

Vorhersage der Größenverteilung von Tropfen in statischen Mischern auf Basis eines gekoppelten CFD-Populationsbilanzen-Ansatz

O. Mierka
E. Bayraktar
S. Turek



F. Platte



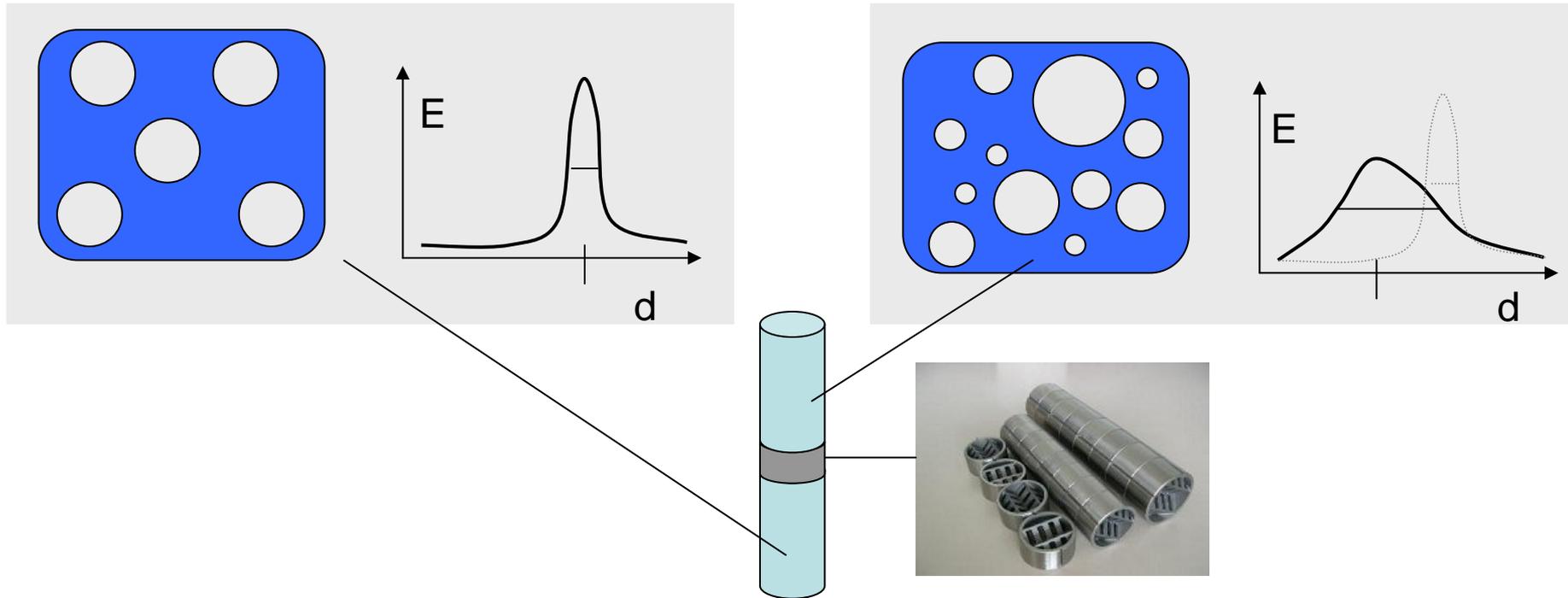
S. Hirschberg
J. Schöck



*Angewandte Mathematik und Numerik, TU Dortmund
lanus Simulation GmbH, Dortmund
Sulzer Chemtech, Winterthur Schweiz*

- Einführung in Problematik
- Anwendungsgebiete
- Einführung in PBE Modellierung
- „0-D“ Validierung (CSTR Rührkessel)
- CFD mit FeatFlow
- Ergebnisse 3D Berechnungen
 - Strömung im Kanal
 - *Merging pipes*
 - Statischer Mischer (SULZER)
- Weiteres Vorgehen
- Zusammenfassende Betrachtung

Projektziele / Einführung in die Problemstellung



- Einzelbetrachtung der Blasen/Tropfen nicht möglich
- Populationsbilanzgleichungen (PBE): Gezielte Studie von *Koaleszenz* und *Zerfall* der dispersen Phase (Turbulenzgrößen, Geschwindigkeit, Scheerrate, Dichte, Viskosität, Oberflächenspannung)
- Robuste, schnelle und genaue Vorhersage der Mischereigenschaften

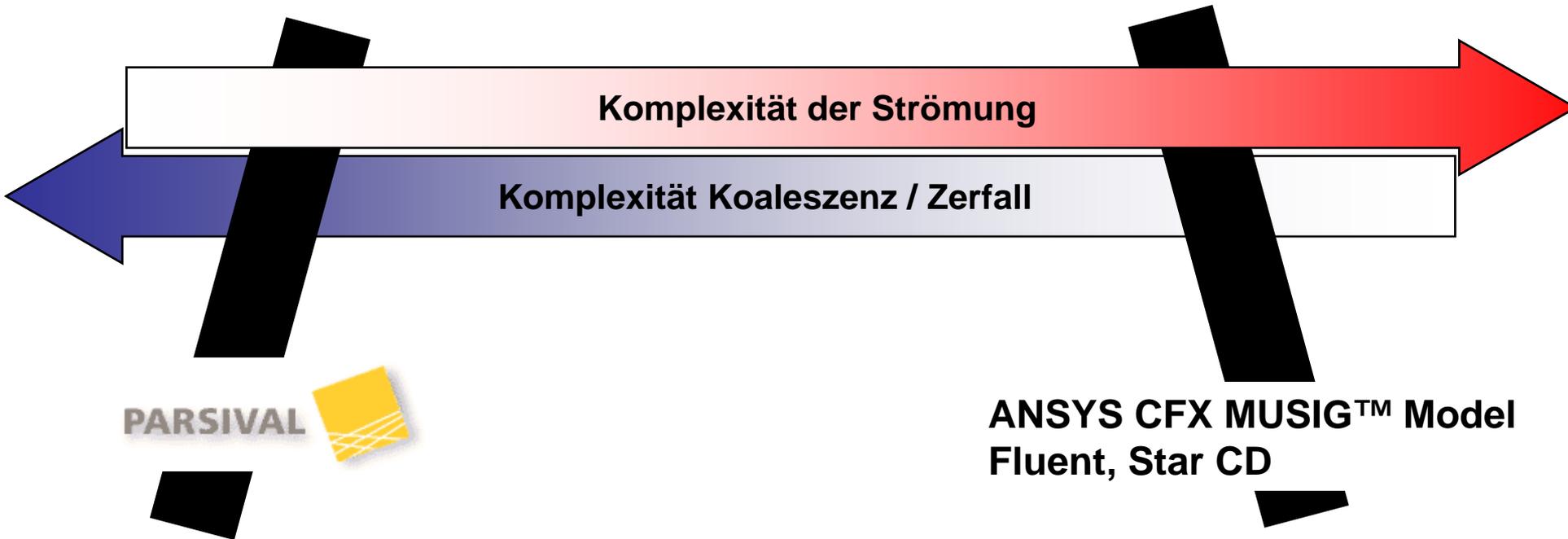
Anwendungsgebiete

- Viele technische Anwendungen
 - Lebensmitteltechnik
 - Wasseraufbereitung
 - Entsalzung von Rohöl
- Dipergatoren → größere Austauschfläche → erhöhter Stoff- und Wärmetransport, schnellere Reaktion
- Kenntnis der Größenverteilung bei der technischen Auslegung notwendig



