

# Abschlussbericht zum Projekt 2671

## Modellierung und numerische Simulation der Selbstentzündung und des Schwelbrandes in Schüttungen fester fossiler Brennstoffe

Prof. Dr. rer. nat. Frank Behrendt, Dr.-Ing. Nico Zobel

Technische Universität Berlin, Fakultät III

Fachgebiet Energieverfahrenstechnik und Umwandlungstechniken regenerativer Energien

Sekr. RDH 9, Fasanenstr. 89, 10623 Berlin

Email: frank.behrendt@tu-berlin.de, nico.zobel@tu-berlin.de

## 1 Kurzfassung

Das Risiko des durch Selbstentzündung entstehenden Schwelbrands von Schüttungen fester fossiler Rohstoffe ist ein gravierendes sicherheitstechnisches und auch wirtschaftliches Problem. Die bisher veröffentlichten Modelle zur Beschreibung dieses Prozesses vernachlässigen inhomogene Lückengradverteilungen, partikelinterne Transportprozesse und oft auch natürliche Konvektion innerhalb der Schüttung. In dieser Arbeit wurde ein bestehendes zweidimensionales Festbettreaktormodell dahingehend erweitert, die o.g. Phänomene berücksichtigen zu können. Damit einhergehend wurde ein paralleler FORTRAN-Computercode entwickelt, um das Modell numerisch lösen zu können. Es konnte gezeigt werden, dass die Berücksichtigung einer inhomogenen Lückengradverteilung bei Schüttungen großer Partikeln unerlässlich für eine hinreichend gute Modellierung ist. Ebenso konnte gezeigt werden, dass bei Schüttungen großer Partikeln die natürliche Konvektion unbedingt zu berücksichtigen ist. Durch die Integration eines eindimensionalen Partikelmodells in das zweidimensionale Festbettreaktormodell kann der Schwelbrand in bisher nicht möglicher Detailliertheit beschrieben werden. Um zu zeigen, wie wertvoll die angesprochenen Modelerweiterungen - insbesondere die mehrskalige Modellierung - sind, müssen nun konsistente Messungen von Mikrokinetiken und Festbettprozessen mit definierten Materialien durchgeführt werden.

## 2 Aufgabenstellung des Forschungsprojektes

Das Risiko des Schwelbrands von Schüttungen fester fossiler Rohstoffe (insbesondere Kohle bzw. Kohlenstaub, aber auch Biomasse verschiedenster Art sowie Müll) ist ein gravierendes sicherheitstechnisches Problem. Dieses Phänomen ist immer dann anzutreffen, wenn die exotherme Oxidation des Feststoffs bzw. die damit verbundene Erwärmung des Festkörpers durch den Wärmetransport an die Umgebung nicht mehr kompensiert werden kann. Nachdem sich der Feststoff auf diese Weise selbst entzündet hat, weitet sich die Reaktionszone in Form eines Schwelbrands innerhalb des Festbettes aus und kann - in Nähe der Oberfläche der Schüttung - sogar zu einem offenen Feuer werden.

Ziel des Forschungsprojektes war es, den Schwelbrand zu modellieren, und zwar in einer Weise, die in mehreren Aspekten über den derzeitigen Stand [1–3] der mathematischen Beschreibung hinausgeht:

1. Berücksichtigung einer inhomogenen Lückengradverteilung
2. Berücksichtigung von natürlicher Konvektion
3. Einsatz eines mehrskaligen Modells zur simultanen Beschreibung von partikelinternen Prozessen

Auf diese Aspekte soll im folgenden nacheinander eingegangen werden. Zuvor wird allerdings kurz geschildert, welche Methodik dafür verwandt wurde.

## 3 Methodik

Ein Grundstein der vorliegenden Arbeit war das Reaktormodell von Lindborg, Jakobsen et al. [4]. Wesentliche Charakteristika dieses Modells sind: 2D-zylindrisch, instationär, quasi-kontinuierlich, homogen. Dieses Modell ist bereits in einen parallelen FORTRAN-Computercode überführt worden, der zur numerischen Simulation von instationären Strömungen durch Festbettreaktoren entwickelt wurde [4]. Dieses Programm ist anhand mehrerer katalytischer Reaktionen erfolgreich getestet worden.

Eine erste Herausforderung im Rahmen dieses Projekts stellte die Migrierung des o.g. FORTRAN-Codes auf den Computer-Cluster des FG EVUR der TU Berlin dar, die - wider Erwarten - mit erheblichen Aufwand verbunden war. Daran anschliessend musste das Reaktormodell (und somit auch der FORTRAN-Code) für die o.g. Teilaspekte des Projekts modifiziert werden. Auf diese Modifikationen bzw. Erweiterungen wird in den entsprechenden Abschnitten dieses Berichts näher eingegangen. Die allermeisten der weiter unten präsentierten Simulationsergebnisse wurden daraufhin parallel auf vier Dual-Core AMD Opteron Prozessoren berechnet.

