

Die Extended Discrete Element Method (XDEM) für multiphysikalische Anwendungen

B. Peters, X. Besseron, A. Dziugys*, A. Estupinan, F. Hoffmann, M. Michael, A. Mouhmedi, F. Vogel**

Universität Luxembourg, Luxembourg, Luxembourg

*Lithuanian Energy Institute, Kaunas, Lithuania,

**inuTech GmbH, Nürnberg, Deutschland

Summary

A vast number of engineering applications include a continuous and discrete phase simultaneously, and therefore, cannot be solved accurately by continuous or discrete approaches only. Problems that involve both a continuous and a discrete phase are important in applications as diverse as pharmaceutical industry e.g. drug production, agriculture food and processing industry, mining, construction and agricultural machinery, metals manufacturing, energy production and systems biology.

A novel technique referred to as Extended Discrete Element Method (XDEM) is developed, that offers a significant advancement for coupled discrete and continuous numerical simulation concepts. XDEM treats the solid phase representing the particles and the fluidised phase usually a fluid phase or a structure as two distinguished phases that are coupled through heat, mass and momentum transfer. An outstanding feature of the numerical concept is that each particle is treated as an individual entity that is described by its thermodynamic state e.g. temperature and reaction progress and its position and orientation in time and space. The thermodynamic state includes one-dimensional and transient distributions of temperature and species within the particle and therefore, allows a detailed and accurate characterisation of the reaction progress in a fluidised bed. Thus, the proposed methodology provides a high degree of resolution ranging from scales within a particle to the continuum phase as global dimensions.

These superior features as compared to traditional and pure continuum mechanics approaches are applied to predict drying of wood particles in a packed bed and impact of particles on a membrane. Pre-heated air streamed through the packed bed, and thus, heated the particles with simultaneous evaporation of moisture. Water vapour is transferred into the gas phase at the surface of the particles and transported to the exit of the reactor. A rather inhomogeneous drying process in the upper part of the reactor with higher temperatures around the circumference of the inner reactor wall was observed. The latter is due to increased porosity in conjunction with higher mass flow rates than in the centre of the reactor, and thus, augmented heat transfer. A comparison of the weight loss over time agreed well with measurements.

Under the impact of falling particles the surface of a membrane deforms that conversely affects the motion of particles on the surface. Due to an increasing vertical deformation particles roll or slide down toward the bottom of the recess, where they are collected in a heap. Furthermore, during initial impacts deformation waves are predicted that propagate through the structure, and may, already indicate resonant effects already before a prototype is built. Hence, the Extended Discrete Element

Method offers a high degree of resolution avoiding further empirical correlations and extends the knowledge into the underlying physics. Although most of the work load concerning CFD and FEM is arranged in the ANSYS workbench, a complete integration is intended that allows for a smooth workflow of the entire simulation environment.

Keywords

Multi-physics, reaction and process engineering, mechanical load of structures

1. Einleitung

Viele technisch relevante Anwendungen setzen sich aus Prozessen zusammen, die auf stark unterschiedlichen Längenskalen stattfinden. Dies ist beispielsweise der Fall, wenn granulare Medien wie Pulver oder Partikel mit einer Struktur interagieren oder zusätzlich auch noch chemische Reaktionen involviert sind, die durch ihren molekularen Charakter geprägt sind. Zusätzlich sind diese Prozesse über die Skalen hinweg stark und oft nichtlinear miteinander gekoppelt. Vorgänge auf kleinen Skalen können daher das makroskopische Verhalten prägen oder sogar dominieren. Deshalb ist ein detailliertes Verständnis der relevanten Vorgänge auf allen Skalen Voraussetzung, um verlässliche Ergebnisse zu berechnen. Dies wird oftmals dadurch erschwert, dass nicht alle Längenskalen mit einem einzigen numerischen Ansatz wie der kontinuumsmechanischen oder diskreten Methode aufgelöst werden können.

Ein rein kontinuumsmechanischer Ansatz mittelt über die kleinsten Längenskalen des granularen Mediums, wodurch allerdings wesentliche Informationen wie Größe und Geometrie der Partikel verloren gehen. Dieser Verlust an Information muss in der Regel durch empirische Annahmen oder experimentelle Untersuchungen ausgeglichen werden. Ein rein diskreter Ansatz hat zwar den Vorteil, dass die kleinen Längenskalen des granularen Mediums aufgelöst werden können, dass aber die größeren Strukturen nicht mit einem vertretbaren Rechenaufwand behandelt werden können. Aus diesen Grunde erscheint eine Kombination beider Methoden vorteilhaft, da die Vorteile beider Ansätze genutzt werden können und eine große Bandbreite von Längenskalen aufgelöst werden kann wie sie es mit der Beschränkung auf eine rein kontinuumsmechanische oder diskrete Beschreibung nicht möglich wäre.

In der Bruchmechanik wurde die Finite Element Methode (FEM) bereits mit der Diskreten Element Methode (DEM) gekoppelt, um die Fragmentierung von Materialien und Strukturen zu berechnen. Basierend auf dieser Kopplung beschrieb Morris et al. [1] die Ausbreitung eines Bruches in Felsgestein eines Tunnels, wobei sich die Berechnungsgebiete für die Finite Element und Diskrete Element Methode teilweise überlappen. Sobald mit der Finiten Element Methode kritische Spannungen berechnet werden, die zu einem Riss führen, wird das Risswachstum mit der Diskreten Element Methode berechnet.

Ein auf zwei Skalen beruhender Ansatz wurde von Nikita et al. [2] entwickelt, um das Verhalten von heterogenem Material zu beschreiben. In seinem Ansatz wurde das mikro-mechanische Verhalten mit der Diskreten Element Methode beschrieben und dessen Ergebnisse wurden über einen Homogenisierungsansatz auf die großskaligen Längenmaßstäbe übertragen. Letztere werden mit der Finiten Element Methode beschrieben, so dass der Einfluss der kleinen auf die großen Längenskalen erfasst wird und damit das integrale Verhalten aufgelöst wird. Mit diesem Ansatz der sich überlappenden Rechengebiete zwischen der Diskreten und Finiten Element Methode wird auch der Aufprall eines Geschosses untersucht. Beissel et al. [3] ließ Material beim Aufprall in eine große Anzahl von diskreten Partikeln zersplittern, die aus finiten Elementen hervorgingen.

In der Geomechanik werden hauptsächlich Rechengebiete verwendet, die sich nicht überlappen. Villard et al. [4] nimmt den Untergrund als ein granulares Medium an, das mit einer geo-synthetischen Schicht in Verbindung steht, wobei die Reibungseffekte zwischen beiden Medien im Vordergrund standen. Nach einer Validierung mit Experimenten lieferte diese Methode detaillierte Ergebnisse über den Reibungsmechanismus. In ähnlicher Form entwickelte Nakashima et al. [5,6] eine zwei-dimensionale Kopplung zwischen der Finiten Element und Diskreten Element Methode, um die Traktion eines Reifens in Abhängigkeit von Profilstruktur zu bestimmen. Mit einem ähnlichen Ansatz berechnete Horner et al. [7] die Wechselwirkung Reifen-Untergrund, wobei der Schwerpunkt auf der Parallelisierung dieses Ansatzes lag.

Während sich die bisher erwähnten Untersuchungen mit der rein mechanischen Wechselwirkung zwischen diskreter und kontinuierlicher Phase beschränkten, wird diese Wechselwirkung bei der thermischen Konvertierung von partikulären Phasen wie in der Verbrennung in Öfen und Wirbelschichten oder der Verfahrenstechnik von Rohmaterialien auf Wärme- und Stoffübergang

ausgedehnt. So hat der Wärmeübergang in Wirbelschichten einen starken Einfluss auf die Betriebsweise von Wirbelschichten und wurde mit verschiedene Ansätzen von Kunii und Levenspiel [8], Andeen und Glicksman [9], Boterill [10] und Linjewile et al. [11] untersucht. Parmar und Hayhurst [12] bestimmten experimentell den Wärmeübergang von Bronzekugeln (2-8 mm Durchmesser) in einer Wirbelschicht und leiteten verbesserte Korrelationen im Vergleich zu Ross et al. [13], Tamarin et al. [14], Prins [15] und Agarwal [16]. Collier et al. [17] bestimmten die Nusselt-Zahl für den Betrieb, wenn die Geschwindigkeit kleiner als die minimale Fluidisierungsgeschwindigkeit ist. Untersuchungen von Schmidt et al. [18, 19,20] zeigten eine starke Abhängigkeit des Wärmeübergangskoeffizienten von der lokalen Partikeldichte. Ebenso wies Papadikis et al. [21] nach, dass die Zusammensetzung der Pyrolysegas stark von der Partikelgröße abhängt.

Obwohl die Berechnung der Wechselwirkung zwischen diskreter und kontinuierlicher Phase im letzten Jahrzehnt Fortschritte gemacht hat (Tsuji et al. [22], Xu und Yu [23]), steckt die Berechnung des Wärmeübergangs immer noch in den Anfängen. So berechnete Kaneko et al. [24] den Wärmeübergangskoeffizienten für eine Polymerisation in einer Wirbelschicht mit der Ranz-Marshall Korrelation [25] allerdings unter Vernachlässigung der Wärmeleitung. Letzteres als Wärmetransport zwischen Partikeln wurde von Li und Mason [26, 27,28] für den Gas-Feststoff-Transport in horizontalen Rohren berücksichtigt. Zhou et al. [29, 30] modellierten den Kohleverbrennung unter Berücksichtigung von sowohl konvektiven als auch konduktiven Wärmetransport. Malone und Xu [31] berechneten den Wärmeübergang in einer flüssigen Wirbelschicht und betonten den Aspekt, dass noch tiefere Untersuchungen zum Wärmeübergang benötigt werden.

2. Extended Discrete Element Method (XDEM)

Die Extended Discrete Element Methode (XDEM) stellt eine generisches Konzept dar, um diskrete mit kontinuumsmechanischen Phasen zu koppeln. Dabei baut die numerische Beschreibung der diskreten Phase auf der klassischen Discrete Element Method (DEM) auf und wurde um thermodynamische Eigenschaften erweitert. Somit können neben Position und Orientierung der Partikel in Raum und Zeit zusätzlich noch ihr thermodynamischer Zustand, ausgedrückt durch die Verteilung für Temperatur und Spezies während chemischer Reaktionen, beschrieben werden, was eine erheblichen Erweiterung der klassischen Methode darstellt. Dazu werden die differentiellen Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie mit schnellen und effizienten Algorithmen gelöst. Ein diskreter Ansatz, der sowohl mechanische als auch thermodynamische Eigenschaften von Partikeln beschreibt, liefert detaillierte Ergebnis und trägt wesentlich zum fundamentalen Verständnis bei.

