

MVKM01 - Examensarbete i energivetenskaper

Värmeöverföring mellan två zoner i en bubblande fluidiserad bädd

Carl Christian Stigsson

Institutionen för Energivetenskaper
Lunds Tekniska Högskola

21 juni 2018

Handledare:	Lei Wang, docent
Biträdande handledare:	Christer Gustavsson, tekn. dr
Examinator:	Bengt Sundén, professor emeritus

Abstract

In this Master's thesis, the heat transfer between two zones in a bubbling fluidized bed and the resultant temperature field were examined using a laminar Eulerian-Eulerian two-fluid model in computational fluid dynamics. The purpose was to estimate the thermal potential to multi-stage a combined heat and power boiler by integration therein of a communicating gasification reactor, which utilizes heat from the combustion, and to analyze how different construction parameters influence the homogeneity of the gas temperature field. The virtual set-up consisted of a reactor zone, partially separated from a combustion zone by an impermeable wall, leaving a gap below the wall through which heat could be transferred from the combustion zone to the reactor zone, mostly by means of particulate transport.

Effects on the gas temperature field from all combinations of two different gap heights and two different separating wall thicknesses, i.e. four subcases, were investigated. Excluding the region within two decimeters of the Dirichlet boundaries, the maximum temperature differences in the symmetry plane of the domains were found to be less than 15°C for all four subcases. The smallest such maximum temperature difference was obtained in the subcase where the gap height was 450 mm and the separating wall thickness was 20 mm, below 9°C .

Keywords: Heat transfer, fluidized bed, multi-stage, Eulerian-Eulerian two-fluid.

Sammanfattning

I detta examensarbete granskades värmeöverföringen mellan två zoner i en bubblande fluidiserad bädd och det resulterande temperaturfältet med numeriska strömningsberäkningar av en laminär Euler-Euler-tvåfluidbeskrivning. Syftet var att uppskatta den termiska potentialen att flerstega en kraftvärme-panna genom integrering av en kommunicerande förgasningsreaktor som utnyttjar värme från förbränningen och att analysera hur olika konstruktionsparametrar påverkar gastemperaturfältets homogenitet. Den virtuella uppställningen utgjordes av en reaktorzon, delvis avskild från en förbränningszon med en impermeabel vägg, där en öppning under väggen möjliggjorde partikeltransport och värmeöverföring från förbränningszonen till reaktorzonen.

Följder på gastemperaturfältet från alla kombinationer av två olika öppningshöjder och två olika skiljeväggjtjocklekar, d.v.s. fyra delfall, undersöktes. Exklusive områden två decimeter från Dirichletränderna, observerades maximala temperaturdifferenser i domänens symmetriplan om mindre än 15°C för alla fyra delfall. Den minsta sådana maximal temperaturdifferens erhöles för delfallet där öppningshöjden var 450 mm och skiljeväggjtjockleken var 20 mm, under 9°C .

Nyckelord: Värmeöverföring, fluidiserad bädd, Euler-Euler-tvåfluid, flerstegad.

Innehåll

Abstract	ii
Sammanfattning	iii
Nomenklatur	vi
1 Introduktion	1
2 Metodik	3
2.1 Teori och modeller	3
2.1.1 Kontinuitet	3
2.1.2 Rörelsemängd	4
2.1.3 Granulär energi	5
2.1.4 Energi	5
2.1.5 Species	7
2.1.6 Spänningskonstitution	8
2.1.7 Tillståndsekvation	9
2.2 Uppställning av fallet	10

2.2.1	Geometri	10
2.2.2	Betingelser	10
2.2.3	Materialegenskaper	12
2.3	Numerik	13
2.3.1	Meshning	13
2.3.2	Diskretisering	14
2.3.3	Tryck-hastighetskoppling	15
3	Resultat	18
4	Diskussion	23
5	Slutsats	29
	Referenser	30
	Bilaga A	34
	Bilaga B	37

Nomenklatur

Latinska bokstäver

a_{p,e_0}	element e_0 :s koefficient för tryckkorrektion [s·m]
a_{p,e_l}	element e_l :s koefficient för tryckkorrektion [s·m]
a_{RK}	parameter i Redlich-Kwongs ekvation [$\text{J} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{K}^{\frac{1}{2}} / \text{mol}^2$]
a_{u,e_0}	element e_0 :s koefficient i rörelsemängdsdiskretisering [kg/s]
a_{u,e_l}	element e_l :s koefficient i rörelsemängdsdiskretisering [kg/s]
A	area [m^2]
A_p	tryck-tryck-korrektionskoefficient i tvåfasflöde [s·m]
A_u	hastighet-hastighet-korrektionskoefficient i tvåfasflöde [kg/s]
A_ε	volymfraktion-volymfraktion-korrektionskoefficient i tvåfasflöde
b	skiljeväggtjocklek [m]
b_{RK}	parameter i Redlich-Kwongs ekvation [m^3 / mol]
B	korrelationsparameter för gränshastighetskvot
B_u	tryck-hastighet-korrektionskoefficient i tvåfasflöde [m^2]
c_p	värme kapacitivitet [$\text{J} / (\text{kg} \cdot \text{K})$]
C	konstant i approximation av diffusionskoefficient [$\text{m}^2 \cdot \text{g}^{\frac{1}{2}} \cdot \text{N} / (\text{K}^{\frac{3}{2}} \cdot \text{mol}^{\frac{1}{2}} \cdot \text{s})$]
C_D	motståndskoefficient
C_T	konstant i approximation av termisk diffusionskoefficient [$\text{mol}^{0,022} / (\text{g}^{0,022} \cdot \text{K}^{0,659})$]
C_u	hastighet-tryck-korrektionskoefficient i tvåfasflöde [kg/m]
CV	kontrollvolym [m^3]
d_s	partikeldiameter [m]
D_T	termisk diffusionskoefficient [$\text{Pa} \cdot \text{s}$]
D_u	volymfraktion-hastighet-korrektionskoefficient i tvåfasflöde [N]

D_ϵ	volymfraktion-tryck-korrektionskoefficient i tvåfasflöde [kg/s]
\mathcal{D}	diffusionskoefficient [m^2/s]
e_{ss}	restitutionskoefficient för partikelkollisioner
E	energi [J]
E_p	tryck-volymfraktion-korrektionskoefficient i tvåfasflöde [m^2/N]
E_u	hastighet-volymfraktion-korrektionskoefficient i tvåfasflöde [s/m]
F	källterm i rörelsemängdsdiskretisering [N]
g	tyngdacceleration [m/s^2]
h	entalpitet [J/kg]
H	höjd från inlopp till skiljevägg [m]
I_2	deviatoriska spänningstensorns andra invariant [$1/\text{s}^2$]
J	massflux [$\text{kg}/(\text{s}\cdot\text{m}^2)$]
k	Boltzmanns konstant [J/K]
K	interfaskraftkoefficient [$\text{kg}/(\text{s}\cdot\text{m}^3)$]
M	molmassa [g/mol]
n	antal elementsidor
\hat{n}	normal
Nu	Nusselts tal
p	tryck [Pa, atm]
Pr	Prandtls tal
q	konduktivt värmefflux [W/m^2]
Q'	värmekälla [W/m^3]
$r_{0,ss}$	radiell distributionsfunktion
R	allmänna gaskonstanten [$\text{J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$]
Re	Reynolds tal
S	bitvis glatt rand till kontrollvolym [m^2]
t	tid [s]
T	absolut temperatur [K]
T_R^*	reducerad temperatur
u	hastighet [m/s]
u_{mf}	minsta fluidiseringshastighet [m/s]
$u_{r,s}$	gränshastighetskvot

u'	hastighetsfluktuation [m/s]
V	volym [m ³]
V_m	molvolym [m ³ /mol]
w	massfraktion
W	vikter i gradientdiskretisering
x	kartesisk koordinat [m]
Z	kompressibilitetsfaktor

Grekiska bokstäver

α	volymetrisk interfasvärmeöverföringskoefficient [W/(m ³ ·K)]
β	intern friktionsvinkel
γ_{Θ_s}	dissipation av granulär energi [kg/(m·s ³)]
Γ_{Θ_s}	diffusionskoefficient för granulär energi [kg/(s·m)]
δ	Kroneckerdelta
Δ	ändring
ϵ	minimum i Lennard-Jones-potentialbrunn [J]
ε	volymfraktion
ζ	källterm i ekv. 2.57 och 2.58 [kg/s]
η	koefficient i ekv. 2.53, 2.54 och 2.56 [s/m]
Θ_s	granulär temperatur [J/kg]
λ	termisk konduktivitet [W/(m·K)]
μ	dynamisk viskositet [Pa·s]
ρ	densitet [kg/m ³]
σ	kollisionsdiameter [Å]
τ	deviatorisk spänningstensor [Pa]
ϕ_{gs}	interfasöverföring av granulär energi [kg/m·s ³]
φ	godtycklig skalär
χ	molfraktion
ω	relaxationsparameter
Ω	kollisionsintegral

Bokstäver i indexläge

<i>a</i>	species a
<i>A</i>	zon A
<i>b</i>	species b
<i>B</i>	zon B
<i>bul</i>	bulk
<i>c</i>	species c
<i>e</i>	element
<i>f</i>	elementsida
<i>fr</i>	friktion
<i>g</i>	gasfas
<i>i</i>	tensorindex
<i>in</i>	inlopp
<i>j</i>	tensorindex
<i>k</i>	tensorindex
<i>l</i>	summeringsindex
<i>kin</i>	kinetisk
<i>kol</i>	kollision
<i>kor</i>	korrektin
<i>r</i>	gräns
<i>s</i>	partikelfas
<i>ut</i>	utlopp

I rapporten används Riccikalcul med index i , j och k för manipulering av tensorer och Einsteins summeringskonvention (1916, 781) i tre spatiella dimensioner. För övriga index genomgås inte dessa operationer.

1. Introduktion

Det finns starka argument för att det nuvarande nyttjandet av fossila bränslen och det resulterande nettoutsläppet av koldioxid bl.a. driver en temperaturökning i det globala klimatet via växthuseffekten (Anderson et al., 2016; Mitchell, 1989; Stern, 2007). I kombination med den sinande totala tillgången på sådana bränslen, infinner sig ett samhälleligt tryck att finna och utnyttja alternativa drivmedelskällor. Denna utmaning har många hinder inblandade, såväl tekniska som ekonomiska. Även med politiska subventioner visar sig parametrar såsom verkningsgrad och utbyte begränsa möjligheter att realisera koncept med förnyelsebara energiråvaror. Tänkta produktioner i fristående anläggningar stöter ofta på motstånd för att den fristående verkningsgraden skulle vara för låg. Ett sätt att komma runt denna problematik i dagsläget är integrering av biobränsleproduktion i redan existerande industriteknik som exempelvis i fluidiserade bäddar i kraftvärmeverk.

I fluidiserade bäddar kan fasta bränslen förbrännas i en bädd av solida partiklar i ett fluidiserat tillstånd där det sker ett samspel mellan gravitationskrafter, interpartikelkrafter, flytkrafter och motståndskrafter orsakade av fluidiseringsmediet. När en minsta fluidiseringshastighet överskrids är de suspenderade partiklarna fria att röra sig (Yates & Lettieri, 2016, 1). Tekniken utnyttjas bland annat i kraftvärmepannor, detta p.g.a. dess effektiva mass- och värmetransport (Bandara et al., 2017, 60; Rowe et al., 1962, 278) samt dess flexibilitet med bränslesammansättningen och således lämplighet för användning av bränslen med hög halt av flyktiga ämnen, som t.ex. biomassa (Oka, 2004, 435; Wan et al., 2009, 479-480).

Kraftvärmeproduktion är en stor industri, som i Sverige år 2016 utgjordes av över hundra maskinaggregat (SCB, 2017, 15). Dessa kraftvärmepannor i drift har potential att åstadkomma mer än att endast producera värme och

elektricitet. Potentiellt kan en del av det alstrade värmnet i den ursprungliga exoterma zonen, ”zon A”, i en panna överföras till en nykonstruerad syrefattigare zon, ”zon B”, som är delvis avskild med en skiljevägg. I zon B skulle då exempelvis pyrolys eller förgasning kunna drivas för att producera bland annat syntesgas och därpå t.ex. tillämpa Fischer-Tropsch-processen, eller syntetisera metanol eller bio-SNG (Gustavsson & Hulteberg, 2016, 830).

Detta examensarbete syftar till att studera temperaturfältet i bubblande fluidiserade bäddar belägna i flerstegade kraftvärmepannor. Närmare bestämt är graden av homogenitet hos temperaturfältet av stort intresse, och om olika konstruktioner kan ge tillräcklig värmetransport från zon A till zon B för att erhålla en tillfredsställande jämn temperaturdistribution. Två forskningsfrågor ställs, en mer generell och en mer specifik:

1. Har konceptet som utformat i studien termisk potential att realiseras?
2. Hur påverkas temperaturfältets homogenitet av de två konstruktionsparametrarna skiljeväggspenetration och skiljeväggstjocklek?

Partikelrörelserna, flödet och värmeöverföringen i de modifierade kraftvärmepannorna med gjorda antaganden styrs av partiella differentialekvationer som beräknas numeriskt i datorsimuleringar med finita volymmetoden. Primärt sker värmeöverföringen mellan zon A och zon B genom transport av bäddmaterial (Zhao et al., 2017, 174) och sekundärt med termisk konduktion genom skiljeväggen. Det sistnämnda sättet antas försumbart. Analys av kemiska reaktioner och termokemi är inte en del av examensarbetet, utan vikt läggs vid fluidmekaniken och värmeöverföringen i sig. Därmed görs förenklingar gällande värmekällor och -sänkor i det aktuella domänet.

2. Metodik

Avsnitt 2.1 behandlar de styrande ekvationerna och använda modellerna. I avsnitt 2.2 presenteras det studerade fallet och i avsnitt 2.3 de numeriska metoderna.