Gekoppelter CFD PBE Ansatz

- Kommerzielle Ansätze bereits verfügbar



- Komplexe PBE Modell aber reduzierte Hydrodynamik (Kompartments)
- Detaillierte CFD Berechnung aber limitierte Klassenanzahl
- → Handlungsbedarf: Komplexe CFD kombiniert mit Vielklassen PBE

Gekoppelter CFD PBE Ansatz

CFD

$$N_{ab} = \int_{v_a}^{v_b} f \, dv \quad \text{number density}$$
$$\alpha_{ab} = \int_{v_a}^{v_b} f v \, dv \quad \text{hold up}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u}_g \nabla f = B^+ + B^- + C^+ + C^-$$

PBE

- B^+ / B^- ; C^+ / C^- : Quell- und Senkenterme für Koaleszenz (C) und Zerfall (B)
- Linke Seite: Transport und Akkumulation

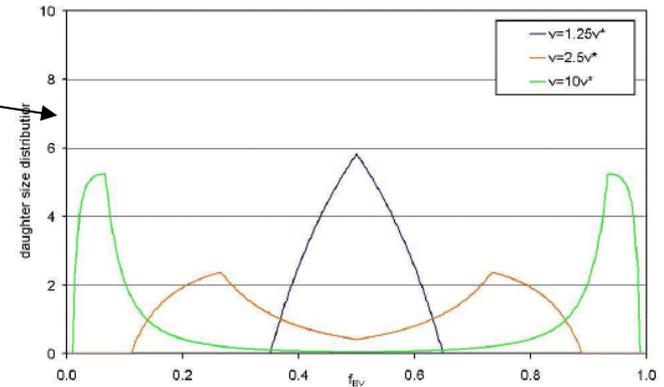
Zerfall

$$r^B(v, \tilde{v}) = K^B \Phi(v, \tilde{v})^*$$

$$K^B = 1.5(1 - \alpha_g) \left(\frac{\rho_l}{\sigma}\right)^{2.2} \varepsilon^{1.8}$$

Total breakage rate

Daughter size distribution
 $f(\rho, \sigma, \varepsilon \dots)$



Koaleszenz

$$r^C(v, \tilde{v}) = \frac{\pi}{4} (d + \tilde{d})^2 \min(u', u_{\text{crit}})^*$$

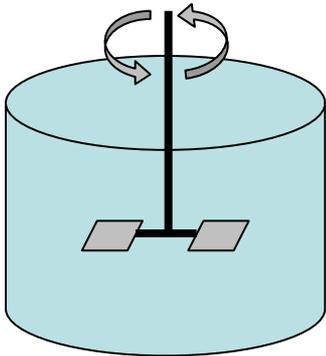
Total coalescence rate

$$u_{\text{crit}} = \sqrt{\frac{We_{\text{crit}} \sigma}{\rho_l d_{\text{eq}}}}$$

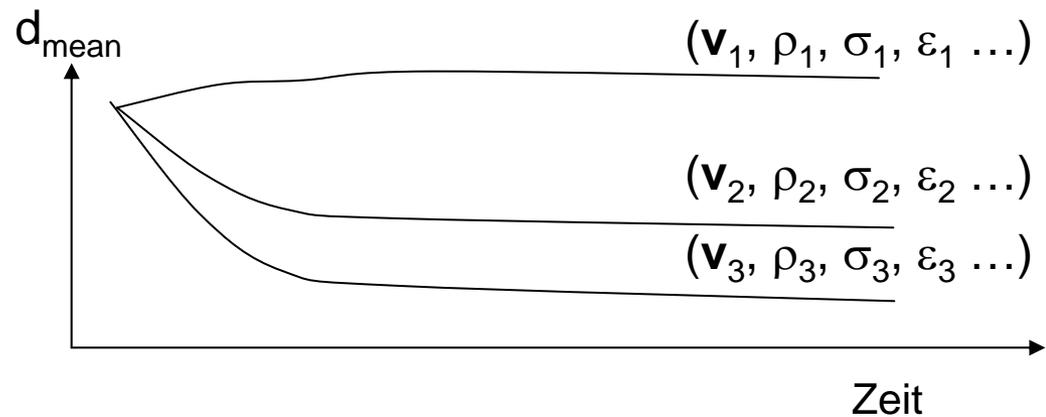
$$u' = \sqrt{2} \varepsilon^{1/3} (d\tilde{d})^{1/6}$$

„0-D“ Validierung

- CFD + PBE komplex
- Tests mit konst. ε
- Modellvalidierung für variierende ε , α
- Ziel: Vergleich Modell (Simulation) -- Experiment