Eine natürliche Kopplung des diskreten Partikel ergibt sich durch Impuls-, Wärme- und Stoffübergang zu fluiddynamischen Phasen, die mit bewährten Methoden der Computational Fluid Dynamics (CFD) [32, 33] beschrieben werden und mechanische Wechselwirkungen von Partikeln mit Strukturen in Form von deren Dehnungen und Spannungen werden mit der Finite Element Method (FEM) [34, 35] abgebildet. Über diese Wechselwirkung zu kontinuumsmechanischen Phasen wird der Anwendungsbereich für diskrete Phasen wesentlich erweitert, womit die Extended Discrete Element Method (XDEM) ein wirkungsvolles Werkzeug darstellt, das in der Verfahrenstechnik, Nahrungsmittelindustrie, Transport von granularen Gütern und in der Reaktortechnik zum tieferen Verständnis der zugrunde liegenden physikalisch-chemischen Prozesse beiträgt.

Damit liefert das hier vorgestellte numerische Konzept sehr detaillierte Ergebnisse, die zum tieferen Verständnis der physikalischen und chemischen Phänomene beitragen. Aus diesem Grunde ist der Ansatz weitgehend frei von empirischen Korrelationen und unabhängiger von experimentellen Randbedingungen. Damit dehnt die Extended Discrete Element Method den Gültigkeits- als auch Anwendungsbereich weit über die integralen oder rein kontinuumsmechanischen Methoden aus.

Dementsprechend wurden für die diskrete Phase der Partikel zwei Module entwickelt, die zum einen die Trajektorien der Partikel beschreiben und zum anderen den thermodynamischen Zustand eines Partikels bestimmen und ausführlich in Peters [36] erläutert ist.

2.1 Modul zur Beschreibung der Partikelbewegung

Die Berechnung der Trajektorien der Partikel ausgedrückt durch Position und Orientierung im Raum in Abhängigkeit der Zeit geht auf das Trägheitsgesetz von Newton zurück, wie es allgemein in der Discrete Element Method (DEM) angewendet wird und von Cleary [37] und Pöschel et al. [38] beschrieben wird. Hierzu werden alle Kräfte und Momente, die auf ein Partikel wirken, bestimmt. Dazu gehören im Besonderen Kräfte, die aus einem oder mehreren Kontakten mit Nachbarpartikel

resultieren, und äußere Kräfte wie Schwerkraft, Strömungskräfte oder feststehende oder sich bewegende Wände. Mit dem Newton'schen Bewegungsgesetz wird durch zweimalige Integration sowohl die Geschwindigkeit als auch die Position eines Partikels berechnet. Über die am Partikel wirkenden Kräfte werden zusätzlich zu äußeren angreifenden Momenten weitere Momente erzeugt, die den Drehimpuls des Partikels verändern. Zusammen mit dem Massenträgheitsmoment wird die Rotation des Partikels bestimmt.

2.2 Modul zur Beschreibung des thermodynamischen Zustandes der Partikel

Ein Partikel setzt sich in der Regel aus einer flüssigen und festen Phase mit Gasvolumen im Porenraum zusammensetzen. Während in der Gasphase des Porenraums sowohl ein konvektiver als auch diffusiver Transport von Stoffen stattfinden kann, werden die flüssige und feste Phase als immobil angenommen. Dabei kann jede Phase verschiedenen Umsetzungsmechanismen unterliegen, die mit einem Phasenwechsel wie bei der Trocknung verbunden sein können. Zusätzlich wird zwischen den Phasen thermisches Gleichgewicht angenommen wie durch Kansa et al. [39] und Peters [40] belegt ist. Wegen der normalerweise großen Anzahl von Partikeln wird aus rechentechnischen Gründen eine eindimensionale Auflösung der Partikel im Raum gewählt, was zusätzlich nach Man und Beyong [41] eine ausreichende Genauigkeit liefert. Der transiente Charakter wurde von Lee et al. [42] bestätigt, sodass die differentiellen eindimensionalen und transienten Erhaltungsgleichungen für Masse, Spezies, Impuls und Energie individuell für alle Partikel gelöst werden. Über die Oberfläche steht jedes Partikel durch konvektiven Wärme- und Stoffübergang mit der es umgebenden Gasphase in Verbindung. Darüber hinaus tauschen die Partikel untereinander Wärme durch Leitung und bei höheren Temperaturen durch Strahlung aus.

2.3 Integration in ANSYS Workbench

Alle Aufgaben, die die Finite Element Method und Computational Fluid Dynamics betreffen, werden in der Ansys Workbench aufbereitet und damit eine komfortable Arbeitsumgebung zur Verfügung stellt. Allerdings werden zurzeit aus technischen Gründen die Rechnungen zur Extended Discrete Element Method noch außerhalb der ANSYS Workbench durchgeführt. Grundsätzlich ist jedoch eine enge Integration der Software in die ANYS Workbench angestrebt, so dass der gesamte Arbeitsprozess beginnend mit dem Preprocessing und endend mit dem Postprocessing innerhalb einer Arbeitsumgebung ausgeführt werden kann.

3. Relevante ingenieurtechnische Anwendungen

Im vorliegen Abschnitt werden exemplarisch Anwendungsfälle gezeigt, die die Möglichkeiten der Extended Discrete Element Method für technisch relevante Anwendungsfälle zeigt. Dazu wird im ersten Teil die mechanische Wechselwirkung eines Reifens mit einem Untergrund bestehend aus granularem Material dargestellt, während im zweiten Teil verschiedene Anwendungen zur thermischen Behandlung von Partikeln in Reaktoren gezeigt wird.

3.1 Deformation und mechanische Belastung eines Reifens

Während des Eingriffs eines Reifenprofils mit einem granularen Untergrund werden aufgrund des Fahrzeuggewichts und der Rotation Kräfte zwischen dem Reifenprofil und den mit ihm im Kontakt befindlichen Partikeln erzeugt. Wichtige Parameter der Simulation sind in Tabelle 1 zusammen gefasst.

Tabelle 1: Parameter des Reifens

Anpresskraft Reifen	9800 N
Reifenradius	0.53 m
Reifeninnendruck	140000.0 Pa

Fig. 1 zeigt den Reifen im Kontakt mit dem granularen Untergrund. Die Kräfte, die zwischen Reifenprofil und Untergrund wirken, rufen einerseits eine Deformation des Reifens hervor und führen andererseits zu einer Verdichtung und Verdrängung der Partikel, was wesentlich vom Reifenprofil

abhängig ist. Im Bereich der Reifenaufstandsfläche ergibt sich damit eine maximale Deformation von ca. 3 cm. Die auftretenden Kräfte rufen eine Verschiebung der Partikel hervor, für die die Bahnen beim ausrollenden Eingriff und das Aufwühlen des Untergrunds hinter dem Reifen verfolgt werden können.

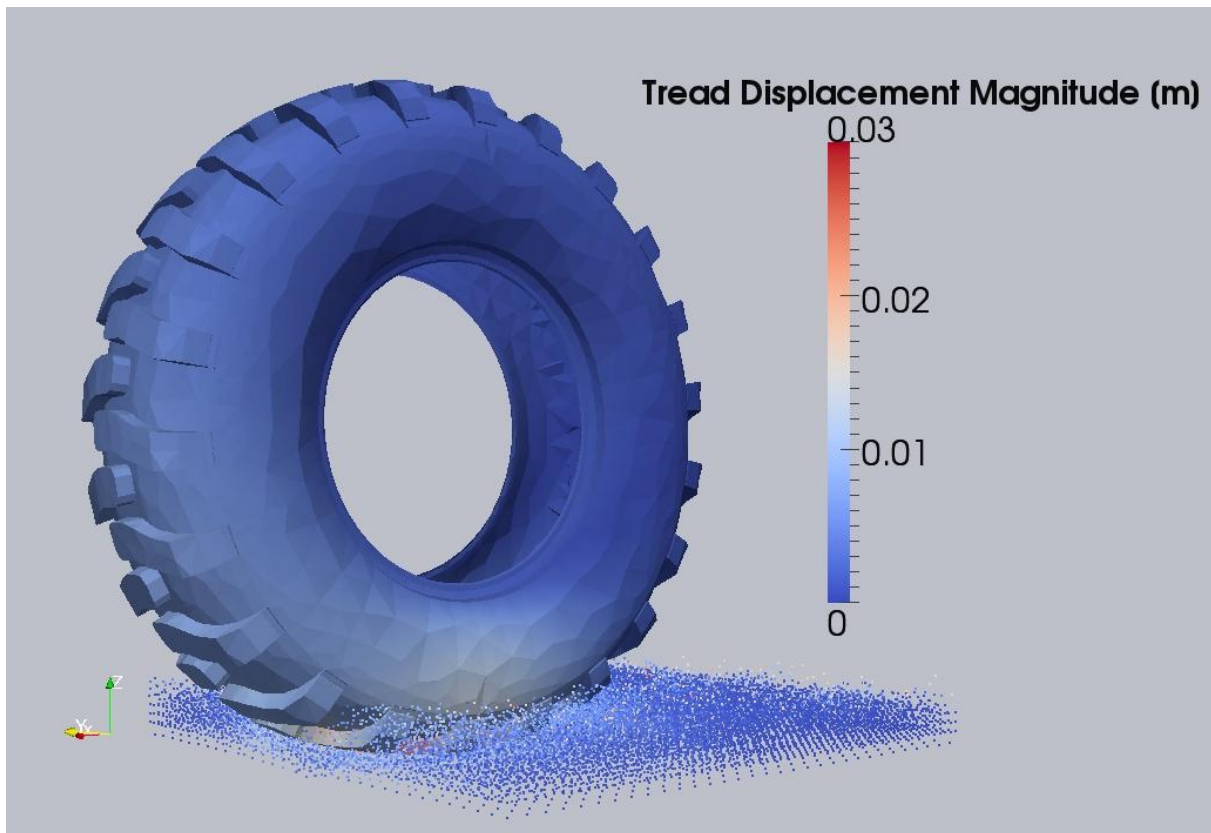


Fig. 1: Reifenprofil im Eingriff mit Untergrund

Diese Phänomene sind deutlich in der Fig. 2 und 3 zu beobachten, in der das Reifenprofil mit und ohne Untergrund in einer Vorderansicht gezeigt wird. Sowohl die verdrängende Wirkung des Reifens auf den Untergrund als auch dessen Verdichtung werden deutlich. Die Partikel im Kontakt mit der Reifenoberfläche erfahren eine Kontaktkraft, die einerseits auf die Nachbarpartikel übertragen wird und andererseits für die Deformation des Profils verantwortlich ist. Damit kann die Reaktion des Untergrunds und seine Rückwirkung auf das Reifenprofil einschließlich Deformation berechnet werden, wie sie in Fig. 3 dargestellt ist.

