

Anwendungsorientierte Modellierung der Verbrennung auf Rostsystemen

- Einsatzbereiche, Modellvorstellung, Schwierigkeiten -

Dipl.-Ing. Torsten Reindorf (V); Dr.-Ing. Stefan Vodegel

Clausthaler Umwelttechnik – Institut GmbH (CUTEC)

1 Vorgänge bei der Verbrennung auf dem Rost

Der Verbrennungsvorgang auf dem Rost kann in einzelne Zonen bzw. thermische Prozessschritte unterteilt werden. Demnach gliedert sich der Verbrennungsverlauf fester Brennstoffe in die Teilprozesse: Trocknung, Entgasung/Pyrolyse, Zündung, Vergasung, Verbrennung, Ausbrand und Abkühlung.

Der Trocknungsprozess wird primär durch die Feuerraumstrahlung und die Primärluft eingeleitet. Der Ablauf wird hauptsächlich durch Mechanismen der Wärme- und Stoffübertragung sowie durch die hygroskopischen Eigenschaften des Feststoffes beeinflusst. Hierbei sind, je nach Eigenschaften des Feststoffes, bis zu drei Trocknungsabschnitte erkennbar, die sich durch verschiedene Trocknungsgeschwindigkeiten auszeichnen. Nach weiterer Wärmezufuhr erfolgt die Entgasung bzw. Pyrolyse, also die Freisetzung der flüchtigen Bestandteile des Brennstoffs. Der brennbare Rest des Brennstoffes liegt danach in Form von Pyrolysekoks vor.

Die Zündung ist ein komplexer instationärer Vorgang, der als Anlaufvorgang betrachtet werden kann und abhängig ist von den chemisch-physikalischen Eigenschaften des Brennstoffes, den vorliegenden Wärme- und Stoffübertragungsverhältnissen und dem O₂-Gehalt des Reaktionsgases [Rosin 1935]. Es kann daher keine allgemeingültige Aussage über die notwendigen Zündbedingungen (insbesondere Temperaturen) getroffen werden. Vereinfacht dargestellt handelt es sich bei der Zündung um eine in Gang kommende chemische Reaktion, die ab diesem Punkt selbst erhaltend unter Wärme-freisetzung bis zum vollständigen Verbrauch des Brennstoffes abläuft.

Die beim Entgasungsvorgang freigesetzten Gase werden oberhalb des Brennstoffbettes gezündet und bei ausreichenden Sauerstoffmengen verbrannt. Neben der Zündung der homogenen Gasphasenreaktionen, die bei relativ niedrigen Temperaturen (250-300°C) ablaufen, besteht ein zweiter Zündpunkt, in dem die Umsetzung des festen Kokes beginnt (heterogene Feststoffreaktion). Dies ist jedoch erst bei deutlich höheren Temperaturen der Fall (750-800°C). Die zur Zündung erforderliche Wärme wird dem Brennstoff

durch Strahlung und Wärmeleitung zugeführt. Mischen von gezündetem und ungezündetem Brennstoff kann den Vorgang unterstützen. Vergasung tritt ein, wenn der bei der Entgasung zurückgebliebene Koks zusammen mit einem Vergasungsmittel ab Temperaturen von ca. 600°C in den gasförmigen Zustand übergeht. Die Zündtemperatur liegt bei etwa 800°C und muss für eine kontinuierliche Vergasung stetig erreicht werden. Nach der Zündung erfolgt oberhalb des Müllbettes und in den Hohlräumen der Brennstoffschüttung die Verbrennung der bei Entgasung und Vergasung gebildeten Gase. Die fortschreitende Verbrennung wird als Ausbrand bezeichnet. Gegen Ende der Feuerungsstrecke muss der vollständige Ausbrand des Brennstoffes nahezu erreicht sein (Massenanteil TOC < 1 %) um die Deponierung der Verbrennungsrückstände zu erlauben. Schließlich werden die Verbrennungsrückstände am Ende des Rostes durch die hindurchströmende Primärluft gekühlt, wobei die sensible Wärme an den Luftstrom übertragen wird.

Eine vereinfachte Darstellung der einzelnen Verbrennungszonen zeigt Abbildung 1. Die Lage und Größe der einzelnen Bereiche ist nicht fest vorgegeben; vielmehr bilden sich die einzelnen Zonen, je nach den örtlichen Zuständen (Temperatur, Sauerstoffangebot), unterschiedlich stark aus.