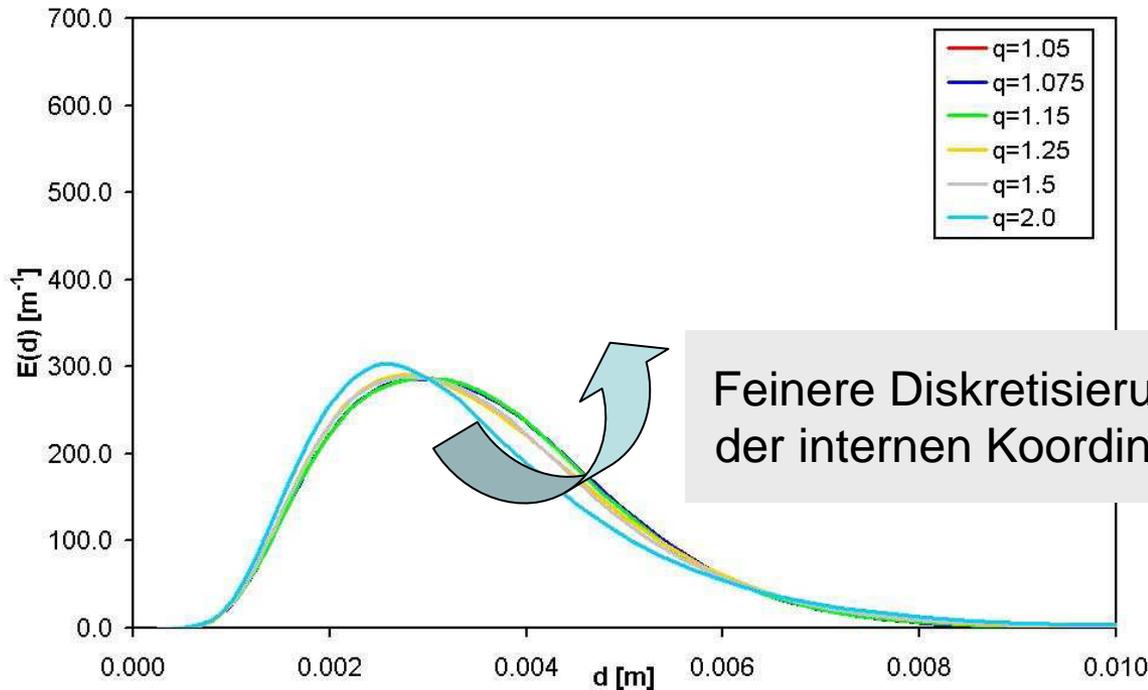
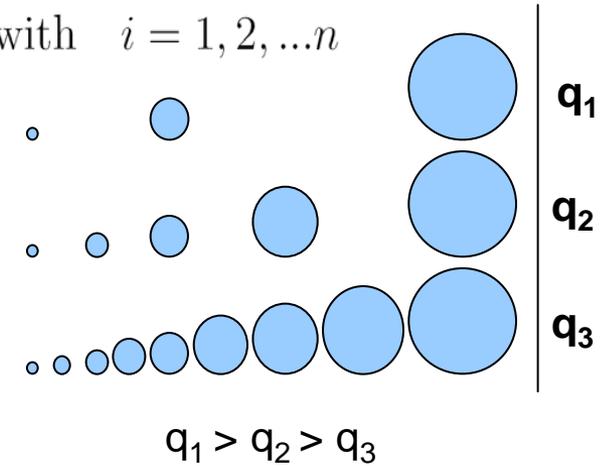


Stirred Tank Reactor (CSTR)



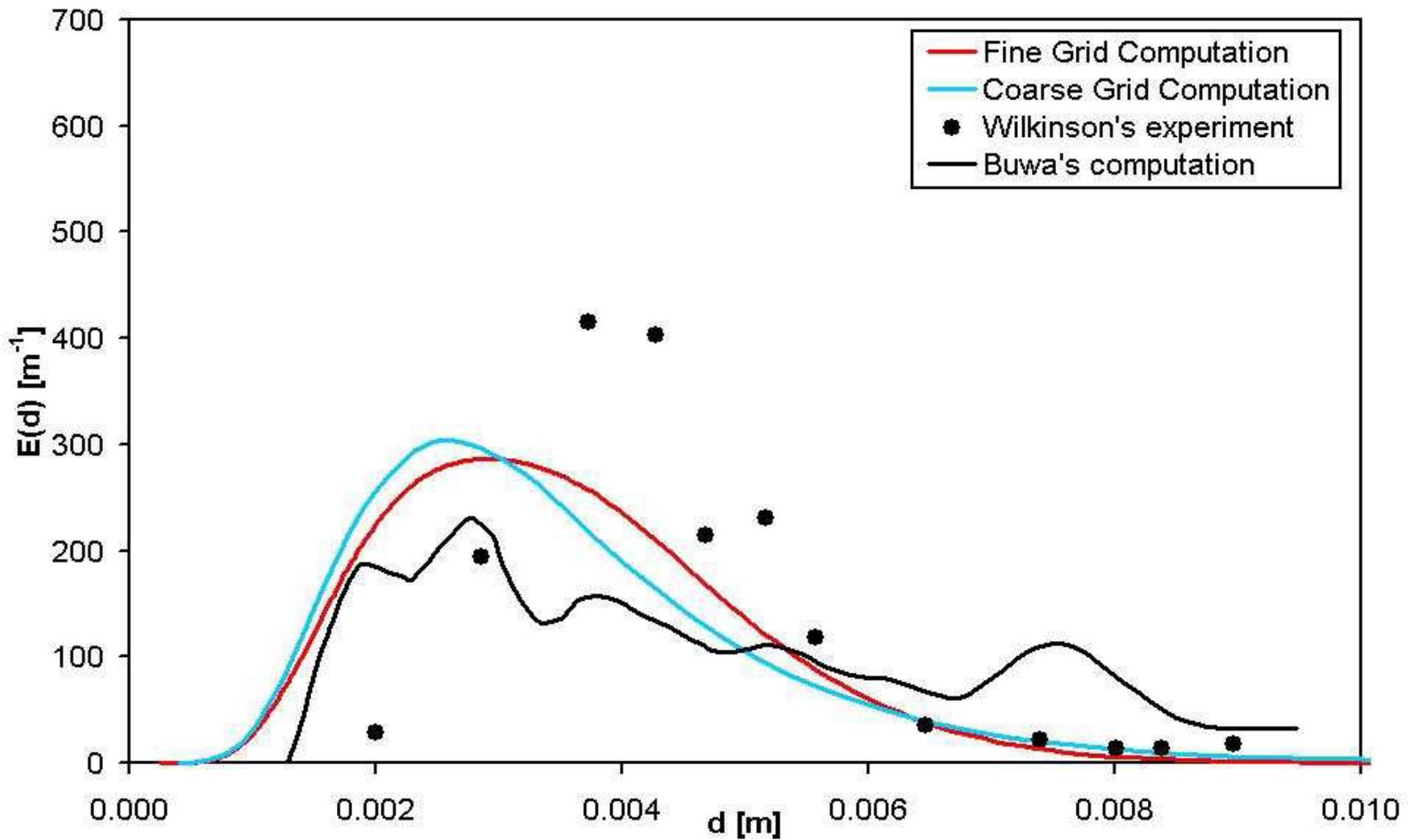
„0-D“ Validierung

- Geometrische Diskretisierung $v_i = v_{\min} q^{i-1}$ with $i = 1, 2, \dots, n$
- Einfluss Anzahl der Klassen
- Konvergenztest bzgl. Interner Koordinate



