

# Gekoppelte Simulation von chemisch reagierenden Partikeln und Strömungen zur Prozessoptimierung in der Verfahrens- und Energietechnik

Robert Scharler,  
Thomas Klein, Ramin Mehrabian, Reinhard Tatschl



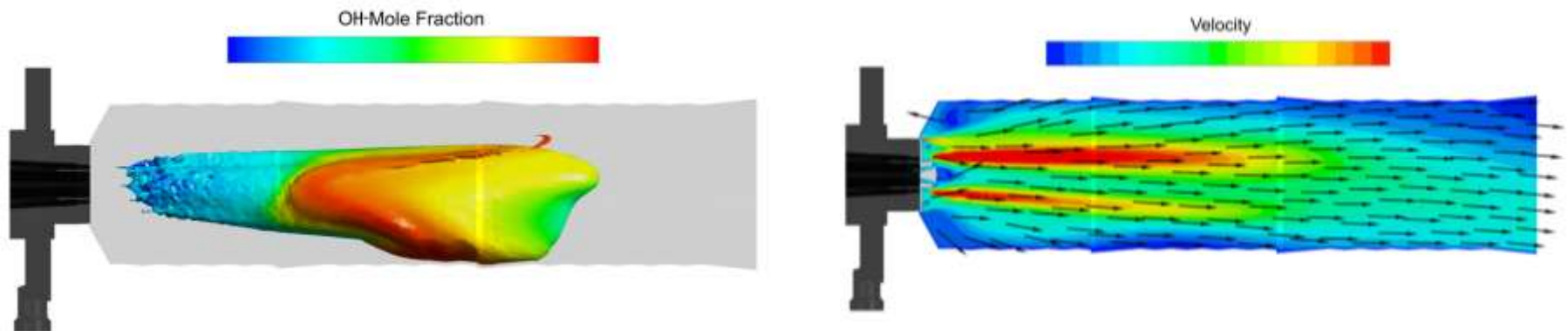
bioenergy2020+

Green Tech Innovators Club,

Mi, 19.10.2016, 16:30

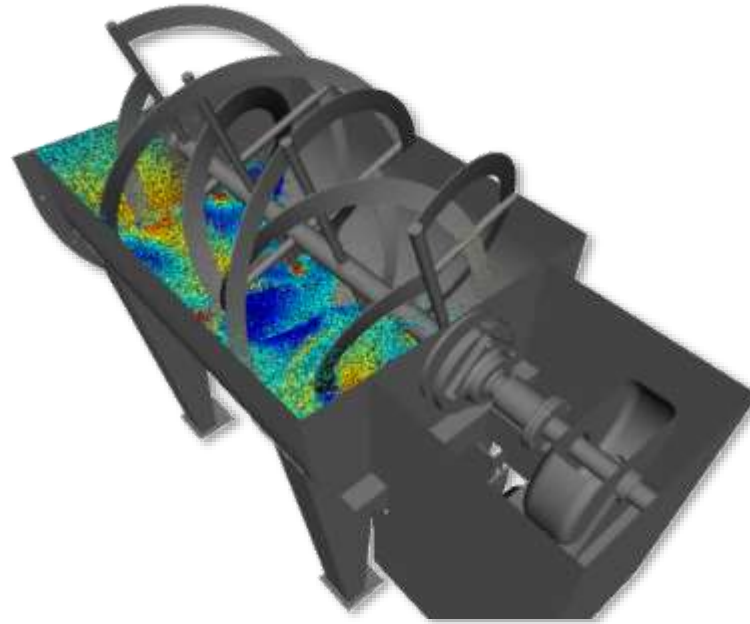
TU Graz, Aula, Rechbauerstraße 12

- Moderne numerische Simulationsmethoden, wie CFD (Computational Fluid Dynamics) und DEM (Diskrete Elemente Methode) werden in zunehmendem Ausmaß als effiziente Werkzeuge zur Entwicklung und Optimierung von Prozessen und Anlagen in der Verfahrenstechnik, Lebensmittel- und Pharmaindustrie, Energietechnik etc. eingesetzt.
- **CFD:** Computational Fluid Dynamics – Numerische Strömungsmechanik – Simulation von laminaren, turbulenten, chemisch reaktiven und mehrphasigen Strömungen. Simulation von Brennern und Feuerungen, Wärmetauschern und Öfen, Verbrennungsmotoren etc.



