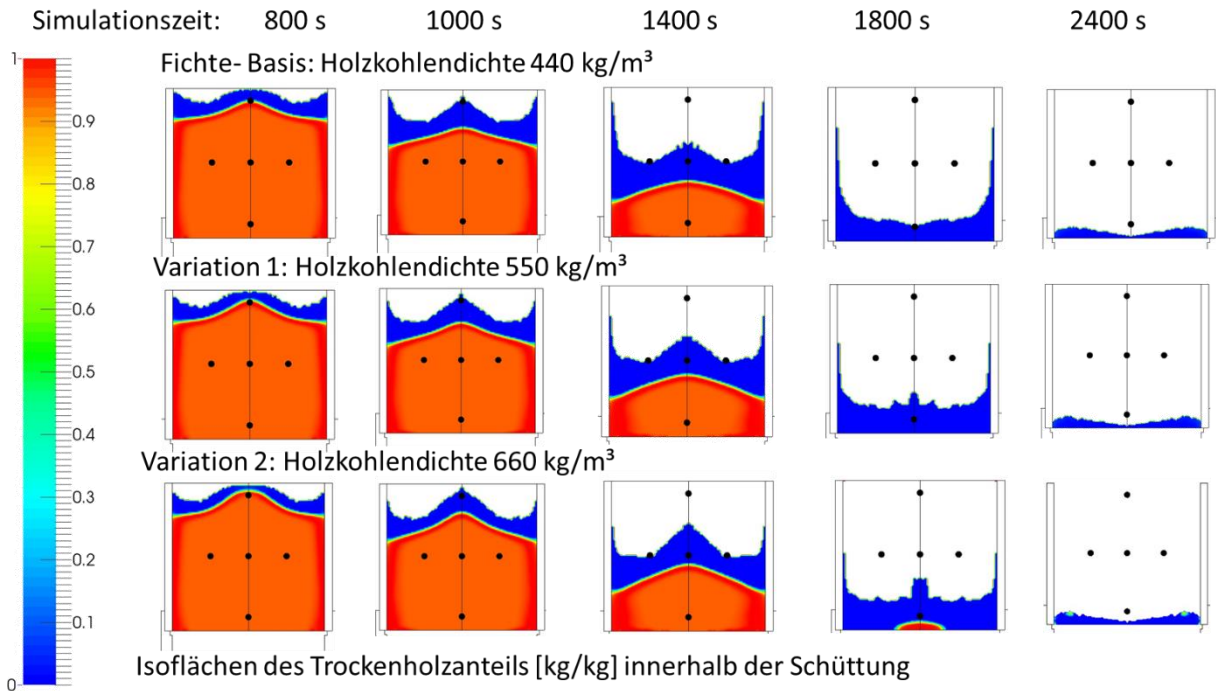


Abbildung 40: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Dichten der Holzkohle nach 800, 1.000, 1.400, 1.800 und 2.400 s - Anteil an trockenem Holz und Holzkohlegehalt

