

# Die Extended Discrete Element Method (XDEM) als integraler Ansatz für reagierende Mehrphasenströmungen

## **The Extended Discrete Element Method (XDEM) as an Integral Approach for Reacting Multi-phase Flows**

Prof. Dr.-Ing. **B. Peters**, MSc **A. Mahmoudi**, Université du Luxembourg 6, rue Coudenhove-Kalergi, L-1359 Luxembourg, email: [bernhard.peters@uni.lu](mailto:bernhard.peters@uni.lu)

### **Kurzfassung**

Eine Großzahl technischer Anwendungen wie beispielsweise in der pharmazeutischen Industrie, Nahrungsmittelindustrie, Bergbau, Verfahrenstechnik oder Energiegewinnung durch Verbrennung von Feststoffen enthalten neben einer gasförmigen oder fluiden Phase eine diskrete Phase in Form von Partikeln oder Feststoffen. Diese Anwendungen lassen sich sehr vorteilhaft mit dem innovativen Konzept der Extended Discrete Element Method (XDEM) numerisch beschreiben. Hierbei werden die einzelnen Partikel über den dynamischen Zustand (Position und Orientierung) und den thermodynamischen Zustand (Temperatur und Spezies) diskret beschrieben, wo hingegen die Gas- oder Flüssigphase über kontinuumsmechanische Ansätze der Computational Fluid Dynamics (CFD) berechnet wird. Beide Phasen – diskret und kontinuumsmechanisch – sind durch Austausch von Stoff, Wärme und Impuls gekoppelt, was damit eine detaillierte Auflösung der Phasen für CFD-Gesamtrechnungen ermöglicht und damit zum tieferen Verständnis der zugrundeliegenden physikalischen Zusammenhänge beiträgt.

### **Abstract**

A large number of engineering applications such as pharmaceutical and food industry, mining, process engineering or energy production through thermal conversion of solid fuels include in addition to a gaseous or fluid phase a discrete phase represented by particles. These applications are most favourable treated by the innovative concept of the Discrete Element Method (XDEM). It describes individual particles by both its dynamic (position and orientation) and thermodynamic (temperature and species) state, while a gaseous or fluid phase is resolved by traditional continuum-mechanic concepts of well-proven Computational Fluid Dynamics (CFD) methods for multi-phase flows. Both phases – discrete and continuum-mechanic – interact by an exchange of mass, heat and momentum that provides

a detailed resolution of the phases involved and supports a deeper understanding of the underlying physical principles.

### **1. Extended Discrete Element Method (XDEM)**

Die Extended Discrete Element Methode (XDEM) stellt ein generisches Konzept dar, das aufbauend auf der Discrete Element Methode (DEM) um wichtige Module erweitert wurde. Mit dem Basismodul der DEM werden Position und Orientierung der Partikel in Raum und Zeit bestimmt, was mit einem zusätzlichen Modul zur Berechnung des thermodynamischen Zustandes ausgedrückt durch temperatur- und Stoffverteilung ergänzt wird wie bei Peters [36] beschrieben. Somit sind individuelle Partikel sowohl durch ihren dynamischen als auch thermodynamischen Zustand charakterisiert, was eine erhebliche Erweiterung der klassischen Methode darstellt. Dazu werden die klassischen Bewegungsgleichungen der Mechanik und 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 Ergebnisse und trägt wesentlich zum fundamentalen Verständnis bei.

Durch die Notwendigkeit von Randbedingungen für die Partikel ergibt sich eine natürliche Kopplung zu fluiddynamischen Phasen, die mit bewährten Methoden der Computational Fluid Dynamics (CFD) [1, 2] beschrieben werden. Mit dieser Kopplung werden Impuls-, Wärme- und Stoffaustausch zwischen den Partikeln und der sie umgebenden Fluidphase beschrieben. Über diese Wechselwirkung zu fluiden Phasen wird der Anwendungsbereich noch einmal wesentlich erweitert, so dass damit eine effektive Verknüpfung zwischen diskreten und kontinuumsmechanischen Rechenmethoden entsteht. Folglich steht mit der Extended Discrete Element Method (XDEM) ein wirkungsvolles Werkzeug zur Verfügung, das in der Verfahrenstechnik, Nahrungsmittelindustrie, Transport von granularen Gütern und in der Reaktortechnik zum tieferen Verständnis der zugrunde liegenden physikalisch-chemischen Prozesse beiträgt.