Deutlich sind die Reifenwölbungen in axialer Richtung am rechten und linken Rand zu erkennen, die ein periodisches Lastkollektiv aufgrund der Rotation hervorrufen. Die periodische Belastung abhängig von der Fahrgeschwindigkeit rufen stehende oder laufende Deformationswellen auf der Reifenoberfläche über den Umfang des Reifens hervor, die maßgeblich für die Geräuschentwicklung des Reifens verantwortlich sind und vom Reifenmaterial und seines Aufbaus bestimmt werden.

Fig. 4 zeigt eine Ansicht des Reifens, die die Deformation der Reifenaufstandsfläche darstellt. In der Reifenmitte werden die maximalen Verformungen bemerkbar, die zum Reifenrand abflachen. Trotz des relativ unsymmetrischen Profils ergibt sich ein relativ homogenes Verformungsbild, das durch eine elliptische Kontur begrenzt wird. Mit der Kenntnis der Reifenaufstandsfläche und ihrem Kontakt mit dem Untergrund kann integral die Kraftübertragung als maßgeblicher Faktor für die Traktion berechnet werden.

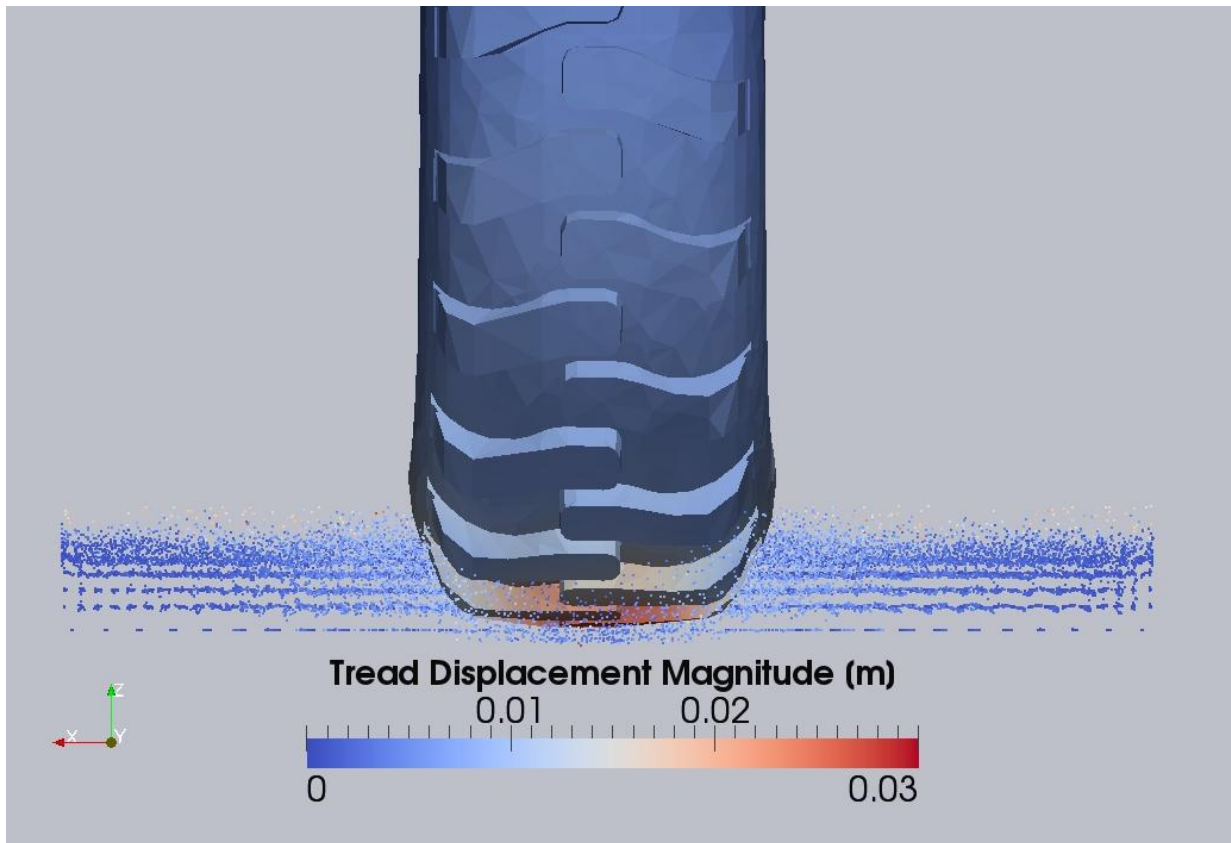


Fig. 2: Vorderansicht eines Reifenprofils mit Deformation im Eingriff mit Untergrund