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

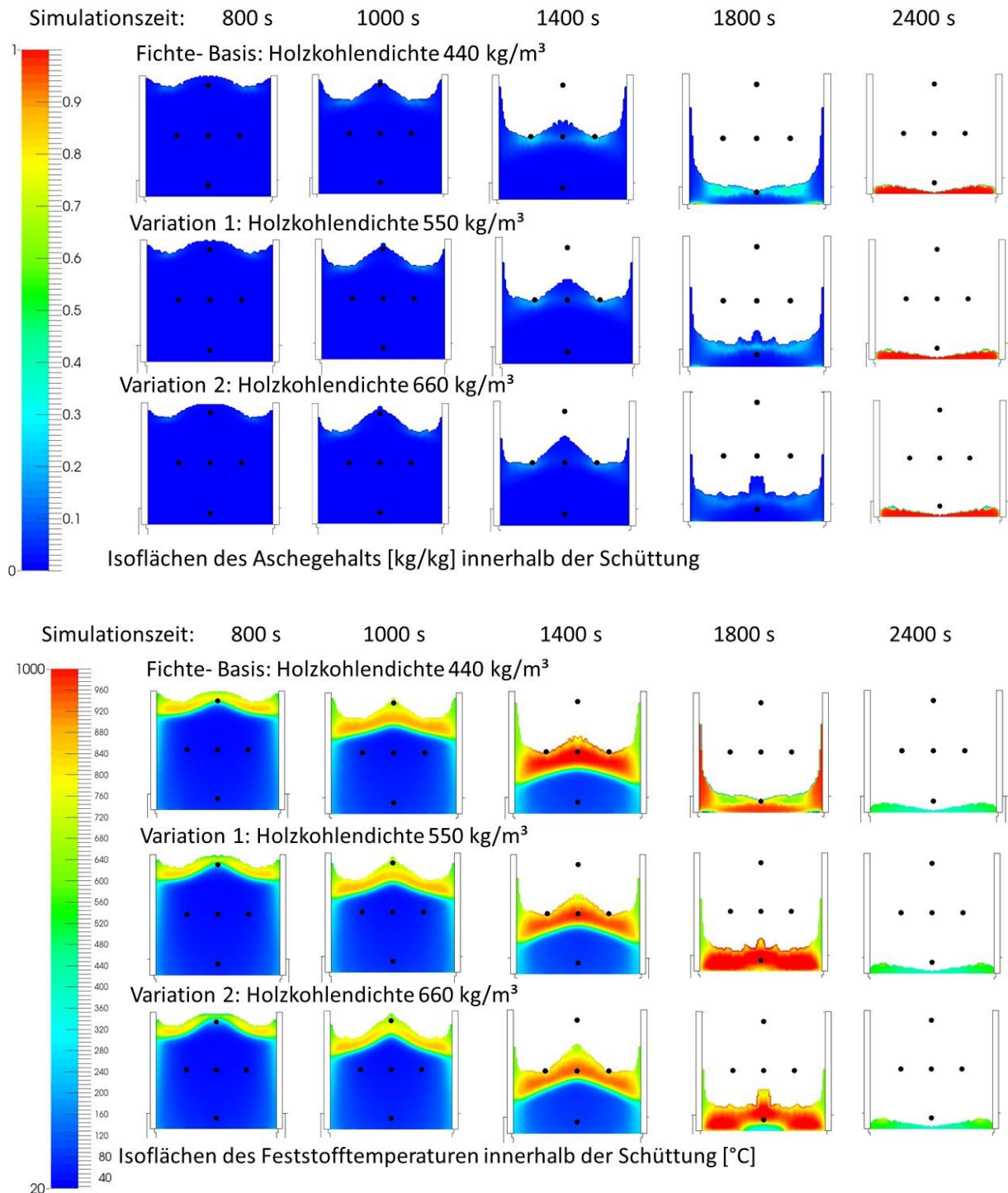


Abbildung 41: Simulationsergebnisse für den Bettzustand bei Einsatz von Pellets mit unterschiedlichen Dichten der Holzkohle nach 800, 1.000, 1.400, 1.800 und 2.400 s - Aschegehalt und Betttemperaturen

Erläuterungen: Vergleichend sind die Positionen der Thermoelemente im Brennstoffbett im Laborreaktor dargestellt

Die untersuchten Variationen der Holzkohledichten zeigen im CFD-Modell einen leichten Einfluss auf die Dauer der Pyrolysephase (Ende CH₄-Freisetzung – siehe Abbildung 38).

Es ergibt sich weiteres aufgrund der größeren reaktiven Oberfläche eines poröseren Holzkohlebetts auch ein Trend für einen schnelleren Holzkohlenausbrand bei geringer werdender Holzkohlendichte. Diese Tendenz kann auch beim Vergleich der Darstellungen des Trockenholzanteils im Bett bei 1.400 Sekunden gesehen werden (siehe Abbildung 40).

Die Zündzeitpunkte verlagern sich ausgehend von der für die Basissimulation berücksichtigten Dichte (550 kg/m^3) für die Holzkohlendichte von 440 kg/m^3 um ca. 50 Sekunden nach vorne, bzw. für die Dichte von 660 kg/m^3 um 50 Sekunden nach hinten.