*Beispiel: CFD-Simulation Gasbrenner*

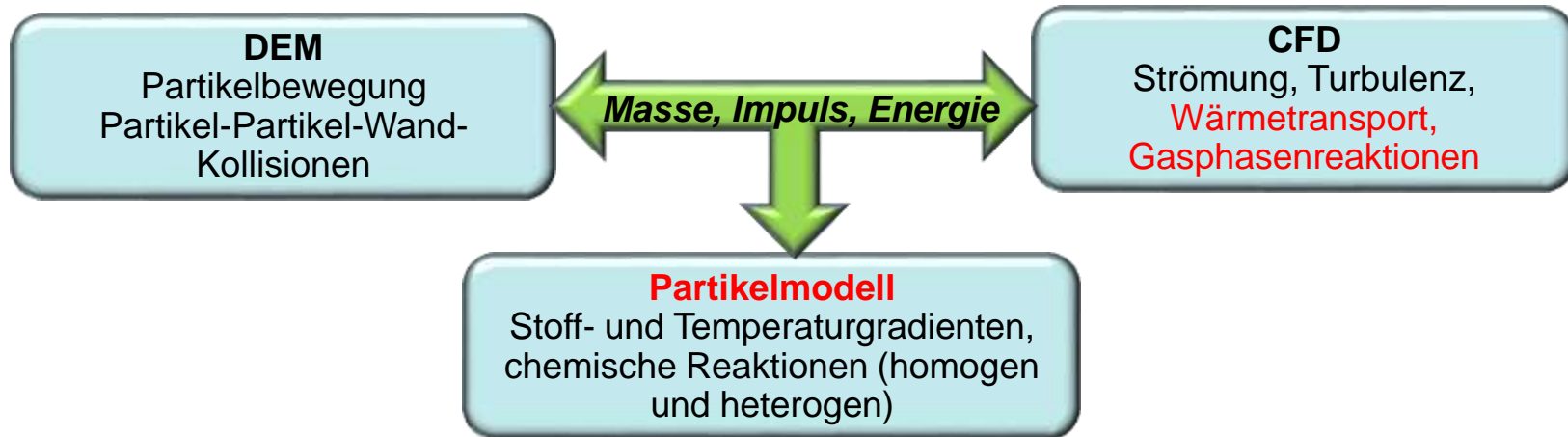
- **DEM:** Diskrete Elemente Methode - Simulation von granularen Strömungen (Partikelströmungen) und Schüttungen; Simulation von verschiedensten Mischern, Rührwerken, Transport- und Förderprozessen, Separations- und Sortierungsprozessen



*Beispiel: DEM-Simulation eines Mixers*

- Bei **Anlagen mit sehr komplexen chemisch reagierenden und interagierenden Partikel-Gas-Mehrphasenströmungen**, wie z.B. Rostfeuerungen mit verschiedensten Brennstoffen, Drehrohröfen (z.B. zum Kalkbrennen), Wirbelschichtfeuerungen und Vergasern etc. ist eine ganzheitliche Simulation der relevanten Prozesse aufgrund des enormen numerischen Aufwands **bis heute nicht mit befriedigender Qualität und Rechenzeit möglich.**

- **Ziel** der beabsichtigten Forschungs Kooperation ist deswegen die **Entwicklung eines neuen Simulationswerkzeug**, dass eine gekoppelte Simulation der Partikel-Gas-Strömung samt chemischer Reaktionen und Stoff- und Wärmeaustausch ermöglicht und als **Entwicklungs- und Designwerkzeug in der Prozess- und Energietechnik** (z.B. zur Emissions-Reduktion, Wirkungsgrad-, Prozess- und Betriebsoptimierung sowie zur Reduktion des Einsatzes von Betriebs-, Roh- und Brennstoffen bzw. CO<sub>2</sub>-Emissionen) eingesetzt werden kann.