2.1 Teori och modeller

Partikel- och gasfasen modellerades som två samexisterande och interpenetrerande kontinua i volymfraktioner ε_s och ε_g med en Euler-Euler-tvåfluidbeskrivning i ett tredimensionellt kartesiskt koordinatsystem. Flödet approximerades som laminärt.

2.1.1 Kontinuitet

Från lagen om massans bevarande fås, för multifasflöden (Kolev, 2007, 17), kontinuitetsekvationerna 2.1 och 2.2 för respektive fas,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon_s \rho_s u_{s,i}) = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon_g \rho_g u_{g,i}) = 0 \quad (2.2)$$

Högerledet är noll då kemiska reaktioner inte modelleras och ingen massöverföring sker mellan faserna.

2.1.2 Rörelsemängd

Lagen om rörelsemängdens bevarande ger Navier-Stokes ekvationer med volymfraktioner och utbytesterm för respektive fas, ekv. 2.3 och 2.4. En term med divergensen av den deviatoriska spänningstensorn togs med även för partikelfasen, utöver den hydrostatiska tryckgradienten, eftersom fallet är transient och bädden inte alltid eller överallt kan antas vara fullt fluidiserad. Härav gäller

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s u_{s,j}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon_s \rho_s u_{s,i} u_{s,j}) = -\varepsilon_s \frac{\partial p}{\partial x_j} - \frac{\partial p_s}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{s,ij}}{\partial x_i} + \varepsilon_s \rho_s g_j + K(u_{g,j} - u_{s,j}) \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g u_{g,j}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon_g \rho_g u_{g,i} u_{g,j}) = -\varepsilon_g \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{g,ij}}{\partial x_i} + \varepsilon_g \rho_g g_j + K(u_{s,j} - u_{g,j}) \quad (2.4)$$

Utbytet av rörelsemängd mellan faserna uppskattades via interfaskraftkoefficienten K i enlighet med Syamlal & O'Brien (1989, 23) som ansätter

$$K = \frac{3\varepsilon_s \varepsilon_g \rho_g}{4u_{r,s}^2 d_s} C_{D,s} \frac{Re_s}{u_{r,s}} \|u_{s,i} - u_{g,i}\| \quad (2.5)$$

Gränshastighetskvoten $u_{r,s}$ är förhållandet mellan gränshastigheten för en samling partiklar och densamma för en isolerad partikel, som här togs fram med den empiriska formeln nedan från Garside & Al-Dibouni (1977, 208-212),

$$u_{r,s} = 0.5(\varepsilon_g^{4.14} - 0.06 Re_s + \sqrt{(0.06 Re_s)^2 + 0.12 Re_s (2B - \varepsilon_g^{4.14}) + \varepsilon_g^{8.28}}) \quad (2.6)$$

där

$$B = \begin{cases} 0.8\varepsilon_g^{1.28}, & \text{om } \varepsilon_g \leq 0.85 \\ \varepsilon_g^{2.65}, & \text{om } \varepsilon_g > 0.85 \end{cases} \quad (2.7)$$

Re_s är det relativa Reynoldstalet baserat på den Euklidiska normen av differensen mellan partikel- och fluidhastighet, se t.ex. Richardson & Zaki (1954, 35-39) om sedimentering och fluidisering, definierat som

$$Re_s = \frac{\rho_g d_s \|u_{s,i} - u_{g,i}\|}{\mu_g} \quad (2.8)$$

För motståndskoefficienten $C_{D,s}$ implementerades approximationen av Dalla-Valle (1948, 23),

$$C_{D,s} = \left(0.63 + \frac{4.8}{\sqrt{Re_s/u_{r,s}}}\right)^2 \quad (2.9)$$

2.1.3 Granulär energi

Låt den granulära temperaturen Θ_s definieras utifrån den genomsnittliga partikelhastighetsfluktuationen $u'_{s,i}$ som

$$\Theta_s = \frac{1}{3} u'_{s,i} u'_{s,i} \quad (2.10)$$

I beräkningarna tillämpades en algebraisk formulering av granulär temperatur där advektion och diffusion av granulär energi inte tas med. Vidare försummas överföring av granulär energi från partikel till partikel, men termen som beskriver interfasöverföringen ϕ_{gs} behövs. Transportekvationen 2.11 med anhörande interfasöverföring i ekv. 2.12 (Ding & Gidaspow, 1990, 529) är

$$\frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s \Theta_s) = (-p_s \delta_{ij} + \tau_{s,ij}) \frac{\partial u_{s,i}}{\partial x_j} - \gamma_{\Theta_s} + \phi_{gs} \quad (2.11)$$

$$\phi_{gs} = -3K\Theta_s \quad (2.12)$$

Partikeltrycket p_s i ekv. 2.13 fås ur Lun et al. (1984, 247) och består av en kinetisk term och en kollisionsterm. Från härledningarna i samma studie kommer formeln för dissipation av kollisionsenergi i ekv. 2.14. Härigenom has

$$p_s = \varepsilon_s \rho_s \Theta_s + 2\rho_s (1 + e_{ss}) \varepsilon_s^2 r_{0,ss} \Theta_s \quad (2.13)$$

$$\gamma_{\Theta_s} = \frac{12(1 - e_{ss}^2) r_{0,ss}}{d_s \sqrt{\pi}} \varepsilon_s^2 \rho_s \Theta_s^{3/2} \quad (2.14)$$

$r_{0,ss}$ är den radiella distributionsfunktionen och korrigerar för sannolikheten att partiklar kolliderar när deras volymfraktion ökar. Den använda ekvationen 2.15 härstammar från Ogawa et al. (1980, 488),

$$r_{0,ss} = \left[1 - \left(\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s,max}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1} \quad (2.15)$$

2.1.4 Energi

Energibalanserna för respektive fas i ekv. 2.23 och 2.24 är en konsekvens av termodynamikens första huvudsats. Värmekälltermen Q' förenklas som

jämmt fördelad över faserna. Det gäller att

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s E_s) + \frac{\partial}{\partial x_i} [\varepsilon_s u_{s,i} (\rho_s E_s + p)] = \frac{\partial}{\partial x_i} (-q_{s,i} + \tau_{s,ij} u_j) + \varepsilon_s Q' + \alpha (T_g - T_s) \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g E_g) + \frac{\partial}{\partial x_i} [\varepsilon_g u_{g,i} (\rho_g E_g + p)] = \frac{\partial}{\partial x_i} (-q_{g,i} - \sum_{l=1}^3 h_l J_{l,i} + \tau_{g,ij} u_j) + \varepsilon_g Q' + \alpha (T_s - T_g) \quad (2.17)$$

där $J_{l,i}$ är det diffusiva massfluxet för species l , och h_l är entalpiteten för species l . I Fouriers lag (1822, 54) ansätts proportionalitet mellan det konduktiva värmeffluxet q_i och temperaturgradienten. Under betingelser med isotropisk termisk konduktivitet λ gäller allmänt

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (2.18)$$

och med approximativ homogenitet hos λ likställs i det generella fallet divergensen av det konduktiva värmeffluxet med den skalerade Laplacianen

$$\frac{\partial q_i}{\partial x_i} = -\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_i} \quad (2.19)$$

Införandet av volymfraktioner medför

$$\frac{\partial q_{s,i}}{\partial x_i} = -\lambda_s \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon_s \frac{\partial T_s}{\partial x_i} \right) \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial q_{g,i}}{\partial x_i} = -\lambda_g \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon_g \frac{\partial T_g}{\partial x_i} \right) \quad (2.21)$$

E är summan av inre och mekanisk energi per massenhet,

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} u_i u_i + g_i x_i \quad (2.22)$$

Den volymetriska interfasvärmeöverföringskoefficienten α fastställdes enligt

$$\alpha = \frac{6 \lambda_g \varepsilon_s N u_s}{d_s^2} \quad (2.23)$$

med Nusselts tal för partiklarna, $N u_s$,

$$N u_s = (7 - 10 \varepsilon_g + 5 \varepsilon_g^2) (1 + 0.7 Re_s^{0.2} Pr_g^{\frac{1}{3}}) + (1.33 - 2.4 \varepsilon_g + 1.2 \varepsilon_g^2) Re_s^{0.7} Pr_g^{\frac{1}{3}} \quad (2.24)$$

vilket föreslogs av Gunn (1978, 473). Prandtls tal för gasfasen, Pr_g , är definerat som

$$Pr_g = \frac{c_{p,g}\mu_g}{\lambda_g} \quad (2.25)$$

Gasvärmekapacitiveteten $c_{p,g}$ fås med massviktning av varje species,

$$c_{p,g} = w_{N_2,g}c_{p,N_2} + w_{O_2,g}c_{p,O_2} + w_{H_2O,g}c_{p,H_2O} \quad (2.26)$$

och bestämmer ändringen i inre energi från sensibelt värme,

$$\Delta\left(h_g - \frac{p}{\rho_g}\right) = c_{p,g}\Delta T_g \quad (2.27)$$

2.1.5 Species

Gasfasen är en multikomponentblandning bestående av kvävgas, syrgas och vattenånga. Komponenternas transport styrs av sina respektive speciesbalanser, som för ett godtyckligt species a med massfraktion $w_{a,g}$ är

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g w_{a,g}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon_g \rho_g w_{a,g} u_{g,i}) = -\frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon_g J_{l,i}) \quad (2.28)$$

Maxwell-Stefan-diffusion antas i simuleringen. Vidare medtas termisk massdiffusion p.g.a. eventuella termoforesiska effekter, medan diffusion som härstammar från tryckgradienter antas försumbar. Ekvation 2.36 (Merk, 1959, 92-97) för diffusionstransport av species a i ett ternärt system av species a, b och c med respektive molfraktioner $\chi_{a,g}$, $\chi_{b,g}$ och $\chi_{c,g}$ lyder då

$$\frac{\chi_{a,g}\chi_{b,g}}{\mathcal{D}_{ab}}(u_{b,i}-u_{a,i}) + \frac{\chi_{a,g}\chi_{c,g}}{\mathcal{D}_{ac}}(u_{c,i}-u_{a,i}) = \frac{\partial}{\partial x_i}\chi_{a,g} - \frac{1}{T_g}\frac{\partial T_g}{\partial x_i}\left[\frac{\chi_{a,g}\chi_{b,g}}{\mathcal{D}_{ab}}\left(\frac{D_{b,T}}{\rho_b} - \frac{D_{a,T}}{\rho_a}\right) + \frac{\chi_{a,g}\chi_{c,g}}{\mathcal{D}_{ac}}\left(\frac{D_{c,T}}{\rho_c} - \frac{D_{a,T}}{\rho_a}\right)\right] \quad (2.29)$$

Genom att utgå från molekylernas medelfria väg och Chapman-Enskog-kinetikteori, kan diffusionskoefficienten \mathcal{D}_{ab} mellan två godtyckliga species a och b med respektive molmassor M_a och M_b beräknas (Bird et al., 2002, 526-527) med

$$\mathcal{D}_{ab} = C \frac{\sqrt{T_g^3 \left(\frac{1}{M_a} + \frac{1}{M_b}\right)}}{p\sigma_{ab}^2\Omega_{ab}} \quad (2.30)$$

där

$$C = 1,90491 \cdot 10^{-22} \frac{\text{m}^2 \text{g}^{\frac{1}{2}} \text{N}}{\text{K}^{\frac{3}{2}} \text{mol}^{\frac{1}{2}} \text{s}} \quad (2.31)$$

Den dimensionslösa kollisionintegralen, Ω_{ab} , är en funktion av den reducerade temperaturen T_R^* ,

$$T_R^* = \frac{kT_g}{\epsilon_{ab}} \quad (2.32)$$

k är Boltzmanns konstant. ϵ_{ab} är potentialbrunnens minimum i Lennard-Jones-(12-6)-potentialen mellan species a och b. ϵ_{ab} och den binära kollisionsdiametern σ_{ab} bestämdes med Lorentz-Berthelots kombinationsregler, alltså det aritmetiska genomsnittet

$$\sigma_{ab} = \frac{1}{2}(\sigma_a + \sigma_b) \quad (2.33)$$

och det geometriska genomsnittet

$$\epsilon_{ab} = \sqrt{\epsilon_a \epsilon_b} \quad (2.34)$$

Den termiska diffusionskoefficienten för species a, $D_{T,a}$, relaterar till temperaturgradientens påverkan på diffusion och uppskattades med den kompositionsberoende formeln (Fluent, 2003, 7-44) nedan,

$$D_{T,a} = -C_T T_g^{0,659} \left(\frac{M_a^{0,511} \chi_{a,g}}{M_a^{0,511} \chi_{a,g} + M_b^{0,511} \chi_{b,g} + M_c^{0,511} \chi_{c,g}} - w_{a,g} \right) \left(\frac{M_a^{0,511} \chi_{a,g} + M_b^{0,511} \chi_{b,g} + M_c^{0,511} \chi_{c,g}}{M_a^{0,489} \chi_{a,g} + M_b^{0,489} \chi_{b,g} + M_c^{0,489} \chi_{c,g}} \right) \quad (2.35)$$

med konstanten

$$C_T = 2,59 \cdot 10^{-7} \frac{\text{Pa} \cdot \text{s} \cdot \text{mol}^{0,022}}{\text{g}^{0,022} \cdot \text{K}^{0,659}} \quad (2.36)$$

2.1.6 Spänningskonstitution

Gasfasens viskösa spänningstensor $\tau_{g,ij}$ utgörs av den dyadiska summan

$$\tau_{g,ij} = \epsilon_g \mu_g \left(\frac{\partial u_{g,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{g,j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_{g,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (2.37)$$

Dilatation beaktas även i den deviatoriska partikelspänningstensorn $\tau_{s,ij}$ som modellerades med

$$\tau_{s,ij} = \epsilon_s \mu_s \left(\frac{\partial u_{s,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{s,j}}{\partial x_i} \right) + \epsilon_s (\mu_{s,bul} - \frac{2}{3} \mu_s) \frac{\partial u_{s,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.38)$$

där partikelviskositeten μ_s är summan av bidragen från kollisioner, $\mu_{s,kol}$, translationsrörelse, $\mu_{s,kin}$, samt friktion, $\mu_{s,fr}$:

$$\mu_s = \mu_{s,kol} + \mu_{s,kin} + \mu_{s,fr} \quad (2.39)$$

Kollisionsviskositeten (Gidaspow et al., 1992, 4) antogs vara på formen

$$\mu_{s,kol} = \frac{4}{5} \varepsilon_s \rho_s d_s r_{0,ss} (1 + e_{ss}) \sqrt{\frac{\Theta_s}{\pi}} \quad (2.40)$$