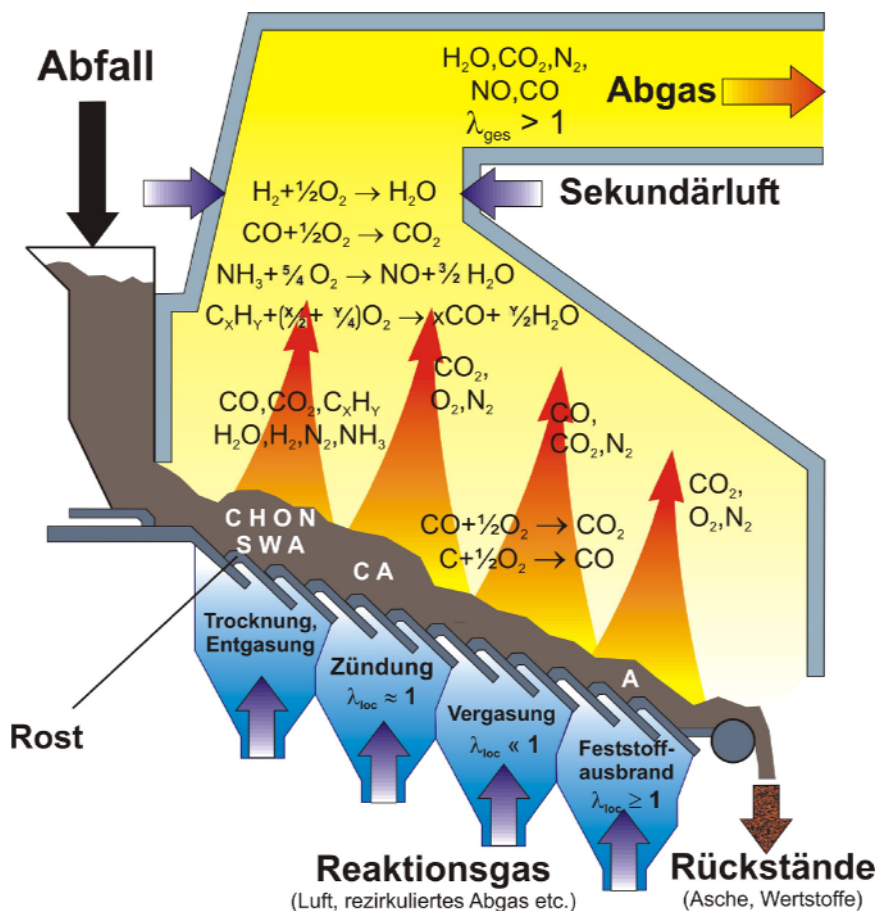


Abbildung 1 Schematische Darstellung der Verbrennungsprozesse auf dem Rost

2 Anwendungsgebiete von Feuerungsmodellen

2.1 Modell als Präprozessor für CFD-Programme

Programme zur numerischen Strömungssimulation (CFD = computational fluid dynamics) haben sich in den letzten Jahren im Zuge der sprunghaften Entwicklung der Computertechnologie rasant weiterentwickelt und mehr und mehr als Werkzeug zur Unterstützung bei der Entscheidungsfindung in Planung und Betrieb durchgesetzt. Während bei Reaktoren, in denen nur Gase reagieren, bereits recht gute Übereinstimmung mit der Realität erzielt wird, ist dies bei Reaktoren mit aufgeschütteten Festbrennstoffen nicht ohne weiteres möglich. Bisherige Simulationen von Rostfeuerungsanlagen begannen daher meist an der Obergrenze des Brennstoffbettes und die notwendigen Randbedingungen (Konzentrationen, Temperaturen, Strömungsgeschwindigkeiten) für die dort einströmenden Gase wurden anhand von Abschätzungen, Erfahrungswerten oder Messungen anderer Anlagen vorgegeben. Die Wahl der Randbedingungen legt jedoch bei CFD-Simulationen auch die Ergebnisse fest. Falsche Randbedingungen führen zu falschen Ergebnissen!

Hier können Rostmodelle einen Beitrag dazu leisten die Randbedingungen und somit die Aussagekraft von CFD-Simulationen zu verbessern. Da Modelle die physikalisch-chemischen Zusammenhänge berücksichtigen, kann – bei geeigneter Belastbarkeit der erhaltenen Ergebnisse – die Qualität der Randbedingungen verbessert werden. Insbesondere, wenn verschiedene Betriebszustände oder Anlagengeometrien zu untersuchen sind, sind Modelle gegenüber Annahmen und Abschätzungen im Vorteil. Für diesen Anwendungsfall sind bereits mehrere Modelle entwickelt worden [Swithenbank 2001, Swithenbank 2003, Görner 2002, Wolf 2003, Modigell 2003, Riccius 1999, Ménard 2002]. Auch vollständig gekoppelte Festbett- und CFD- Simulationen liegen vor z.B. [Krüll 2001].

2.2 Modell als Basis für besseres Prozessverständnis

Anhand von mathematischen Modellen können Prozesse untersucht oder Experimente durchgeführt werden, die in der Praxis zu aufwendig, zu teuer oder gar unmöglich sind oder in der Realität zu lange dauern. Bei genügend kurzer Rechenzeit haben sie weiterhin den Vorteil, dass schnell recht viele Parameter und Parameterkombinationen variiert werden können und der sich daraus ergebende Einfluss beurteilt werden kann. Sie können somit erste Einsichten vermitteln wo sonst aufwendige Versuchsreihen notwendig wären.

Selbstverständlich können Modelle praktische Erfahrung und Experiment nicht ersetzen. Dennoch können Sie dazu beitragen, z.B. durch Eingrenzung des interessanten Parameterbereiches im Vorfeld von Experimenten oder durch Schulung des Betriebs-

personals vor dem erstmaligen Bedienen einer Anlage den Verständniserwerb zu beschleunigen und zu verbessern. Sie sind daher nicht als Ersatz sondern als Unterstützung für Experimente und praktische Erfahrung zu sehen.

Modelle, die auf dieses Anwendungsgebiet ausgerichtet sind finden sich z.B. in [Cramer 2000, Urban 1991, Van Kessel 1995].

2.3 Modell als Baustein einer modellprädiktiven Regelung

Bei modellprädiktiven Regelungsverfahren wird mit Hilfe eines Prozessmodells (basierend auf mathematischen Modellen, Fuzzy-Logic oder neuronalen Netzen) ein Abbild der Regelstrecke geschaffen, das in der Lage ist die Ausgangsgrößen für beliebige Eingangsgrößen zu berechnen. Dadurch ist es möglich ‚zukünftig‘ stattfindende Veränderungen des Prozesses vorzuberechnen und daraus frühzeitig Maßnahmen abzuleiten, die den Prozess in den Soll-Zustand überführen.

Bisher werden diese Verfahren in Feuerungsanlagen nur auf Teilbereiche angewandt [Qin 1998, Lautala 1990, Birk 1999]. Die Integration eines vollständigen Verbrennungsmodells ist bisher nicht bekannt. Dies kann darauf zurückgeführt werden, dass die Anzahl der Systemgrößen sehr hoch ist, nicht alle Größen messtechnisch erfassbar und viele Zusammenhänge nicht bekannt sind. Insbesondere treten komplizierte nichtlineare Zusammenhänge und Rückkopplungseffekte auf, und bestimmte Modellparameter wie brennbare Oberfläche, Diffusionswerte usw. sind online nicht zu bestimmen.

Dennoch könnten auch hier in Zukunft mathematische Modelle nutzbar gemacht werden. An der Entwicklung einer solchen modell-basierten Regelung wird bereits gearbeitet [Van Kessel 2002].

3 Modellierung

3.1 Anforderungen

Unter Modellierung versteht man die Beschreibung von Prozessen, Zuständen oder Eigenschaften mit mathematischen Formulierungen naturwissenschaftlicher Grundlagen oder technischer Zusammenhänge. Ziel ist im Allgemeinen das reale – genau genommen: das in der Realität beobachtbare bzw. messbare - Verhalten korrekt widerzugeben. In Ausnahmefällen kann jedoch auch das Ziel sein, das Verhalten oder die Eigenschaften eines bestimmten Systems unter physikalisch unmöglichen Bedingungen zu untersuchen. Beim Ergebnis der Modellierung – dem mathematischen Modell – handelt es sich also um eine abstrahierte Beschreibung des realen Phänomens.

An ein Modell, das neben der Reproduktion und Untersuchung theoretischer Zusammenhänge vor allem die Verwendbarkeit in der Praxis ermöglichen soll, stellen sich außer Exaktheit weitere Anforderungen. Insgesamt sollte ein anwendungsorientiertes Modell nach **kurzer Einarbeitungszeit, leicht zu bedienen** sein und **schnell**, für den Praktiker **nachvollziehbare, ausreichend genaue Ergebnisse** erzielen.

Da sich die Anforderungen ‚Genauigkeit‘ und ‚Geschwindigkeit‘ widersprechen, kann ein anwendungsorientiertes Modell im besten Fall nur den Kompromiss ‚So genau wie nötig und so schnell wie möglich‘ erfüllen.