Die bildlichen Darstellungen der Simulationsergebnisse zeigen, dass die Holzkohlendichte nur einen geringen Einfluss auf die Betthöhen während des Abbrands hat, da sich die geringere Holzkohlendichte und der schnellere Ausbrand kompensieren (siehe Abbildung 39 und Abbildung 41).

6.2.3 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Über die durchgeführten Sensitivitätsstudien konnten tiefere Einblicke in die Auswirkungen unterschiedlicher Brennstoffparameter von Holzpellets auf das Abbrandverhalten des Brennstoffbettes gewonnen werden.

Es zeigte sich, dass bei Einsatz unterschiedlicher Nadelholzpelletsortimente die **Schüttdichte des Brennstoffes** eine Auswirkung auf den Abbrand zeigt. So weisen die Referenz-Fichtenpellets aufgrund ihrer um 8 % höheren Schüttdichte eine um ca. 6 % höhere Abbranddauer auf als das marktverfügbare Sortiment 19.

Bezüglich der untersuchten unterschiedlichen **Pelletlängen** ist anzumerken, dass dieser Parameter auch zu deutlich variierenden Schüttdichten und damit auch zu unterschiedlichen Brennstoffmengen im Beobachtungsgebiet führt. Dadurch verkürzen sich die Abbrandzeiten mit länger werdenden Pellets. Trotz der nur um 2 – 5 % abweichenden Schüttdichten der Pelletsortimente mit variierten Pelletlängen resultiert ein relativ großer Unterschied von 6 – 11 % in der Abbranddauer. Längere Pellets brennen schneller ab und führen zu höheren Temperaturen im Brennstoffbett. Dies deckt sich auch mit den Erkenntnissen aus durchgeführten Einzelpartikelsimulationen.

Die Untersuchungen bzgl. **unterschiedlicher Holzarten** (Fichte versus Buche) zeigten, dass aufgrund der schnelleren TGA-Kinetik für Buchenholz im Vergleich zu Fichte für Buchenholz eine um ca. 1 % verkürzte Pyrolysephase resultiert. Durch die schnellere Energiefreisetzung aufgrund der früher ablaufenden Gasphasenreaktionen steigen im Fall der Buchenpellets die Betttemperaturen schneller an und verbleiben auch auf einem hohen Niveau, wodurch sich die Gesamtabbranddauer um 7 % verkürzt. Aufgrund des höheren Aschegehalts der Buchenpellets bildet sich für Buchenpellets am Simulationende ein um ca. 50 % höheres Aschebett aus.

Hinsichtlich **unterschiedlicher Aschegehalte** wurde ein gewisser Einfluss auf die Dauer der Pyrolyse festgestellt, sowie ein deutlicher Einfluss auf die Hauptphase des Holzkohlenabbrands, jedoch kaum ein Einfluss auf die gesamte Abbranddauer. Die im Fall des hohen Aschegehalts beobachtete Verzögerung der Pyrolyse wird wahrscheinlich durch

die isolierende Wirkung der Ascheschicht verursacht. Die dickere Ascheschicht verlangsamt die Bettverdichtung und die Trocknung (Isolierung nach oben), wodurch sich die Pyrolyse leicht verzögert. Während des Holzkohleausbrands wirkt diese Isolationsschicht noch stärker. Gegen Ende des Holzkohleausbrands scheint die durch hohe Aschegehalte stabilere Holzkohleschüttung den Ausbrand zu beschleunigen. Aufgrund des hohen Aschegehalts von Buchenholz und der damit schneller anwachsenden Ascheschicht, ist bei der Dimensionierung von Brennerschalen, der Definition von Düsenpositionen und der Definition von erforderlichen Entaschungsintervallen der Einfluss der Brennstoffart sehr wichtig und bei der Ofenkonzeption zu berücksichtigen.

Unterschiedliche **Holzkohledichten** wirken sich aufgrund der größeren reaktiven Oberfläche im Holzkohlenbett aus und es zeigt sich eine Tendenz für eine leicht schnellere Pyrolyse und einen schnelleren Holzkohleausbrand bei geringer werdender Holzkohledichte. Die hohen Betttemperaturen bei geringer Holzkohledichte beschleunigen den Abbrand weiter. Das Ende des Holzkohlenabbrands erfolgt für höhere Holzkohledichten schneller, da die dichtere Holzkohleschicht weniger stark zusammensackt. Die Variation der Holzkohledichte hat nur einen geringen Einfluss auf die Betthöhen während des Abbrands, da sich die geringere Holzkohledichte und der raschere Ausbrand nahezu kompensieren.