## 4 Berücksichtigung einer inhomogenen Lückengradverteilung

Da sowohl die Selbsterhitzung als auch der Schwelbrand im wesentlichen transportlimitierte Prozesse sind, kommt der Beschreibung des Stoff- und Energietransports besondere Bedeutung zu. Dementsprechend hat der Lückengrad signifikanten Einfluss auf den Prozess, wie in vorangegangenen Arbeiten gezeigt werden konnte [3, 5]. Allerdings ist bisher stets von einer räumlich homogenen Lückengradverteilung ausgegangen worden.

Letzteres ist eine vereinfachende Annahme, da der Lückengrad nur dann homogen ist, wenn man es mit einer regellosen Schüttung zu tun hat. Sobald Störungen vorhanden sind (etwa die Reaktorwand oder Leitungen von Thermoelementen), die eine regellose Schüttung verhindern, weicht der Lückengrad erheblich vom Mittelwert ab. Im Falle einer polydispersen Schüttung kugelförmiger Partikeln sinkt der Lückengrad von 1 direkt an der Wand exponentiell innerhalb eines halben mittleren Partikeldurchmessers auf den Mittelwert von etwa 0,4 ab.

Aus dieser Ungleichverteilung des Lückengrads in Wandnähe resultiert das bekannte Phänomen der Randgängigkeit bei durchströmten Festbetten. Dieses Phänomen ist bei der Modellierung von Festbettprozessen immer dann in guter Näherung zu vernachlässigen, wenn das Verhältnis von Rohrdurchmesser zu Partikeldurchmesser sehr groß ist. Je kleiner dieses Verhältnis, desto wichtiger die Berücksichtigung der Randgängigkeit aufgrund des inhomogenen Lückengrades.

Um dieses Phänomen in das Reaktormodell von Lindborg, Jakobsen et al. [4] zu integrieren, war es erforderlich, den wandnahen Bereich mit einer größeren örtlichen Auflösung zu versehen als den Bereich der Kernströmung. Daher wurde ein nicht-äquidistantes Gitter implementiert. Desweiteren wurde die Lückengradverteilung für polydisperse Schüttungen verwendet [6] sowie die effektive Viskosität nach Giese et al. [7] und die effektive Wärmeleitfähigkeit nach Winterberg und Tsotsas [8].

Limitierungen der Reaktionsgeschwindigkeit aufgrund des externen Stofftransports vom Fluid an die äußere Oberfläche der Partikel wurden durch die Einführung einer Bilanz der Stoffmengen an der äußeren Partikeloberfläche berücksichtigt. Der Einfluss des Partikeldurchmessers auf die effektiven Reaktionsgeschwindigkeiten wurde mit Hilfe des Porennutzungsgrades beschrieben. Da es sich um Reaktionen mit nicht ganzzahliger Ordnung handelt (siehe Anhang A), wurde der Porennutzungsgrad mittels einer Approximierung nach Haynes [9] bestimmt.

Um die Auswirkungen dieser Modellerweiterungen auf die Simulationsergebnisse deutlich zu machen, wurde ein Gegenstrom-Schwelbrand bei erzwungener Konvektion numerisch simuliert (die genauen Prozessdaten finden sich in Anhang A). Dabei wurde nicht nur die Störung durch die Reaktorwand sondern auch eine zusätzliche Störung durch eine entlang der Reaktorachse eingebrachte Thermoelementleitung berücksichtigt. In Abb. 1 sind die berechneten Felder der axialen Leerrohrgeschwindigkeit für die Annahmen homogener bzw. inhomogener Lückengradverteilung miteinander verglichen.

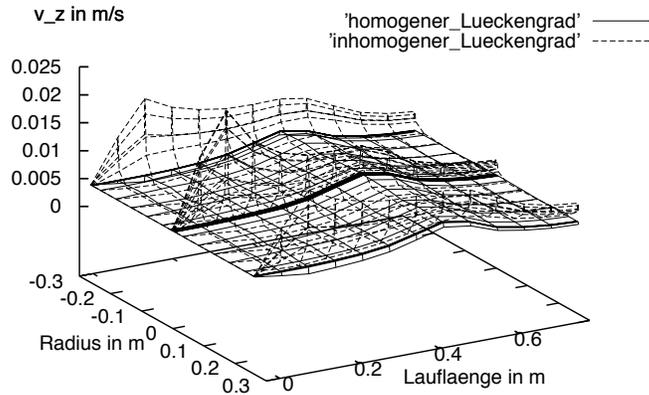


Abbildung 1: Axiale Leerrohrgeschwindigkeit für die Annahmen homogener bzw. inhomogener Lückengradverteilung.

Es ist deutlich erkennbar, dass die größeren Lückengrade in Nähe der Reaktorwand sowie in Nähe der Thermoelementleitung im Falle eines mittleren Partikeldurchmessers von 1,5 cm eine axiale Leerrohrgeschwindigkeit hervor rufen, die um den Faktor 2 bis 4 mal größer ist als im Falle der Nichtberücksichtigung dieses Phänomens. Eine der wesentlichen Auswirkungen dieser unterschiedlichen Modellierung ist in Abb. 2 zu sehen: Die Temperatur der Reaktionsfront unterscheidet sich um bis zu 150 Kelvin.