3.2 Bestehende Modelle

In der Vergangenheit wurde eine Vielzahl von Modellen zur Beschreibung der Verbrennung verschiedener Feststoffe (Kohle, Holz, Abfall) in unterschiedlichsten Verfahren (Staubfeuerung, Wirbelschicht, Festbett, Rostfeuerung, usw.) entwickelt, die hier nicht vollständig wiedergegeben werden kann. Dennoch sollen hier einige grundsätzliche Unterschiede verdeutlicht und einige Arbeiten erwähnt werden, die dem interessierten Leser einen Einstieg in die Thematik bieten.

Die Einordnung oder der Vergleich verschiedener Modelle kann anhand mehrerer Kriterien erfolgen (z.B. Dimensionalität, stationär/instationär, Reaktionsmodell u.ä.), so dass sich je nach Wahl des Unterscheidungsmerkmals eine andere Systematik ergibt. Hier wird die Unterscheidung anhand der örtlichen Auflösung vorgenommen, die auch als Indiz für die Ausrichtung ‚grundlagenorientiert‘ oder ‚anwendungsorientiert‘ genommen werden kann. Nachfolgend werden einige Modellansätze, beginnend bei den Einfachen und fortschreitend zu den Komplexeren, kurz beschrieben.

3.2.1 Rührkesselmodelle

Wie bereits dargestellt muss bei anwendungsorientierten Modellen darauf geachtet werden, dass die Modellvorstellung möglichst einfach ist, um für den Praktiker nachvollziehbar und leicht verständlich zu sein und schnelle Berechnungen zu ermöglichen. Die realen Vorgänge müssen daher stark vereinfacht, abstrahiert und idealisiert werden. Hier haben sich in der Vergangenheit Rührkesselmodelle [Levenspiel 1999] bewährt, bei denen das Brennstoffbett oder die Feuerung in Teilbereiche unterteilt wird, von denen man annimmt, dass sie ideal durchmischt sind [Beckmann 1995, Gruber 1993, Modigell 2003, Ryu 2002].

Diese Gruppe von Modellen kann man weiter unterscheiden in homogene Modelle, bei denen Gas- und Feststoffphase in einem Rührkessel zusammengefasst werden, und heterogene Modelle, bei denen je ein Rührkessелеlement für die beiden Phasen vorgesehen wird. Heterogene Rührkesselmodelle haben den Vorteil, dass, aufgrund unter-

schiedlicher Zustandsgrößen in den einzelnen Rührkessелеlementen, der Stoff- und Wärmeübergang genauer abgebildet werden kann. Auch die Art, wie aus der Berechnung des Brennstoffumsatzes die Profile der Größen entlang des Rostes ermittelt werden, kann unterschiedlich sein. Entweder werden mehrere Rührkessel zu einer Kaskade zusammengeschaltet, die entlang der Transportrichtung vom Brennstoff durchströmt wird (Eulersche Betrachtungsweise) oder ein einziges Rührkessелеlement wird entsprechend der Transportgeschwindigkeit längs des Rostes verschoben (mitfahrender Beobachter, Lagrange'sche Betrachtungsweise).

3.2.2 Kontinuumsmodelle

Bei der Abbildung der Festbettverbrennung mit Hilfe von Kontinuumsmodellen wird meistens die so genannte Finite-Volumen-Methode verwendet, die starke Ähnlichkeit mit Rührkesselmodellen aufweist. Auch hier wird das Brennstoffbett in Teilbereiche (Zellen) unterteilt und der Verbrennungsvorgang in jeder Zelle betrachtet. Der Hauptunterschied besteht darin, dass bei Kontinuumsmodellen an den Grenzflächen zwischen zwei Zellen mit interpolierten Größen gerechnet wird, wohingegen bei der Rührkesselmethode die Größen identisch zu denen im Inneren der Zelle sind. Ein weiterer Unterschied kann in der Methode bestehen wie das Differentialgleichungssystem, das den Prozess beschreibt, gelöst wird. Während bei Kontinuumsmodellen das System aus **partiellen Differentialgleichungen** in seiner **Gesamtheit** gelöst wird (mit Verfahren aus der numerischen Strömungsmechanik), wird bei Rührkesselmodellen in der Regel ein System aus **gewöhnlichen Differentialgleichungen** für **jede Zelle** gelöst.

Kontinuumsmodelle sind u.a. in [Swithenbank 2001, Swithenbank 2003, Krüll 2001, Raupenstrauch 1991] beschrieben.

3.2.3 Einzelpartikelmodelle

Bei diesen Modellen wird ein einziger, in der Regel als Kugel angenäherter und für die Gesamtheit der Partikel als repräsentativ angesehener, Brennstoffpartikel betrachtet und dessen Abbrand eindimensional als Funktion des Radius beschrieben. Diese Modelle können anhand der Art, wie sich der Partikel während des Abbrandes verändert, weiter klassifiziert werden. Hier sind das sog. ‚shrinking particle‘ Modell zu nennen, bei dem sich der Partikeldurchmesser mit fortschreitendem Abbrand kontinuierlich verringert, sowie das ‚shrinking core‘ Modell, bei dem der Durchmesser durch den Abbrand unbeeinflusst bleibt und stattdessen eine schalenförmige Reaktionsfront ins Innere des Partikels wandert. Weiteres Unterscheidungsmerkmal kann sein, ob das Modell die Bildung von Poren im Partikel berücksichtigt oder nicht.

Besonders für die Untersuchung der Vorgänge in Kohlenstaub- oder Wirbelschichtfeuerungen sind zahlreiche Modelle dieser Art entwickelt worden z.B. [Ranke 1990, Quang

1999]; für den Bereich der Abfallverbrennung finden sich Modelle in [Peters 2001, Lohf 1999].

3.2.4 Partikelmodelle

Partikelmodelle beschreiben den Zustand der Feuerung durch die Zustände aller enthaltener Partikel. D. h. für **jeden** Partikel der Schüttung wird mit Hilfe eines Einzelpartikelmodells der Verbrennungsvorgang berechnet. Ergänzt wird diese Berechnung durch gekoppelte Modelle, welche die Vorgänge in der Gasphase, den Wärmeübergang zwischen den Partikeln und zwischen Schüttung und Fluid, sowie den Transport der Partikelschüttung beschreiben. Ein vollständiges Modell dieser Art existiert bisher nicht, an der Entwicklung der Einzelmodelle und deren Kopplung wird jedoch zur Zeit gearbeitet [Peters 2000, Peters 2002].

3.3 Vereinfachte Modellvorstellung

3.3.1 Prinzip des vereinfachten Modells

Bei dem hier beschriebenen Modell handelt es sich um ein zweidimensionales, instationäres, heterogenes Rührkesselmodell, bei dem der Feuerraum längs des Rostes und über der Höhe in Zellen eingeteilt wird.