Allgemeines zeigte sich, dass die Erhöhung des Brennstoffbetts in der Mitte des Reaktors durch die Heizung über die Wände bedingt (Trocknung von außen nach innen) ist und somit versuchsspezifisch und nicht allgemein gültig ist. Das höhere Brennstoffbett entlang der Wand ist auf das verwendete Berechnungsgitter zurückzuführen (Feinheit der Auflösung wandnaher Schichten) und somit in der Praxis nicht zu erwarten.

7 Zusammenfassung

Es konnte ein innovatives Brennstoffbett-Abbrandmodell für Pelletschüttungen entwickelt und anhand von Testläufen an einem Laborreaktor validiert werden. Das Brennstoffbett-Abbrandmodell wurde an ein Gasphasenverbrennungsmodell gekoppelt und das Gesamtsimulationspaket wurde anhand von Daten aus Testläufen am Laborreaktor von BIOS validiert. Mit dem neuen Brennstoffbett-Abbrandmodell können alle brennstoffspezifischen Parameter, die im Rahmen der experimentellen Arbeiten als relevant erachtet wurden, getrennt variiert und somit ihr Einfluss auf den Abbrandvorgang untersucht werden.

Insgesamt ist es mit diesem neuen, innovativen CFD-Simulationsmodell möglich, in akzeptabler Simulationszeit eine relativ genaue Übereinstimmung mit den Messergebnissen aus dem Laborreaktor zu erzielen. Das neue Brennstoffbett-Abbrandmodell ermöglicht somit eine genaue Bewertung des Bettabbrandes und relevanter Einflussgrößen darauf.

Sensitivitätsstudien mit einem Einzelpartikel-Abbrandmodell zeigten, dass sowohl die Holzart (Laubholz, Nadelholz) als auch die Pelletlänge und die Pelletdichte einen relevanten Einfluss auf das Abbrandverhalten einzelner Pellets zu haben scheinen. Die Einzelpartikelsimulationen lieferten zwar erste wertvolle Ergebnisse bzgl. der Auswirkungen relevanter Parameter auf den Abbrand von Pellets, sie können aber nicht direkt auf das Verhalten von Pelletschüttungen übertragen werden.

Deshalb wurden die genannten sowie weitere Einflussparameter mit dem neuen Brennstoffbett-Abbrandmodell im Detail untersucht um auch den Einfluss der Schüttung auf diese Parameter entsprechend bewerten zu können. Folgende Erkenntnisse wurden aus diesen Parameterstudien zusammenfassend gewonnen:

- Höhere Schüttdichten führen aufgrund von kleineren inneren Oberflächen in der Schüttung zu längeren Abbrandzeiten.
- Die Pelletlänge hat Einfluss auf die Schüttdichte und damit auf die Bettabbrandzeit. Außerdem beschleunigt die Pelletlänge selbst den Abbrand. Ein Bett aus längeren Pellets (geringere Schüttdichte) brennt somit schneller ab und verursacht daher auch höhere Betttemperaturen.
- Je nach Holzart ergeben sich auf Basis unterschiedlicher Zersetzungskinetiken und Brennstoffzusammensetzungen unterschiedliche Abbrandcharakteristika, die auf das Brennstoffbett und den Aufbau einer Ascheschicht Einfluss nehmen. Im Fall des Vergleichs vom Buchen- und Fichtenholz zeigt sich, dass durch den höheren Aschegehalt des Buchenholzes sich ein höheres Aschebett aufbaut und dass aufgrund der schnelleren TGA-Kinetik für Buchenholz das Bett schneller abbrennt, wobei höhere Temperaturen resultieren.
- Brennstoffe mit höheren Aschegehalten führen aufgrund der „isolierenden“ Wirkung der Asche zu einem veränderten Abbrandverhalten (leicht verkürzte Trocknung und Pyrolyse und klar kürzerer Holzkohlenabbrand bei geringerem Aschegehalt) und zu höheren Betthöhen bei hohen Aschegehalten. Diese können z.B. problematisch hinsichtlich Luftdüsenpositionen in einem Brennertopf sein, was mit dem Modell nun leichter bewertet werden kann.