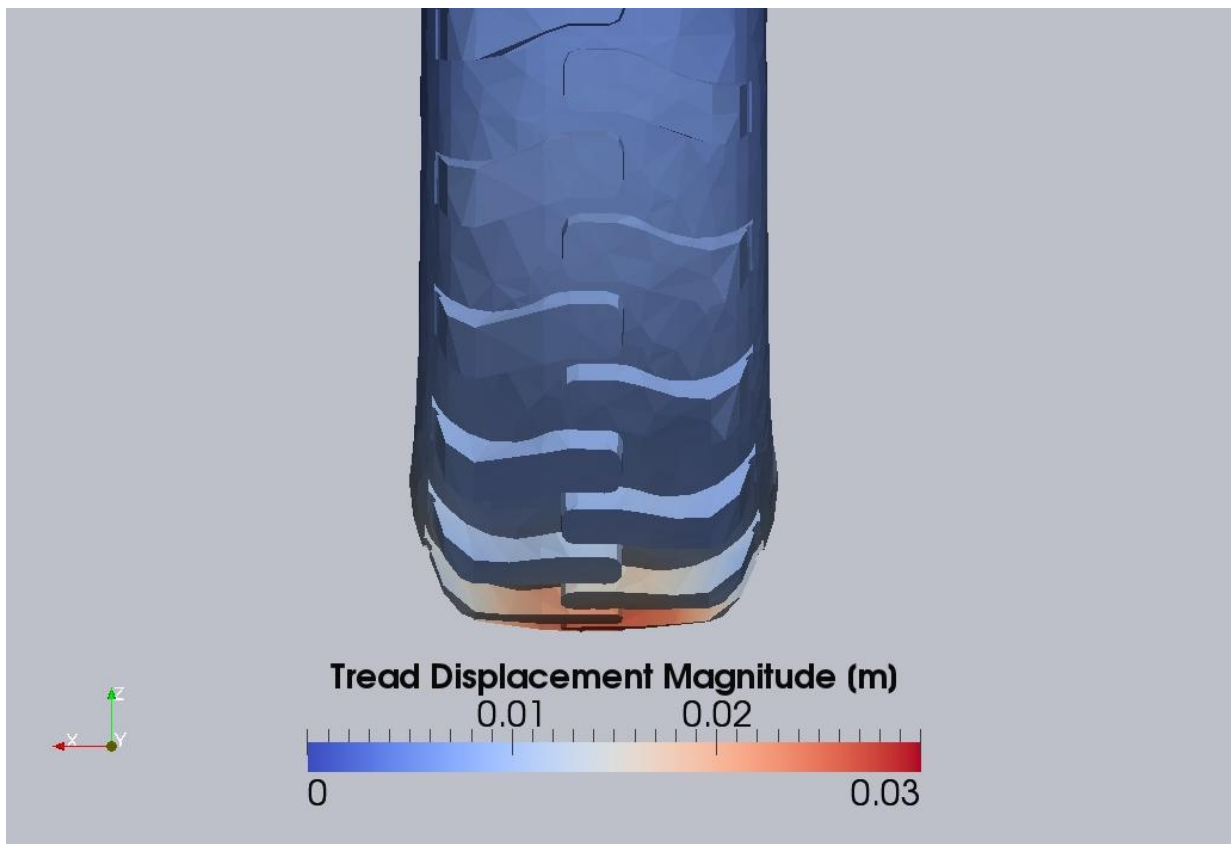


Fig. 3: Vorderansicht eines Reifens mit Deformation

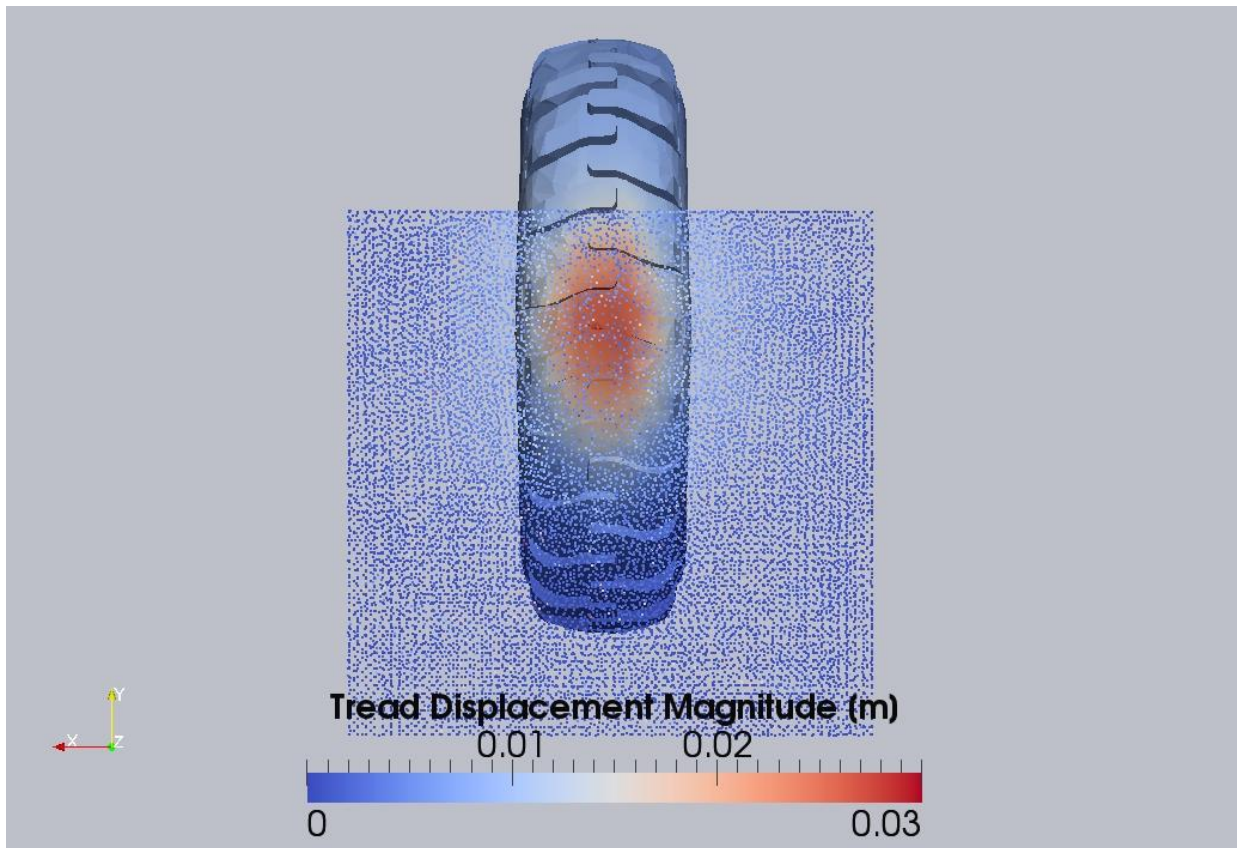


Fig. 4: Ansicht der Aufstandsfläche eines Reifenprofils im Eingriff mit Untergrund

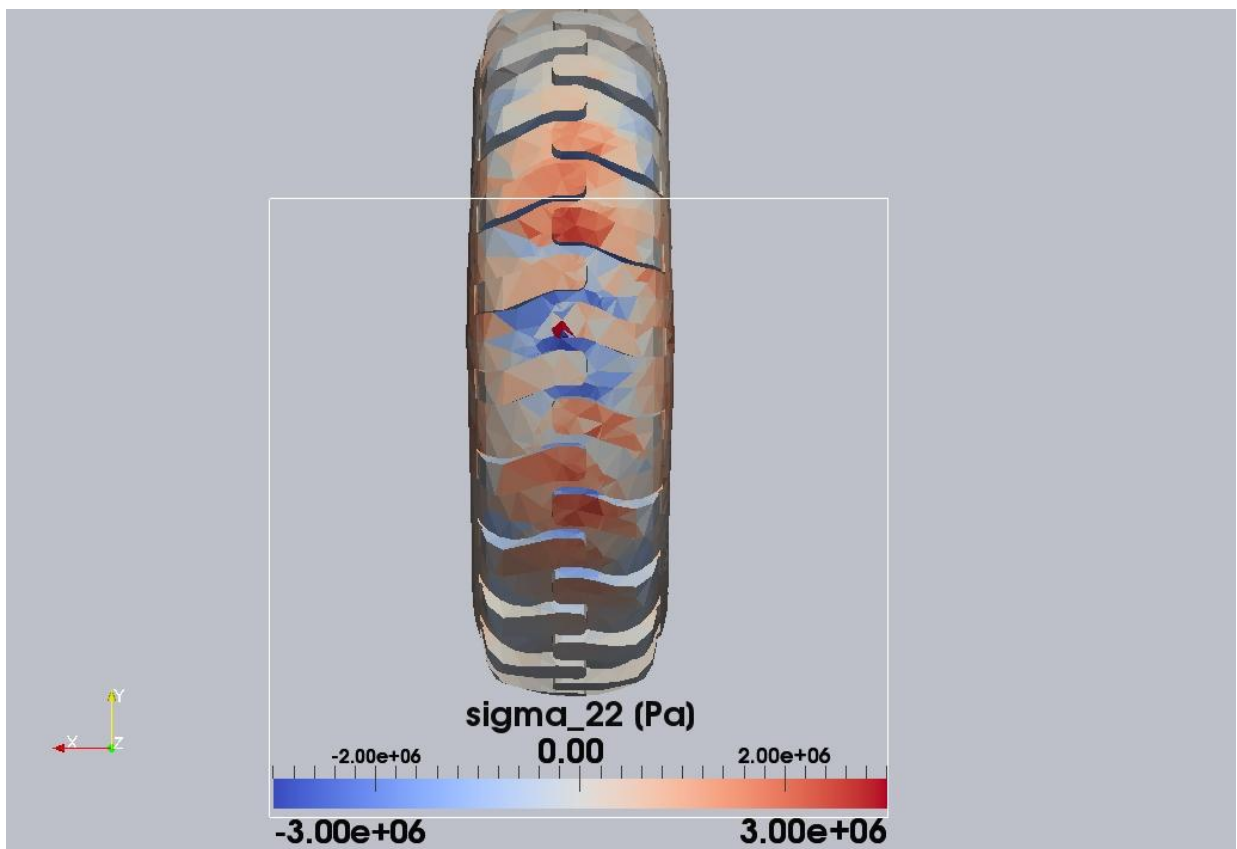


Fig. 5: Spannung des Reifens in radialer Richtung

Fig. 5 stellt die radiale Spannungsverteilung des Reifens hervorgerufen durch die Fahrzeuglast und die Wechselwirkung mit dem Untergrund dar. Im Profil treten sowohl Druck- als auch Zugspannungen in gleicher Größenordnung auf. Zugspannungen treten im inneren Bereich des Profils auf, während Druckspannungen auf den Flanken hervorgerufen werden, die bis in das äußere Profil reichen.

3.2 Thermische Konvertierung in einem Festbettreaktor

Festbettreaktoren dominieren einen großen Teil der verfahrenstechnischen Anlagen, bei denen ein Festbett, bestehend aus Partikeln von einem heißen Gas durchströmt wird. Dadurch tauschen Partikel und Gas, Wärme und Stoff aus. Aufgrund der diskreten Beschreibung des Festbettes werden keine Ansätze experimenteller Natur oder empirische Korrelationen für die Partikeleigenschaften wie Oberfläche oder Größe und die Verteilung des Lückenraums benötigt, was einen entscheidenden Vorteil gegenüber kontinuumsmechanischen Simulationen bedeutet. Entsprechend wurde der Reaktor mit einer bi-dispersen Partikelphase gefüllt, was in Fig. 6 dargestellt ist. Der untere Teil des Reaktors ist mit einer zufälligen Anordnung größerer Kugeln ($D = 10 \text{ cm}$) gefüllt, während der obere Teil ebenso eine zufällige Anordnung kleinerer Kugeln ($D = 5 \text{ cm}$) enthält. Dadurch ergibt sich eine unregelmäßige Verteilung des Lückenraums zwischen den Partikeln, die der Gasströmung zur Verfügung steht.

Ebenso ist die Position jedes Partikels im Festbett bestimmt, womit die lokal herrschenden Strömungszustände und die Gaszusammensetzung in der Umgebung des Partikels identifiziert werden können. Zusätzlich ist die für den Wärme- und Stoffübergang zur Verfügung stehende Oberfläche eines Partikels durch seine geometrische Form bestimmt. Die Wechselwirkung zwischen Gas und Partikeloberfläche wird wesentlich durch Strömungsgeschwindigkeit bestimmt, die wiederum durch die Verteilung des Lückenraums zwischen den Partikeln bestimmt wird. Mit der expliziten Kenntnis dieser Größen wird die räumliche Verteilung des Lückenraums bestimmt und ist in Fig. 5 im Querschnitt für die untere und obere Festbetthälfte dargestellt. Fig. 5 lässt eindeutig zwei charakteristische Eigenschaften von Festbetten erkennen: Für verschieden große Partikel ergeben sich unterschiedliche Niveaus des Lückenraums und der sogenannte Wandeffekt. Letzteres ist durch einen größeren Lückenraum in Reaktorwandnähe mit maximalen Werten bis 0.5 in den Ecken des Reaktors gegeben. Die Gasströmung erfährt grundsätzlich in Bereichen höheren Lückenvolumens geringere Widerstandskräfte, was dort zu erhöhten Strömungsgeschwindigkeiten führt. Dies ruft wiederum einen vergrößerten Wärmeübergang an den Wänden hervor und verursacht dadurch höhere Wärmeverluste durch die Reaktorwände an die Umgebung. Da sowohl der Lückenraum als auch die Strömungsgeschwindigkeiten in Wandnähe mit ausreichender Genauigkeit bestimmt sind, kann auch der Wärmeübergang ohne weitere experimentelle Untersuchungen oder empirische Korrelationen berechnet werden.