Jede der Zellen enthält eine Feststoffphase (Brennstoff) mit bestimmten Eigenschaften (Masse, äquivalenter Partikeldurchmesser, Porenvolumen, Zusammensetzung, Temperatur usw.) und eine Gasphase, die jeweils als idealer Rührkessel aufgefasst werden. Im Inneren der Zellen liegen somit für die Zustandsgrößen der einzelnen Phasen keine Gradienten vor, die Zustandsgrößen der Feststoff- und Gasphase können sich jedoch unterscheiden. Die Annahme eines idealen Rührkessels impliziert weiterhin, dass auch die Brennstoffpartikel im Innern gradientenfrei sind. Aufgrund dieser Annahmen kann eine solche Zelle als Gebiet verstanden werden, das eine bestimmte Anzahl von Partikeln zusammenfasst und anhand gemittelter Eigenschaften beschreibt.

Die Zellen werden ortsfest betrachtet und stehen über ihre Grenzflächen, über die Stoff- und Energieströme fließen können, in gegenseitigem Kontakt (Abb. 2). Der Verbrennungsvorgang wird – unterteilt in Teilmodelle – für jede Zelle mit Hilfe der Erhaltungsgleichungen und konstitutiver Gleichungen instationär beschrieben und das entstehende Differentialgleichungssystem numerisch gelöst.

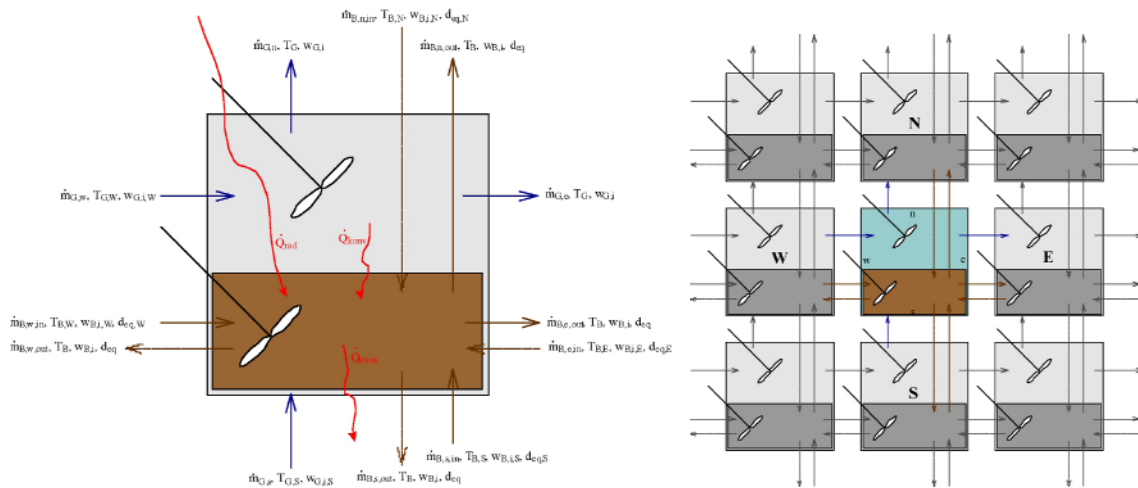


Abbildung 2 Zelle als idealer Rührkessel und Verschaltung zu einer Rührkesselkaskade

3.3.2 Trocknungsmodell

Die Stoffmenge an verdampftem Wasser kann alternativ aus zwei Ansätzen berechnet werden. Entweder mit Hilfe einer empirischen Gleichung, welche die Trocknung in Analogie zu einer Reaktion erster Ordnung beschreibt (Gl. 1), oder aus der Enthalpiebilanz des Brennstoffes (ist die Temperatur des Brennstoffes größer als die Verdampfungstemperatur des Wassers wird die Temperaturdifferenz zur Verdampfung genutzt, Gl. 2).

$$\dot{n}_{H_2O} = -k_{Trocknung} \cdot e^{-\frac{E_{a,Trocknung}}{RT}} \cdot n_{H_2O} \quad (Gl. 1)$$

$$\dot{n}_{H_2O} = -\frac{n_{Br} \cdot c_{p,Br} \cdot (T - T_{evap})}{h_{evap} \Delta t} \quad (\text{wenn } T > T_{evap} \text{ sonst } 0) \quad (Gl. 2)$$

Die unterschiedlichen Trocknungsabschnitte werden dabei zur Zeit vernachlässigt.

3.3.3 Pyrolysemodell

Die Freisetzung flüchtiger Bestandteile des Brennstoffes sowie dessen thermische Zersetzung werden zusammengefasst und mit Hilfe von Freisetzungsreaktionen nach Gleichung 3 beschrieben. Die Temperaturabhängigkeit wird durch den Arrhenius-Ansatz berücksichtigt.

$$\dot{n}_i = -k_{i,0} \cdot e^{-\frac{E_{a,i}}{RT}} \cdot n_i^r \quad (Gl. 3)$$

Das Modell berücksichtigt derzeit folgende Gaskomponenten: CO, CO₂, C_xH_y, H₂, H₂O, N₂, O₂, NH₃, HCN, HNCO, C₄H₅N, NO, HF, HCl, SO₂. Bei der Pyrolyse gebildete Öle und Teere werden bisher nicht berücksichtigt. Es wird angenommen, dass die Pyrolysegase in ‚reiner Form‘ im Brennstoff eingelagert sind, beim Entweichen Hohlräume im

Innern der Partikel entstehen lassen und so zu einer Vergrößerung der Porenoberfläche beitragen.

3.3.4 Koksabbrandmodell

Für die Berechnung des Koksabbrandes wurden im Bereich der Kohleverbrennung eine Vielzahl von Ansätzen entwickelt [Specht 1993, Szekeley 1976]. Hier wird ein Ansatz verwendet, der in [Görner 1991] beschrieben ist. Es wird angenommen, dass der nach Trocknung und Pyrolyse verbleibende Koks über zwei Schritte reagiert. Im ersten Reaktionsschritt (heterogene Vergasungsreaktion, R 1) wird der Kohlenstoff zu Kohlenmonoxid oxidiert. Hierbei spielt das an der äußeren und inneren Partikeloberfläche vorliegende Sauerstoffangebot (Partialdruck) eine entscheidende Rolle.