- Unterschiedliche Holzkohledichten haben keinen wesentlichen Einfluss auf die Bett-
höhe, jedoch Einfluss auf die Pyrolyse- und Holzkohleabbranddauer. Geringere Holz-
kohledichten führen zu beschleunigtem Bettabbrand aufgrund der größeren verfügba-
ren Oberfläche.
- Ein stärkeres Zusammensacken des Bettes (bedingt durch geringere Aschegehalte
bzw. geringere Holzkohledichten) verlangsamt das Ende des Holzkohlenausbrandes.

Basieren auf den Ergebnissen der CFD-Simulationen mit dem neuen Bettmodell ist es nun möglich, einen besseren Einblick in die Vorgänge im Brennstoffbett zu erhalten und daraus wichtige Informationen für die Gestaltung von Brennstoffmulden, Primärluftdüsen, Sekundärluftdüsen und die Regelung der Verbrennung zu erhalten, sowie die komplexen Interaktionen einzelner Einflussparameter besser zu verstehen.

Die Möglichkeit, dass relevante Einflussparameter direkt im Bettabbrandmodell berücksichtigt werden können, ermöglicht es, diese im Zuge einer Technologieentwicklung von Pelletöfen und Pelletkesseln auch gezielt zu berücksichtigen.

Quellenverzeichnis

- [1] A. KAZAKOV AND M. FRENKLACH, <http://combustion.berkeley.edu/drm/>
- [2] ANCA-COUCÉ ET AL. ENERGY CONVERSION AND MANAGEMENT 87 (2014) PP. 687–696
- [3] C.T. BOWMAN, R.K. HANSON, D.F. DAVIDSON, W.C. GARDINER, JR., V. LISSIAWSKI, G.P. SMITH, D.M. GOLDEN, M. FRENKLACH AND M. GOLDENBERG, http://www.combustion.berkeley.edu/gri_mech/
- [4] E. RANZI ET AL., “CHEMICAL KINETICS OF BIOMASS PYROLYSIS,” Energy Fuels 22, 6, pp 4292–4300, 2008
- [5] E. RANZI, M. CORBETTA, F. MANENTI, AND S. PIERUCCI, “Kinetic modeling of the thermal degradation and combustion of biomass,” Chem. Eng. Sci., 2014
- [6] GOERNER, K.; KLASSEN, T. (2006): Modelling, simulation and validation of the solid biomass combustion in different plants. Progress in Computational Fluid Dynamics, An International Journal (PCFD), Vol. 6, No. 4/5
- [7] GOMEZ, M.A.; PORTEIRO, J.; PATINO, D.; MIGUEZ, J.L.(2014) CFD modelling of thermal conversion and packed bed compaction in biomass combustion. Fuel 117 (5), pp 716-732
- [8] H. Lu, “Experimental and Modeling Investigations of Biomass Particle Combustion,” PhD-thesis, Dep. Chem. Eng., Brigham Young University (USA), 2006.
- [9] MARTIN H., Chemical Engineering Science, 1978, Vol 33, pp. 913-919
- [10] MEHRABIAN R., SHIEHNEJADHESAR A., SCHARLER R., OBERNBERGER I., Fuel, 2014, Vol. 122, pp. 164–178
- [11] P. PETERMEIER, “Kinetic modelling of thermal product gas reformation for countercurrent biomass gasification,” MS thesis, Graz University of Technology, 2020.
- [12] PEDERSEN K., 2003: Master thesis. Technical University of Denmark, Denmark
- [13] SIMSEK, E.; BROSCHE, B.; WIRTZ, S.; SCHERER, V.; KRÜLL, F. (2009): Numerical simulation of grate firing systems using a coupled CFD/discrete element method (DEM), Powder Technology 193 (3)
- [14] VEREIN DEUTSCHER INGENIEURE, VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (GVC) (Hg.), 2013: VDI-Wärmeatlas, 11., bearbeitete und erweiterte Auflage