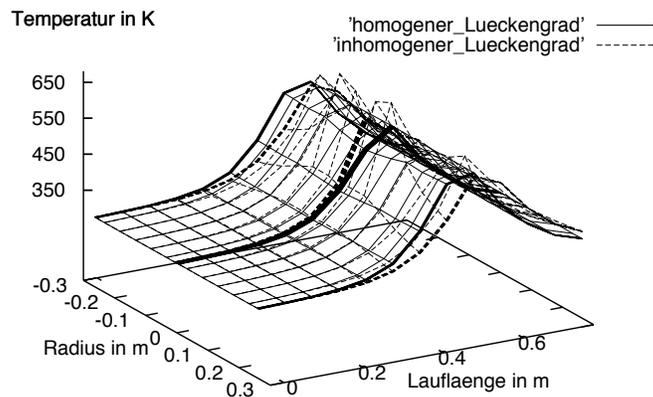


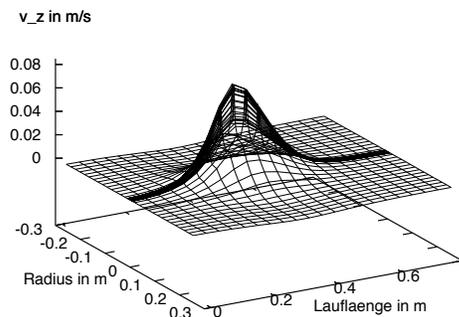
Abbildung 2: Temperatur für die Annahmen homogener bzw. inhomogener Lückengradverteilung.

## 5 Berücksichtigung von natürlicher Konvektion

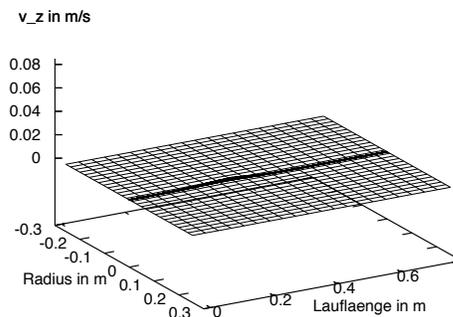
Das Reaktormodell von Lindborg, Jakobsen et al. [4] beinhaltet bereits die natürliche Konvektion. Allerdings ist das Modell speziell für gaskatalytische Festbettprozesse ausgelegt, wie man sie vor allem in großtechnischen chemischen Prozessen antrifft. In diesen Anwendungen ist die (erzwungene) Leerrohrgeschwindigkeit zumeist so groß, dass der Druckverlust, der durch das Festbett verursacht wird, mit dem Quadrat der Leerrohrgeschwindigkeit wächst. Ein solcher Ansatz wurde von Lindborg, Jakobsen et al. auch verwendet.

Für geringere Leerrohrgeschwindigkeiten, wie sie bei nicht erzwungenen Strömungen (sprich: natürlicher Konvektion) auftreten, ist hingegen das Gesetz von D'Arcy maßgeblich, wonach der Druckverlust linear mit der Leerrohrgeschwindigkeit steigt. Zur Untersuchung der Auswirkungen der natürlichen Konvektion wurde also dieser Teil des Modells von Lindborg, Jakobsen et al. [4] entsprechend modifiziert.

Zur Illustration der Signifikanz der natürlichen Konvektion wurde eine Quasi-Selbsterhitzung mit anschließendem Schwelbrand inmitten einer nicht durchströmten Partikelschüttung numerisch simuliert (die genauen Prozessdaten finden sich in Anhang B). Dabei wurde im einen Fall ein mittlerer Partikeldurchmesser von 1,5 mm und im anderen Fall von 2 cm betrachtet. Das Ausmaß der natürlichen Konvektion ist bei den kleineren Partikeln erwartungsgemäß deutlich geringer als bei den größeren, da bei größerer spezifischer Oberfläche größere Reibungsverluste zu gewärtigen sind. Diese Erwartung wird durch die Ergebnisse der numerischen Simulation bestätigt (siehe Abb. 3).



(a)  $d_p = 2 \text{ cm}$

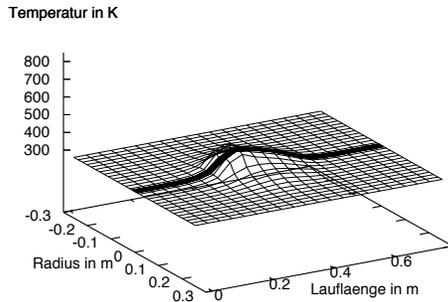


(b)  $d_p = 0.15 \text{ cm}$

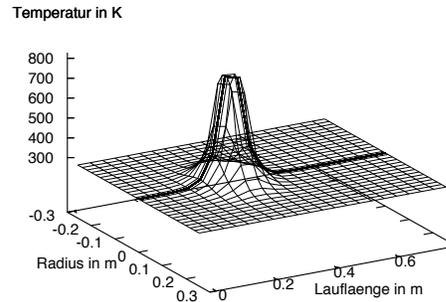
Abbildung 3: Felder der axialen Leerrohrgeschwindigkeit  $v_z$  während des Schwelbrands bei mittleren Partikeldurchmessern von (a) 2 cm und (b) 1,5 mm.