Der Verbrennungsvorgang wird durch die in der Korngrenzschicht ablaufenden, gekoppelten Prozesse des Stoff- und Wärmeübergangs, im wesentlichen Transport des Oxidationsmittels zur äußeren und inneren Oberfläche, chemische Reaktion und Rücktransport der Reaktionsprodukte, bestimmt. Somit ergibt sich die effektive Reaktionsgeschwindigkeit (Gl. 6+7) aus dem Zusammenspiel der chemischen Reaktionsgeschwindigkeit (Gl. 4) und des durch Grenzschicht- und Porendiffusion begrenzten Stofftransportes (Gl. 5).



$$k_{chem} = k_{0,chem} \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (\text{Gl. } 4)$$

$$k_{diff} = \frac{M_C \cdot Sh \cdot D_0}{R \cdot d_{eq} \cdot T} \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1,75} \quad (\text{Gl. } 5)$$

$$k_{eff} = \frac{1}{\frac{1}{k_{diff}} + \frac{1}{k_{chem}}} \quad (\text{Gl. } 6)$$

$$\dot{M}_C = -k_{eff} \cdot A \cdot p_{O_2} \cdot \frac{1}{M_C} \quad (\text{Gl. } 7)$$

Das gebildete CO reagiert anschließend in einer homogenen Gasphasenreaktion (R 2) weiter zu Kohlendioxid. Es wird angenommen, dass der Koksumsatz zu einer Reduzierung des Partikeldurchmessers führt („shrinking particle“ [Levenspiel 1999]). Andere Vergasungsreaktionen (z.B. Boudouard-Reaktion, Wassergas-Reaktion) werden bisher nicht berücksichtigt. Sie können jedoch aufgrund der gewählten Modellstruktur zukünftig eingearbeitet werden.

3.3.5 Reaktionsmodell

Die ablaufenden homogenen Gasphasenreaktionen werden als Globalreaktionen betrachtet und der Umsatz aus der Kinetik der Reaktion bestimmt. Die benötigten kinetischen Parameter, die angeben, ob und wie schnell bei einer bestimmten Temperatur eine Reaktion abläuft, können Datenbanken [NIST] oder der Literatur entnommen werden. Es sind die nachfolgend genannten Reaktionen (R 2-5) berücksichtigt.

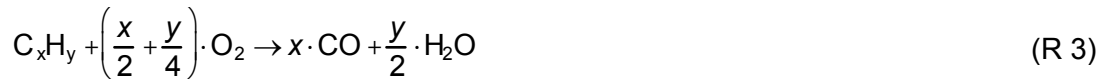
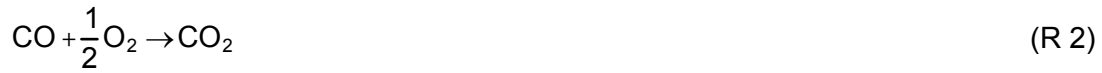


Abbildung 3 zeigt schematisch das Regime der einzelnen Verbrennungsphasen in Anlehnung an [Gruber 1993].

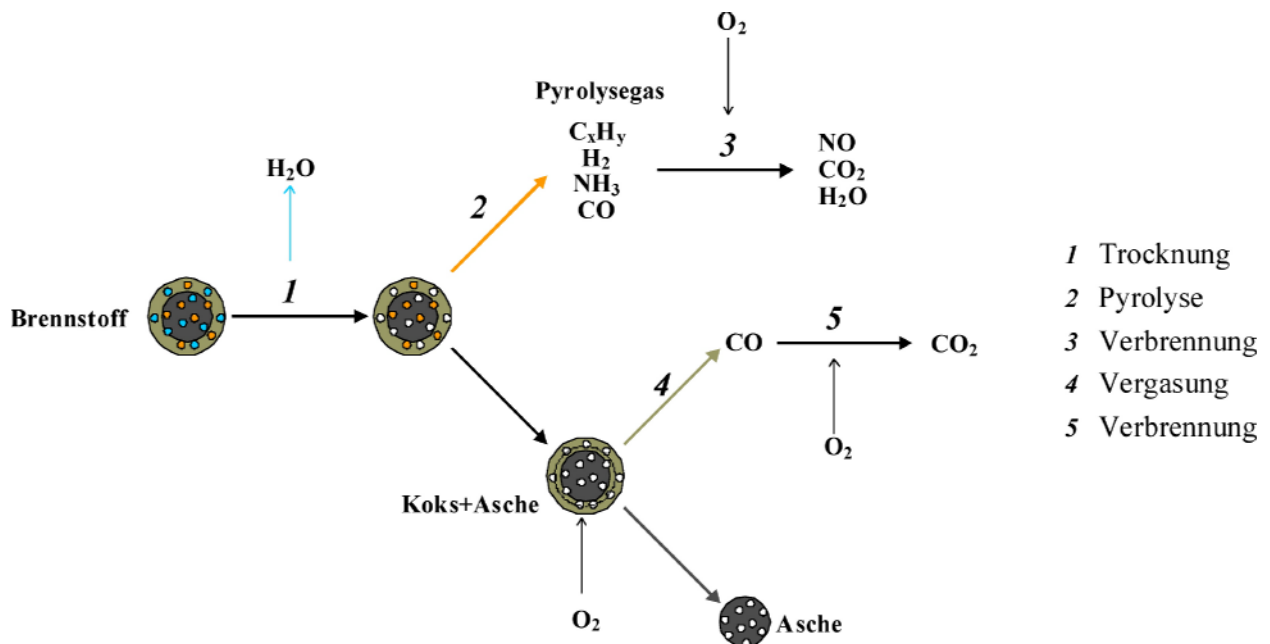


Abbildung 3 Schematische Darstellung des Ablaufes der einzelnen Verbrennungsphasen

3.3.6 Wärmeübergangs- und Stofftransportmodell

Es werden Strahlung, Konvektion und Wärmeleitung als wärmeübertragende Mechanismen zwischen Gasphase und Brennstoff berücksichtigt. Ein Feuerraummodell, das den konvektiven Wärmeübergang an die Feuerraumwände und den Strahlungsaus-

tausch innerhalb des Feuerraumes berücksichtigt, ist derzeit nicht enthalten. Auch die speziellen Strahlungseigenschaften des Abgases werden nicht berücksichtigt.