Den kinetiska viskositeten (Syamlal et al., 1993, 16) approximerades med

$$\mu_{s,kin} = \frac{\varepsilon_s \rho_s d_s \sqrt{\Theta_s \pi}}{6(3 - e_{ss})} \left[1 + \frac{2}{5} (1 + e_{ss}) (3e_{ss} - 1) \varepsilon_s r_{0,ss} \right] \quad (2.41)$$

Låt β vara vinkeln för intern friktion och I_2 den deviatoriska spänningstens andra invariant. Friktionsviskositeten (Schaeffer, 1987, 23-39) ansattes till

$$\mu_{s,fr} = \frac{p_s \sin \beta}{2\sqrt{I_2}} \quad (2.42)$$

$\mu_{s,bul}$ är bulkviskositeten (Lun et al., 1984, 248) som relaterar till expansion och kompression, och togs som

$$\mu_{s,bul} = \frac{4}{3} \varepsilon_s \rho_s d_s r_{0,ss} (1 + e_{ss}) \sqrt{\frac{\Theta_s}{\pi}} \quad (2.43)$$

2.1.7 Tillståndsekvation

Gasens tillstånd approximerades med Redlich-Kwongs ekvation (1949, 234-235). Om V_m är gasens molvolym och $T_{c,g}$ dess kritiska temperatur has den kubiska ekvationen

$$p = \frac{RT_g}{V_m - b_{RK}} - \frac{a_{RK}}{V_m(V_m + b_{RK})\sqrt{T_g}} \quad (2.44)$$

där R är den allmänna gaskonstanten och parametrarna a_{RK} samt b_{RK} är funktioner av gasens kritiska tryck p_c och kritiska temperatur,

$$a_{RK} = 0,42747 \frac{R^2 T_{c,g}^{2,5}}{p_{c,g}} \quad (2.45)$$

$$b_{RK} = 0,08664 \frac{RT_{c,g}}{p_{c,g}} \quad (2.46)$$

2.2 Uppställning av fallet

I delavsnitt 2.2.1 återges den ansatta geometrin och koordinatsystemet däri. Rand- och initialvillkor samt värmekällor redovisas i delavsnitt 2.2.2. I delavsnitt 2.2.3 anges materialegenskaper.

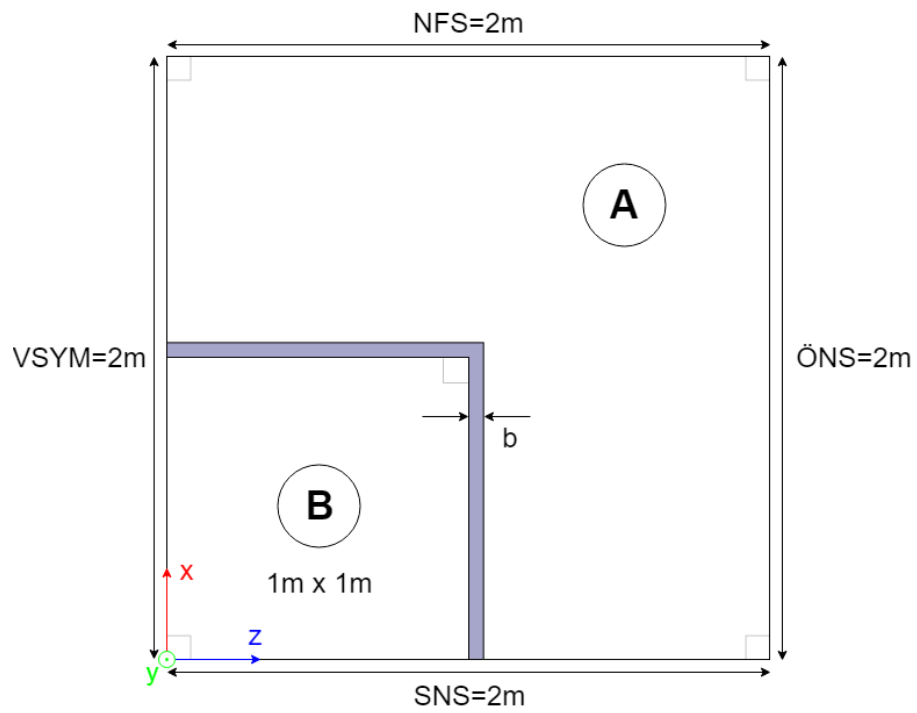
2.2.1 Geometri

Det simulerade domänet, se fig. 2.1 och 2.2, är till de yttre ränderna rätblocksförmad. Bottenytan (inlopp) som ligger i xz -planet, och toppytan (utlopp), som befinner sig 1,5 m (domänhöjd) från den parallella bottenytan, har dimensioner 2m x 2m, se fig. 2.1. Zon B har en egentlig inre tvärsnittsarea (endast halva simulerades) i flödesriktningen om 1m x 2m och inträder med sin 1 m korta sida i den större zon A, och dess södra sida om 2 m är i anslutning till konstruktionens södra sida. Studien utnyttjade en antagen symmetri av beräkningsekonomiska skäl, vilket innebär att den studerade zon B är 1m x 1m. Zon B är belägen i det sydvästra hörnet vid origo.

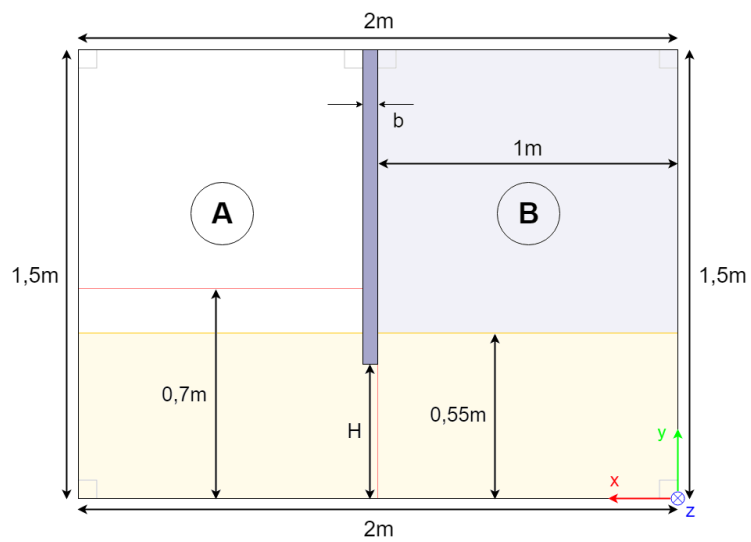
Som kan ses i fig. 2.1 är origo placerad vid inloppet i hörnet som delas av det västra symmetriplanet, VSYM, och den södra vidhäftningsväggen, SNS (eng. *no-slip*). VSYM ligger i xy -planet och SNS ligger i yz -planet. Den östra randen, ÖNS, är en vidhäftningsvägg. Den norra väggen, NFS, är en icke-vidhäftningsvägg (eng. *free-slip*). Skiljeväggen är en vidhäftningsvägg med tjocklek b . Det ortogonala avståndet från skiljeväggen till de yttre väggarna är således $1m - b$. Fig. 2.2 illustrerar skiljeväggens vertikala penetration ned i bädden, där H är höjden från inloppet till skiljeväggen (öppningshöjden). Fyra delfall studerades, med öppningshöjder 450 mm och 650 mm samt skiljeväggstjocklekar 20 mm och 150 mm.

2.2.2 Betingelser

Den statiska bäddhöjden är 550 mm, se fig. 2.2. Partikelfasens initiala volymfraktion i den statiska bädden är $\varepsilon_s = 0,598$. Den högsta tillåtna volymfraktionen för partikelfasen sattes till $\varepsilon_{s,max} = 0,63$ med dominerande friktion vid $\varepsilon_{s,fr} = 0,61$, och partiklarnas vinkel för intern friktion sattes till $\beta = 30,00007^\circ$. Direkt under avskilda zon B, i bottenytan, är ett



Figur 2.1: Geometri uppifrån (utlopp)



Figur 2.2: Geometri från symmetriplanet (VSYM)

vattenånginlopp med molfraktion vattenånga $\chi_{H_2O,in,B} = 1$. Under zon A, inkl. ytan under skiljeväggen, är ett luftinlopp med molfraktioner kvävgas $\chi_{N_2,in,A} = 0,79$ och syrgas $\chi_{O_2,in,A} = 0,21$. Båda inloppshastigheter valdes till 1 m/s. Tyngdaccelerationen sattes till $g = 9,82 \text{ m/s}^2$ och är motsatt riktad y-led. Med vidhäftning menas att väggparallella hastighetskomponenter är 0. Vidhäftningsväggarna är dessutom impermeabla, och hastigheten är därmed nollvektorn överallt längs dem. På symmetriplanet tvingas alla ortogonala gradienter vara 0. Icke-vidhäftning innebär att skjuvspänningskomponenter är specificerade till 0, vilket upprätthålls vid den norra väggen NFS.

Mot bakgrund av tidigare studier (Kumar & Pandey, 2012, 168; Shah et al., 2015, 68; Zhang et al., 2011, 5) valdes en luftinloppstemperatur om 500 K. Vidare valdes en vattenånginloppstemperatur om 473 K. Backflödestemperaturen sattes till 1100 K i utlopp A och till 1000 K i utlopp B. Ränderna NFS och ÖNS har fix temperatur på 1123 K, som är en rimlig temperatur i zon A tillräckligt långt ifrån zon B (Bates et al., 2017, 1543; Bittanti et al., 1996, 6910). I zon A, inkl. volymen under skiljeväggen, upp till 0,7 m, som kan ses i fig. 2.2, implementerades en homogen värmekälla på 500 kW/m^3 . I och med den ytterst begränsade värmeöverföringen med termisk konduktion genom skiljeväggen i förhållande till värmeöverföringen genom transport av bäddmaterial under den, antogs dess termiska konduktivitet vara 0, och exkluderades från simuleringarna med en adiabatisk rand. Därtill antas perfekt isolering över hela den yttre södra vidhäftningsväggen. Den ortogonala värmeffluxkomponenten mot Neumannränderna skiljevägg och SNS är alltså 0.

2.2.3 Materialegenskaper

Partiklarna var av typ Geldart D med diameter $d_s = 1,2 \text{ mm}$ och restitutionskoefficient $e_{ss} = 0,9$. Partikelfasens konstanta densitet var $\rho_s = 2660 \text{ kg/m}^3$ och värmekapacitivet $c_{p,s} = 737 \text{ J/(kg}\cdot\text{K)}$. Gasviskositeten sattes till $\mu_g = 4,1 \cdot 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$.

Gaskomponenternas individuella värmekapacititeter approximerades med bitvisa polynom av grad 4 enligt nedan, och den totala gasvärmekapacitivet beräknades sedan med ekvation 2.33.

$$c_{p,N_2}(T_g) = \begin{cases} 300 \text{ K} \leq T_g < 1000 \text{ K} : \\ 868,6229 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}} + 0,4416295 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^2} T_g - 0,000168723 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^3} T_g^2 + 2,996787 \cdot 10^{-8} \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^4} T_g^3 - 2,004386 \cdot 10^{-12} \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^5} T_g^4 \\ 1000 \text{ K} \leq T_g < 5000 \text{ K} : \\ 979,043 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}} + 0,4179639 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^2} T_g - 0,001176279 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^3} T_g^2 + 1,674394 \cdot 10^{-6} \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^4} T_g^3 - 7,256297 \cdot 10^{-10} \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^5} T_g^4 \end{cases} \quad (2.47)$$

$$c_{p,O_2}(T_g) = \begin{cases} 300 \text{ K} \leq T_g < 1000 \text{ K} : \\ 834,8265 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}} + 0,292958 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^2} T_g - 0,0001495637 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^3} T_g^2 + 3,413885 \cdot 10^{-7} \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^4} T_g^3 - 2,278359 \cdot 10^{-10} \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^5} T_g^4 \\ 1000 \text{ K} \leq T_g < 5000 \text{ K} : \\ 960,7523 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}} + 0,1594126 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^2} T_g - 3,270885 \cdot 10^{-5} \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^3} T_g^2 + 4,612765 \cdot 10^{-9} \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^4} T_g^3 - 2,952832 \cdot 10^{-13} \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^5} T_g^4 \end{cases} \quad (2.48)$$

$$c_{p,H_2O}(T_g) = \begin{cases} 300 \text{ K} \leq T_g < 1000 \text{ K} : \\ 1563,077 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}} + 1,603755 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^2} T_g - 0,002932784 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^3} T_g^2 + 3,216101 \cdot 10^{-6} \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^4} T_g^3 - 1,156827 \cdot 10^{-9} \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^5} T_g^4 \\ 1000 \text{ K} \leq T_g < 5000 \text{ K} : \\ 1233,234 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}} + 1,410523 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^2} T_g - 0,0004029141 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^3} T_g^2 + 5,542772 \cdot 10^{-8} \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^4} T_g^3 - 2,949824 \cdot 10^{-12} \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}^5} T_g^4 \end{cases} \quad (2.49)$$

Lennard-Jones-parametrarna för kvävgasen är $\sigma_{N_2} = 3,621 \text{ \AA}$ och $(\epsilon_{N_2}/k) = 97,53 \text{ K}$, för syrgasen $\sigma_{O_2} = 3,458 \text{ \AA}$ och $(\epsilon_{O_2}/k) = 107,4 \text{ K}$, samt för vattenångan $\sigma_{H_2O} = 2,605 \text{ \AA}$ och $(\epsilon_{H_2O}/k) = 572,4 \text{ K}$.