Es wird deutlich, dass bei 1,5 mm kleinen Partikeln (Abb. 3(b)) die natürliche Konvektion praktisch vernachlässigbar ist, wohingegen bei 2 cm großen Partikeln (Abb. 3(a)) erhebliche Auftriebsgeschwindigkeiten von immerhin einigen Zentimetern pro Sekunde auftreten. Dies beeinflusst selbstverständlich den Wärmetransport in der Schüttung und damit die

Selbstentzündung und den Schwelbrand erheblich. In den Abbildungen 4 und 5 sind die Auswirkungen der natürlichen Konvektion auf die Temperaturentwicklung sowie den Massenanteil an Sauerstoff in der Gasphase illustriert.

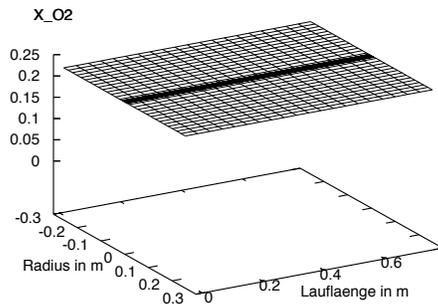


(a)  $d_p = 2 \text{ cm}$

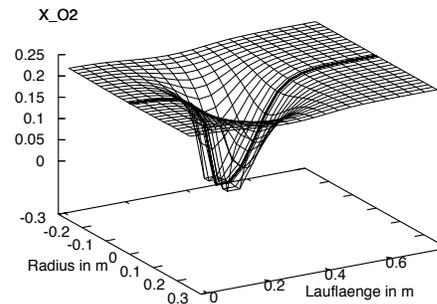


(b)  $d_p = 0.15 \text{ cm}$

Abbildung 4: Felder der axialen Leerrohrgeschwindigkeit  $v_z$  nach der Quasi-Selbsterhitzung bei mittleren Partikeldurchmessern von (a) 2 cm und (b) 1,5 mm.



(a)  $d_p = 2 \text{ cm}$



(b)  $d_p = 0.15 \text{ cm}$

Abbildung 5: Felder der Massenanteils von Sauerstoff in der Gasphase  $X_{O_2}$  nach der Quasi-Selbsterhitzung bei mittleren Partikeldurchmessern von (a) 2 cm und (b) 1,5 mm.

Unterschiedliche Partikeldurchmesser führen hier offenbar zu verschiedenen Prozessen. Bei großen Partikeln verursacht die natürliche Konvektion, dass der Wärmetransport während des Aufheizens so gut ist, dass der Schwelbrand praktisch gar nicht einsetzen kann. Bei kleinen Partikeln ist der Wärmetransport hingegen deutlich schlechter, es kann sich mithin eine deutlich höhere Temperatur am Hotspot einstellen, die wiederum zu Schwelbrand führt.

## 6 Einsatz eines mehrskaligen Modells zur simultanen Beschreibung von partikelinternen Prozessen

Die größte Erweiterung der Arbeiten von Lindborg, Jakobsen et al. [4] im Rahmen dieses Projekts stellte die Integration eines eindimensionalen Partikelmodells in das Reaktormodell dar - sowohl bzgl. Modellierung als auch bzgl. Programmieraufwand. Als Partikelmodell wurde auf die sehr gut dokumentierte Arbeit von Gronli [10] zurück gegriffen. Im Gegensatz zu [10] wurde das Partikelmodell hier allerdings nicht in finiten Differenzen sondern mit finiten Volumen formuliert, um eine Kopplung an das Reaktormodell, welches ebenfalls in finiten Volumen formuliert ist, zu vereinfachen.

Das Grundprinzip ist nun folgendes: Für jedes der finiten Volumen des Reaktors (2D-zylindrisch) wird - neben den Bilanzen für das Fluid außerhalb der Partikel - simultan ein 1D-kugelsymmetrisches Partikelmodell integriert. Für Holz- bzw. Kohlevergasungen in Festbettreaktoren sind in der Vergangenheit bereits erfolgreich solche mehrskaligen Modelle eingesetzt worden [11–14]. Allerdings geschah das bisher lediglich in räumlich eindimensionalen Reaktormodellen (1D+1D) mit Ausnahme von [11], dort wurde allerdings ein direktes Partikelmodell (DPM) aufgestellt, in welchem jedes einzelne Partikel modelliert wird. Hier wird ein Partikel pro finitem Volumen des Reaktors berechnet, welches als repräsentativ für alle Partikel in diesem finiten Volumen ist. Somit ist der Rechenaufwand deutlich niedriger als bei einem DPM.