Dieses numerische Konzept liefert sehr detaillierte Ergebnisse, die zum tieferen Verständnis der physikalischen und chemischen Phänomene beitragen. Dadurch ist der Ansatz weitestgehend frei von experimentellen Randbedingungen oder empirischen Korrelationen und dehnt seinen Anwendungsbereich weit über die integralen oder rein kontinuumsmechanischen Methoden aus wie von Peters [3] erläutert.

## 2. Anwendung der Extended Discrete Element Method zur Beschreibung der Trocknung und Pyrolyse von Tannenholz in einem Festbettreaktor

Der oben beschriebene XDEM-Ansatz der wurde eingesetzt, um die Trocknung mit anschließender Pyrolyse von Tannenholz in einem Festbettreaktor zu berechnen. Die Eigenschaften des Ausgangsmaterials und der Pyrolyseprodukte sind in Tabelle 1 aufgeführt.

Tabelle 1: Eigenschaften von Tannenholz, Pyrolysekoks und Asche

Eigenschaft	Tanne	Pyrolysekoks	Asche
Dichte [kg/m <sup>3</sup> ]	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]	$50.0 \cdot 10^{-6}$	$10.0 \cdot 10^{-5}$	$50.0 \cdot 10^{-6}$

Zunächst wurde das Befüllen des Rektors mit Hilfe des Bewegungsmoduls numerisch beschrieben wie exemplarisch in Abb. 1 dargestellt ist, womit die eine zufällig im Raum verteilte Anordnung der Partikel und des sie umgebenden Lückenraums im Reaktor erhalten wurde.

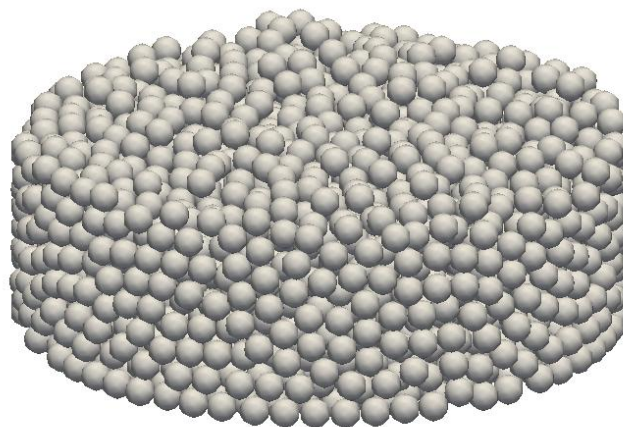


Bild 1: Zufällige Verteilung der Partikel im Reaktor und des sie umgebenden Lückenraums gezeigt im Querschnitt des Festbetts

Der zylindrische Reaktor wurde von oben nach unten mit heißem Gas durchströmt, das die Partikel zunächst bis zur Verdampfungstemperatur des Wassers aufheizte. Wie aus Abb. 1 zu erkennen ist, ist der Lückengrad an den Rändern des Reaktors, hervorgerufen durch den Wandeffekt, grösser als im Innern.