2.3 Numerik

Den implementerade meshen specificeras i delavsnitt 2.3.1. I delavsnitt 2.3.2 redogörs för diskretisering av styrande ekvationer. Tryck-hastighetskopplingen finns beskriven i delavsnitt 2.3.3.

2.3.1 Meshning

Den maximala elementsidlängden valdes till 120 mm för de simulerade partiklarna med diameter 1,2 mm. De implementerade mesharna var ostrukturerade och tetraederdominanta. Meshen bestod av 4 669 noder och 22 311

element för delfallet med $H = 450$ mm och $b = 20$ mm, 4 590 noder och 21 935 element för delfallet med $H = 450$ mm och $b = 150$ mm, 4 607 noder och 22 170 element för delfallet med $H = 650$ mm och $b = 20$ mm, samt 4 500 noder och 21 544 element för delfallet med $H = 650$ mm och $b = 150$ mm.

2.3.2 Diskretisering

Betrakta integreringen av den allmänna kontinuitetsekvationen över en kompakt kontrollvolym CV ,

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{CV} \rho dx_1 dx_2 dx_3 + \iiint_{CV} \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) dx_1 dx_2 dx_3 = 0 \quad (2.50)$$

Via Gauss-Ostrogradskis sats kan den andra trippelintegralen skrivas om till ytintegralen av massfluxet över den till CV bitvis glatta randen S , uppbyggd av infinitesimala vektorareainkrement $\hat{n}_i dA$ med normaler \hat{n}_i definierade utåt. Med konstant kontrollvolym kan den transienta differentialoperatorn tas in i integranden,

$$\oiint_S \rho u_i \hat{n}_i dA = - \iiint_{CV} \frac{\partial \rho}{\partial t} dx_1 dx_2 dx_3 \quad (2.51)$$

Låt kontrollvolymen vara ett element med n sidor och $(\rho u_i \hat{n}_i A)_f$ vara massflödet genom sida f . Med summering över sidorna fås

$$\oiint_S \rho u_i \hat{n}_i dA = \sum_{f=1}^n (\rho u_i \hat{n}_i A)_f \quad (2.52)$$

Den temporala formuleringen var implicit och av andra ordningen. För en given skalär φ gäller då

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{3\varphi_{t+\Delta t} - 4\varphi_t + \varphi_{t-\Delta t}}{2\Delta t} \quad (2.53)$$

Kombination av ekv. 2.45, 2.46 och 2.47 ger slutligen diskretiseringen av ekv. 2.44,

$$\frac{3\rho_{t+\Delta t} - 4\rho_t + \rho_{t-\Delta t}}{2\Delta t} V + \sum_{f=1}^n (\rho u_i \hat{n}_i A)_f = 0 \quad (2.54)$$

Den diskreta rörelsemängdsekvationen för ett givet element e_0 med n angränsande element e_l och delade sidor f med e_0 är på den allmänna formen i ekv. 2.50 med elementberoende koefficienter a ,

$$a_{u,e_0} u_{e_0,i} = \sum_{l=1}^n a_{u,e_l} u_{e_l,i} + \sum_{f=1}^n p_f A_f \hat{n}_i + F_{e_0} \quad (2.55)$$

där F är en källterm, här bestående av interfaskraft.

Gradienter kvantifierades med cellbaserade minsta-kvadrat-metoden. Genom Gram-Schmidts ortogonaliseringsprocess fås vikter från vilka en ortonormerad bas kan konstrueras i det inre produktrummet. Varje komponent i gradienten av en given skalär φ_{e_0} , $\partial\varphi_{e_0}/\partial x_i$, över ett givet element e_0 beräknas därpå med en summering över n elementsidor med respektive vikter $W_{l_0,i}$ och differensen mellan φ_{e_l} i angränsande element e_l och φ_{e_0} i element e_0 enligt

$$\frac{\partial\varphi_{e_0}}{\partial x_i} = \sum_{l=1}^n W_{l_0,i} (\varphi_{e_l} - \varphi_{e_0}) \quad (2.56)$$

All spatiell diskretisering var uppströms och av första ordningen. Relaxationsparametern ω begränsar ändringen från φ till φ_{ny} i varje iteration,

$$\varphi_{ny,eff} = \varphi + \omega_\varphi (\varphi_{ny,ber} - \varphi) \quad (2.57)$$

$\varphi_{ny,ber}$ är det beräknade värdet på φ_{ny} och $\varphi_{ny,eff}$ är värdet som fortsätter till nästa iteration. Lägre ω kan ge stabilitet i lösaren men minskar konvergenstakten. ω var här 1 utom för de underrelaxerade storheterna tryck, $\omega_p = 0,5$, rörelsemängd, $\omega_{\rho u_i} = 0,2$, och volymfraktion, $\omega_\varepsilon = 0,5$. Residualtoleransen för samtliga variabler var 0,001. Tidssteget valdes till $\Delta t = 250 \mu\text{s}$ och simuleringen kördes över 240 000 tidssteg, alltså 60 s.

2.3.3 Tryck-hastighetskoppling

För att relatera hastighetsvärden på sidor till desamma i elementcentroider användes en procedur analog med Rhie-Chow-interpolation (1983, 1527-1528) för att undvika ofysikaliska oscillationer, eller schackbrädeseffekter, på lösningen av trycket i den samlokaliserade meshen. Sidvärdet bestäms med

ett rörelsemängdsviktat genomsnitt baserat på koefficienten a_{e_0} i ekv. 2.49. Sidmassfluxet J_f är

$$J_f = (\rho u_i \hat{n}_i)_f \quad (2.58)$$

och skrivs med den implementerade interpolationsmetoden för en sida delad av element e_0 och element e_l ,

$$J_f = \hat{J}_f + \eta_f(p_{e_0} - p_{e_l}) \quad (2.59)$$

där η_f är en funktion av genomsnittet av koefficienterna a_{e_l} i rörelsemängdsdiskretiseringen och \hat{J}_f beror på hastigheterna i de två elementen på vardera sida f . Som tryck-hastighetskoppling valdes SIMPLE-algoritmen (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) av Patankar & Spalding (1972, 1793-1795) med faskoppling, se t.ex. Afrooz et al. (2017, 229) och Feng et al. (2012, 80). Ett förhållande mellan hastighets- och tryckkorrektioner appliceras för att iterativt etablera ett fysikaliskt tryckfält och samtidigt upprätthålla massbevarande. Initialt ansätts ett gissat tryckfält p^* från vilket J_f^* beräknas,

$$J_f^* = \hat{J}_f^* + \eta_f(p_{e_0} - p_{e_l}) \quad (2.60)$$

Sidmassfluxen J_f^* satisfierar inte kontinuitet. Därför adderas en korrektionsterm $J_{f,kor}$ till J_f^* så att kontinuitet satisfieras,

$$J_f = J_f^* + J_{f,kor} \quad (2.61)$$

Enligt SIMPLE är

$$J_{f,kor} = \eta_f(p_{e_0,kor} - p_{e_l,kor}) \quad (2.62)$$

med de korrigerade elementtrycken p_{kor} . Fluxkorrektionsekvationerna substitueras i kontinuitetsdiskretiseringen för att erhålla den diskreta tryckkorrektionsekvationen i element e_0 ,

$$a_{p,e_0} p_{e_0,kor} = \sum_{l=1}^n a_{p,e_l} p_{e_l,kor} + \zeta_{e_0} \quad (2.63)$$

där källtermen ζ_{e_0} är nettomassflödet,

$$\zeta_{e_0} = \sum_{f=1}^n J_f^* A_f \quad (2.64)$$

När en lösning till ekv. 2.57 tagits fram korrigeras elementcentroidtrycket med

$$p = p^* + \omega_p p_{kor} \quad (2.65)$$

och sidmassfluxet med ekv. 2.56 insatt i ekv. 2.55,

$$J_f = J_f^* + \eta_f (p_{e_0, kor} - p_{e_1, kor}) \quad (2.66)$$

vilket ger en identisk satisfiering av kontinuitetsekvationen i varje iteration. Generalisering till tvåfasflöde kan uttryckas på matrisform,

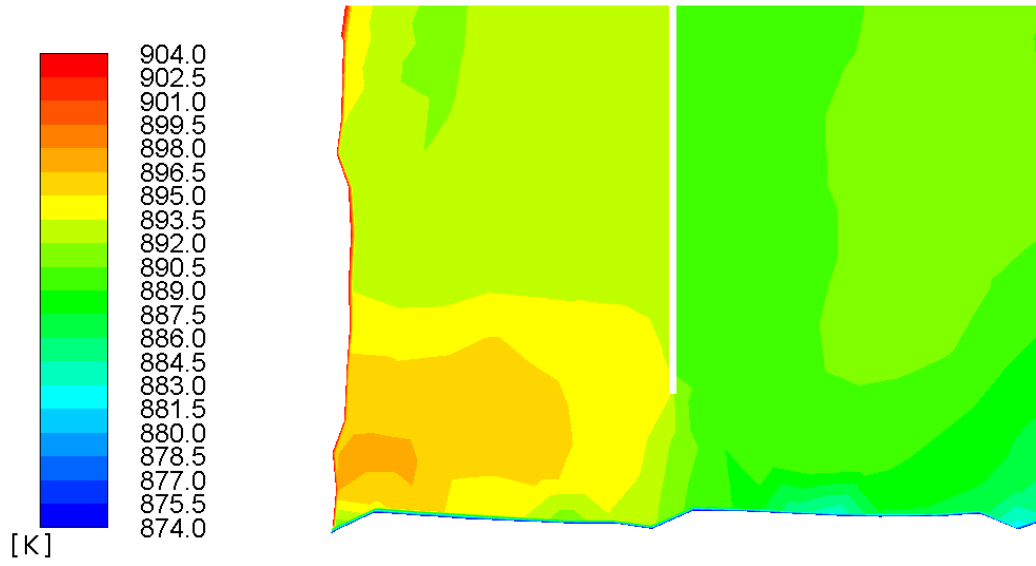
$$\begin{bmatrix} A_p & C_{u_g} & C_{u_s} & D_{\varepsilon_s} \\ B_{u_g} & A_{u_g} & A_{u_{gs}} & D_{u_g} \\ B_{u_s} & A_{u_{sg}} & A_{u_s} & D_{u_s} \\ E_p & E_{u_g} & E_{u_s} & A_{\varepsilon_s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{kor} \\ u_{g, kor} \\ u_{s, kor} \\ \varepsilon_{s, kor} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_p \\ S_{u_g} \\ S_{u_s} \\ S_{\varepsilon_s} \end{bmatrix} \quad (2.67)$$

3. Resultat

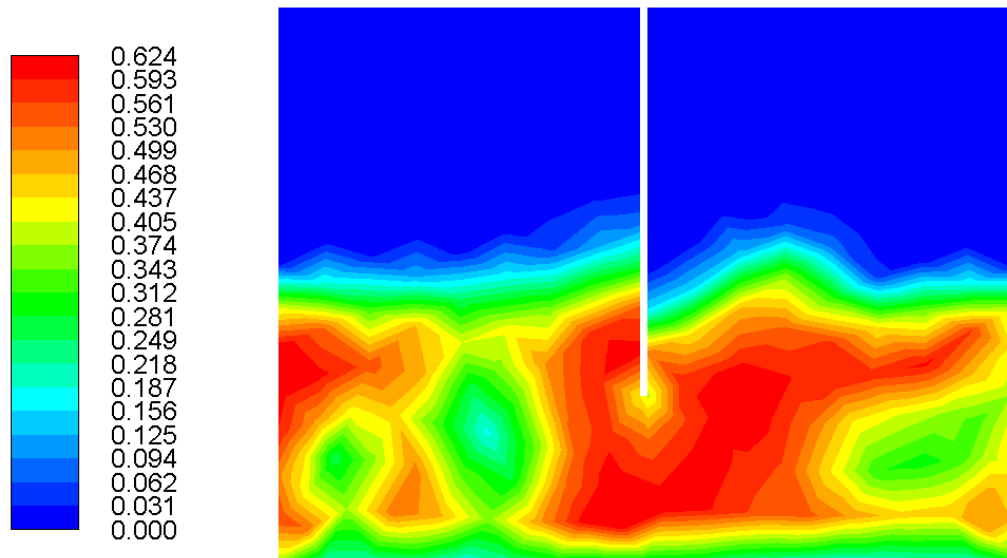
Figurer 3.1-3.8 nedan är fyllda konturdiagram med isaritmer, som presenterar gasfasens temperaturfält och partikelfasens volymfraktionsfält vid 60 s för de fyra delfallen. Gasfasens temperaturfält för de respektive delfallen är uppritade i temperaturintervallet 874 K till 904 K med isotermer som skiljer sig 1,5 K över de 20 banden. Volymfraktionsfältens färgskala representerar partikelvolymfraktioner mellan 0 och 0,622 till 0,629, också över 20 band. Det kan ses att de temperaturskillnaderna i merparten av domänen är under 15°C. Passande expansion för bubblande karakteristik kan urskiljas för samtliga delfall från den statiska bäddhöjden 550 mm, med tydlig partikel närvaro med god marginal över skiljeväggens nedre ände även för delfallen med $H = 650$ mm.

I fig. 3.1 ses gasfasens temperaturfält för delfallet där $H = 450$ mm och $b = 20$ mm och i fig. 3.2 visas detta delfalls partikelvolymfraktionsfält. Här kan den minsta temperaturskillnaden i merparten av domänet observeras, under 9°C. I fig. 3.3 och 3.4 syns gasfasens temperaturfält respektive partikelfasens volymfraktionsfält för delfallet där $H = 450$ mm och $b = 150$ mm. Temperaturtoppen kan ses nära skiljeväggens nedre ände. Fig. 3.5 visar gasfasens temperaturfält för delfallet där $H = 650$ mm och $b = 20$ mm och fig 3.6 detta delfalls partikelvolymfraktionsfält. Större horisontell temperaturvariation uppvisas här jämfört med föregående delfall. I fig 3.7 har gasfasens temperaturfält uppritats för delfallet där $H = 650$ mm och $b = 150$ mm och i fig. 3.8 visas detta delfalls partikelvolymfraktionsfält. Här förekommer temperaturtoppen centralt i förbränningsregionen.