Um die prinzipiellen Möglichkeiten des 2D+1D-Modells aufzuzeigen, sei folgender Fall beleuchtet: Am Eintritt eines durchströmten zylindrischen Festbetts aus brennbarem Material werde ein Teil der Partikel erhitzt (Quasi-Selbsterhitzung), so dass der Schwelbrand einsetzen kann. Die folgenden Diagramme zeigen Felder, die zu zwei verschiedenen Zeitpunkten (1000 bzw. 3000 Sekunden nach Beginn des Aufheizens) während der Zündung des Schwelbrands berechnet wurden. In Abb. 6 ist das Temperaturfeld des Fluids in den Partikelzwischenräumen zu den genannten Zeitpunkten dargestellt.

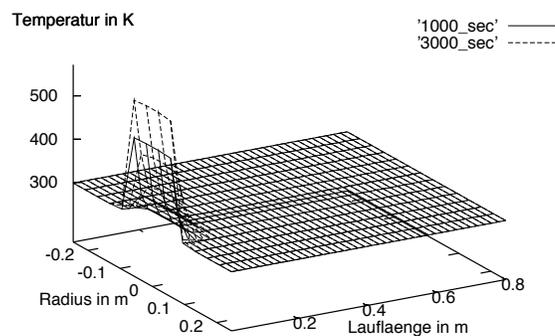


Abbildung 6: Temperatur des Fluids in den Partikelzwischenräumen 1000 bzw. 3000 Sekunden nach dem Beginn des Aufheizens.

In den folgenden Diagrammen ist die Auswirkung dieses Aufheizens auf ein Partikel am Eintritt des Festbetts illustriert.

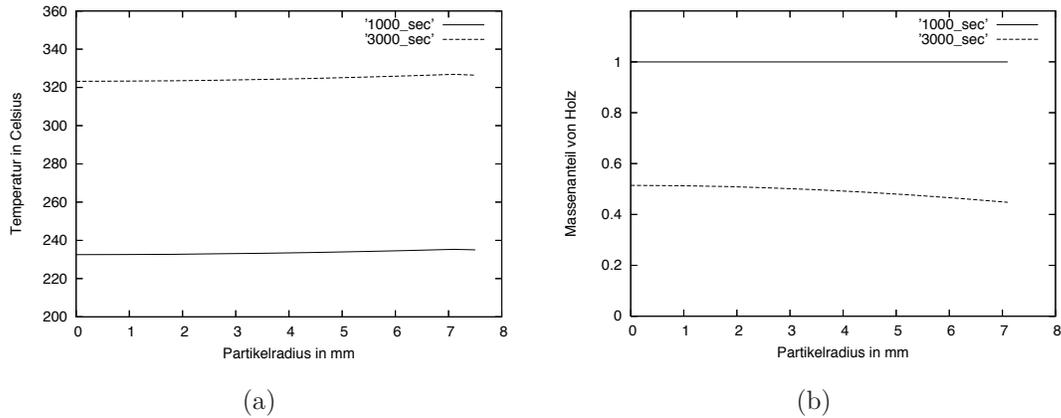


Abbildung 7: (a) Temperatur und (b) Massenanteil des Holzes innerhalb eines Partikels am Eintritt des Festbetts 1000 bzw. 3000 Sekunden nach dem Beginn des Aufheizens.

Es ist Abb. 7(a) zu entnehmen, dass die Temperaturgradienten während des Aufheizens innerhalb des Partikels nicht allzu groß sind. Dies ist der geringen Heizrate zuzuschreiben. Gleichwohl stellt sich ein deutlicher Gradient hinsichtlich des Massenanteils von Holz ein (welches in Gas und Holzkohle zersetzt wird). Die Ursache für diesen Gradienten sieht man in Abb. 8.

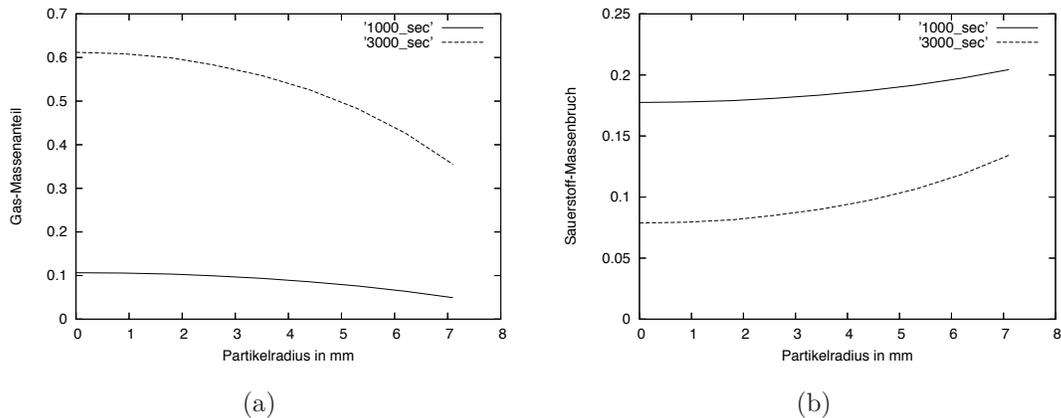


Abbildung 8: Massenanteile von (a) erzeugtem Gas und (b) Sauerstoff in der Gasphase eines Partikels am Eintritt des Festbetts 1000 bzw. 3000 Sekunden nach dem Beginn des Aufheizens.