Der Transport des Brennstoffes kann bisher nicht exakt beschrieben werden, da es sich um ein granulares Medium handelt. Modelle zur Simulation von bewegten Schüttungen existieren zwar, es ist jedoch fraglich in wie weit spezielle Effekte (z.B. Aufschmelzen und Zusammenbacken der Partikel, Aufbrechen der Partikel usw.) darin berücksichtigt werden können. Aus diesem Grund wird der Brennstofftransport, ausgedrückt durch den aus einer Zelle austretenden Brennstoffmassenstrom, mit Hilfe einer empirischen Gleichung beschrieben (Gl. 11), die von der Massendifferenz in zwei benachbarten Zellen als treibendes Potential ausgeht. Die darin enthaltenen Faktoren beschreiben den Transport aufgrund der Schwerkraft (TF1) und den durch die Roststäbe induzierten Transport (TF2); sie werden anhand der sich einstellenden Schüttungshöhe validiert.

$$\dot{m}_{Br} = TF_1 \cdot \sqrt{(m_{Br} - m_{Br,E})} + TF_2 \cdot m_{Br} \quad (\text{Gl.8})$$

Von der Gasströmung wird angenommen, dass sie das Festbett in vertikaler Richtung verlässt. Diese Annahme kann als zulässig betrachtet werden, wenn man davon ausgeht, dass sich die Impulse in Querrichtung gegenseitig aufheben. Oberhalb des Bettes wird die Strömungsrichtung vorgegeben. Diese Vereinfachung ist zwar ungünstig, da das Ziel dieses Simulationsprogramms aber hauptsächlich die Berechnung von Randwerten für ein Programm zur numerischen Strömungssimulation ist durchaus zulässig. Die genaue Berechnung der Strömung kann dann mit einem CFD-Programm erfolgen.

3.4 Simulationsprogramm

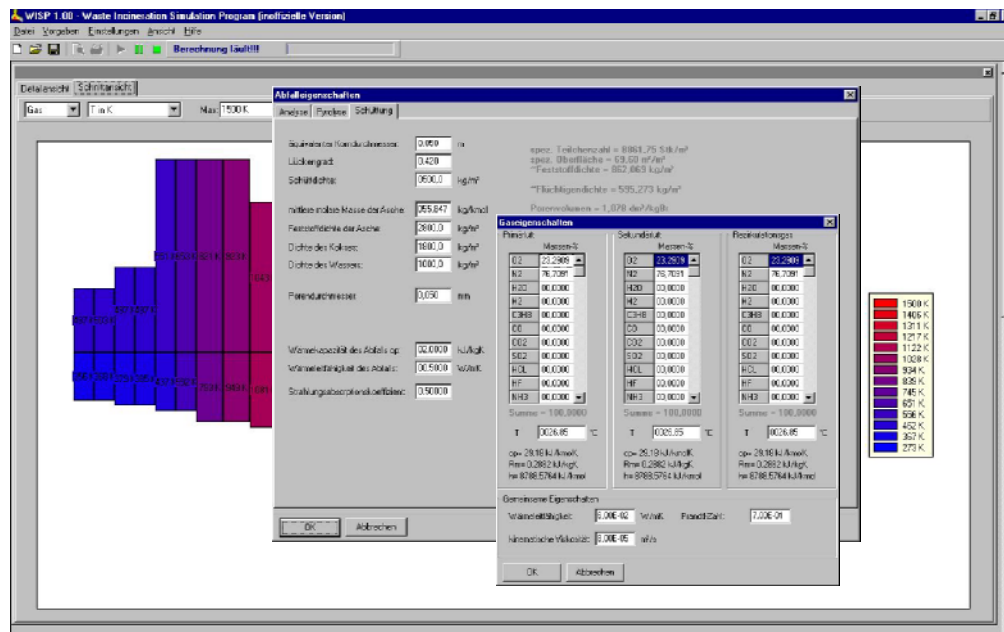


Abbildung 4 Benutzeroberfläche des entwickelten Simulationsprogramms

Das hier beschriebene Modell wurde in der Programmiersprache C++ objektorientiert programmiert und mit Hilfe einer professionellen Entwicklungsumgebung in eine eigenständige Software umgesetzt. Abbildung 4 (vorherige Seite) zeigt die Benutzeroberfläche des Programms.

4 Forschungsbedarf und Schwierigkeiten

4.1 Forschungsphase

Bei genauer Untersuchung der Einzelvorgänge und der zugehörigen Modellvorstellungen wird man feststellen, dass in allen Bereichen Fälle existieren, die mit den bisher bestehenden Modellen und Theorien nicht mehr oder nur unzureichend beschreibbar sind. Es kann daher an dieser Stelle keine vollständige Übersicht über den Forschungsbedarf gegeben werden, sondern nur eine ‚Sensibilisierung‘ für die Problematik anhand einiger ausgewählter Teilbereiche erfolgen.

Ein Schwerpunkt laufender und zukünftiger Forschungsarbeiten kann in dem Verständnis der Zersetzung des festen Brennstoffes während der Pyrolyse gesehen werden. Hier hat sich in vergangenen Forschungsarbeiten (z.B. [Seifert 2003]) gezeigt, dass die Zusammensetzung des Pyrolysegases von einer Vielzahl von Faktoren (z.B. Sauerstoffgehalt des zugeführten Gases, Aufheizgeschwindigkeit, Temperaturverlauf, Brennstoff) abhängt, deren Einfluss derzeit nicht hinreichend bekannt ist. Aus diesem Grund wird in allen Arbeiten zur Modellierung der Feststoffverbrennung die Pyrolyse stark vereinfacht beschrieben. Aufgrund der Vielzahl von Einflussfaktoren und deren wechselseitigen Abhängigkeiten scheint eine detaillierte Untersuchung mit Hilfe von Parametervariationen und nachfolgender phänomenologischer Beschreibung wenig aussichtsreich zu sein. Einen Erfolg versprechenderen Eindruck macht hier die quantenmechanische Beschreibung der Zersetzungs Vorgänge, welche eine Vorhersage der abgespalteten Moleküle oder Molekülgruppen ausgehend von der Betrachtung ihrer jeweiligen Schwingungszustände erlaubt. Zwar ist eine solche Berechnung für komplexe chemische Strukturen, wie sie bei Festbrennstoffen vorliegen, bei derzeitigen Rechnerleistungen sicherlich nicht in annehmbarer Zeit durchführbar, unter der Annahme, dass die Leistung von Computern in Zukunft weiter ansteigt, kann dies aber in Zukunft möglich werden. Der begrenzende Faktor für den Einsatz dieser Methode scheint dann eher die genaue Kenntnis des chemischen Aufbaus zu sein.

Auch die Beschreibung komplexer chemischer Reaktionen stellt ein weites Forschungsfeld dar. Zwar können Vorgänge mit Hilfe detaillierter Reaktionsmechanismen, die eine Vielzahl an Elementarreaktionen umfassen, formal nahezu beliebig genau beschrieben werden, gekoppelt mit Strömungssimulationen ist dies zur Zeit dennoch nicht uneingeschränkt möglich. Des Weiteren zeigt sich hierbei, dass neben dem Reaktionsmodell

auch das gewählte Turbulenzmodell einen entscheidenden Einfluss auf die Simulationsergebnisse hat. In Verbindung mit den immer komplizierteren Reaktionsmechanismen ergibt sich zudem die Schwierigkeit, die kinetischen Parameter aller Einzelreaktionen zu bestimmen.