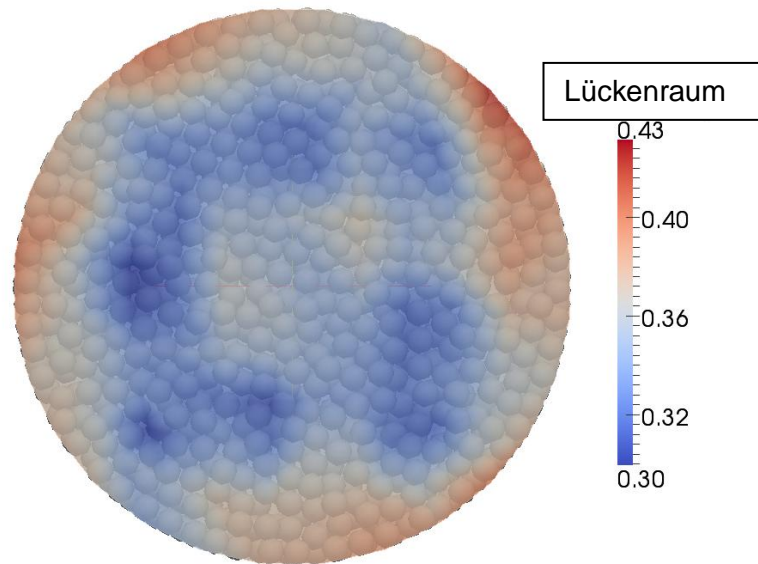


Bild 2: Verteilung des Lückenraums im Querschnitt eines Festbettes

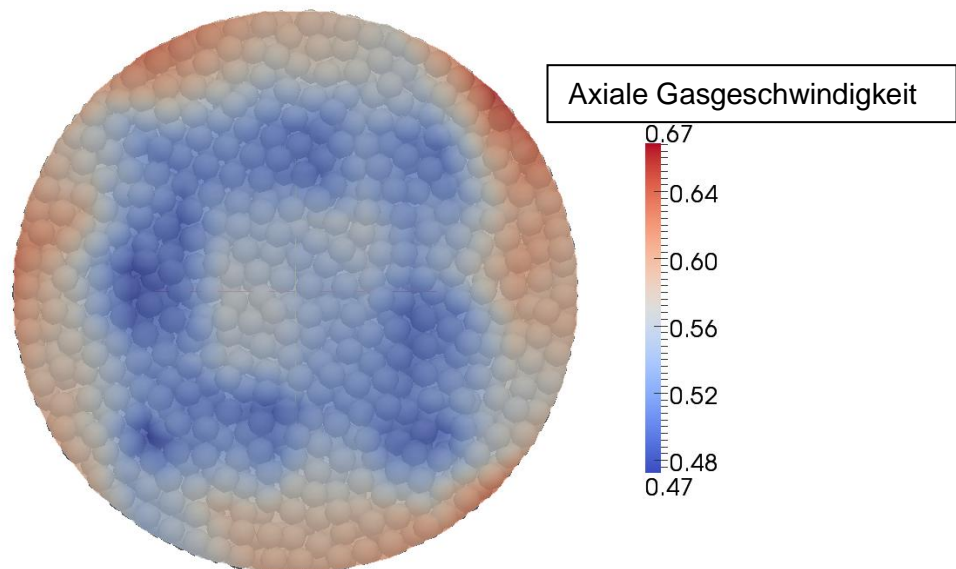


Bild 3: Verteilung der axialen Gasgeschwindigkeit im Querschnitt eines Festbettes

Dadurch ergibt sich in einem Ring um die Reaktorwände eine höhere Strömungsgeschwindigkeit wie in Abb. 3 dargestellt, die einen vergrößerten Wärmeübergang sowohl an die Partikel als auch an die Reaktorwand zur Folge hat. Damit steht den Partikeln im Randbereich eine größere Wärmemenge zur Verfügung, was den Trocknungsvorgang beschleunigt was Abb. 4 zu einem Zeitpunkt von 2000 s zeigt.