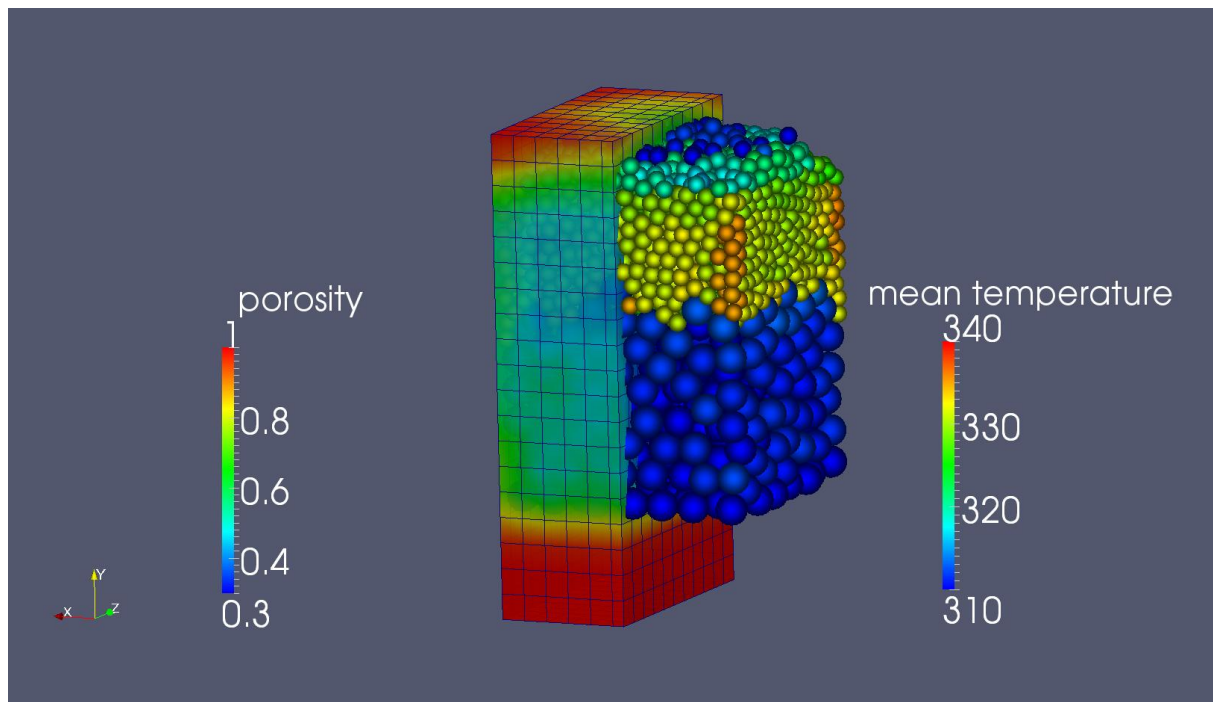


Fig. 5: Verteilung der Partikel in einem Festbettreaktor

Des Weiteren ergeben sich aufgrund der Anordnung der Partikel verschiedene Lückenvolumina im Bereich des Reaktorkerns wie in Fig. 5 zu erkennen ist. Eine Anordnung von kleineren Partikeln ergibt in der Regel ein kleineres Lückenvolumen als eine Anordnung von großen Partikeln, was zu Werten des Lückenvolumens von ~ 0.34 und ~ 0.4 im oberen und unteren Festbett führt. Die gesamte räumliche Verteilung des Lückenraums beeinflusst wesentlich die vertikale Strömungsgeschwindigkeit, für die die Variation in beiden Querschnitten in Fig. 7 gezeigt ist. Wegen des höheren Lückenvolumens im unteren Teil des Festbetts steht der Strömungsgeschwindigkeit ein höherer Querschnitt zu Verfügung, wodurch sich im Allgemeinen kleinere Strömungsgeschwindigkeiten einstellen als im oberen Teil des Festbetts mit reduziertem Lückenvolumen und damit einhergehend größeren Strömungsgeschwindigkeiten. Außerdem sind die Gasgeschwindigkeiten an den Wänden und in den Eckbereichen des Reaktors bis zu 50 % höher als im Kern des Reaktors hervorgerufen durch das höhere Lückenvolumen wie bereits erwähnt.

Die Temperaturverteilung im Gas als auch in den Partikeln wird durch konvektiven Wärmetransport zwischen Gas und Partikeloberfläche, Wärmeleitung zwischen Partikeln im Kontakt und Wärmestrahlung zwischen benachbarten Partikeln bei höheren Temperaturen bestimmt. Der konvektive Wärme- und Stoffübergang wird durch die verwundenen Strömungswege im Lückenraum erhöht, wofür die Nusselt- (Nu_B) und Sherwoodzahl (Sh_B) von denjenigen eines Einzelpartikels (Nu_p , Sh_p) abgeleitet werden können wie folgt:

$$Nu_B = f Nu_p$$

$$Sh_B = f Sh_p$$

wobei der Korrelationskoeffizient mit $f = 1 + 1.5 (1 - \epsilon_B)$ bestimmt wird. Unter diesen Voraussetzungen wurde die Temperaturverteilung der Partikel berechnet wie sie in Fig. 5 gezeigt ist. Wegen der großen thermischen Trägheit der größeren Partikel hat sich deren Temperatur noch nicht signifikant von der Anfangstemperatur unterschieden. Hingegen sind im oberen Bereich des Festbettes deutlich die eingangs erwähnten Auswirkungen des Lückenvolumens auf die Strömungsgeschwindigkeit und damit den Wärmeübergang festzustellen. Durch die erhöhten Strömungsgeschwindigkeiten entlang der Wände und in den Eckbereichen des Reaktors sind die Partikeltemperaturen bereits merklich höher (~ 20 °C) als im Kernbereich. Außerdem ergibt sich eine inhomogene Verteilung der Partikeltemperaturen über den Querschnitt, was durch die räumliche Verteilung des Lückenvolumens hervorgerufen wird.

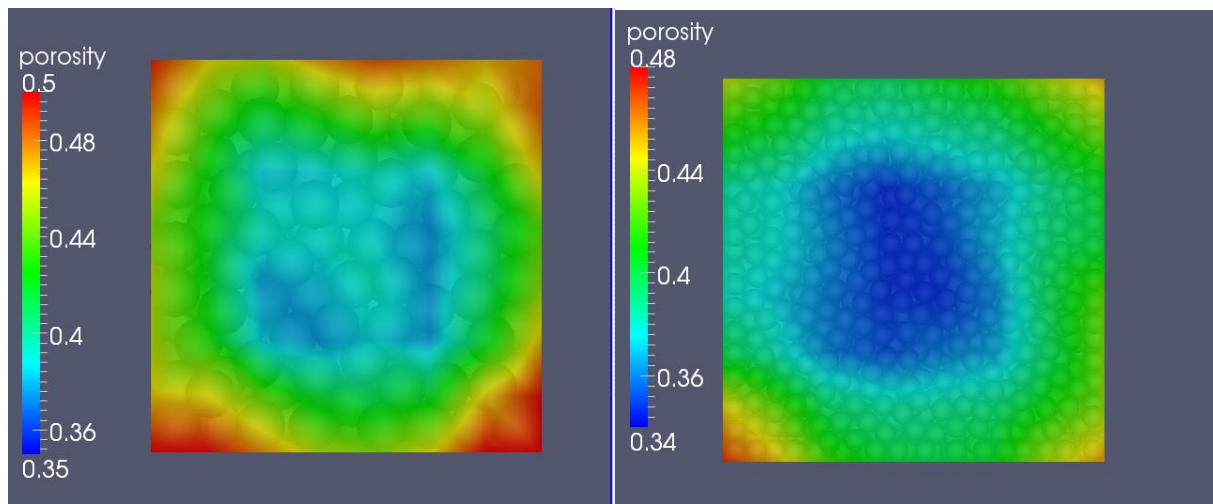


Fig. 6: Verteilung des Lückenraums im Reaktor für unterschiedlich grosse Partikelanordnungen von $D = 10$ cm und $D = 5$ cm

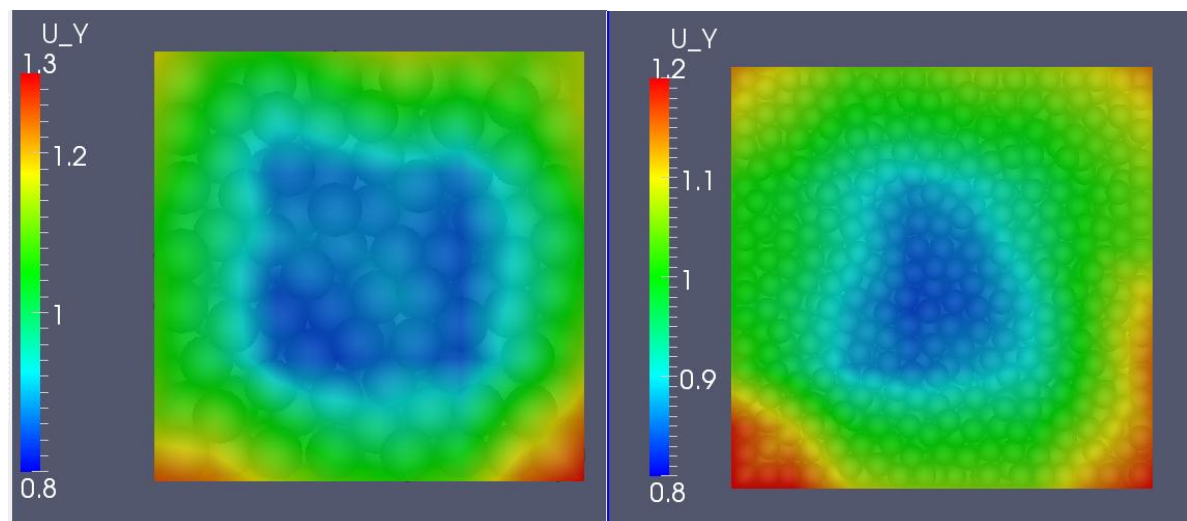


Fig. 7: Verteilung der Vertikalgeschwindigkeit im Lückenraums des Reaktors für unterschiedlich große Partikelanordnungen

3.3 Verbrennung auf einem Vorschubrost

Ähnlich zur numerischen Beschreibung des Festbettreaktors im vorherigen Abschnitt wurde auch die thermische Konvertierung eines bewegten Bettes aus Tannenholzpartikeln auf einem Vorschubrost berechnet. Dabei wird jeder zweite Roststab periodisch vorwärts und rückwärts bewegt, so dass dadurch die Tannenholzpartikel über den Rost durch den Brennraum transportiert werden wie durch Peters [43] gezeigt wurde. Auf die oberste Lage des Partikelbetts trifft die Strahlung der Wände, die mit einem Wert von 20.0 kW/m^2 angenommen wurde. Der aufgenommene Wärmestrom dieser Oberflächenpartikel wird durch Leitung und Strahlung an Nachbarpartikel weitergegeben und bewirkt somit eine Aufheizung des Betts. Die Pyrolyse des Tannenholzes wurde mit den Ansatz von Balci et al. [44] beschrieben, wo hingegen für die Verbrennung des Pyrolysekokes mit dem Sauerstoff der Primärluft der kinetischen Ansatz von Kulasekaran et al. [45] verwendet wurde. Die Eigenschaften von Tannenholz, des Pyrolysekokes und der Asche als Verbrennungsrückstand sind in der folgenden Tabelle 1 aufgeführt:

Tabelle 1: Eigenschaften von Tannenholz, Pyrolysekoks und Asche

Eigenschaft	Tanne	Pyrolysekoks	Asche
Dichte [kg/m ³]	310.0	150.0	1000.0

Spezifische Wärmekapazität [J/kgK]	1733.0	$(420.0+2.09*T+6.85 \cdot 10^{-4}*T^2)$	1400.0
Wärmeleitung [W/mK]	0.2	0.105	0.93
Porosität [-]	0.6	0.85	0.3
Porendurchmesser [m]	$50.0 \cdot 10^{-6}$	$10.0 \cdot 10^{-5}$	$50.0 \cdot 10^{-6}$

Sowohl Bewegung der Partikel auf dem Vorschubrost als auch die thermische Konvertierung bestehend aus den Prozessen Aufheizen, Trocknung, Pyrolyse und Verbrennung wurde mit der Extended Discrete Element Method berechnet. Wie bereits erwähnt, wird für jedes Partikel individuell die Trajektorie und der thermodynamische Zustand charakterisiert durch Temperatur- und Stoffverteilung im Partikel bestimmt, das in Fig. 8 stellvertretend für ein Partikel anhand der Temperatur dargestellt ist.