Die Beschreibung des Transportes fester Brennstoffe stellt, wie bereits erwähnt, ebenfalls ein bisher nicht hinreichend gelöstes Problem dar. Dies liegt daran, dass im Gegensatz zu Fluidströmungen, für den Transport granularer Medien bisher keine exakte physikalische Theorie besteht. Kann bei im Verhältnis zur Apparategeometrie kleinen Partikeldurchmessern eine Schüttung durchaus angenähert als Kontinuum betrachtet werden, so gilt dies bei großen Verhältnissen nicht mehr. Dies kann dadurch begründet werden, dass im Gegensatz zu Kontinua, bei denen Kräfteinwirkungen über weit reichende Wechselwirkungen weitergegeben werden ohne dass sich die Moleküle gegenseitig berühren, bei granularen Medien die Kraftweiterleitung durch unmittelbaren Kontakt der Partikel erfolgt. Eine bisher erfolgreiche und weiterhin aussichtsreiche Methode zur Beschreibung des Transportes solcher Medien stellen Diskrete Elemente Modelle dar, bei denen die Bewegung der Schüttung durch die Bewegung jedes einzelnen Teilchens beschrieben wird.

4.2 Entwicklungs- und Implementierungsphase

In der Phase der Entwicklung besteht die Hauptschwierigkeit in der Recherche, dem Verstehen, dem Abwägen verschiedener und letztlich der Auswahl der benötigten Teilmodelle. Dies wird dadurch erschwert, dass in der Regel mehrere Modelle implementiert und getestet werden müssen, bis eine Beschreibung gefunden wurde, die dem Problem adäquat und in sich konsistent ist.

Für die, sich der Entwicklungsphase anschließenden, Implementierungsphase des Modells kann die Problematik verkürzt durch die 80/20-Regel wiedergegeben werden:

- 80 % der Fehler befinden sich in 20 % des Programmcodes
- 80 % der geschwindigkeitsrelevanten Routinen befinden sich in 20 % des Codes
- 20 % problemspezifischem Quelltext stehen 80 % für Ein- und Ausgabe, Speichern- und Laden, Verwaltung und Funktionalität gegenüber
- 20 % der Entwicklungszeit werden für die eigentliche Implementierung, 80 % für die Überprüfung benötigt.

Zudem kann ein solches Modell nur zügig umgesetzt werden, wenn neben einem fruchtbaren Arbeitsumfeld und der notwendigen Soft- und Hardwareausstattung auch die Finanzierung für das Projekt gewährleistet ist. Gerade letzteres ist in Zeiten ,leerer

Kassen' nicht immer möglich. Auch solch einfache Faktoren wie ‚Ruhe am Arbeitsplatz‘ können, da es sich bei nahezu jeder Phase der Modellierung um ‚schöpferische‘ Tätigkeiten handelt, entscheidend zu einer raschen Entwicklung und sicheren Implementierung des Modells beitragen oder bei Nicht-Vorhandensein unter Umständen den Erfolg verhindern. Auch stellt das Gebiet der Modellierung umfangreiche Anforderungen an den Entwickler. Er muss über umfangreiche Kenntnisse in den Fachgebieten Physik, Chemie, Mathematik, Informatik und vor allem auch der Verfahrenstechnik verfügen und diese sicher anwenden können.

4.3 Anwendungsphase

Ist es trotz der oben genannten Schwierigkeiten gelungen ein funktionsfähiges und korrektes Modell zu erarbeiten, ist auch die Anwendung des Modells mit Problemen verbunden, denn in den einzelnen Teilmodellen enthaltene Faktoren und Parameter sind oftmals nicht bekannt und nur mit großem Aufwand bestimmbar. Bestehen beispielsweise für die kinetischen Parameter von chemischen Reaktionen umfangreiche Datenbanken oder für die Strahlungseigenschaften von Gasen ausreichend validierte Ansätze, so sind die kinetischen Parameter der Freisetzungsreaktionen oder die Strahlungseigenschaften des Brennstoffes und der Apparatewände kaum bestimmbar und in der Literatur nur wenig dokumentiert. Ähnliches gilt für Parameter wie den äquivalenten Durchmesser des Brennstoffes, die Porengröße, den Lückengrad der Schüttung, die Transport- und Schürungskoeffizienten, Wärmeleitfähigkeiten usw. Hier ist der Anwender gefordert auf Basis seines Wissens vernünftige Werte vorzugeben oder aber die fehlenden Parameter experimentell zu bestimmen.

Dennoch kann, trotz ungenauer Parameter, ein solches Modell zu Einsichten, Erkenntnissen und Ergebnissen führen welche die Inkaufnahme dieser Unzulänglichkeiten rechtfertigen.

5 Zusammenfassung

Mathematische Modelle der Verbrennung auf Rostsystemen können zur Berechnung von Randwerten für die numerische Strömungssimulation, zum Erwerb eines besseren Prozessverständnisses oder zukünftig sogar für die Regelung von Feuerungsanlagen dienen. Es bestehen bereits zahlreiche Modelle unterschiedlicher Komplexität und Genauigkeit. Die Entwicklung und Implementierung eines solchen Modells ist aufwändig und schwierig und stellt hohe Anforderungen an den Entwickler. Zur Verbesserung der Modelle und Modellvorstellungen, sowie der theoretischen Grundlagen besteht noch umfangreicher Forschungsbedarf.

6 Literatur

- Rosin, P.; Kayser, H.-G.; 1935 I Die Zündung fester Brennstoffe auf dem Rost; II Fehling, R. Untersuchungen über das Zündverhalten; Berichte der Technisch-Wirtschaftlichen Sachverständigenausschüsse des Reichskohlenrates; Berlin
- Swithenbank, J.; et.al. 2001 Developments in Incinerator Bed Modelling; 3rd International Symposium on Incineration and Flue Gas Treatment Technologies; 2-4 July; Brussels
- Swithenbank, J.; et.el. 2003 Waste Thermal Treatment: Strategic research Achievements; 4th International Symposium on Waste Treatment Technologies; 29 June – 2 July 2003, Sheffield, UK
- Swithenbank, J.; et.el. The Fluid Dynamic Incinerator Code (FLIC) For Modelling Incinerator Bed Combustion; User's Manual
- Görner, K.; Klasen, T. 2002 Betriebsoptimierung von thermischen Abfallbehandlungsanlagen durch CFD-Simulation; 13. DVV Kolloquium; Weimar 2002; 57-66
- Wolf, Ch.; Koralewska, R. 2003 Anwendungsorientierte Modellierung der Verbrennungsvorgänge auf Rostsystemen in MVA; VDI-Berichte Nr. 1750; 619-627
- Modigell, M.; Liebig, D.; 2003 Prozessmodellierung eines Biomasseheizkraftwerkes; VDI-Berichte Nr. 1750; 609-614
Weng, M.; Sunderman, B.
- Riccus, O.; Walther, A.; 1999 Design of Waste Incinerators Utilising CFD; 2nd International Symposium on Incineration and Flue Gas Treatment Technologies; Sheffield University; UK; Stoffel, B. July 1999
- Ménard, Y.; et. al. 2002 Transient combustion of municipal solid waste in a grate furnace: modelling and experiments; Waste Management 2002; 239-242
- Krüll, F. 2001 Verfahren zur numerischen Simulation von Müllrostfeuerungen; Diss. RU Bochum
- Cramer, J. 2000 Training Simulators For Biomass Fired Plants; 1st World Conference on Biomass for Energy and Industry; sevilla; Spain; 5-9 June 2000; 931-932
- Urban, A. I.; Stöwe, H. 1991 Ein dynamisches Modell zur Simulation der Müll-