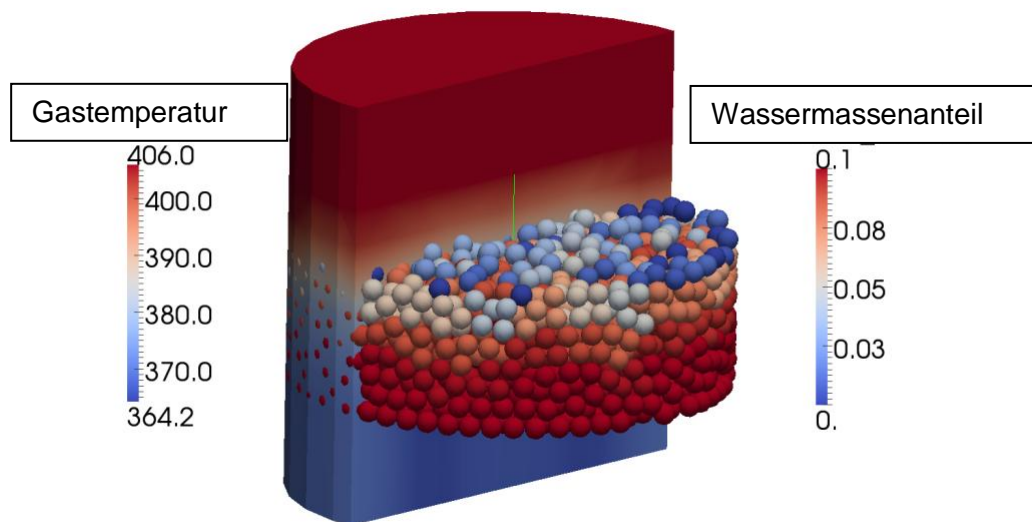


Bild 4: Gastemperatur und Feuchtegehalt der Partikel während der Trocknung

Partikel in Wandnähe sind bereits vollständig oder doch zu einem großen Teil durchgetrocknet, wodurch ihr Feuchtegehalt auf verschwindende Mengen reduziert wurde während die Mehrzahl der Partikel im Innern des Reaktors noch eine merkliche Feuchte besitzen. Außerdem ruft die inhomogene Verteilung des Lückengrads im inneren Bereich des Reaktors eine heterogen verteilte Strömungsbedingung im Festbett hervor, wodurch sich kein einheitlicher Trocknungsvorgang einstellt. Im speziellen kann auf kleinskaligen Längen nicht von einer klar abgrenzten und forstschreitenden Trocknungsfrent ausgegangen werden. Damit liefert die Extended Discrete Element Method sehr detaillierte Ergebnisse über ein breites Spektrum von Längenskalen, die mit experimentellen Methoden nur sehr aufwendig, oft aber nicht in dieser Form, gewonnen werden können. Allerdings liefern integrale Messungen wie der Gewichtsverlust während der Trocknungsphase wertvolle Validierungsdaten, da auch in der Simulation integrale Bilanzen erfüllt sein müssen. Abb. 5 zeigt einen Vergleich des Gewichtsverlusts zwischen Messung und Rechnung während der Trocknung eines Festbetts für zwei Trocknungstemperaturen von 150 °C und 135 °C. Für beide Trocknungsvorgänge wurde eine sehr gute Übereinstimmung erzielt.

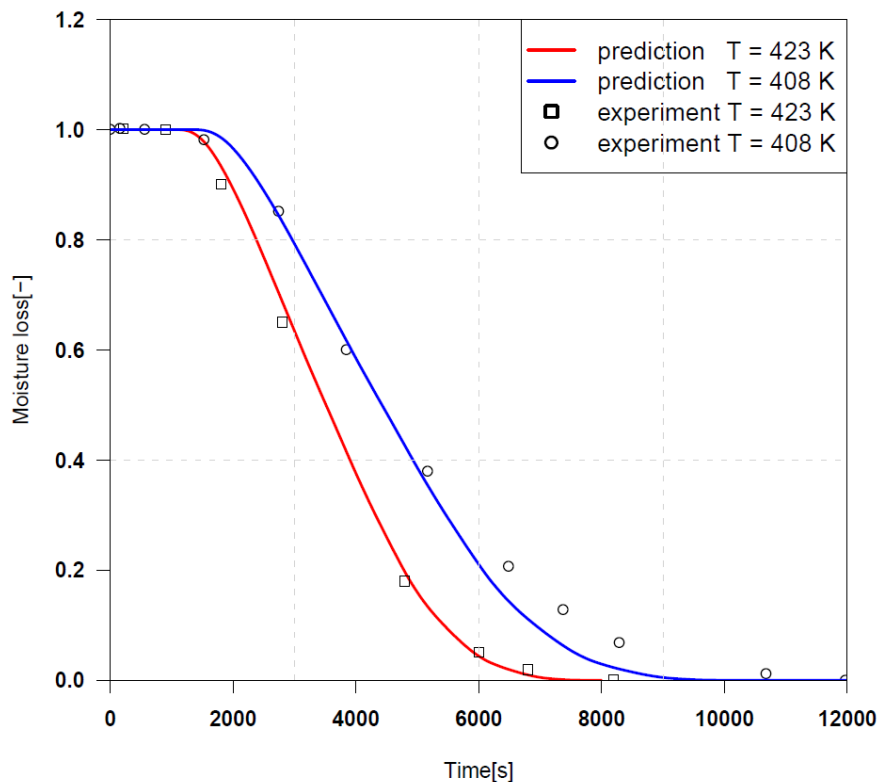


Bild 5: Vergleich des Gewichtsverlusts zwischen Messung und Rechnung während der Trocknung in einem Festbett