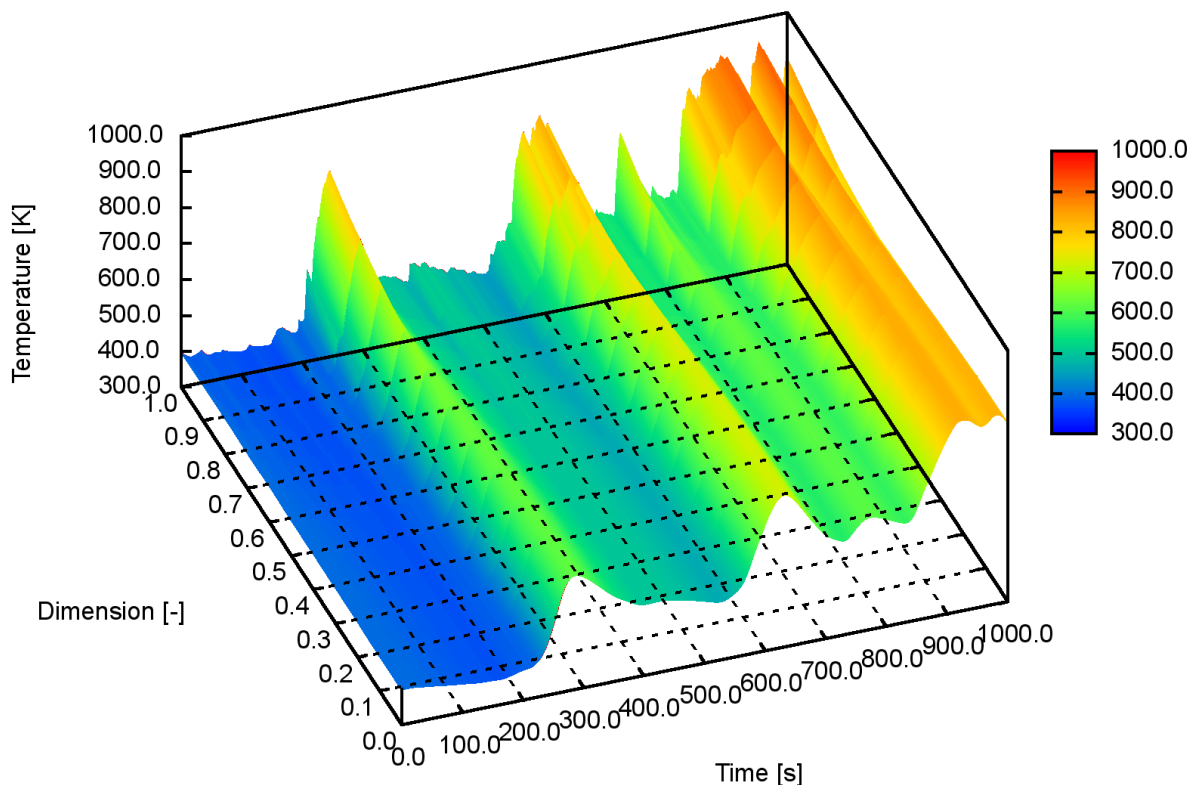


Fig. 8: Verteilung der Oberflächentemperatur der Partikel auf dem Vorschubrost bei einem Strahlungswärmestrom von 20 kW/m^2 nach einer Zeitspanne von 290 s

Ausgehend von einer Anfangstemperatur von $127 \text{ }^\circ\text{C}$ verliert das Partikel zunächst Wärme an die $27 \text{ }^\circ\text{C}$ warme Primärluft. Nach einer Zeitspanne von $\sim 250 \text{ s}$ wird das Partikel an die Oberfläche des Betts bewegt, und ist damit dem Strahlungseinfluss der Wände ausgesetzt. Dadurch heizt sich das Partikel auf und Wärme wird über einen Temperaturgradienten in das Innere des Partikels geleitet. Nach einer kurzen Verweilzeit an der Oberfläche des Betts taucht das Partikel wieder in das Bett ein und verliert dadurch die Strahlungswärme der Wände. Innerhalb des Betts gibt das Partikel Wärme durch Leitung und Strahlung an Nachbarpartikel und durch Konvektion an die Primärluft ab, was ein Auskühlen des Partikels bewirkt. Zu späteren Zeitpunkten erscheint das Partikel wieder an der Oberfläche des Betts und der Vorgang des Aufheizens und Abkühlens wiederholt sich.

Die erzielten Ergebnisse für das gesamte Bett sind exemplarisch für einen Zeitpunkt von 290 s in Fig. 9-12 gezeigt. Fig. 9 zeigt die Verteilung der Oberflächentemperatur der einzelnen Partikel, von denen die sich an der Oberfläche des Betts befindlichen Partikel dem bereits erwähnten Strahlungswärmestrom ausgesetzt sind. Entgegen häufig gemachter Annahmen eines vertikal

geschichteten Temperaturverlaufs, wird dieser durch die Vorschubbewegung aufgebrochen, so dass sich eine eher zufällige Temperaturverteilung mit heißen Nestern ergibt.

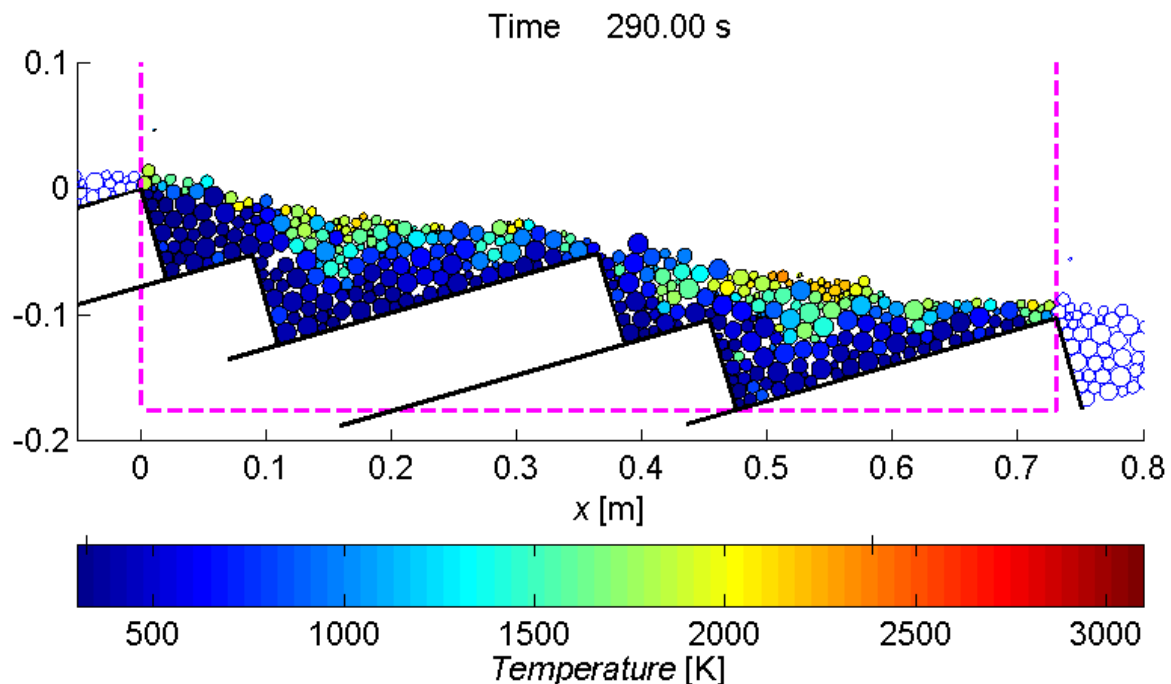


Fig. 9: Verteilung der Oberflächentemperatur der Partikel auf dem Vorschubrost bei einem Strahlungswärmestrom von 20 kW/m^2 nach einer Zeitspanne von 290 s

Durch die Bewegung der Roststäbe wird ein hoher Anteil an Dynamik in das System eingebracht, wodurch die Nachbarn der Partikel einem dauernden Wechsel unterworfen sind. Dies ruft ebenso einen häufigen Wechsel der Wärmefflüsse zwischen den Partikeln hervor. Zusätzlich werden immer wieder Partikel aus dem Inneren des Betts an seine Oberfläche bewegt und Oberflächenpartikel versinken im Bett. Dies verursacht eine mehr oder weniger zufällige Verteilung des Wärmetransportes im Bett verbunden mit einer inhomogenen Temperaturverteilung, so dass nicht von einer einheitlichen Temperaturfront im Bett ausgegangen werden kann.

Die Temperaturverteilung im Bett und damit der Partikel beeinflusst wesentlich die nachfolgenden Prozesse der Trocknung und Pyrolyse wie in Fig. 10 für den augenblicklichen Feuchtegehalt der Partikel dargestellt. Die Anfangsfeuchte der Partikel betrug 60 %, die durch den Trocknungsvorgang sukzessiv reduziert wird. Obwohl bereits eine große Anzahl der Partikel fast vollkommen trocken ist, existieren immer noch Partikel, die fast noch ihre gesamte Anfangsfeuchte behalten haben. Diese Partikel sind vornehmlich im unteren Bereich des Betts zu finden, wo der Eintrag von Wärme am wenigsten wahrscheinlich ist. Die Heterogenität des Trocknungsprozesses bestätigt die Erfahrung, dass ein großer Teil der Rostlänge zum Trocknen aufgewendet werden muss.