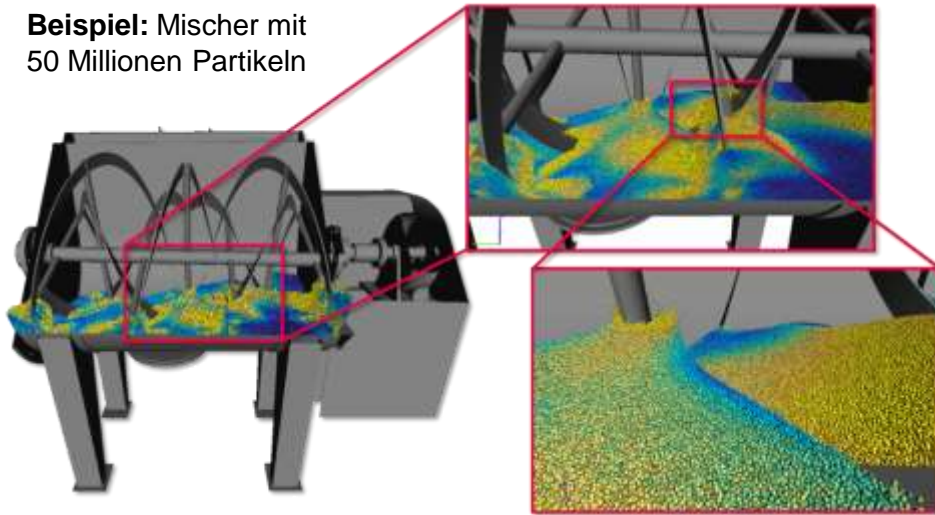
- Dabei soll auf bestehendem Know-How und eigenentwickelten Modellen von in Ihren Bereichen der DEM- und CFD-Simulation **führenden österr. F&E-Organisationen aufgebaut** werden.
  - Institut für Wärmetechnik, Technische Universität Graz (IWT, TU Graz)
  - AVL LIST GmbH
  - BIOENERGY 2020+ GmbH (BE2020)
  - Research Center Pharmaceutical Engineering GmbH (RCPE)
- **Gesucht** werden nun **Industriepartner aus verschiedenen relevanten Sparten**, die an einer Projektkooperation und an einem Anwendung des neuartigen Modells für die Entwicklung und Optimierung Ihrer Anlagen interessiert sind.

- **Research Center Pharmaceutical Engineering GmbH (RCPE):** Führendes Kompetenzzentrum im Pharmaceutical Engineering, betreibt Spitzenforschung im Bereich der Prozess- und Produktoptimierung
- Die *Area Modeling and Prediction* hat große Erfahrung im Bereich der Entwicklung und Anwendung von DEM und CFD-Modellen und hat den DEM Code XPS® entwickelt. Weiters wurde gemeinsam mit AVL die Kopplung mit der CFD-Software AVL FIRE™ realisiert.
- **AVL LIST GMBH:** AVL ist das weltgrößte unabhängige Unternehmen, das sich mit der Entwicklung, der Simulation und dem Test von Antriebssträngen von PKWs, LKWs und Großmotoren
- Die *Abteilung Advanced Simulation Technologies* hat die CFD-Software AVL FIRE™ mit einer internationalen Spitzenposition im Bereich motorische Verbrennung / Anwendungen in der Mobilindustrie entwickelt und gemeinsam mit dem RCPE das Interface von AVL FIRE™ mit XPS® zur gekoppelten CFD-DEM-Simulation entwickelt.