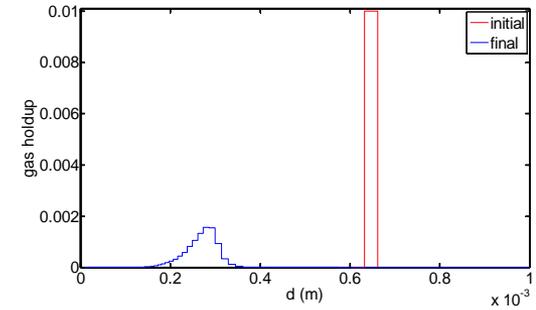
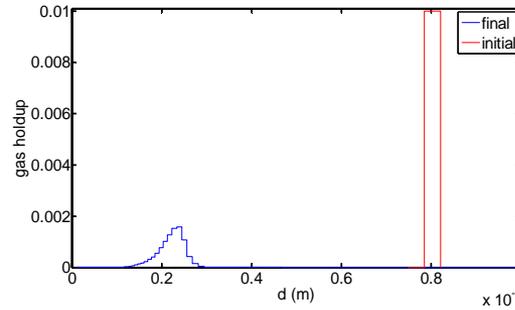
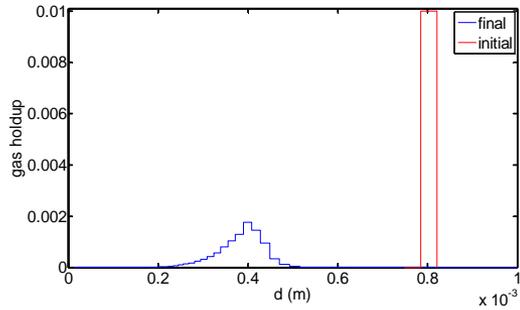
Gitterunabhängige Lösung ab > 20 Klassen

„0-D“ Validierung



→ Gute Übereinstimmung mit Experiment

„0-D“ Validierung



| Sauterdurchmesser d_{32} | <i>IANUS</i> | <i>Laakkonen et al.</i> | <i>Hu et al. *</i> |
|-------------------------------------|---------------------|--------------------------------|---------------------------|
| <i>air-water</i> | 0.358 | 0.359 | 0.447 |
| <i>Air-1-propanol</i> | 0.205 | 0.207 | 0.316 |
| <i>Air-diethylene glycol</i> | 0.250 | 0.251 | 0.598 |

(* Experimentelle Ergebnisse)

•FEM

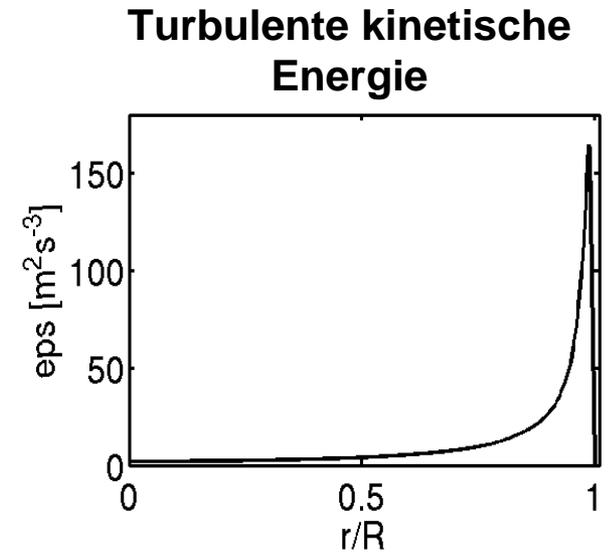
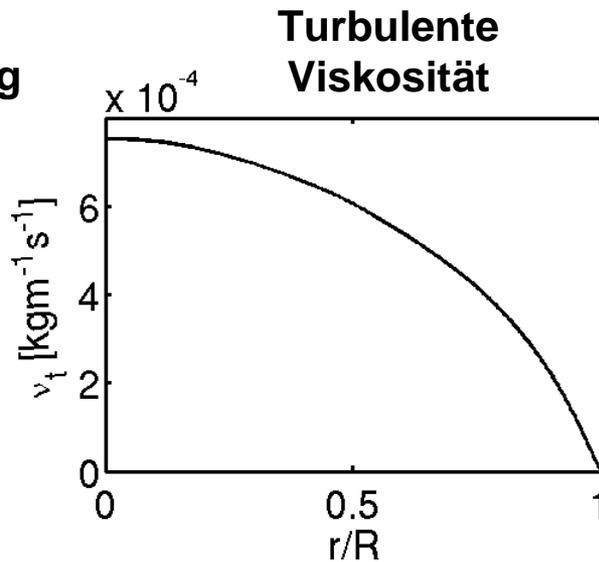
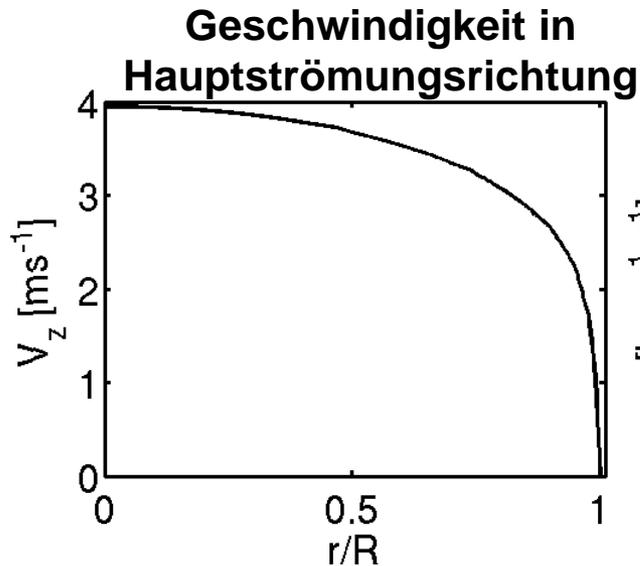
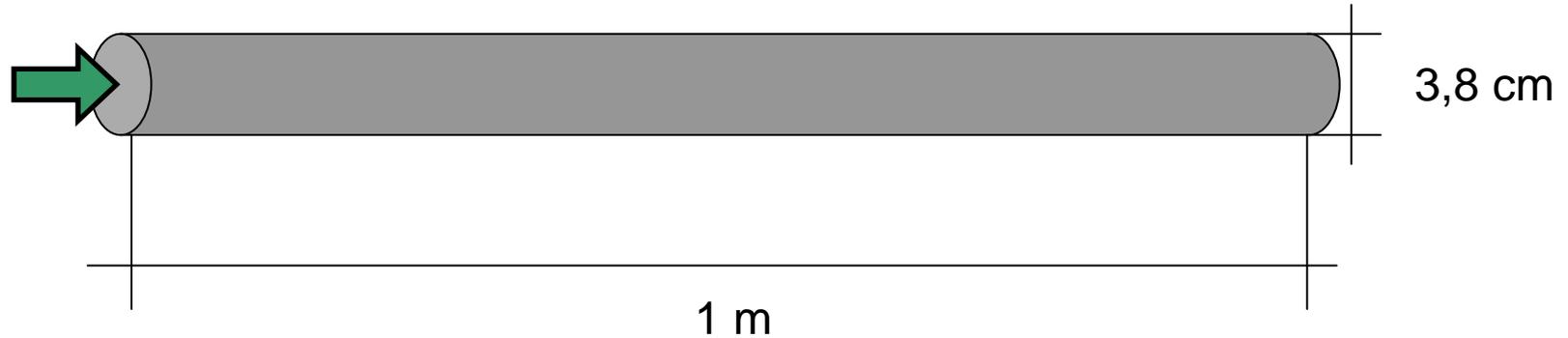
•TVD