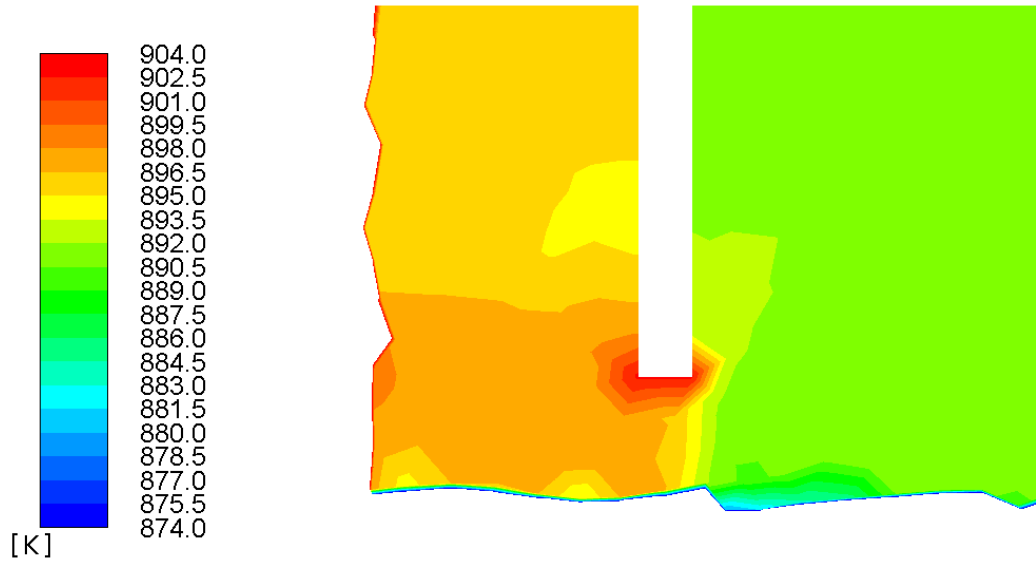
I bilaga A visas gastemperaturfälten med nollställd interfasvärmeöverföring, och korresponderande partikelvolymfraktioner kan ses i bilaga B.



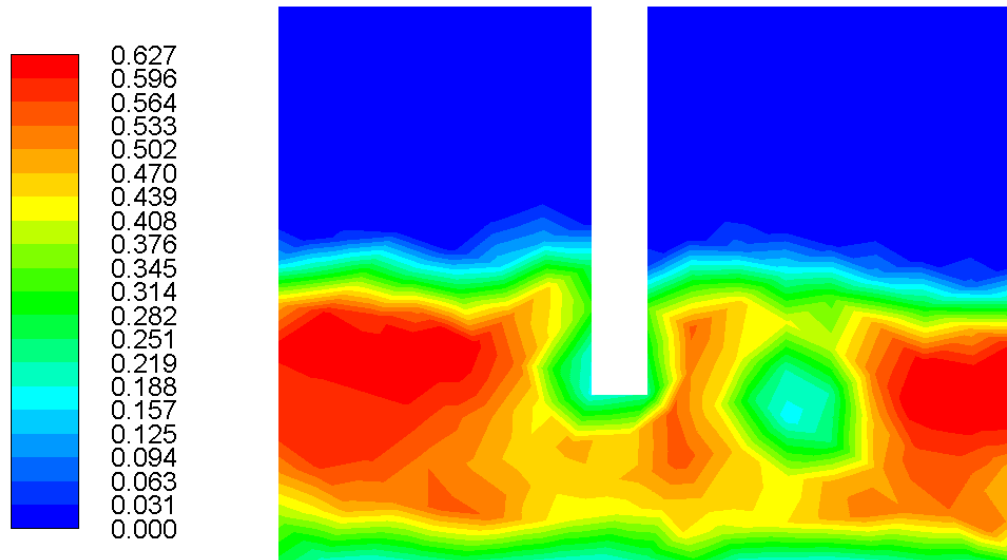
Figur 3.1: Gastemperatur, $H = 450$ mm, $b = 20$ mm.



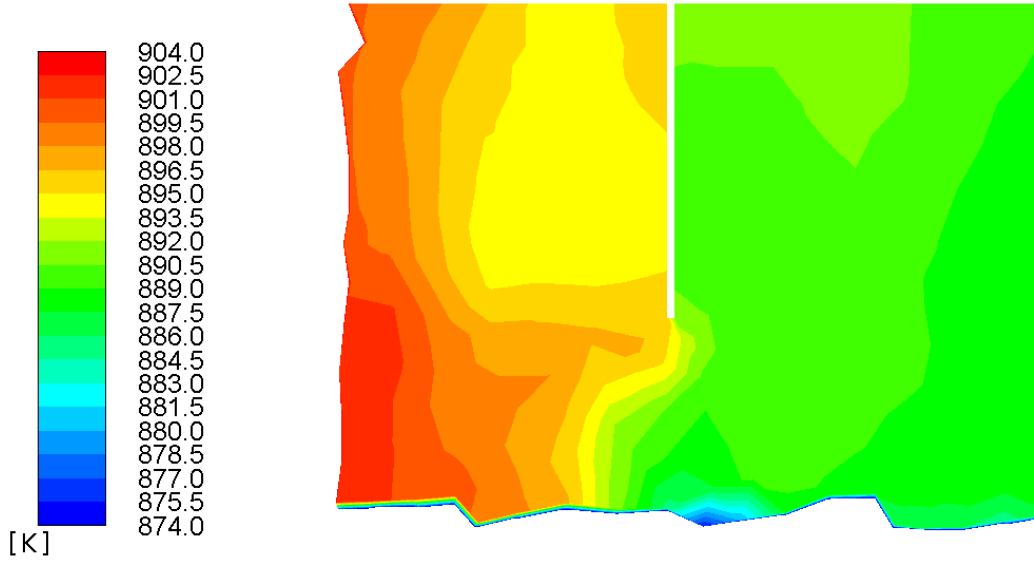
Figur 3.2: Partikelvolymfraktion, $H = 450$ mm, $b = 20$ mm.



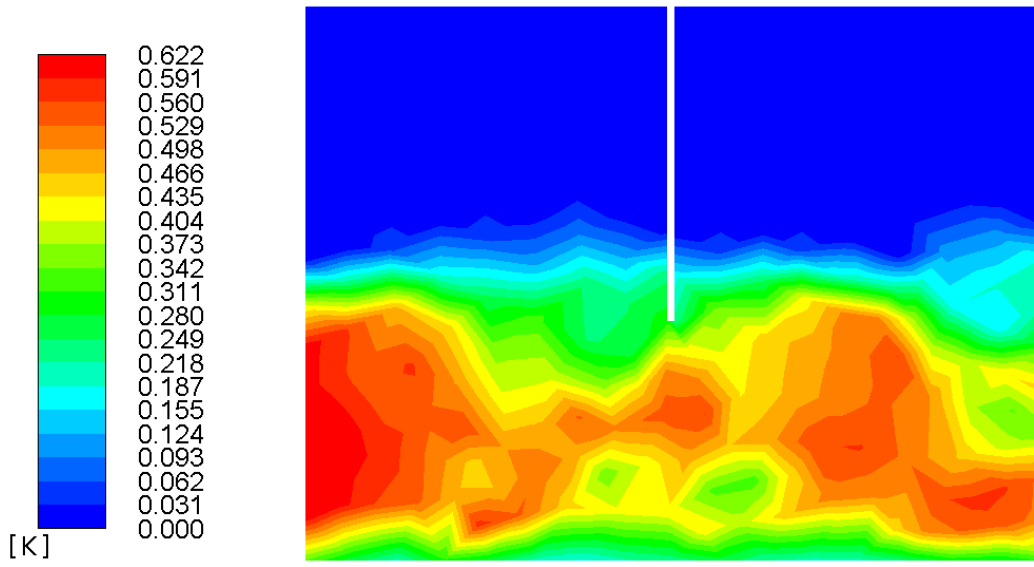
Figur 3.3: Gastemperatur, $H = 450$ mm, $b = 150$ mm.



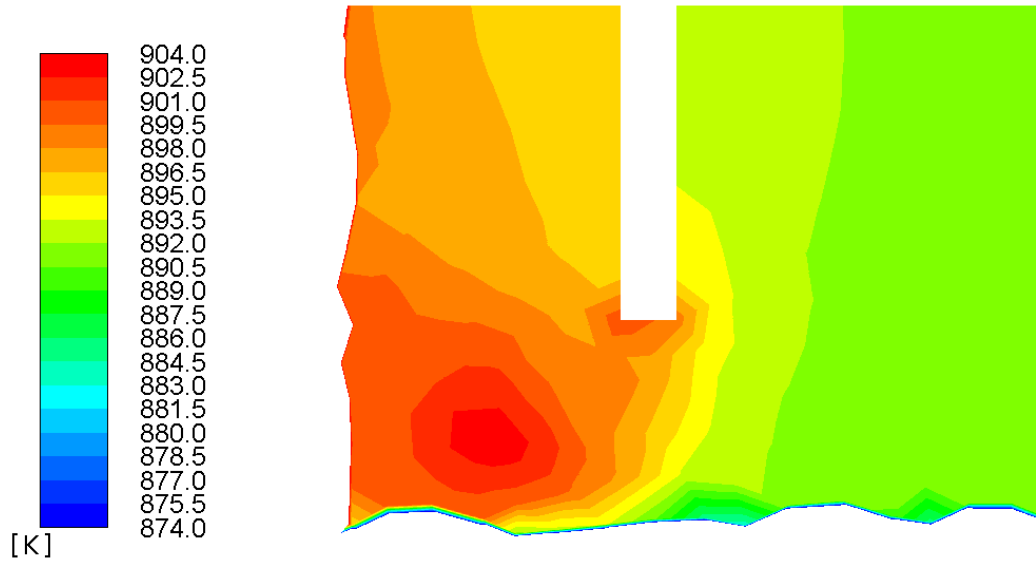
Figur 3.4: Partikelvolymfraktion, $H = 450$ mm, $b = 150$ mm.



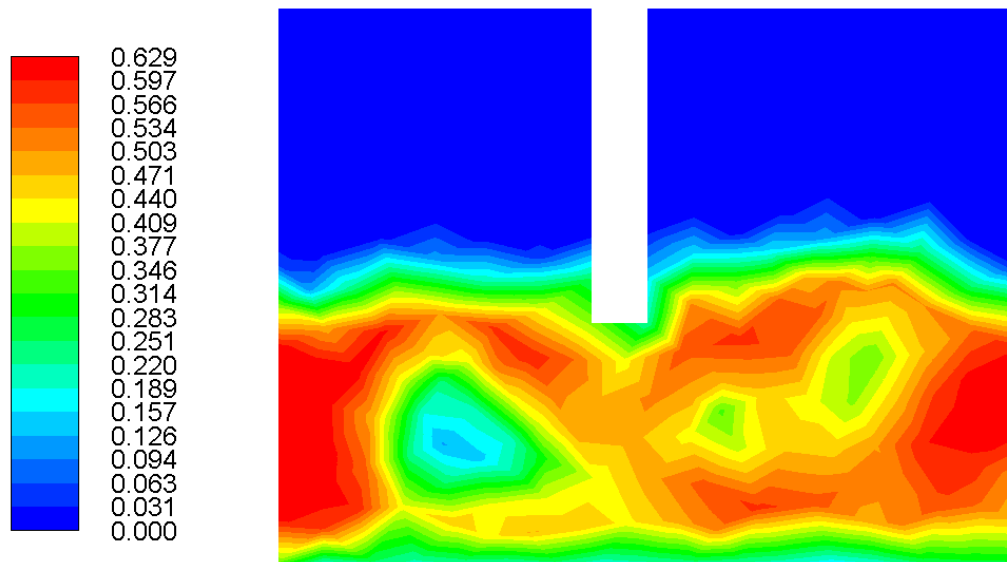
Figur 3.5: Gastemperatur, $H = 650$ mm, $b = 20$ mm.



Figur 3.6: Partikelvolymfraktion, $H = 650$ mm, $b = 20$ mm.



Figur 3.7: Gastemperatur, $H = 650$ mm, $b = 150$ mm.



Figur 3.8: Partikelvolymfraktion, $H = 650$ mm, $b = 150$ mm.

4. Diskussion

Granulära gaser skiljer sig från molekylära bl.a. i och med de förstnämndas tendens att spontant anhopa sig i kluster och förekommandet av inelastiska kollisioner, se t.ex. van der Weeles (2008, 159-161) analys av Maxwells demon i granulära gaser. Eftersom partikelrörelsen inte kan beskrivas som Brownsk p.g.a. energikaskaden och avsaknandet av jämvikt är valet att involvera konceptet granulär temperatur, ett mått på partiklarnas slumpmässiga fluktuerande kinetiska energi som härrör från genomsnittlig partikelhastighetsfluktuation, inte självklart. Dessutom kan en rad andra fenomen associeras med partiklar och inte molekyler, exempelvis nötning.

Partikelkollisionerna antogs dock vara nära elastiska, med en restitutionskoefficient på $e_{ss} = 0,9$, vilket berättigar en Maxwell-Boltzmann-hastighetsdistribution som framtagen av exempelvis Jenkins & Savage (1983, 191-195) och användande av granulär temperatur, som för övrigt påvisat stor framgång även utanför sitt tänkta område. En sådan ansats är giltig eftersom den kan expanderas kring det elastiska området där lokal termodynamisk jämvikt gäller. För detaljer, se t.ex. Goldhirsch (2008).

Försummandet av advektion och diffusion av granulär energi i den algebraiska formuleringen av granulär temperatur rättfärdigas av den giltiga approximationen att den granulära energin är i ett jämviktstillstånd och att dess dissipation är lokal (Boemer et al., 1997, 935; van Wachem et al., 2001, 1039). Medtagande av diffusion av granulär energi innebär ett behov av att framställa en tillhörande diffusionskoefficient Γ_{Θ_s} . Syamlal et al. (1993, 31) anger ett uttryck för Γ_{Θ_s} , men likväl försummar de både advektion och diffusion. Upplösningen av granulär temperatur i en given mesh blir, som intuitionen också säger, mindre resurskrävande med denna approximation (Mineto et al., 2014, 1003).