## Hauptvorteile von XPS® (eXtended Particle Simulation)

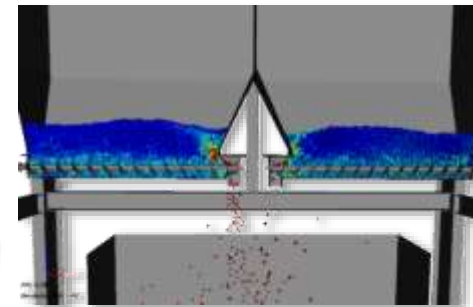
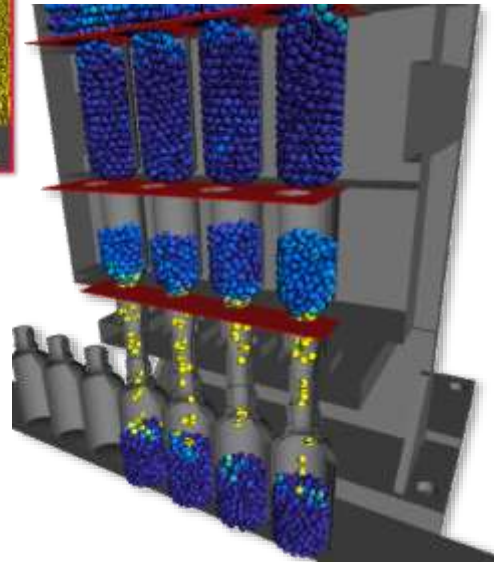
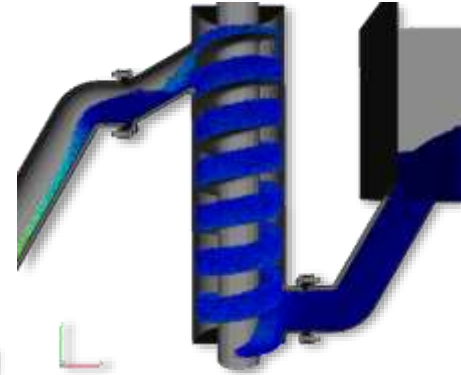
- Sehr niedrige Berechnungszeiten aufgrund der **Simulation auf mehreren GPUs**
- Simulation von extrem großen Partikelzahlen (bis zu 100 Mio.)
- Detaillierte Information über individuelle Partikelbahnen und Kräfte auf die Partikel verfügbar

**Beispiel:** Mischer mit  
50 Millionen Partikeln



## Anwendungen:

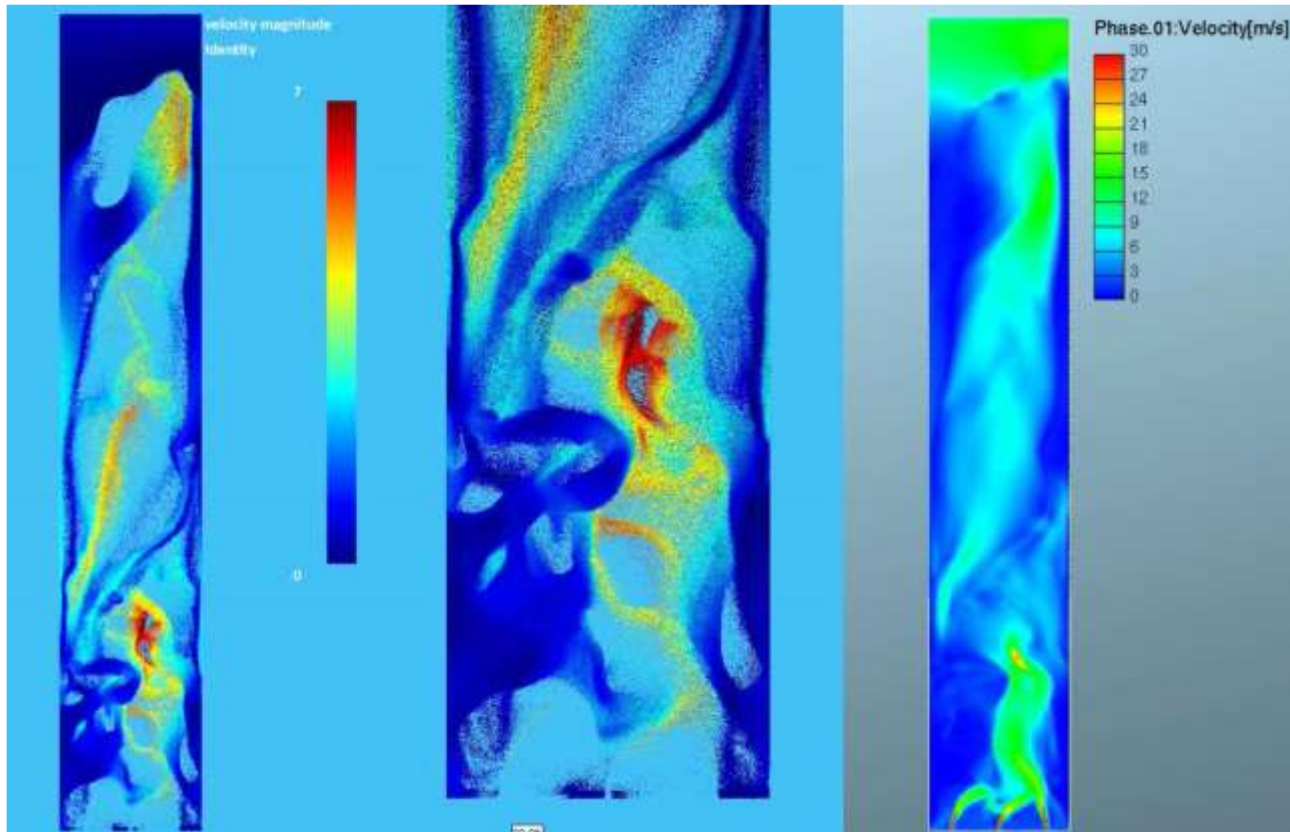
- Mischer, Rührwerke
- Separation
- Förderung/Transport
- Sortierung