•Multigrid

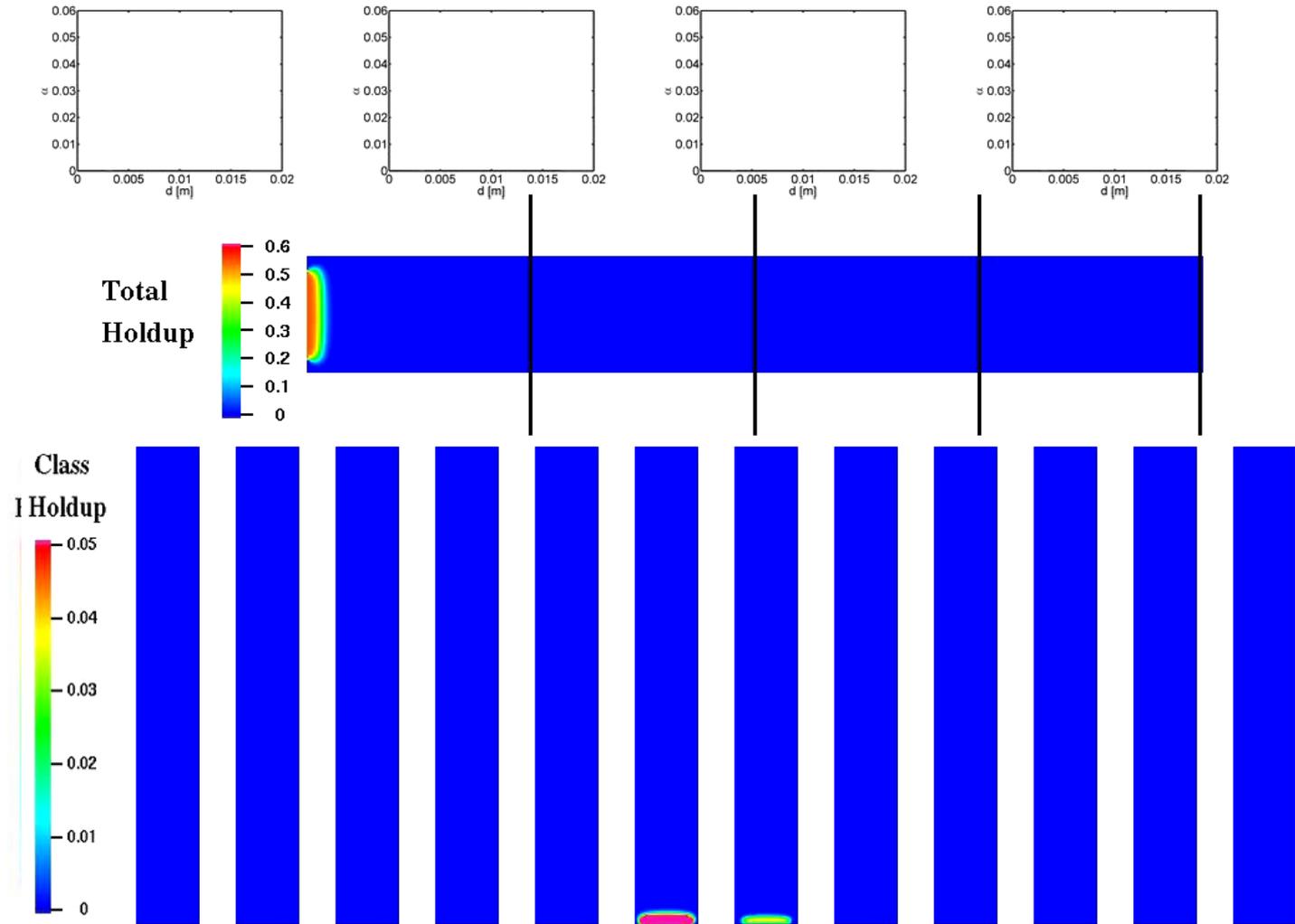
•HPC

Strömung im Kanal

- CFD Berechnung mit FeatFlow (stationär, 3D, k-eps)

