

Neuer numerischer Ansatz zum Design von Mischer-Abscheidern

Antragsteller:

Dr.-Ing. M.W. Hlawitschka

Bearbeiter:

Jan Steinhoff, M. Eng. und Dr.-Ing. M.W. Hlawitschka

Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Hans-Jörg Bart
TU Kaiserslautern
Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik
Gottlieb-Daimler Straße
67663 Kaiserslautern

Abstract

Bisherige numerische Untersuchungen von Extraktionsapparaten beschäftigten sich maßgeblich mit Extraktionskolonnen, während der am häufigsten verwendete Extraktionsapparat, der Mischer-Abscheider, zumeist nur getrennt betrachtet wurde. In diesem Projekt wird ein Ansatz um eine multimodale Populationsbilanzmodellierung für Mischer-Abscheider verfolgt und gegen eigene Experimente validiert.

Einleitung

Mischer-Abscheider sind leicht in ihrer Verweilzeit regelbar und werden besonders gerne bei der Reaktivextraktion verwendet, die längere Verweilzeiten braucht. Insgesamt sind weltweit in der Apparatetechnik Mischer-Abscheider-Kaskaden der meist verwendete Typus in der flüssig-flüssig Extraktion. Diese sind im Betrieb häufig vergleichbar kostengünstig, umweltfreundlicher und können bei geringen Temperaturen betrieben werden, brauchen jedoch im Gegensatz zu Kolonnen einen hohen Flächenbedarf, was hauptsächlich am Abscheider liegt. Ganz allgemein gesprochen, durch seine Kostenvorteile und Flexibilität kommt dieses Verfahren in den letzten Jahren auch verstärkt in den Bereichen Umwelttechnik, der Pharmaindustrie, der Lebensmittelindustrie und der Biotechnologie zum Einsatz (Schmidt 1994).

In dieser Arbeit wird das Trennverfahren der flüssig-flüssig Extraktion im Zusammenhang mit einem horizontalen Schwerkraftabscheider experimentell und numerisch untersucht. Obwohl auf dem Gebiet der flüssig-flüssig Extraktion in horizontalen Schwerkraftabscheidern bereits geforscht wurde, ist es bis dato noch nicht möglich, mit mathematischen Modellen, die ablaufenden Vorgänge exakt zu beschreiben und zu modellieren. Um die Abläufe im Vorfeld genauer zu bestimmen bedarf es weiterer Forschung auf diesem Gebiet. Dadurch würde es möglich werden, horizontale Schwerkraftabscheider nach wissenschaftlichen Erkenntnissen auszulegen und aufwendige Vorversuche, zur Dimensionierung könnten reduziert werden. (Bart et al. 2006)

Versuchsaufbau

Die Versuche zur Bestimmung von Dispersionskeilen wurden in einer Anlage durchgeführt, die sich aufbaumäßig an der Anlage von Jeffreys et al. (Jeffreys et al. 1970) orientiert. Bei der Anlage handelt es sich um einen horizontalen Schwerkraftabscheider mit einer Länge von 580mm, einer Breite von 120mm und einer Höhe von 210mm. Der Setzler besteht aus Plexiglasplatten mit einer Dicke von 10mm für die Außenteile und 7mm für die Einbauten. Im Gegensatz zum Setzler von Jeffreys et al. (Jeffreys et al. 1970) ist die hier beschriebene Anlage in zwei Kammern unterteilt. Die erste Kammer ist die Mischkammer mit einem quadratischen Grundriss mit einer Innenkantenlänge von 100mm, und einer Höhe von 200mm. Die beiden Zuläufe für die Flüssigkeiten befinden sich auf der Stirnseite der Mischkammer in einer Höhe von 65mm. In der Trennwand zwischen Mischkammer und Abscheidekammer befindet sich ein 10mm breiter Spalt. In der zweiten Kammer, der Abscheidekammer, findet der eigentliche Extraktionsprozess statt. Diese Kammer ist 453mm lang und besitzt die gleiche Höhe und Breite wie die Mischkammer. Beide Flüssigkeiten wurden mithilfe von zwei Zahnradpumpen in die Versuchsanlage gepumpt und fließen nach dem Extraktionsvorgang über Abläufe wieder aus der Abscheidekammer. Vor den Abläufen befinden sich Einbauten die verhindern sollen, dass der Sog der Abläufe den Extraktionsvorgang in der Abscheidekammer beeinflusst. Das Wasser wird direkt wieder in die Mischkammer gepumpt. Es liegt also ein geschlossener Wasserkreislauf vor, wodurch sich immer die gleiche Wassermenge im System befindet. Durch verändern

der Wasserpumpenleistung lässt sich lediglich die Dynamik im System verändern. Die disperse Phase hingegen fließt nach dem Abscheidevorgang in einen Vorlaufbehälter aus dem es ebenfalls durch eine Zahnradpumpe wieder in die Mischkammer gepumpt wird.