Quelle: CATRA GmbH

- Die Schnittstelle DEM (XPS®) mit CFD (AVL FIRE™) zur gemeinsamen Berechnung von interagierenden Gas-Flüssig-Partikel Mehrphasenströmungen ist bereits entwickelt (z.B. für die Simulation von Wirbelschichten, Sprühbeschichtung, Sprühtrocknung etc.).
- Die Simulation chemischer Reaktionen samt Wärmetransport in der Partikel-Gas-Mehrphasenströmung ist noch nicht möglich.

**Beispiel:** Simulation einer Wirbelschicht (nicht reaktiv)

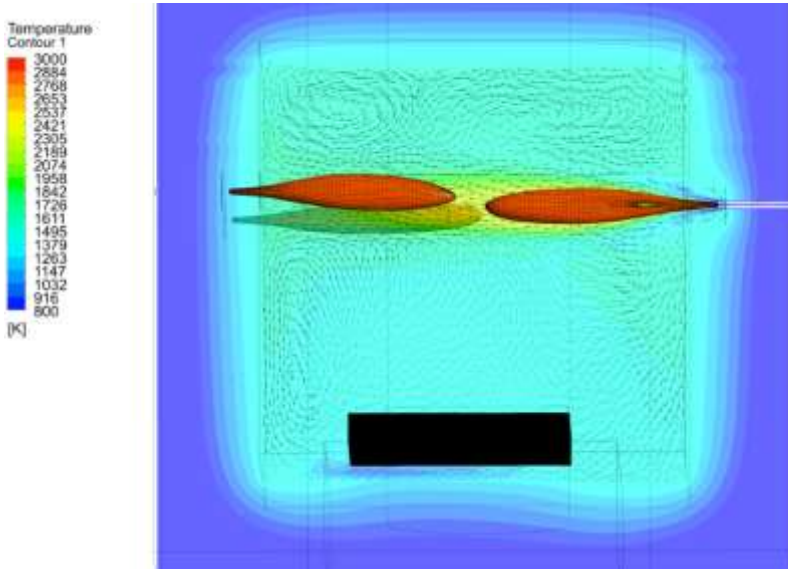
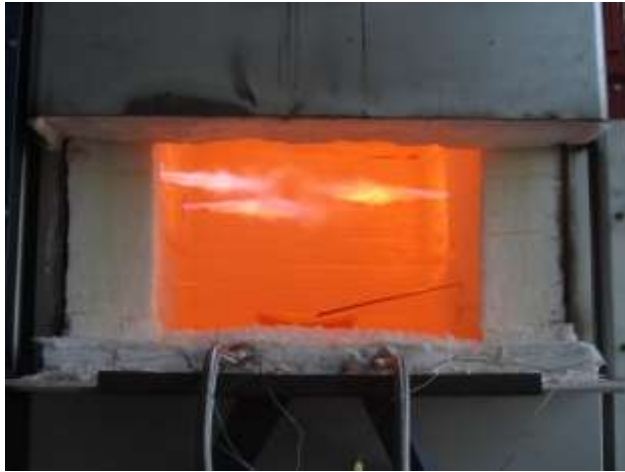


Partikelgeschwindigkeiten (links, Mitte) und Gasgeschwindigkeiten (rechts) [m/s]

- **Institut für Wärmetechnik, Technische Universität Graz (IWT):** Spitzenposition und umfassende Kompetenzen im Bereich thermischen Energietechnik / innovative Energiesysteme.
- Großes Know-How der *Simulationsabteilung* in der *CFD-Simulation* in diesen Bereichen sowie insbesondere in der Simulation von reaktiven Strömungen mit detaillierter Reaktionskinetik, z.B. in Feuerungen und Industrieöfen aller Art; Prof. Robert Scharler hat eine Professur für CFD inne, ist Scientific Advisor von BE2020 und arbeitet auch eng mit dem RCPE zusammen.
  