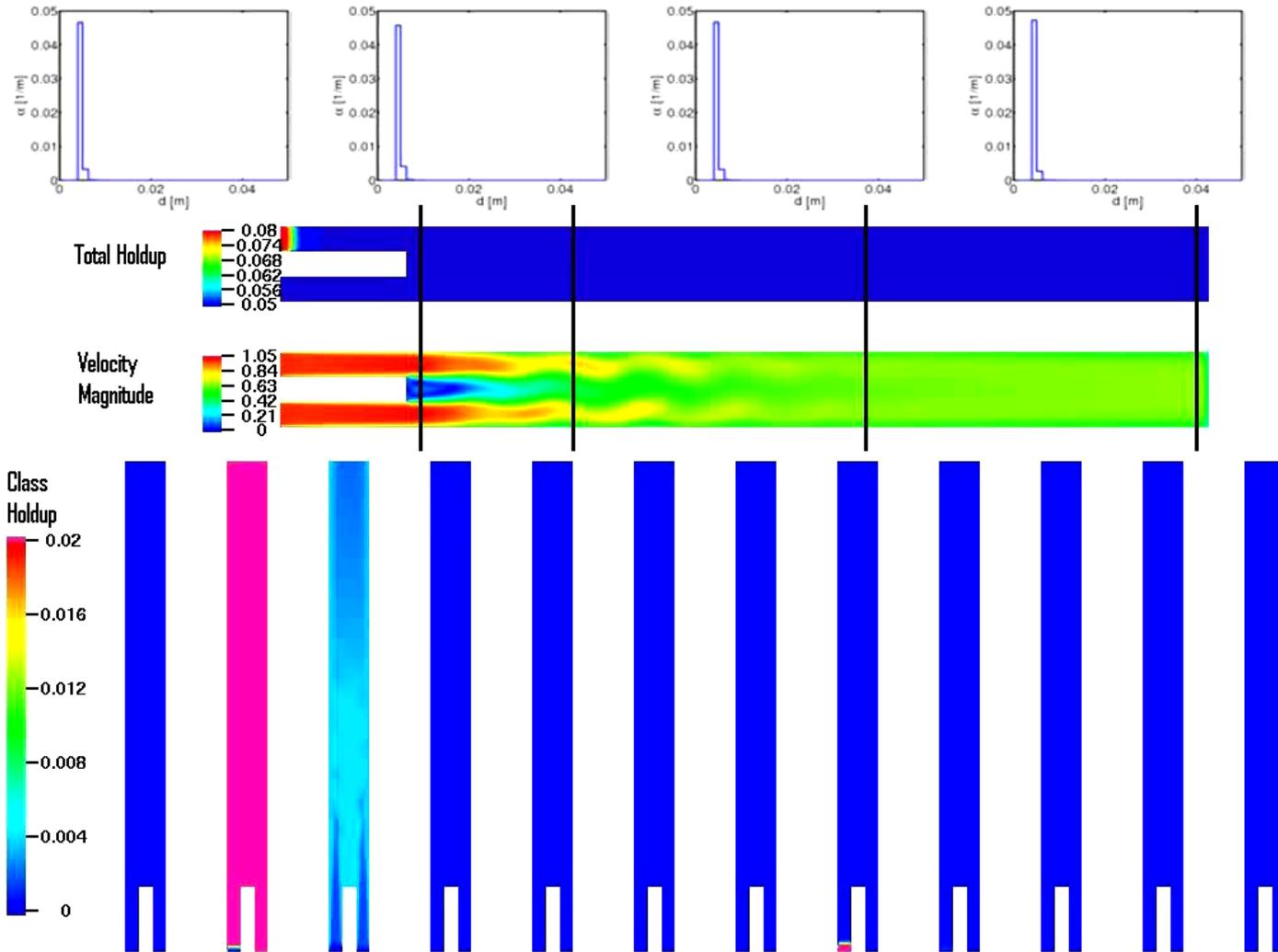


- CFD Berechnung mit FeatFlow (stationär, 3D, k-eps)



“Merging Channels”

- CFD Berechnung mit FeatFlow (instationär, 3D, k-eps)

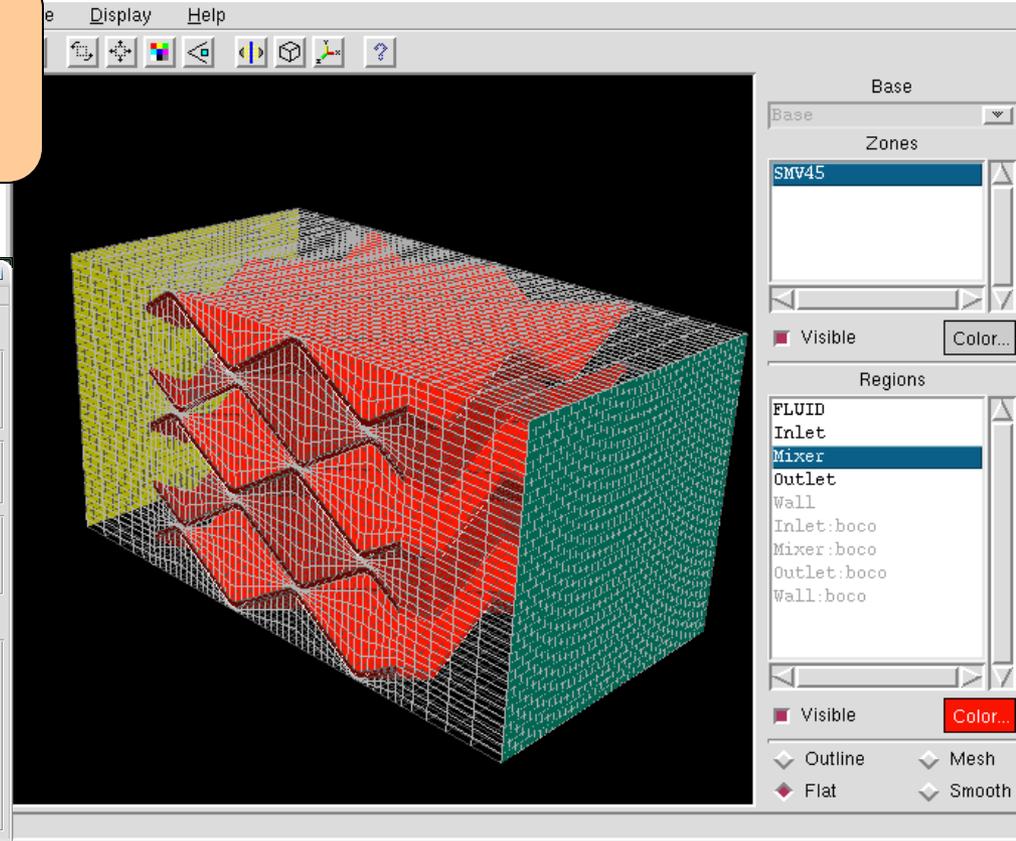
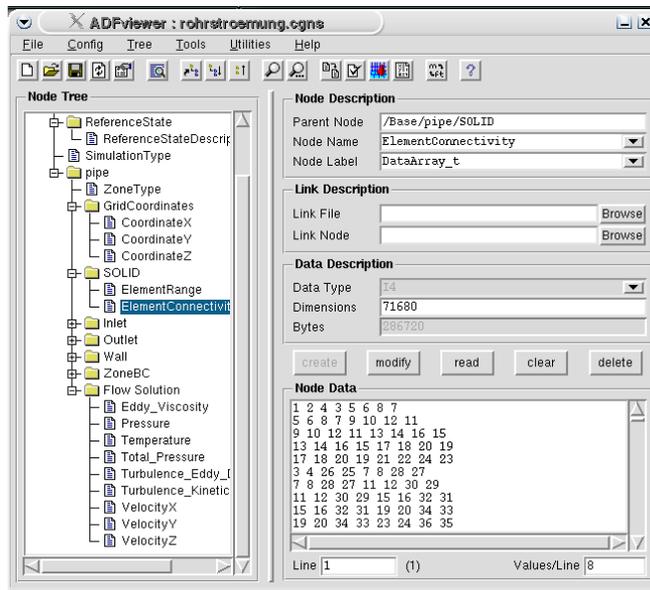


Statischer Mischer (SULZER)