Dieses charakteristische Verhalten prägt analog die Pyrolysephase der Partikel im Anschluss an die Trocknungsphase. Zunächst schreitet die Temperaturerhöhung der Partikel weiter fort, die ebenso heterogen auf der Partikelebene verteilt ist, wie sie durch die Strömungszustände und den damit verbunden Wärmeübergang im Lückenraum vorgegeben ist und in Abb. 6 gezeigt ist.

Auch hier sind die Partikeltemperaturen ungleichmäßig verteilt, wobei die Wandeffekte im Besonderen in der Temperaturverteilung des Gases deutlich zu erkennen sind. Diese Temperaturverteilung innerhalb des Reaktors beeinflusst zu einem großen Grad den Pyrolysefortschritt und die damit verbundene Freisetzung der Pyrolysegase wie Methan, das in Abb. 7 gezeigt ist.

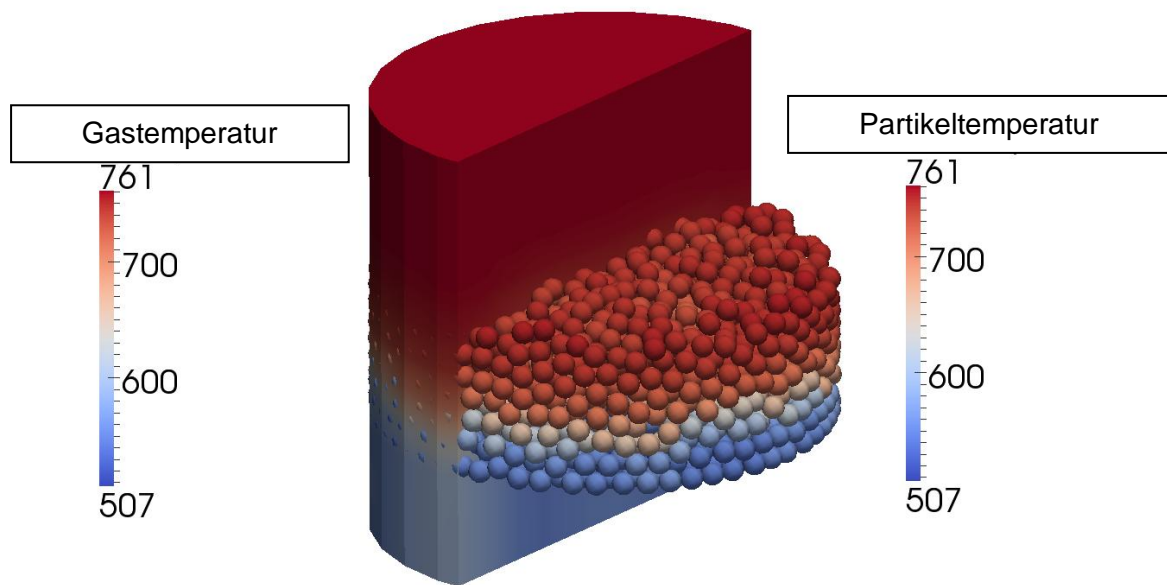


Bild 6: Gastemperatur und partikel aufgelöste Temperaturverteilung in einem chemischen Reaktor