Angående diffusionsmodellen valdes Maxwell-Stefan-diffusion av flexibilitets-skäl. Ett annat alternativ vore generaliserade Ficks lag, men i en multikomponentblandning annat än binär hade denna endast varit giltig för utspädda komponenter (Krishna & Wesselingh, 1997, 863). Att diffusion modellerades överhuvudtaget var till följd av gränssytan mellan luft och överhettad vattenånga. Att modellera diffusion i en redan förblandad gas som t.ex. endast luft, utan kemiska reaktioner med bränsle, hade varit föga meningsfullt.

Termofores, även känd som termodiffusion, termisk diffusion eller Ludwig-Soret-diffusion, skulle kunna argumenteras vara försumbar när det gäller fluidiserade bäddar. Trots det togs den med i simuleringarna, i och med att värmeöverföring studeras mellan två zoner där det sker kraftigt exoterm förbränning i en av dem och zonerna är blåsta med två olika fluidiseringsmedia. Vidare kallas den irreversibla reciproken till termofores för Dufoureffekt, och ingen kan existera utan den andra. Dufoureffekten är alltså ett entalpiflux orsakat av koncentrationsgradienter, som har en direkt påverkan på temperaturfältet.

Lennard-Jones-(12-6)-potential är egentligen en modell för intermolekylär potential mellan neutrala molekyler. Visserligen inkluderas Londondispersion, men denna form av attraktionskraft utövas när elektroner p.g.a. kvantmekaniska effekter momentant upptar platser som gör molekyler till temporära multipoler, och orsakar alltså fluktuerande polariseringar även hos neutrala molekyler. Permanent dipol-dipol-växelverkan från skilld elektronegativitet beaktas inte.

Stockmayer-(12-6-3)-potential inkluderar utöver Lennard-Jones-(12-6)-potential ett elektriskt punktdipolmoment som då tar hänsyn till polariteten hos t.ex. vatten. Värden på kollisionsintegraler för Stockmayer-(12-6-3)-potential har tabellerats av bl.a. Monchick & Mason (1961, 1682-1691). Vattnets dipolkaraktär skulle kunna tänkas skapa problem med något ofysikaliska diffusionsflux i simuleringen som innefattar vattenånga, om än med marginella eller försumbara skillnader som antagligen är irrelevanta för den här studien, och därmed prioriterades beräkningsekonomin som Lennard-Jones-(12-6)-potential erbjuder.

Även fast fluidiserade bäddar är i det närmaste isoterma, åtminstone vertikalt, hade ansättning av konstant fluiddensitet varit till att anses som ofysikaliskt, inte p.g.a. tryckeffekter från Machtalet då detta är oansenligt här,

men eftersom temperaturen varierar betydligt globalt i domänet. Förvisso är temperaturgradienten i bäddbotten skarp innan temperaturen befinner sig i ett mer begränsat intervall i merparten av domänet, men regionen med värmekälla kontra regionen utan sådan gör att mer substantiell temperaturvariation förekommer i horisontalled än i en konventionell fluidiserad förbränningsbädd.

Ett eventuellt antagande att ett fludelement i en Lagrangsk referensram har konstant densitet är i singelfasfallet ekvivalent med att den materiella derivatan av densiteten är noll och därmed ett solenoidalt hastighetsfält, vilket generellt förenklar beräkningar. I multifasflöden är en sådan slutsats dock ogiltig då volymfraktioner varierar, och dessutom utsätts det dynamiska fludelementet för temperaturändringar. Den kontinuerliga värmealstringen i de nedre 0,7 m av förbränningszonen jämte temperaturgradienter nära ränder anses inalles för påtagliga ur detta perspektiv för att densitetsvariationer ska kunna ignoreras.

Torr luft är i ingenjörssammanhang fullt acceptabelt att betrakta som en ideal gas. För vattenånga är det dock svårare att rättfärdiga användande av ideala gaslagen vid besiktning av dess kompressibilitetsfaktor Z . I det höga aktuella temperaturintervallet hade det möjligtvis kunnat övervägas. I luftkonditioneringssammanhang kan ideala gaslagen ofta användas ty Z är då tillräckligt nära 1, men i kraftverk är det dock inte rekommenderat givet trycksituationen (Çengel & Boles, 2011, 137). Redlich-Kwong-modellen återger tillståndet för en verklig gas på ett mer adekvat sätt.

För att partiklarna ska nå fluidisering krävs en minsta fluidiseringshastighet, u_{mf} , med vilken fluidmotståndet blir lika med partiklarnas tyngd. Sedan 1950 har över hundra uttryck för denna för fluidiserade bäddar centrala parameter tagits fram (Anantharaman et al., 2018, 454). Under u_{mf} är tryckfallet över bädden proportionellt mot gashastigheten, där det ofta når sitt maximum innan en smärre minskning till det statiska bäddtrycket vid u_{mf} då friare perkolation inträder. Ökning av gashastigheten över u_{mf} leder till ett fönster där systemet är bubblande (Kunii & Levenspiel, 1991, 71). Vid inpassning av gashastigheten häri har det turbulenta området ännu ej nåtts, och då inte heller turbulenta bäddar drar mycket nytta av turbulensmodellering, är den laminära ansatsen än mer motiverad. En eventuell turbulensmodell hade behövt precis inställning av modellparametrar, men även då riskeras mer orealistisk hydrodynamik (Gao et al., 2009, 1688-1690).

Av den anledningen framträder en viss problematik vad gäller specificering av randvillkor för hastighet. De stora Geldart D-partiklarna kräver en relativt hög gashastighet för fluidisering. I det verkliga fallet finns ett spektrum av partikeldiametrar, vilket betyder att fluidiseringshastigheten behöver noggrann kalibrering och fortlöpande reglering för att upprätthålla en lämplig bäddhöjd och önskad karakteristik internt i bädden. Med den ansatta inloppshastigheten om 1 m/s har tydlig dynamisk expansion av bädden uppnåtts. Lägre hastigheter än så ändrade inte bäddhöjden på ett lämpligt sätt, och högre hastigheter medförde alltför kraftigt medtagande av partiklar förbi stadiet då bädden kan kallas bubblande (snarare en så kallad sluggande sådan).

Den egentliga kraftvärmepannan har (troligtvis) inte en vägg vid NFS, utan denna har införts för att inte behöva simulera hela kraftvärmepannan, så att fokus kan ligga på det relevanta området. ÖNS ansattes som vidhäftande för att observera effekter av en eventuell vägg på denna plats. Vid närmare undersökning av Blasius lösning till ett laminärt gränsskikts tjocklek som funktion av den yttangentiella koordinaten och Reynolds tal (Schlichting, 1979, 140) ses att friströmmen teoretiskt är i det närmaste oförändrad även uppe i fribordet i nischen som skiljeväggen, SNS och ÖNS skapar. Icke desto mindre påverkas gränsskiktet av det tortuösa flödet som närvaron av partiklar orsakar. Hursomhelst har gränsskiktet som antaget inte visat sig påverka temperaturfältet nämnvärt i det relevanta området.

Vad beträffar bedömningen av maximal cellstorlek hos meshen refereras det till Cloete et al. (2015, 158), som konstaterade att normaliserad cellstorlek baserad på partikeldiameter för meshsjälvtändighet i en tvådimensionell mesh skiljer sig mer än en storleksordning över deras studerade partikeldiameterintervall 200-1000 μm . Kravet på meshsjälvtändighet var 7,8 partikeldiametrars cellstorlek för partikeldiametrar om 200 μm , och 98,4 för 1000 μm . Strax dessförinnan fann Li et al. (2014, 178) för deras uppställning att tredimensionella meshar uppvisade bättre meshkonvergens än tvådimensionella.

Meshsjälvtändighetscellstorleken som funktion av partikelstorlek är alltså tydligt olinjär med ökande derivata. Extrapoleringen till 120 mm maximal cellsida för den simulerade partikeldiametern 1,2 mm får anses konservativ, speciellt med tanke på tredimensionalitetens överordning. Dessutom har beräkningsresurserna varit begränsade till endast 1 nod om 20 kärnor på klustret. Nämnas bör i detta sammanhang att en Lagrangsk partikelspårningsrutin för framtagande av dispersionskoefficient och effektiv termisk konduk-

tivitet hade varit av intresse, men uteslöts med de givna förutsättningarna. Empiriska formuleringar för effektiv termisk konduktivitet, t.ex. av Basu (2006, 193), ansågs inte bidra med väsentligt ny information. Simuleringar av det tredimensionella, transienta och granulära multifasflödesfallet är extremt krävande, och då makroskopisk upplösning förväntas med den implementerade meshen på den beskrivna grunden, är dess grovhet befogad. Särkilt detaljerad upplösning har ändock inte uppnåtts, och isaritmeterna kan konstateras vara ojämna.

En av de kraftigare förenklingarna i examensarbetet är värmekällan, eller snarare frånvaron av värmesänkor. Fluidiserade bäddar inbegriper en viss komplexitet och praxis är i många avseenden att förlita sig på empiri. Dessutom är kemisk kinetik och termokemi typiskt sådant som måste modelleras för att erhålla optimalt fysikaliska resultat. I pannan finns också värmesänkor i form av devolatiliserings- och torkningsregioner, och även förgasningsregionen är något endotermisk beroende på hur syrefattig miljön är. Trots allt detta är det möjligt att fånga värmeöverföringen utifrån rimliga approximationer.

Ståndpunkten är att värmekällors och -sänkors storlek och position inte är kritiska parametrar i denna undersökning, eftersom temperaturens homogenitet är central för studien och inte så mycket dess magnitud. Temperaturen är högst nära randen och minskar kraftigt inom två decimeter in i domänet. Dessa temperaturvärden är inte plottade i resultaten då temperaturspridningen i merparten av domänet eftersöks och denna är i behov av så representativ skala som möjligt. Noteras bör att temperaturens faktiska magnitud i plottarna är betydligt lägre än antagna 1123 K vid NFS. Där inloppet möter Dirichletranden uppenbarar sig ofysikalitet då den avgränsande Dirichletranden inte representerar temperaturen i det verkliga fallet. Detta problem är dock kontrollerat och dess ofysikalitet propagerar försumbart på domänskala, och behålls i området som inte plottas.

De två delfallen där $b = 150$ mm presenterar något högre temperatur precis under skiljeväggen, vilket förefaller vara en konsekvens av den närvarande värmekällan och stagnerande flöde som inte transporterar värmen vidare. Dessa fall har fördelen att kompositionen i den ursprungliga zon A blir mindre påverkad av det nya fluidiseringsmediet i zon B. Att minst temperaturvariation i det plottade området återfinns hos delfallet där $H = 450$ mm och $b = 20$ mm är något kontraintuitivt då en större öppning borde ge mer värmeöverföring, men det observeras att temperaturtoppen i den re-

levanta merparten är lägst för detta delfall. Detta kan också tyda på att öppningshöjden är fullt tillräcklig i allmänhet redan vid 450 mm p.g.a. den stora värmeöverföringen i fluidiserade bäddar, och att större öppningar ger försumbara förbättringar, eller t.o.m. som här en försämring.

Interfasvärmeöverföringen spelar en avgörande roll för värmeöverföringen i sin helhet. Simuleringar av fallet med nollställd volymetrisk interfasvärmeöverföringskoefficient gav kraftiga temperaturtoppar högt i förbränningsregionen som kan ses i fig. A.1-4 i bilaga A, med en synnerligen låg värmeöverföring under skiljeväggen. Detta bekräftar ytterligare den väletablerade teorin att värmeöverföring som härrör från bäddmaterialtransport är eminent, i alla fall med Gunns uttryck för Nusselts tal för partiklar i fluidiserade bäddar i ekv. 2.31, som har både analytisk och experimentell grund. Andra modeller som passar sig för laminära förhållanden inkluderar Ranz & Marshalls (1952, 143), samt modifieringen därav av Hughmark (1967, 1220-1221). Deras lämplighet för granulära flöden är däremot diskutabel.

I realiteten tyder fluidiserade bäddars effektiva värmeöverföring på att det studerade konceptet kan tänkas vara genomförbart. CFD-simuleringar är inte sällan oabsoluta, utan relativa, varvid variation av konstruktionsparametrar och anhörande relativa resultat ofta är av störst intresse. Det är viktigt att modellera med fysikaliska indata, men med Ockhams rakkniv som vetenskaplig princip bör mångfald inte förutsättas om så ej är nödvändigt. Detta gäller framför allt inte sådant som a priori känns till som något ovidkommande att försöka kvantifiera perfekt, som exempelvis värden och positioner på värmekällor och -sänkor i en studie som inte inkluderar kemiska reaktioner. Den huvudsakligen anledningen till att diffusion modelleras är eftersom den bidrar direkt till värmeöverföringen hos denna fluidiserade bädd med flera gaskomponenter och en initialt väldefinierad gränssyta mellan dem. Även om detta bidrag intuitivt är förhållandevis litet jämfört med det från partikelfasens masstransport, är det okänt hur mycket.

5. Slutsats

Examensarbetet åsyftade att studera värmeöverföringen mellan två zoner i en bubblande fluidiserad bädd, där en av zonerna är kraftigt exoterm. Temperaturfälten som erhållna i symmetriplanet för de fyra simulerade delfallen i detta examensarbete uppvisar, exkluderat områden två decimeter från Dirichletränder, en maximal temperaturdifferens om 15°C . Lägst maximal temperaturdifferens noterades i delfallet med öppningshöjd 450 mm och skiljeväggjocklek 20 mm, under 9°C . Interfasvärmeöverföringen med den använda modellen i studien konstaterades vara kritisk för den totala värmeöverföringen. Bubblande fluidiserad bäddkaraktistik och därtill lämplig expanderad bäddhöjd har observerats med fluidiseringshastigheten 1 m/s och partikeldiametern 1,2 mm.