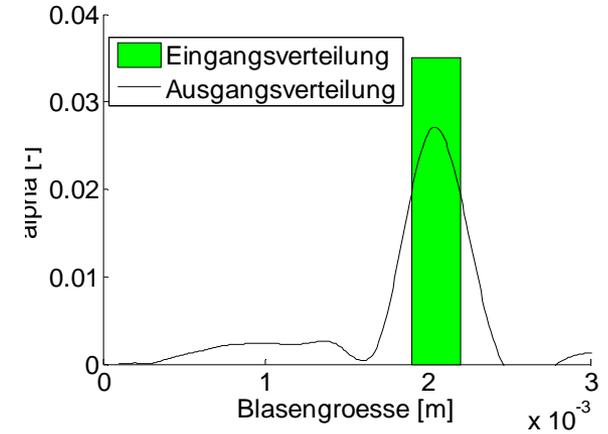
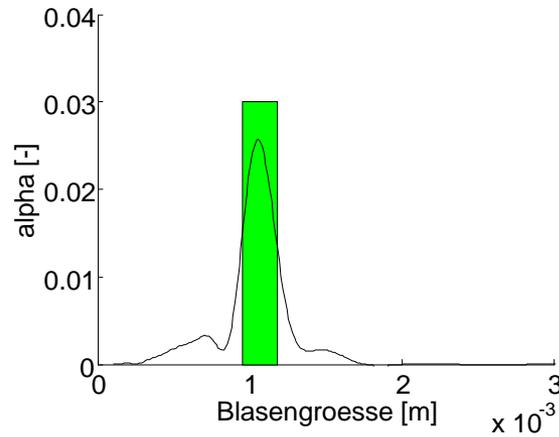
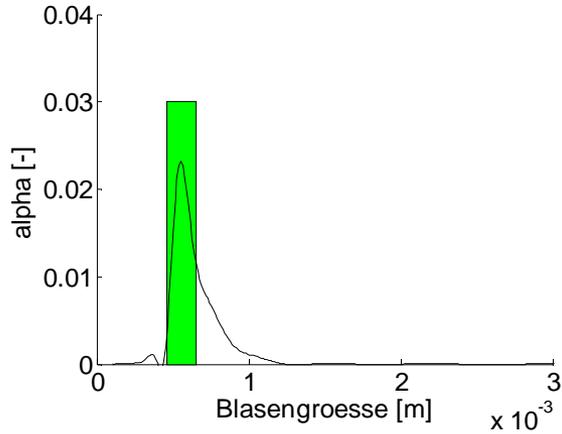
CGNS

CFX,
(Fluent, StarCD ...)

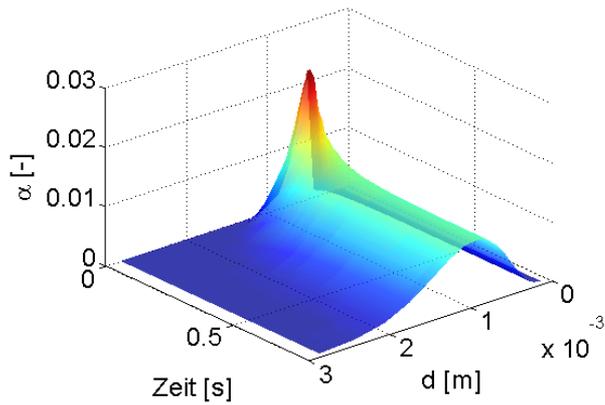
FeatFlow



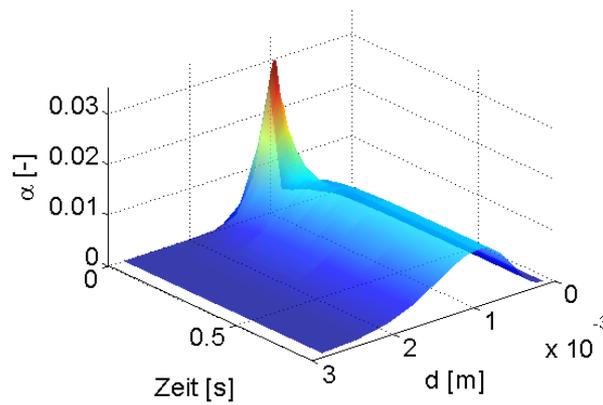
Statischer Mischer (SULZER)