Die Zusammensetzung der Gasphase innerhalb des porösen Partikels weist deutliche Gradienten auf, wie Abb. 8 zu entnehmen ist. Dies ist einleuchtend, da der für die Zersetzungsre-

aktionen notwendige Sauerstofftransport in das Partikel nur durch Diffusion erfolgen kann, was Abb. 9(b) bestätigt. Dort wird deutlich, dass aufgrund der molerzeugenden Reaktionen ein konvektiver Strom in Richtung Partikeloberfläche induziert wird. Der Sauerstoff muss mithin quasi gegen den Strom diffundieren.

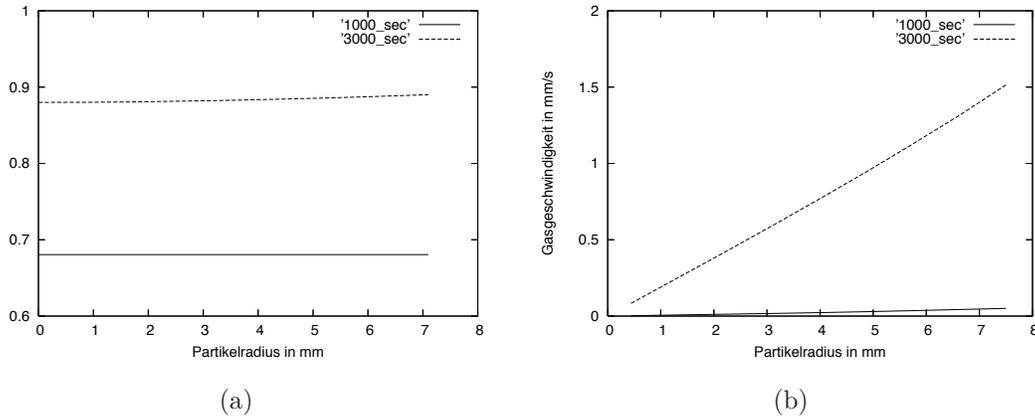


Abbildung 9: (a) Porosität und (b) Strömungsgeschwindigkeit des Gases in einem Partikel am Eintritt des Festbetts 1000 bzw. 3000 Sekunden nach dem Beginn des Aufheizens.

Abb. 9(a) zeigt, dass die Porosität des Partikels aufgrund der Zersetzungsreaktionen bereits beim Aufheizen deutlich zunimmt.

Die in den Abbildungen 7 bis 9 illustrierten partikelinternen Prozesse wirken über die Partikeloberfläche wieder zurück auf den gesamten Reaktor. Besonders deutlich wird das anhand der Konzentrationsprofile in der Gasphase in den Partikelzwischenräumen, die in der folgenden Abbildung dargestellt sind.

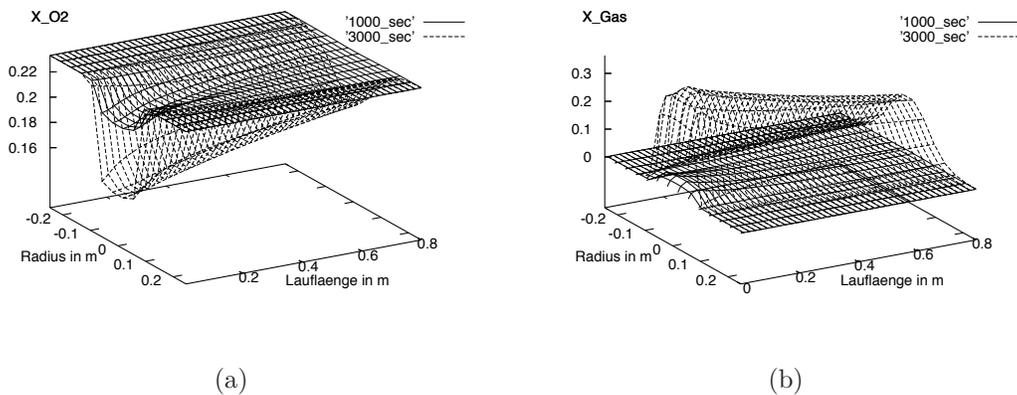


Abbildung 10: Massenanteile von (a) Sauerstoff und (b) dem erzeugten Gas im Fluid zwischen den Partikeln 1000 bzw. 3000 Sekunden nach dem Beginn des Aufheizens.

## 7 Fazit und Ausblick

Im Rahmen dieses Projektes wurde die Modellierung der Selbstentzündung und des Schwelbrands um drei wesentliche Aspekte im Vergleich zu vorangegangenen Arbeiten erweitert. Es konnte gezeigt werden, dass die Berücksichtigung einer inhomogenen Lückengradverteilung bei Schüttungen großer Partikeln unerlässlich für eine hinreichend gute Modellierung ist. Ebenso konnte gezeigt werden, dass bei Schüttungen großer Partikeln die natürliche Konvektion unbedingt zu berücksichtigen ist. Der bei weitem größte Aufwand in diesem Projekt war mit der Integration eines 1D-Partikelmodells in ein bestehendes 2D-Reaktormodell verbunden. Mit Hilfe dieses 2D+1D Modells ist es möglich, partikelinterne Prozesse während der Selbsterhitzung bzw. des Schwelbrands in Schüttungen zu beschreiben. Damit geht dieses Modell deutlich über die Möglichkeiten gängiger kontinuierlicher Modelle hinaus.