Auf den Trocknungsvorgang folgt die Pyrolyse und Verbrennung, während der der Holzanteil in Pyrolysekoks und flüchtige Komponenten konvertiert und anschließend verbrannt wird was in Fig. 11 und 12 gezeigt ist. Auch hier spiegelt sich wieder der durch die unregelmäßige Bewegung der Partikel hervorgerufene heterogene Reaktionsfortschritt im Bett. Durch die Vorschubbewegung des Rostes werden die Partikel sowohl horizontal als auch vertikal gemischt, so dass sich auch hier keine einheitliche Reaktionsfront mit einer bevorzugten Ausbreitungsrichtung einstellt. Im unteren Teil des Betts sind hauptsächlich noch relativ große Partikel mit einem niedrigen Pyrolysegrad zu finden, während im oberen Teil weitgehend pyrolysierte Partikel, die teilweise Nester formen, anzutreffen sind und in Fig. 11 zu erkennen ist. Kleinere Partikel mit mäßigen Koksgehalten deuten darauf hin, dass sie bereits verbrennen, was mit einer Reduktion der Partikelgröße einhergeht wie in Fig. 12 gezeigt.

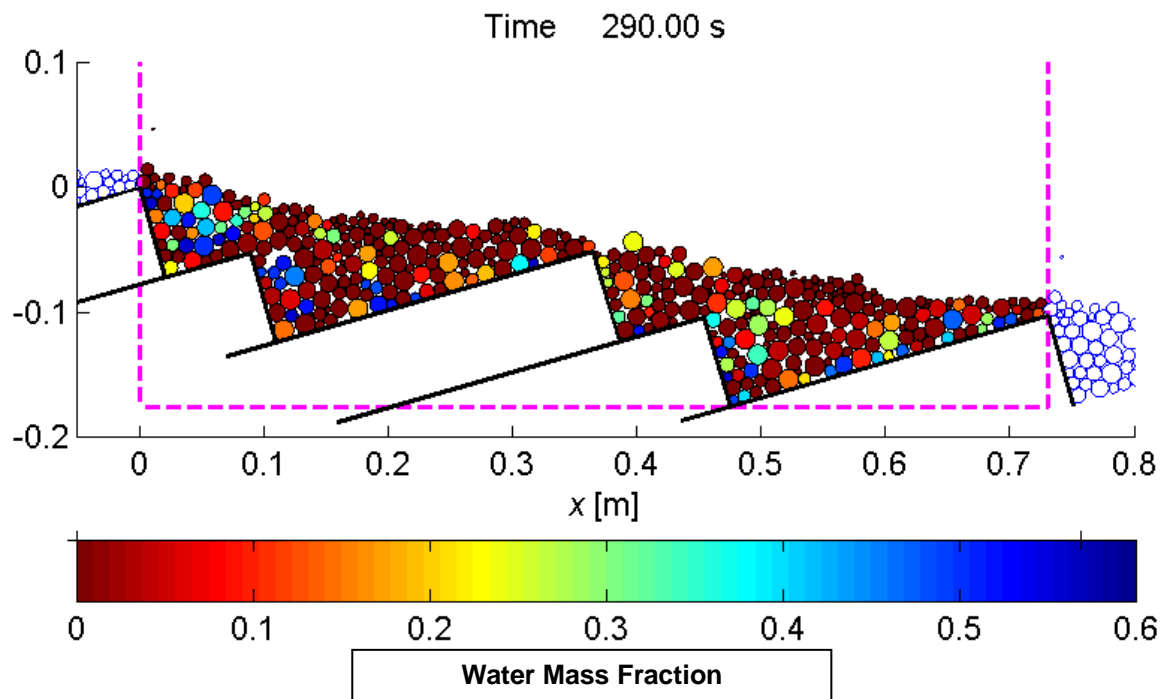


Fig. 10: Verteilung des Feuchtegehaltes der Partikel auf dem Vorschubrost bei einem Strahlungswärmestrom von 20 kW/m^2 nach einer Zeitspanne von 290 s

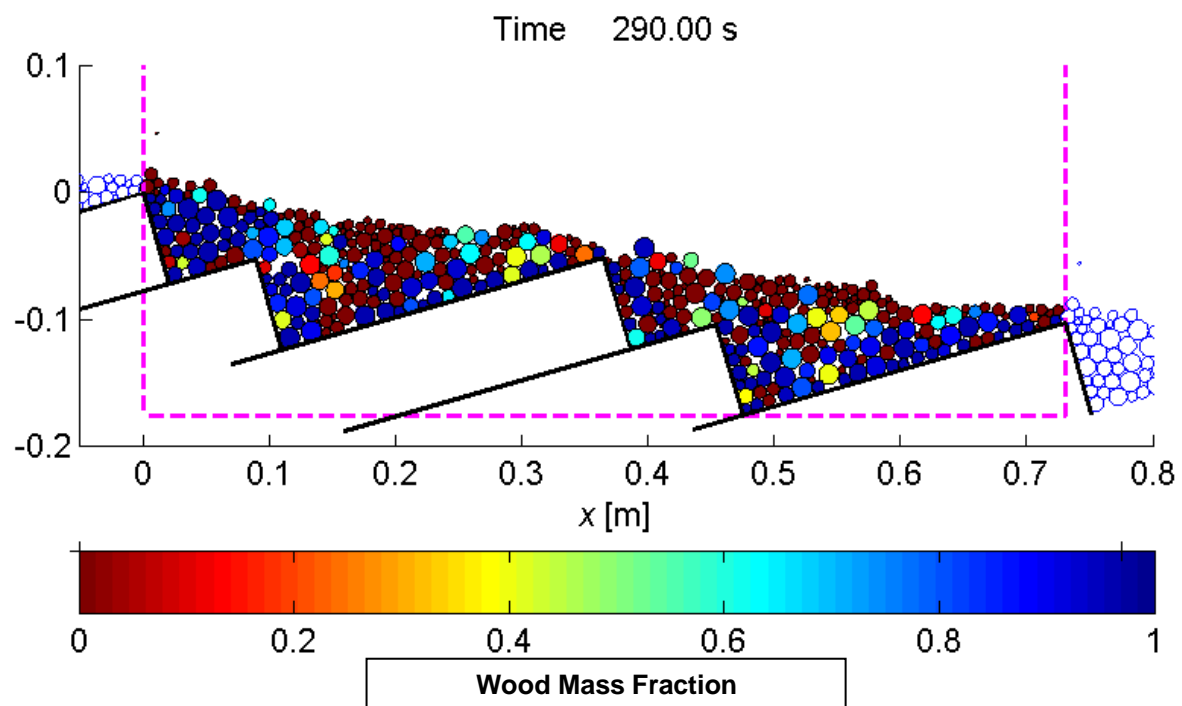


Fig. 11: Pyrolysefortschritt der Partikel auf dem Vorschubrost dargestellt durch den Masseanteil an Holz bei einem Strahlungswärmestrom von 20 kW/m^2 nach einer Zeitspanne von 290 s

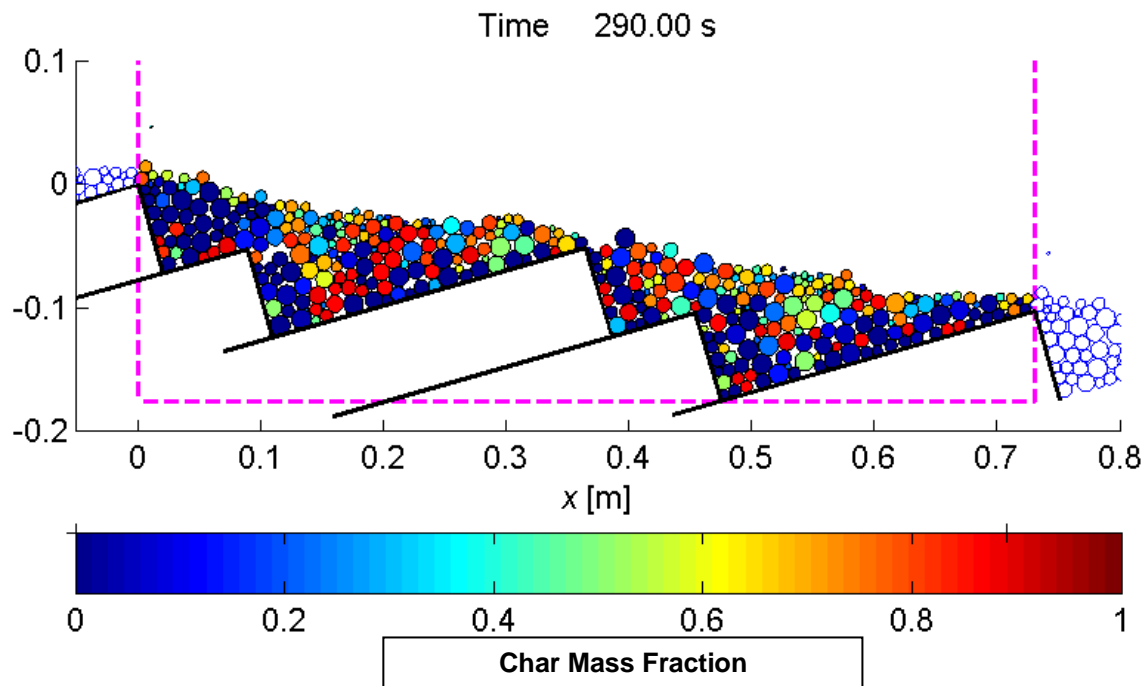


Fig. 12: Pyrolyse- und Verbrennungsfortschritt der Partikel auf dem Vorschubrost dargestellt durch den Masseanteil an Koks bei einem Strahlungswärmestrom von 20 kW/m^2 nach einer Zeitspanne von 290 s

4. Zusammenfassung

In dem vorliegenden Beitrag wurde die Extended Discrete Element Methode (XDEM) ein innovativer Ansatz zur numerischen Beschreibung von multi-physikalischen Anwendungen vorgestellt. Der integrale und neuartige Charakter besteht in der Abbildung eines großen Längenskalenspektrums, wodurch Prozesse auf kleinskaligen Längen der Partikelebene akkurat abgebildet werden und deren Wechselwirkung mit den großen Längenskalen mit ebensolcher Genauigkeit erfasst wird. Aus diesem Grund werden die kleinen Längenskalen mit einem Lagrange-Ansatz diskret aufgelöst, während die großen Skalen mit bewährten Methoden der Kontinuumsmechanik basierend auf Eulerschen Methoden beschrieben werden. Während der Lagrange-Ansatz auf der klassischen Discrete Element Method (DEM) fußt und um den thermodynamischen Zustand erweitert worden ist, kommen für das Kontinuum die Finite Element Method (FEM) und Computational Fluid Dynamics (CFD) zum Einsatz. Damit kann die Deformation und Spannungsverteilung in Strukturen durch mechanische Belastung von Partikeln berechnet werden oder der Zustand einer strömenden fluiden Phase wie Gas oder Flüssigkeit im Raum zwischen den Partikeln bestimmt werden. Zu diesem Zweck tauschen diskrete und kontinuierliche Phase Impuls, Stoff und Wärme aus und löst dadurch die relevanten Prozesse mit hoher Genauigkeit auf, was zu einem weitgehenden Verzicht auf empirische Korrelationen und experimentelle Untersuchungen führt. Mit einer derart erzielten hohen räumlichen und zeitlichen Auflösung werden Prozesse detailliert analysiert und tragen wesentlich zum Verständnis der zugrundeliegenden physikalischen Gesetzmäßigkeiten bei.