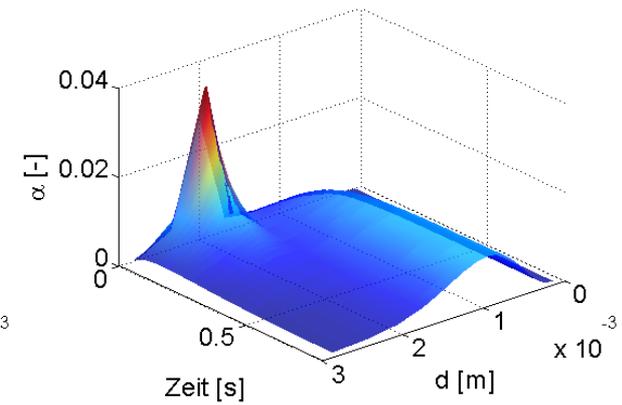
Fall 1



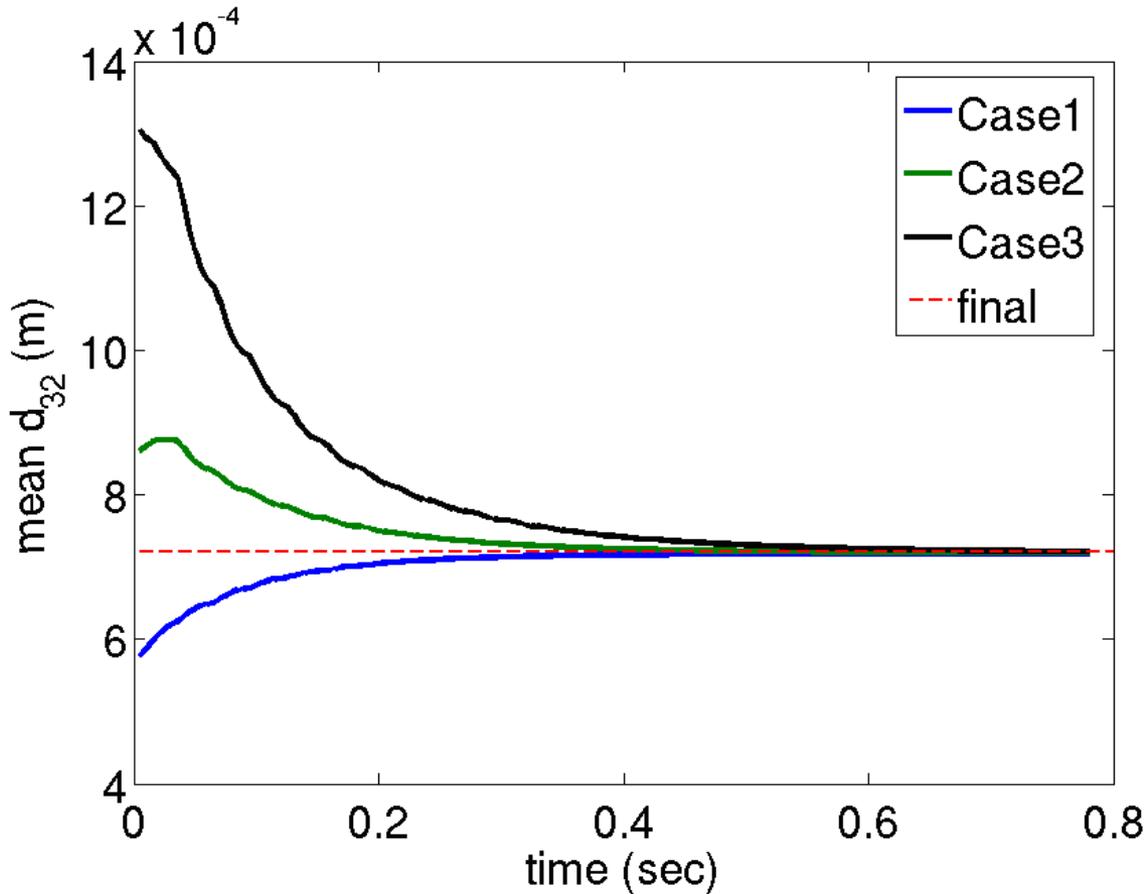
Fall 2



Fall 3

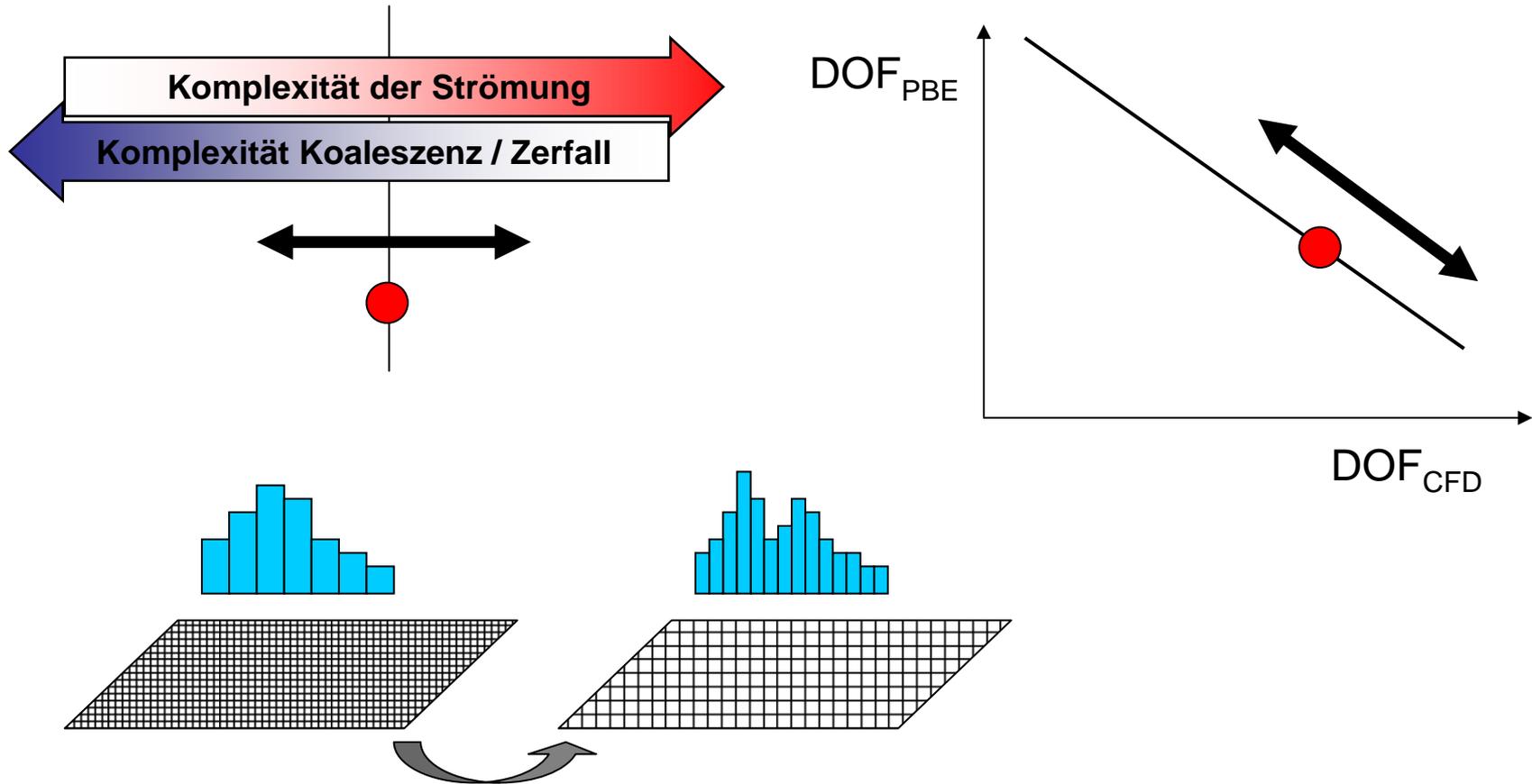


Statischer Mischer (SULZER)



Plausibilität: Gleichgewicht ist unabhängig von der Eingangsverteilung

- Modellverfeinerungen und – Erweiterungen (in Kooperation mit Sulzer)



- **Populationbilanzen teilweise schon für CFD Codes verfügbar**
- **Ausgiebig getestete Kernel Funktion (CSTR)**
- **Verschiedene Modelle verfügbar und (fast) beliebig erweiterbar**
- **Geometrische Diskretisierung + hohe Klassenzahl – Sehr genaue Beschreibung der internen Koordinate**
- **Effiziente Implementierung der PBE in FeatFlow (Anwendung moderner mathematische Methoden wie FEM, MG, HPC, TVD ...)**
- **Anbindung an kommerzielle CFD Pakete möglich (Industriewunsch)**

Ende

31.03.08
10:00 Uhr

*Jahrestreffen des
Fachausschusses Mischvorgänge*

tu technische universität
dortmund

 IANUS
Simulation

SULZER