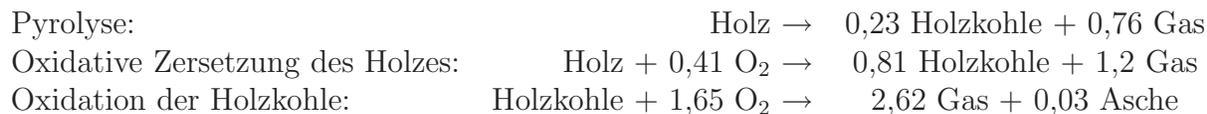
Es gilt nun, durch geeignete Experimente zu untermauern, dass die in dieser Arbeit erreichten Modellerweiterungen auch tatsächlich zu einer verbesserten Beschreibung der Prozesse führt. Anhand der vorliegenden Literatur ist dies leider nicht möglich. So gibt es zwar intrinsische Schwelbrand-Mikrokinetiken [15], doch gibt es für die untersuchten Materialien keinerlei veröffentlichte Daten zum Schwelbrand in großen Schüttungen. Genau das wäre allerdings notwendig. Umgekehrt gibt es Messungen zum Schwelbrand in Schüttungen von Holzpartikeln [16], aber leider keinerlei intrinsische kinetische Daten für dieses Material bzgl. Schwelbrand. Diese Lücke in den experimentellen Daten muss geschlossen werden. Genau dies ist in einem Folgeprojekt geplant. Dann wird sich zeigen, wie wertvoll die Modellerweiterungen, die im Rahmen dieses Projekts erarbeitet wurden, tatsächlich sind.

## 8 Danksagung

Die Autoren danken der Max-Buchner-Forschungstiftung für die Unterstützung dieses Projekts.

# A Prozessparameter für die Simulationsrechnungen zum inhomogenen Lückengrad

Als Reaktionsnetzwerk wurde das etablierte Modell von Ohlemiller [17] verwendet. Es postuliert, dass der Schwelbrand aus drei Teilreaktionen besteht.



Die kinetischen Parameter dieser Reaktionen sind der Arbeit von Kashiwagi und Nambu [15] entnommen. Weitere Daten der Simulation sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst.

|  |                           |      |
|--|---------------------------|------|
| Geometrie  |                           |      |
| Rohrradius   | 26,5                      | cm   |
| Höhe der Schüttung   | 81,0                      | cm   |
| Partikeldurchmesser  | 1,5                       | cm   |
| Anfangsbedingungen   |                           |      |
| Temperatur   | 293                       | K    |
| Druck  | 1                         | bar  |
| Gaszusammensetzung   | Luft                      |      |
| Porosität der Partikel   | 0,79                      |      |
| Massenanteil der Holzkohle im Feststoff                        | 0                         |      |
| Randbedingungen am Eintritt                                    |                           |      |
| Temperatur (t < 1 h)   | 800                       | K    |
| Temperatur (t > 1 h)   | 293                       | K    |
| Leerrohrgeschwindigkeit  | 5                         | mm/s |
| Gaszusammensetzung   | Luft                      |      |
| Randbedingungen am Austritt                                    |                           |      |
| Temperatur   | $\partial/\partial z = 0$ |      |
| Leerrohrgeschwindigkeit  | $\partial/\partial z = 0$ |      |
| Gaszusammensetzung   | $\partial/\partial z = 0$ |      |
| Randbedingungen entlang der Reaktorachse sowie der Reaktorwand |                           |      |
| Temperatur   | $\partial/\partial r = 0$ |      |
| Leerrohrgeschwindigkeit  | $v_z = v_r = 0$           |      |
| Gaszusammensetzung   | $\partial/\partial r = 0$ |      |

## B Prozessparameter für die Simulationsrechnungen zur natürlichen Konvektion

In diesen Rechnungen wurden die Versuche aus [16] nachgestellt. Wesentliche Unterschiede zum Setup der Simulationen bzgl. des inhomogenen Lückengrads sind:

- keine Thermoelementleitung entlang der Reaktorachse, d.h. an dieser Stelle gibt es keinen erhöhten Lückengrad und die Randbedingungen der Leerrohrgeschwindigkeiten verändern sich entsprechend,
- die Quasi-Selbstentzündung geschieht durch eine zentral eingebrachte Heizquelle von 60 W Leistung, die nach einer Stunde abgeschaltet wird,
- es gibt keinen aufgeprägten Gasstrom.