Kraftiga temperaturgradienter har uppstått nära Dirichletväggar med specificerad fix temperatur på 1123 K. Merparterna av domänen har i alla fyra delfall temperaturer mellan 874 K och 904 K. Orsaken till denna diskrepans bör undersökas vidare i framtida studier med värmekällor och -sänkor kalibrerade utifrån termokemiska beräkningar för mer absoluta resultat. Ett förslag är även att med mer beräkningsresurser simulera hela den flerstegade kraftvärmepannan för att undvika ofysikaliska randvillkor, med en mer passande backflödestemperatur, och med en finare mesh för jämnare och mer detaljerad upplösning. Ett annat förslag är att jämföra hur olika interfasvärmeöverföringsmodeller påverkar värmeöverföringen. Därutöver föreslås också att, om beräkningsresurserna så tillåter, implementera en Lagrangsk partikelspårningsrutin för direkt beräkning av dispersionskoefficienten och den effektiva termiska konduktiviteten. Relaterat till det studerade konceptet är också potentiella hållfasthetskomplikationer i skiljeväggen beroende på dess dimensionering, vilket bör granskas.

Referenser

Afrooz, I. E., Sinnathambi, C. M., Chuang, D. L., Karuppanan, S. (2017). CFD simulation of bubbling fluidized bed: Effects of bed column geometry on hydrodynamics of gas–solid mixing. *Mat.-wiss. u. Werkstofftech* 48(3-4), pp. 226-234.

Anantharaman, A., Cocco, R. A., Chew, J. W. (2018). Evaluation of correlations for minimum fluidization velocity (U_{mf}) in gas-solid fluidization. *Powder Tech.* 323, pp. 454-485.

Anderson, T. R., Hawkins, E., Jones, P. D. (2016). CO₂, the greenhouse effect and global warming: from the pioneering work of Arrhenius and Callendar to today's Earth System Models. *Endeavour* 40(3), pp. 178-187.

Bandara, J. C., Eikeland, M. S., Moldestad, B. M. E. (2017). Analyzing the effects of particle density, size and size distribution for minimum fluidization velocity with Eulerian-Lagrangian CFD simulation. I Jonsson M. T. (red.), *Proc. 58th. Conf. Simul. Model.*, pp. 60-65. Linköping: LiU E-Press.

Basu, P. (2006). *Combustion and Gasification in Fluidized Beds*. Boca Raton, FL: CRC.

Bates, R. B., Ghoniem, A. F., Jablonski, W. S., Carpenter, D. L., Altantzis, C., Garg, A., Barton, J. L., Chen, R., Field, R. P. (2017). Steam-air blown bubbling fluidized bed biomass gasification (BFBBG): Multi-scale models and experimental validation. *AIChE J.* 63(5), pp. 1543-1565.

Bird, R. B., Stewart, W. E., Lightfoot, E. N. (2002). *Transport Phenomena*, 2:a utg. New York, NY: Wiley.

Bittanti, S., Bolzern, P., Campi, M., De Marco, A., Panseri, R., Poncia, G., Prandoni, W. (1996). A model of a bubbling fluidized bed combustor for the estimation of the char mass via extended Kalman filter. *IFAC Proc. Volumes* 29(1), pp. 6909-6914.

Boemer, A., Qi, H., Renz, U. (1997). Eulerian simulation of bubble formation at a jet in a two-dimensional fluidized bed. *Int. J. Multiphase Flow* 23(5), pp. 927-944.

Çengel, Y. A., Boles, M. A. (2011). *Thermodynamics: An Engineering - Second Edition*. New York, NY: McGraw-Hill.

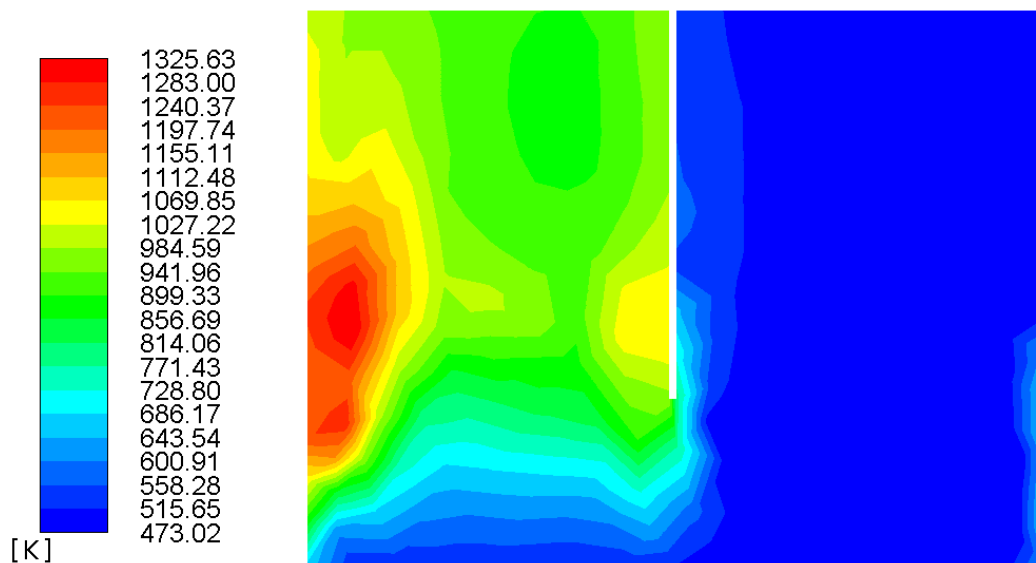
- Cloete, S., Johansen, S. T., Amini, S. (2015). Grid independence behaviour of fluidized bed reactor simulations using the Two Fluid Model: Effect of particle size. *Powder Tech.* 269, pp. 153-165.
- DallaValle, J. M. (1948). *Micromeritics: The Technology of Fine Particles*. New York, NY: Pitman.
- Ding, J., Gidaspow, D. (1990). A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow. *AIChE J.* 36(4), pp. 523-538.
- Einstein, A. (1916). Die Grundlage der allgemeinen Relativitätstheorie [*The Principle of Relativity - Original Papers*, übers. M. N. Saha & S. N. Bose, 1920, University of Calcutta]. *Annalen der Physik* 354(7), pp. 769-822.
- Feng, Y, Swenser-Smith, T., Witt, P. J., Doblin, C., Lim, S., Schwarz, M. P. (2012). CFD modeling of gas–solid flow in an internally circulating fluidized bed. *Powder Tech.* 219, pp. 78-85.
- Fluent (2003). *FLUENT 6.1 User's Guide*. Lebanon, NH: Fluent.
- Fourier, J. (1822). *Théorie analytique de la chaleur* [*The Analytical Theory of Heat*, übers. A. Freeman, 1878, Cambridge UP]. Paris: Firmin Didot.
- Gao, J., Lan, X., Fan, Y., Chang, J., Wang, G., Lu, C., Xu, C. (2009). CFD modeling and validation of the turbulent fluidized bed of FCC particles. *AIChE J.* 55(7), 1680-1694.
- Garside, J., Al-Dibouni, M. R. (1977). Velocity-voidage relationships for fluidization and sedimentation in solid-liquid systems. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* 16(2), pp. 206-214.
- Gidaspow, D., Bezburuah, R., Ding, J. (1992). Hydrodynamics of circulating fluidized beds: Kinetic theory approach.
- Goldhirsch, I. (2008). Introduction to granular temperature. *Powder Tech.* 182(2), pp. 130-136.
- Gunn, D. J. (1978). Transfer of heat or mass to particles in fixed and fluidised beds. *Int. J. Heat Mass Transfer* 21(4), pp. 467-476.
- Gustavsson, C., Hulteberg, C. (2016). Co-production of gasification based biofuels in existing combined heat and power plants – Analysis of production capacity and integration potential. *Energy* 111, pp. 830-840.
- Hughmark, G. A. (1967). Mass and heat transfer from rigid spheres. *AIChE J.* 13(6), pp. 1219-1221.
- Jenkins, J. T., Savage, S. B. (1983). A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles. *J. Fluid Mech.* 130, pp. 187-202.

- Kolev, N. I. (2007). *Multiphase Flow Dynamics 1 - Fundamentals*, 3:e utg. Berlin: Springer.
- Krishna, R., Wesselingh, J. A. (1997). The Maxwell-Stefan approach to mass transfer. *Chem. Eng. Sci.* 52(6), pp. 861-911.
- Kumar, R., Pandey, K. M. (2012). CFD Analysis of circulating fluidized bed combustion. *Eng. Sci. Tech. Int. J.* 2(1), 163-174.
- Kunii, D., Levenspiel, O. (1991). *Fluidization Engineering*, 2:a utg. Boston, MA: Butterworth-Heinemann.
- Li, T., Gel, A., Pannala, S., Shahnam, M., Syamlal, M. (2014). CFD simulations of circulating fluidized bed risers, part I: Grid study. *Powder Tech.* 254, pp. 170-180.
- Lun, C. K. K., Savage, S. B., Jeffrey, D. J., Chepuruiy, N. (1984). Kinetic theories for granular flow: Inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield. *J. Fluid Mech.* 140, pp. 223-256.
- Merk, H. J. (1959). The macroscopic equations for simultaneous heat and mass transfer in isotropic, continuous and closed systems. *Appl. Sci. Res.* 8(1), pp. 73-99.
- Mineto, A. T., de Souza Braun, M. P., Navarro, H. A., Cabezas-Gómez, L. (2014). Influence of the granular temperature in the numerical simulation of gas-solid flow in a bubbling fluidized bed. *Chem. Eng. Comm.* 201(8): 1003-1020.
- Mitchell, J. F. B. (1989). The “Greenhouse” effect and climate change. *Rev. Geophys.* 27(1), pp. 115-139.
- Monchick, L., Mason, E. A. (1961). Transport properties of polar gases. *J. Chem. Phys.* 35(5), pp. 1676-1697.
- Ogawa, S., Umemura, A., Oshima, N. (1980). On the equations of fully fluidized granular materials. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik* 31(4), pp. 483-493.
- Oka, S. (2004). *Fluidized Bed Combustion*. New York, NY: Marcel Dekker.
- Patankar, S. V., Spalding, D. B. (1972). A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *Int. J. Heat Mass Transfer* 15(10), pp. 1787-1806.
- Ranz, W. E., Marshall, W. R., Jr. (1952). Evaporation from drops - Part I. *Chem. Eng. Progress* 48(3), pp. 141-146.
- Redlich, O., Kwong, J. N. S. (1949). On the thermodynamics of solutions. V. An equation of state. Fugacities of gaseous solutions. *Chem. Rev.* 44(1), pp. 233-244.
- Rhie, C. M., Chow, W. L. (1983). Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. *AIAA J.* 21(11), pp. 1525-1532.

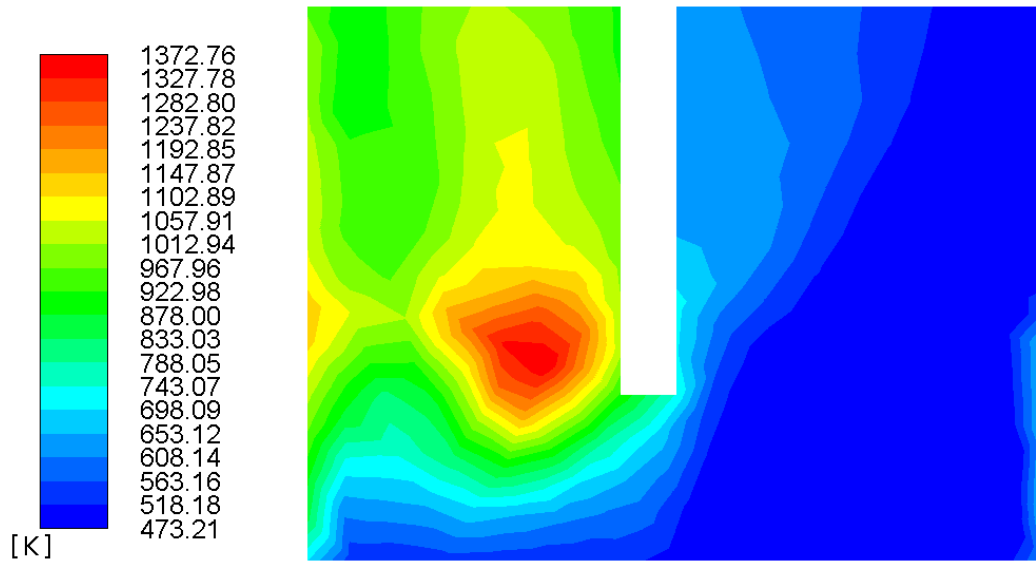
- Richardson, J. F., Zaki, W. N. (1954). Sedimentation and fluidization: Part I. *Trans. Inst. Chem. Eng.* 32, pp. 35-53.
- Rowe, P. N., Partridge, B. A., Lyall, E., Ardran, G. M. (1962). Bubbles in fluidized beds. *Nature* 195(4838), pp. 278-279.
- SCB (2017). *El-, gas- och fjärrvärmeförsörjningen 2016, Definitiva uppgifter*. Stockholm: SCB.
- Schaeffer, D. G. (1987). Instability in the evolution equations describing incompressible granular flow. *J. Diff. Equ.* 66(1), pp. 19-50.
- Schlichting, H. (1979). *Boundary-Layer Theory*, 7:e utg, övers. J. Kestin. New York, NY: McGraw-Hill.
- Shah, S., Myöhänen, K., Kallio, S., Hyppänen, T. (2015). CFD simulations of gas–solid flow in an industrial-scale circulating fluidized bed furnace using subgrid-scale drag models. *Particuology* 18, pp. 66-75.
- Stern, N. (2007). *The Economics of Climate Change: The Stern Review*. Cambridge: Cambridge UP.
- Syamlal, M., O'Brien, T. J. (1989). Computer simulation of nubbles in a fluidized bed. *AIChE Symp. Ser.* 85(270), pp. 22-31.
- Syamlal, M., Rogers, W., O'Brien, T. J. (1993). *MFIX Documentation Theory Guide - Technical Note*. Springfield, VA: NTIS.
- van Wachem, B. G. M., Schouten, J. C., van den Bleek, C. M., Krishna, R., Sinclair, J. L. Comparative analysis of CFD models of dense gas–solid systems. *AIChE J.* 47(5), pp. 1035-1051.
- Wan, H.-P., Chyang, C.-S., Yang, C.-S., Juch, C.-I., Lo, K.-C., Lee, H.-T. (2009). The heat release ratio and performance test at a small-scale RDF-5 bubbling fluidized bed boiler. I Yue, G., Zhang, H., Zhao, C., Luo, Z. (red.), *Proc. 20th Int. Conf. Fluidized Bed Combust.*, pp. 475-480. Peking: Tsinghua University Press.
- van der Weele, K. (2008). Granular gas dynamics: how Maxwell's demon rules in a non-equilibrium system. *Contemp. Phys.* 49(3), pp. 157-178.
- Yates, J. G., Lettieri, P. (2016). *Fluidized-Bed Reactors: Processes and Operating Conditions*. Cham: Springer.
- Zhang, N., Lu, B., Wang, W., Li, J. (2011). 3D CFD simulation of combustion in a 150 MWe circulating fluidized bed boiler. *10th Int. Conf. Circulating Fluidized Beds Fluidization Tech.*, 1-5 maj, Sunriver, OR.
- Zhao, K., Thunman, H., Pallarès, D., Ström, H. (2017). Control of the solids retention time by multi-staging a fluidized bed reactor. *Fuel Processing Tech.* 167, pp. 171-182.