- verbrennung; In: Margret Häckler, Andreas Jaeschke (Eds.): Informatik für den Umweltschutz / Computer Science for Environmental Protection, 6. Symposium, München, 4.-6. Dezember 1991, Proceedings. Informatik-Fachberichte 296; Springer Verlag
- Van Kessel, L.B.M; Brem, G. 1995 A dynamic model of a municipal solid waste incinerator; VDI-Berichte Nr. 1193; 421-428
- Qin, S.J.; Badgwell, T.J. 1998 An overview of nonlinear model predictive control applications; Nonlinear MPC Workshop, Ascona, Schweiz, 2.-6. Juni 1998
- Lautala, P.; Majanne, Y.; Henttonen, J. 1990 Model Based NO_x-Reduction Control in Power Plants, Proceedings of the 11th Triennial World Congress of the International Federation of Automatic Control, Tallin, Estonia, 13-17 August 1990
- Birk, W.; Johansson, A.; Medvedev, A. 1999 Model-Based Control for a Fine Coal Injection Plant, IEEE Control Systems, Feb. 1999
- Van Kessel, R.; Leskens, M. 2002 Model based optimization of MSWC process control; 13. DVV Kolloquium; Weimar 2002; 98-107
- Levenspiel, O. 1999 Chemical Reactor Engineering; John-Wiley & Sons; New York
- Beckmann, M. 1995 Mathematische Modellierung und Versuche zur Prozeßführung bei der Verbrennung und Vergasung in Rostsystemen zur thermischen Rückstandsbehandlung; Diss. TU Clausthal
- Beckmann, M.; Scholz, R. 1995 Simplified Mathematical Model of Combustion in Stoker Systems; Proceedings 3rd European Conference on Industrial Furnaces and Boilers; Lisbon; Portugal, 18.-21. 04. 1995, ISBN 972-8034-02-4, Vol. II, pp. 61-70
- Gruber, T. 1993 Vorgänge bei der Verbrennung von Hausmüll auf dem Rost; Diss. TU-Berlin
- Ryu, C.; Shin, D.; Choi, S. 2002 Combined Simulation of Combustion and Gas Flow in a Grate-Type Incinerator; Journ. of the Air & Waste Management Association; Vol. 52; 174-185
- Raupenstrauch, H. 1991 Ein Beitrag zur Computersimulation reagierender Schüttschichten; Diss. TU Graz

-
- | | | |
|---------------------------------------|------|---|
| Ranke, U. | 1990 | Kinetik der Pyrolyse und der Verbrennung von Steinkohlen unter besonderer Berücksichtigung des Sauerstoffpartialdruckes; Diss. RU Bochum |
| Quang, N.T. | 1999 | Pyrolyse und Verbrennung der Brennstoffe und Brennstoffgemische in zirkulierenden Wirbelschichtfeuerungen, Experiment und Modellierung; Diss. TU Dresden |
| Peters, B.; Krebs, L. | 2001 | Ein partikelauflösender Ansatz zur Simulation der Festbettverbrennung; VDI-Berichte Nr. 1629; 493-498 |
| Reinelt, D. | 1995 | Numerische Simulation der Zündung von heterogenen und homogenen Reaktionen beim Abbrand einer angeströmten Schüttung; Diss. RWTH Aachen |
| Lohf, A. | 1999 | Modellierung der chemisch-physikalischen Vorgänge im Müllbett von Rostfeuerungsanlagen; Diss. TU Darmstadt |
| Peters, B.; Krebs, L.; Frey, H.-H. | 2000 | Modellierung der Festbettverbrennung; Nachrichten – Forschungszentrum Karlsruhe Jahrg. 32 3/2000; 139-147 |
| Peters, B. | 2002 | Developments in Heat Transfer Vol. 15, Thermal Conversion of Solid Fuels; Witpress; Southhampton, Boston |
| Specht, E. | 1993 | Kinetik der Abbaureaktionen; Habilitationsschrift; TU Clausthal |
| Szekeley, J.; Evans, J.W.; Sohn, H.Y. | 1976 | Gas-Solid-Reactions; Academic Press; New York |
| Görner, K. | 1991 | Technische Verbrennungssysteme. Grundlagen, Modellbildung, Simulation; Springer-Verlag, Berlin |
| NIST | | http://kinetics.nist.gov/index.php |
| Seifert, H.; Merz, D. (Hrsg.) | 2003 | Primärseitige Stickoxidminderung als Beispiel für die Optimierung des Verbrennungsvorgangs in Abfallverbrennungsanlagen; Forschungszentrum Karlsruhe - Wissenschaftliche Berichte - FZKA 6944 |

7 Formelzeichen

7.1 Lateinische Buchstaben

A	Fläche	n	Stoffmenge
c_p	isobare Wärmekapazität	p	Druck
d	Durchmesser	Q	Wärmemenge
D	Diffusionskoeffizient	r	Reaktionsordnung
E_a	Aktivierungsenergie	R	Gaskonstante
k_0	Frequenzfaktor	Sh	Sherwood-Zahl
m	Masse	T	Temperatur
M	molare Masse	TF1, TF2	emp. Transportfaktoren

7.2 Indizes

Br	Brennstoff	H ₂ O	Wasser
C	Kohlenstoff	i	Spezies-Index
chem	chemisch	konv	Konvektion
diff	Diffusion	n,w,s,e	Nord, West, Süd, Ost (Strom)
eq	äquivalent	N,W,S,E	Nord, West, Süd, Ost (Zelle)
evap	Verdampfung	O ₂	Sauerstoff
G	Gas		

Anschrift des Verfassers

Dipl.-Ing. Torsten Reindorf
CUTEC-Insitut GmbH
Leibnizstr. 21+23
D-38678 Clausthal-Zellerfeld
Telefon +49 (0) 5323 / 933-234
Email: torsten.reindorf@cutec.de
Website: www.cutec.de