Auch hier wurden die kinetischen Daten von Kashiwagi und Nambu [15] eingesetzt. Weitere Daten sind nachstehend zusammengefasst.

|  |                           |
|--|---------------------------|
| Geometrie                                |                           |
| Rohrradius                               | 26,5 cm                   |
| Höhe der Schüttung                       | 81,0 cm                   |
| Randbedingungen am Eintritt              |                           |
| Temperatur ( $t > 1$ h)                  | 293 K                     |
| Leerrohrgeschwindigkeit                  | 0 mm/s                    |
| Gaszusammensetzung                       | Luft                      |
| Randbedingungen am Austritt              |                           |
| Temperatur                               | $\partial/\partial z = 0$ |
| Leerrohrgeschwindigkeit                  | $\partial/\partial z = 0$ |
| Gaszusammensetzung                       | Luft                      |
| Randbedingungen entlang der Reaktorachse |                           |
| Temperatur                               | $\partial/\partial r = 0$ |
| axiale Leerrohrgeschwindigkeit           | $\partial/\partial r = 0$ |
| radiale Leerrohrgeschwindigkeit          | $v_r = 0$                 |
| Gaszusammensetzung                       | $\partial/\partial r = 0$ |
| Randbedingungen entlang der Reaktorwand  |                           |
| Temperatur                               | $\partial/\partial r = 0$ |
| Leerrohrgeschwindigkeit                  | $v_z = v_r = 0$           |
| Gaszusammensetzung                       | $\partial/\partial r = 0$ |

# Literatur

- [1] LOHRER, C.; KRAUSE, U.; STEINBACH, J.: Self-ignition of combustible bulk materials under various ambient conditions. In: *Process Safety and Environmental Protection* 83 (2005), Nr. B2, S.145–150
- [2] ROSTAMI, A.; MURTHY, J.; HAJALIGOL, M.: Modeling of smoldering process in a porous biomass fuel rod. In: *Fuel* 83 (2004), Nr. 11-12, S.1527–1536
- [3] AKGUN, F.; ESSENHIGH, R. H.: Self-ignition characteristics of coal stockpiles: theoretical prediction from a two-dimensional unsteady-state model. In: *Fuel* 80 (2001), Nr. 3, S.409–415
- [4] LINDBORG, H.; EIDE, V.; UNGER, S.; HENRIKSEN, S. T.; JAKOBSEN, H. A.: Parallelization and performance optimization of a dynamic PDE fixed bed reactor model for practical applications. In: *Computers and Chemical Engineering* 28 (2004), Nr. 9, S.1585–1597
- [5] HULL, A.; LANTHIER, J. L.; AGARWAL, P. K.: The role of the diffusion of oxygen in the ignition of a coal stockpile in confined storage. In: *Fuel* 76 (1997), Nr. 10, S.975–983
- [6] GIESE, M.: Strömung in porösen Medien unter Berücksichtigung effektiver Viskositäten, Technische Universität M $\ddot{A}$  $\frac{1}{4}$ nchen, Dissertation, 2007
- [7] GIESE, M.; ROTTSCHÄFER, K.; VORTMEYER, D.: Measured and modelled superficial flow profiles in packed beds with liquid flow. In: *AIChE Journal* 44 (1998), S.484–491
- [8] WINTERBERG, M.; TSOTSAS, E.; KRISCHKE, A.; VORTMEYER, D.: A simple and coherent set of coefficients for modelling of heat and mass transport with and without chemical reaction in tubes filled with spheres. In: *Chemical Engineering Science* 55 (2000), S.967–979
- [9] HAYNES, H. W.: An explicit approximation for the effectiveness factor in porous heterogeneous catalysts. In: *Chemical Engineering Science* 41 (1986), S.421–415
- [10] GRONLI, M. G.: A Theoretical and Experimental Study of the Thermal Degradation of Biomass, Norwegian University of Science and Technology, Dissertation, 1996
- [11] BRUCH, C.; PETERS, B.; NUSSBAUMER, T.: Modelling wood combustion under fixed bed conditions. In: *Fuel* 82 (2003), Nr. 6, S.729–738

- [12] WURZENBERGER, J. C.; WALLNER, S.; RAUPENSTRAUCH, H.; KHINAST, J. G.: Thermal conversion of biomass: Comprehensive reactor and particle modeling. In: *Aiche Journal* 48 (2002), Nr. 10, S.2398–2411
- [13] CHEJNE, F.; HERNANDEZ, J. P.; FLOREZ, W. F.; HILL, A. F. J.: Modelling and simulation of time-dependent coal combustion processes in stacks. In: *Fuel* 79 (2000), Nr. 8, S.987–997
- [14] MONAZAM, E. R.; SHADLE, L. J.: Predictive tool to aid design and operations of pressurized fixed bed coal gasifiers. In: *Industrial and Engineering Chemistry Research* 37 (1998), Nr. 1, S.120–130
- [15] KASHIWAGI, T.; NAMBU, H.: Global Kinetic Constants for Thermal Oxidative Degradation of a Cellulosic Paper. In: *Combustion and Flame* (1992), S.345–368
- [16] TUOMISAARI, M.; BAROUDI, D.; LATVA, R.: Extinguishing smoldering fires in silos. In: *VTT Publications 339* (1998)
- [17] OHLEMILLER, T. J.: Modelling of Smoldering Combustion Propagation. In: *Progress in Energy and Combustion Science* (1986), S.277–310