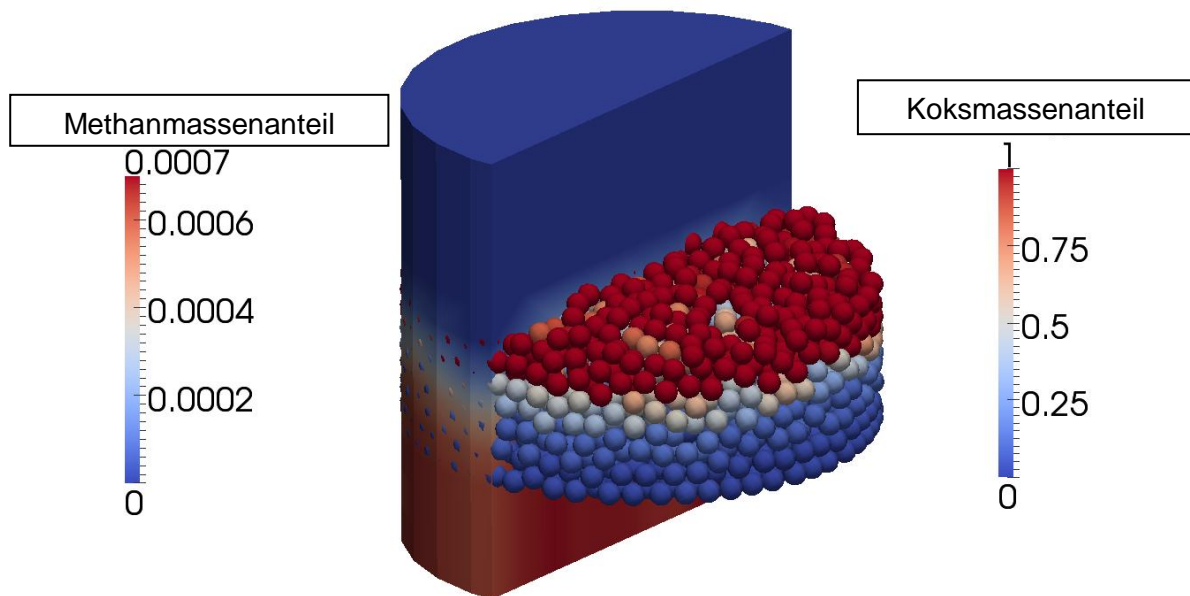


Bild 7: Pyrolysefortschritt im Festbett dargestellt durch den gebildeten Koksanteil im Partikel und des Methananteils in der Gasphase

Die Konzentration des freiwerdenden Methangases besonders im Querschnitt ungleichmäßig verteilt, was mit der Verteilung des Lückenraums in Abb. 2 und der damit hervorgerufenen Strömungs- und Temperaturverteilung korreliert.

### **3. Zusammenfassung**

Die Extended Discrete Element Methode (XDEM) als innovativer Ansatz zur numerischen Beschreibung von multi-physikalischen Anwendungen wurde im vorliegenden Beitrag vorgestellt und an der Pyrolyse in einem Festbettreaktor erläutert. Sowohl Prozesse auf kleinskaligen Längen der Partikelebene wie als auch deren Wechselwirkung mit den großen Längenskalen der Strömung im Lückenraum werden akkurat abgebildet und machen den integralen und neuartigen Charakter der Methode aus. Um diesen Genauigkeitsgrad zu erhalten, werden die Längenskalen der Partikel mit Lagrange-Ansatz diskret aufgelöst, während die großen Skalen mit bewährten Methoden der Kontinuumsmechanik basierend auf Eulerschen Methoden beschrieben werden. Partikelprozesse werden mit der um den thermodynamischen Zustand der Partikel erweiterte Discrete Element Method (DEM) beschrieben, wohingegen für die Strömung im Lückenraum mit bewährten Methoden der Computational Fluid Dynamics (CFD) zum Einsatz kommen. Zwischen der diskreten und kontinuierlichen Phase (Partikel und Strömung) werden Impuls, Stoff und Wärme ausgetauscht, wodurch weitestgehend auf empirische Korrelationen und experimentelle Untersuchungen verzichtet werden kann. Mit einer auf diese Art erzielten hohen räumlichen und zeitlichen Auflösung können Prozesse detailliert analysiert werden und tragen wesentlich zum tieferen Verständnis der zugrundeliegenden physikalischen Gesetze bei.

- [1] J. H. Ferziger und M. Peric. *Computation Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, Heidelberg, 1996
- [2] C. Hirsch. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. Wiley & Sons, London, 1991.
- [3] B. Peters. *Thermal Conversion of Solid Fuels*. WIT Press, Southampton, 2003