Bilaga A

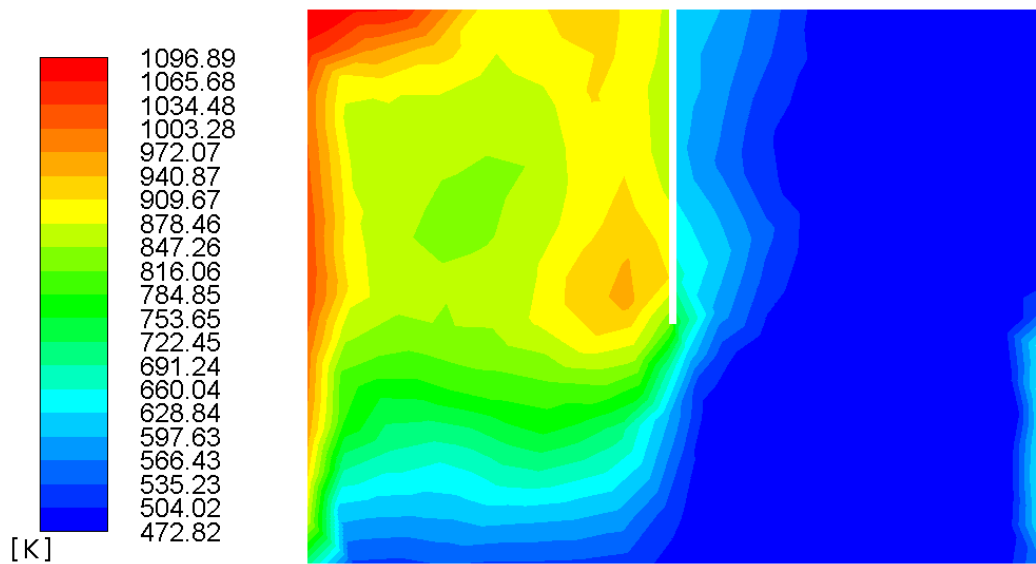
Nedan i fig. A.1-4 är gasfasens temperaturfält för de fyra delfallen med nollställd interfasvärmeöverföring upp ritade.



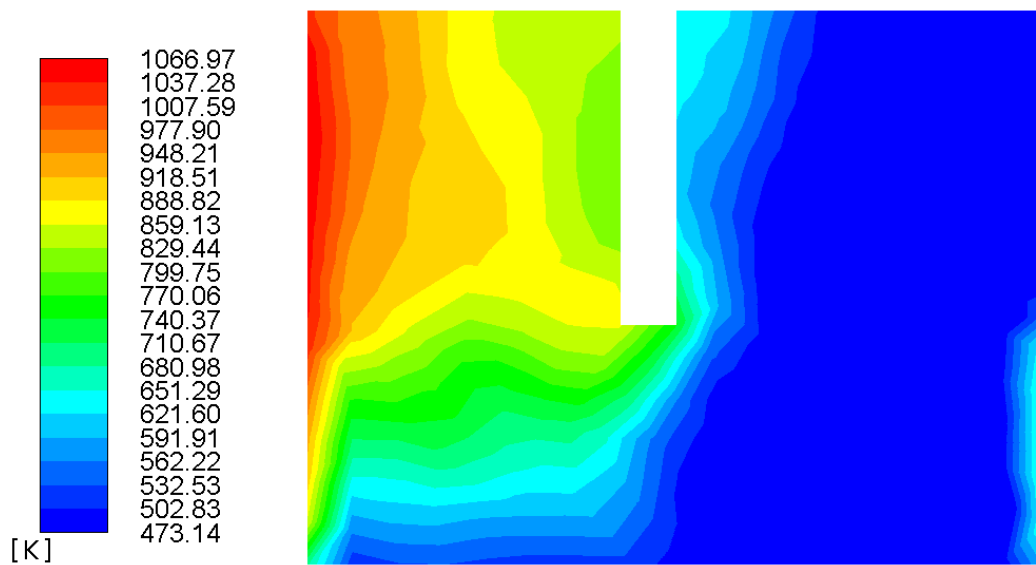
Figur A.1: Gastemperatur utan interfasvärmeöverföring, $H = 450$ mm, $b = 20$ mm.



Figur A.2: Gastemperatur utan interfasvärmeöverföring, $H = 450$ mm, $b = 150$ mm.



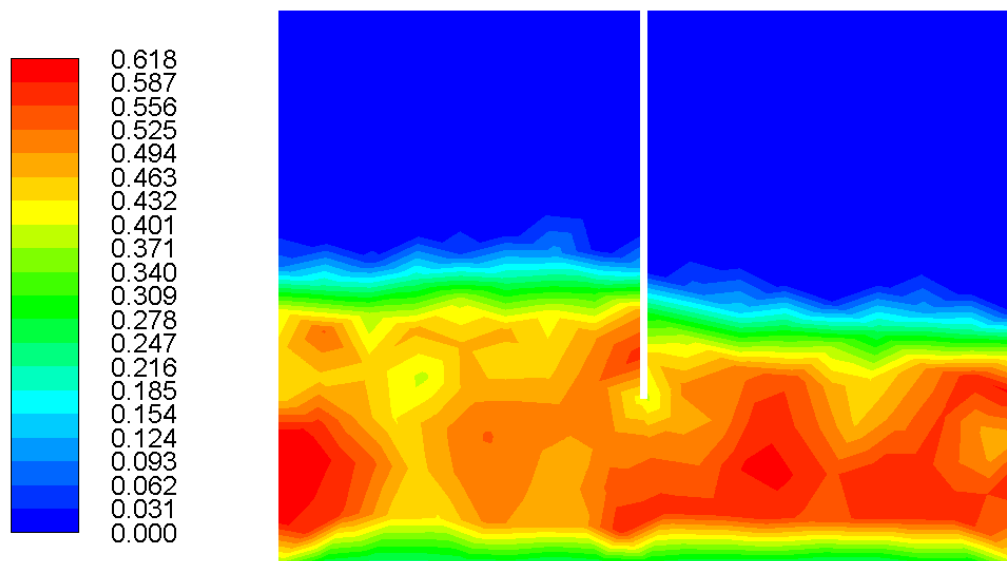
Figur A.3: Gastemperatur utan interfasvärmeöverföring, $H = 650$ mm, $b = 20$ mm.



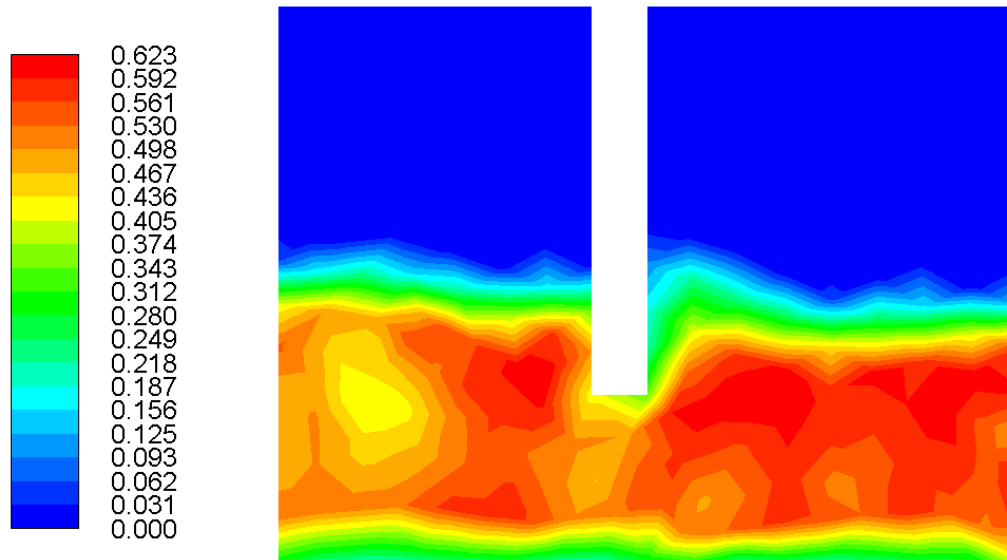
Figur A.4: Gastemperatur utan interfasvärmeöverföring, $H = 650$ mm, $b = 150$ mm.

Bilaga B

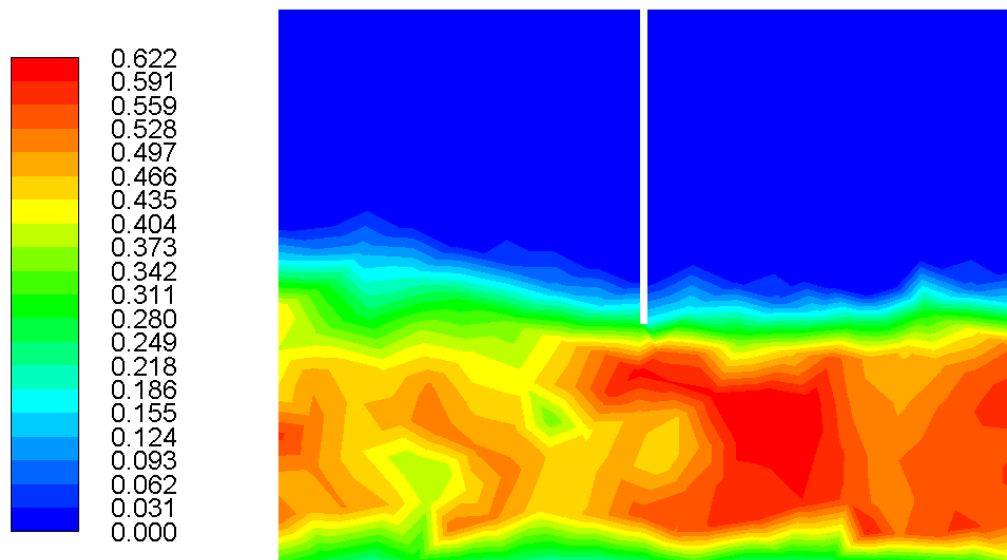
Nedan i fig. B.1-4 är partikelfasens volymfraktionsfält för de fyra delfallen med nollställd interfasvärmeöverföring uppritade.



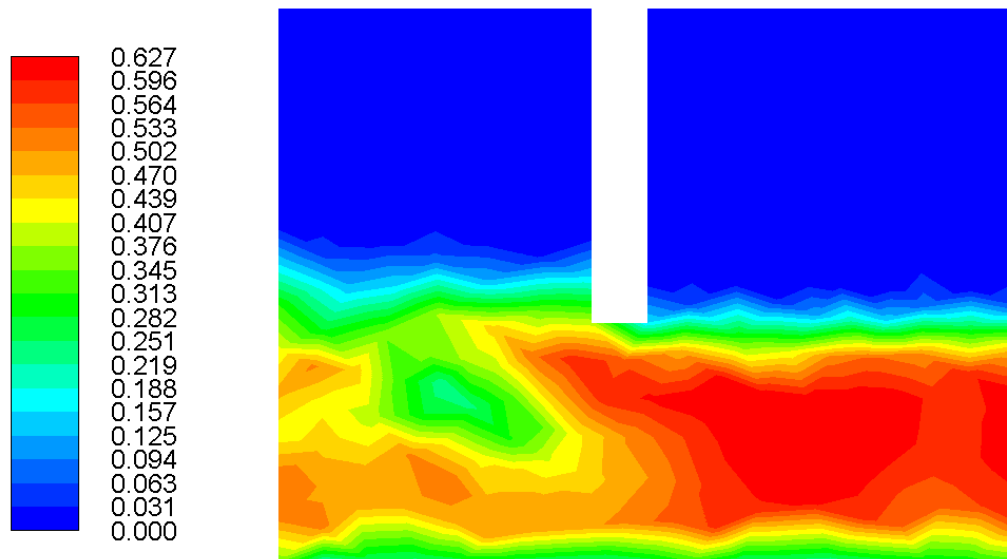
Figur B.1: Partikelvolymfraktion utan interfasvärmeöverföring, $H = 450$ mm, $b = 20$ mm.



Figur B.2: Partikelvolymfraktion utan interfasvärmeöverföring, $H = 450$ mm, $b = 150$ mm.



Figur B.3: Partikelvolymfraktion utan interfasvärmeöverföring, $H = 650$ mm, $b = 20$ mm.



Figur B.4: Partikelvolymfraktion utan interfasvärmeöverföring, $H = 650$ mm, $b = 150$ mm.