- **BIOENERGY 2020+ GmbH (BE2020):** Führendes österreichisches Biomassekompetenzzentrum
- Die *Area Modellierung und Simulation* hat eine internationale Spitzenposition im Bereich der Simulation von Biomasse-Feuerungsanlagen und umfangreiche Erfahrung in der CFD-Modellentwicklung und Simulation in den Bereichen der Konversion fester Biomasse sowie der Gasphasenverbrennung- und Schadstoffbildung. Beispielsweise wurde ein Modell, das Temperatur- und Speziesgradienten sowie die chemischen Reaktionen beim Abbrand der Biomasse-Partikel beschreibt, entwickelt, mit CFD-Routinen für die Simulation der reaktiven Feuerraumströmung gekoppelt und validiert.

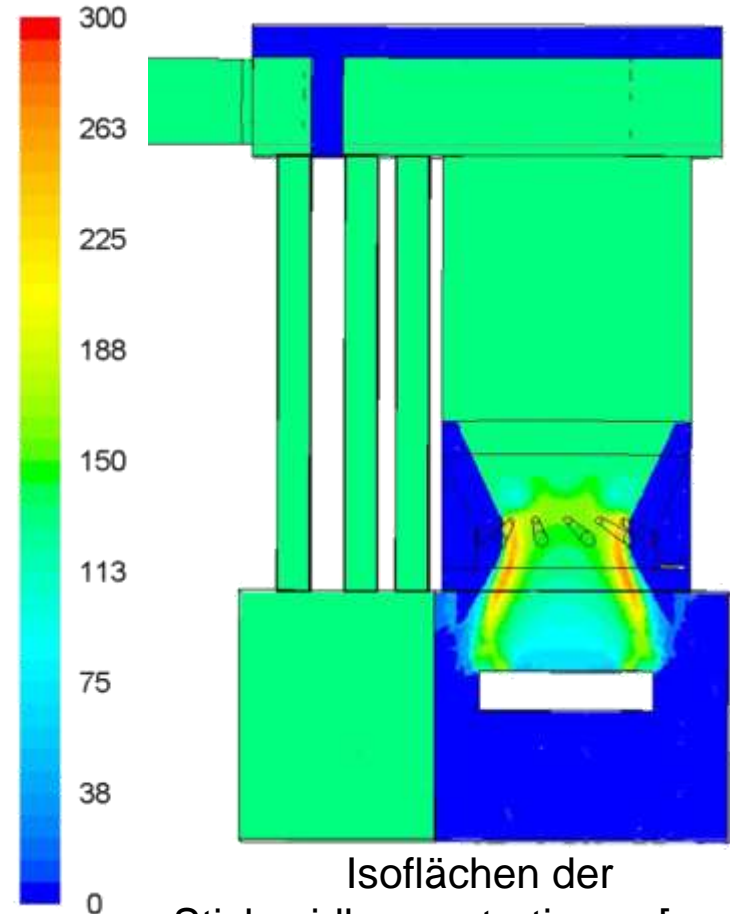


Simulation eines Versuchsofens mit Sauerstoff-angereicherter Verbrennung



Isoflächen der Gastemperatur [K]