5. Referenzen

- [1] J.P. Morris, M.B. Rubin, G.I. Block, und M.P. Bonner. Simulations of fracture and fragmentation of geologic materials using combined fem/dem analysis. *International Journal of Impact Engineering*, 33(1-12):463–473, 2006. Hypervelocity Impact Proceedings of the 2005 Symposium.
- [2] Michal Nitka, Gabriela Bilbie, Gael Combe, Cristian Dascalu, und Jacques Desrues. A DEM-FEM two scale approach of the behaviour of granular materials. *AIP Conference Proceedings*, 1145(1):443–446, 2009.

- [3] S.R. Beissel, C.A. Gerlach, und G.R. Johnson. Hypervelocity impact computations with finite elements und meshfree particles. *International Journal of Impact Engineering*, 33(1-12):80 "C 90, 2006. Hypervelocity Impact Proceedings of the 2005 Symposium.
- [4] P. Villard, B. Chevalier, B. Le Hello, und G. Combe. Coupling between finite and discrete element methods for the modelling of earth structures reinforced by geosynthetic. *Computers and Geotechnics*, 36(5):709"C717, 2009.
- [5] H. Nakashima und A. Oida. Algorithm und implementation of soil-tire con-tact analysis code based on dynamic fe-de method. *Journal of Terramechanics*, 41:127"C137, 2004.
- [6] Hiroshi Nakashima, Yuzuru Takatsu, Hisanori Shinone, Hisao Matsukawa, und Takahiro Kasetani. Fe-dem analysis of the effect of tread pattern on the tractive performance of tires operating on sand. *Journal of Mechanical Systems for Transportation and Logistics*, 2(1):55"C65, 2009.
- [7] David A. Horner, John F. Peters, und Alex Carrillo. Large scale discrete element modeling of vehicle-soil interaction. *Journal of Engineering Mechanics*, 127(10):1027"C1032, 2001.
- [8] D. Kunii und O. Levenspiel. *Fluidization Engineering*. Butterworth-Heinemann, 1991.
- [9] B.R. Andeen und L.R. Glicksman. Heat transfer to horizontal tubes in shallow fluidised beds. In *ASMEpaper 76-HT-67*, 1976.
- [10] J.S.M. Boterill. *Fluid-bed Heat Transfer*. Academic Press, New York, 1975
- [11] T. M. Linjewile, A. S. Hull, und P. K. Agarwal. Heat transfer to a large mobile particle in gas-fluidized beds of smaller particles. *Chemical Engineering Science*, 48(21):3671- 3675, 1993. ISSN 0009-2509. doi: 10.1016/0009-2509(93)81023-O. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/000925099381023O>.
- [12] M. S. Parmar und A. N. Hayhurst. The heat transfer coefficient for a freely moving sphere in a bubbling fluidised bed. *Chemical Engineering Science*, 57(17):3485 - 3494, 2002. ISSN 0009-2509. doi: 10.1016/S0009-2509(02)00259-2. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250902002592..>
- [13] I. B. Ross, M. S. Patel, und J. F. Davidson. The combustion of carbon particles in a fluidised bed. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, 59:83-88, 1981
- [14] A. I. Tamarin, D. M. Galerstein, und V. M. Shuklina. Heat transfer and the combustion temperature of coke particles in a uidised bed. *Journal of Engineering Physics*, 42:14-19, 1982
- [15] W. Prins. Fluidised bed combustion of a single carbon particle. PhD thesis, Twente, University, The Netherlands, 1987
- [16] P. K. Agarwal. Transport phenomena in multi-particle systems-iv. heat transfer to a large freely moving particle in gas fluidised bed of smaller particles. *Chemical Engineering Science*, 46: 1115-1127, 1991
- [17] A.P. Collier, A.N. Hayhurst, J.L. Richardson, und S.A. Scott. The heat transfer coefficient between a particle and a bed (packed or fluidised) of much larger particles. *Chemical Engineering Science*, 59(21):4613 - 4620, 2004. ISSN 0009-2509. doi: 10.1016/j.ces.2004.07.029. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250904004658>.
- [18] A. Schmidt und U. Renz. Eulerian computation of heat transfer in fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 54(22):5515 - 5522, 1999. ISSN 0009-2509. doi: 10.1016/S0009-2509(99) 00298-5. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250999002985>.
- [19] A. Schmidt und U. Renz. Numerical prediction of heat transfer in fluidised beds by a kinetic theory of granular flows numerical prediction of heat transfer in fluidised beds by a kinetic theory of granular ows. *International Journal of Thermal Sciences*, 39:871-885, 2000.
- [20] S. Schmidt, J. Büchs, C. Born, und M. Biselli. A new correlation for the wall-to-fluid mass transfer in liquid-solid fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 54(6):829 - 839, 1999. ISSN 0009- 2509. doi: 10.1016/S0009-2509(98)00284-X. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000925099800284X>
- [21] K. Papadikis, S. Gu, und A.V. Bridgwater. Computational modelling of the impact of particle size to the heat transfer coefficient between biomass particles and a fluidised bed. *Fuel Processing Technology*, 91(1):68 - 79, 2010. ISSN 0378-3820. doi: 10.1016/j.fuproc.2009.08.016. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378382009002483>.
- [22] Y. Tsuji, T. Kawaguchi, und T. Tanaka. Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. *Powder Technol.*, 77(79), 1993
- [23] B. H. Xu und A. B. Yu. Numerical simulation of the gas-solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Science*, 52:2785, 1997
- [24] Y. Kaneko, T. Shiojima, und M. Horio. Dem simulation of fluidized beds for gas-phase olefin

- polymerization. *Chemical Engineering Science*, 54:5809, 1999
- [25] W. E. Ranz und W. R. Marshall. Evaporation from drops. *Chemical Engineering Progress*, 48:141, 1952.
- [26] J. T. Li und D. J. Mason. A computational investigation of transient heat transfer in pneumatic transport of granular particles. *Powder Technology*, 112:273, 2000. 3
- [27] J. T. Li und D. J. Mason. Application of the discrete element modelling in air drying of particulate solids. *Drying Technology*, 20:255, 2002
- [28] J. T. Li, D. J. Mason, und A. S. Mujumdar. A numerical study of heat transfer mechanisms in gas-solids flows through pipes using a coupled CFD and DEM model. *Drying Technology*, 21:1839, 2003.
- [29] H. Zhou, G. Flamant, und D. Gauthier. Dem-les of coal combustion in a bubbling fluidized bed. part i: gas-particle turbulent flow structure. *Chemical Engineering Science*, 59:4193, 2004a.
- [30] H. Zhou, G. Flamant, und D. Gauthier. Dem-les simulation of coal combustion in a bubbling fluidized bed. part ii: coal combustion at the particle level. *Chemical Engineering Science*, 59: 4205, 2004b.
- [31] K. F. Malone und B. H. Xu. Particle-scale simulation of heat transfer in liquid-fluidised beds. *Powder Technology*, 184:189-204, 2008.
- [32] J. H. Ferziger und M. Peric. *Computation Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, Heidelberg, 1996
- [33] C. Hirsch. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. Wiley & Sons, London, 1991.
- [34] K. J. Bathe. *Finite Element Procedures*. Prentice Hall, 1996
- [35] O. Zienkiewicz. *Methode der Finiten Elemente*. Carl Hanser Verlag, 1984.
- [36] B. Peters. *Thermal Conversion of Solid Fuels*. WIT Press, Southampton, 2003
- [37] Large scale industrial DEM modelling, 2004, P. W. Cleary, *Engineering Computations*, Vol21 No. 2/3/4, PP. 169-204
- [38] *Computational Granular Dynamics*, 2005, T. Pöschel, T. Schwager, Springer
- [39] Kansa, E.J., Perlee, H.E. und Chaiken, R.F.: Mathematical model of wood pyrolysis including internal forced convection. *Combustion and Flame*, 29:pp. 311-324, 1977
- [40] Peters, B.: Classification of combustion regimes in a packed bed based on the relevant time and length scales. *Combustion and Flame*, 116:297-301, 1999
- [41] Man, Y. H. und Byeong, R. C.: A numerical study on the combustion of a single carbon particle entrained in a steady flow. *Combustion and Flame*, 97:1-16, 1994
- [42] Lee, J.C., Yetter, R.A. und Dryer, F.L.: Transient numerical modelling of carbon ignition and oxidation. *Combustion and Flame*, 101:387-398, 1995
- [45] B. Peters und A. Dziugys. An approach to simulate the motion of spherical and non-spherical fuel particles in combustion chambers. *Granular Matter*, 3(4):231-265, 2001.
- [44] Balci, S., Dogu, T. und Yücel, H.: Pyrolysis kinetics of lignocellulosic materials. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 32: 2573-2579, 1993
- [45] Kulasekaran, S. Linjewile, T. und Agarwal, P. und Biggs, M.: Combustion of porous char particle in an incipiently fluidized bed. *Fuel*, 77: 1549-1560, 1998