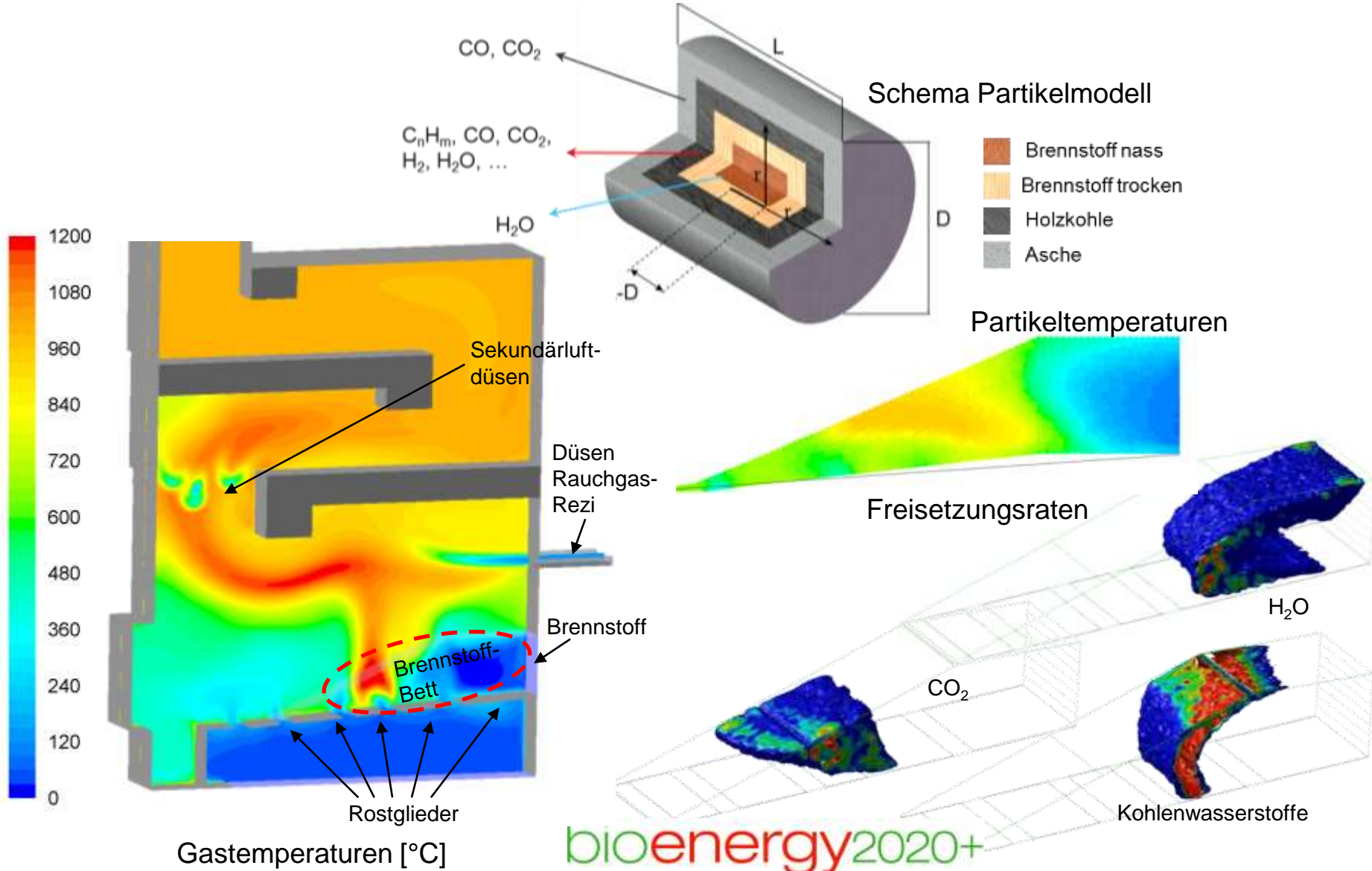
Simulation der Brennkammer eines Pelletkessels



Isoflächen der Stickoxidkonzentrationen [ppmv]

bioenergy2020+

Beispiel: Simulation einer Biomasse-Rostfeuerung



**Institut für Wärmetechnik, TU Graz**

*Univ.-Prof. DI Dr. Robert Scharler*

*Universitätsprofessor für CFD, Scientific Advisor BE2020*

*Tel: +43 316 873 7804*

*Email: robert.scharler@tugraz.at*



**AVL LIST GMBH**

*Dr. Reinhard Tatschl*

*Research & Technology Manager Advanced Simulation Technologies*

*Tel.: +43 316 787 618*

*Email: reinhard.tatschl@avl.com*



**BIOENERGY 2020+ GmbH**

*Dr. Ramin Mehrabian*

*Area Manager Modelling and Simulation*

*Tel.: +43 316 873 9232*

*Email: ramin.mehrabian@bioenergy2020.eu*

bioenergy2020+

**Research Center Pharmaceutical Engineering GmbH**

*Dr. Thomas Kurt Klein*

*Geschäftsführer / CEO*

*Tel.: +43 316 873 30900*

*Email: thomas.klein@rcpe.at*