Numerische Modellierung

In diesem Abschnitt werden die Grundzüge der verwendeten Gleichungen beschrieben. Eine genaue Erläuterung des als Basis genutzten OpenFOAM Solvers „multiphaseEulerFoam“ ist in Wardle & Weller (Wardle, Weller 2013) zu finden.

Euler-Euler Mehrphasenansatz

Der Euler-Euleransatz erfasst die einzelnen Phasen als einander durchdringende kontinuierliche Phasen. Das entsprechende Gleichungssystem für inkompressible, isotherme Strömungen wird dabei durch die Massenerhaltungs- und die Impulserhaltungsgleichung, je Phase n , aufgespannt. In Wardle & Weller (Wardle, Weller 2013) wurde es für Grenzflächenkompressionen erweitert.

$$\frac{\partial \alpha_n}{\partial t} + \vec{u}_n \cdot \nabla \alpha_n + \nabla \cdot (\vec{u}_n \alpha_n (1 - \alpha_n)) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_n \rho_n \vec{u}_n) + (\rho_n \alpha_n \vec{u}_n \cdot \nabla) \vec{u}_n = -\alpha_n \nabla p + \nabla \cdot (\mu_n \alpha_n \nabla \vec{u}_n) + \alpha_n \rho_n \vec{g} + \vec{F}_{D,n} + \vec{F}_{lift,n} + \vec{F}_{VM,n} \quad (2)$$

Die Viskosität der Phase wird durch μ_n erfasst, die Dichte durch ρ_n , die Schwerkraft mit dem Vektor \vec{g} und α_n beschreibt den Phasenanteil. Die Kräfte, die zwischen den Phasen wirken, sind mit $\vec{F}_{D,n}$, die Widerstandskraft, $\vec{F}_{lift,n}$, die Auftriebskraft und mit $\vec{F}_{VM,n}$, die Kraft der virtuellen Masse (Wardle, Weller 2013).

Die hier durchgeführten Simulationen des Mischer-Abscheiders berücksichtigen als einzige dieser Kräfte die Widerstandskraft $\vec{F}_{D,n}$, die anderen beiden Kräfte werden vernachlässigt.

In dieser Arbeit wird die Gleichung von Tomiyama et al. (Tomiyama et al. 1998) verwendet. Auf Grund des von Díaz et al. (Díaz et al. 2008) in den Experimenten verwendeten Leitungswassers wird bei der Berechnung der Widerstandskraft von Wasser mit leichten Verunreinigungen ausgegangen.

Die Lösung erfolgte mit einer Large Eddy Simulation (LES), welche im Solver „multiphaseEulerFoam“ implementiert ist.

Populationsbilanzgleichung

Die Populationsbilanzgleichung erfasst die Veränderung der Partikelzusammensetzung mithilfe der Anzahldichtefunktion n .

$$n(L, x, t) \quad (3)$$

Diese enthält Informationen über die Anzahlverteilung der Blasen mit bestimmten Eigenschaften. Dabei ist n von internen Koordinaten, welche Eigenschaften des Partikelsystems beschreiben und von externen Koordinaten, welche äußere Eigenschaften (Position im Raum und die Zeit) erfassen, abhängig. Die internen Koordinaten können dabei entsprechend der interessierenden Zielgrößen gewählt werden. In dieser Arbeit ist dies die charakteristische Länge L (Marchisio, Fox 2013). Die Populationsbilanzgleichung lässt sich dann wie folgt schreiben

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_d n(L, x, t)] + \nabla [\vec{u} \rho_d n(L, x, t)] + \nabla [G(L, x, t) \rho_d n(L, x, t)] = \rho_d S(L, x, t), \quad (4)$$

Dabei beschreibt G die Partikelwachstumsrate durch zum Beispiel Massentransfer und S den Quellterm der Veränderung der Population durch diskontinuierliche Ereignisse, wie Bruch- und Koaleszenzprozesse. In dieser Arbeit wird Massentransfer vernachlässigt, der dritte Term aus Gleichung (4) fällt damit weg. Der Quellterm S setzt sich dabei folgenderweise zusammen:

$$S(L, x, t) = B^C(L, x, t) - D^C(L, x, t) + B^B(L, x, t) - D^B(L, x, t), \quad (5)$$

In diesem Fall steht B^* für „Birth“, das Entstehen neuer Blasen und D^* für „Death“, den Verlust von Blasen. Die Exponenten C und B stehen jeweils für Koaleszenz und Zerfall. Eine allgemeingültige analytische Lösung für Gleichung (5) existiert nicht. Aus diesem Grund wird die OPOSPM als numerische Lösungsmethode angewandt (Drumm et al. 2010). Die OPOSPM beschreibt einen Spezialfall der „sectional quadrature method of moments“ (SQMoM) (Attarakih et al. 2009). Im Falle von OPOSPM wird genau ein Primär- und ein Sekundärpartikel betrachtet. Berechnet werden nur das nullte und das dritte Moment.

Ergebnisse

Da der Einfluss der Zufuhr der dispersen Phase von hoher Bedeutung für die Dispersionsbildung ist, werden die Ergebnisse präsentiert, bei welchen dieser Faktor variiert. Dazu wird untersucht, welchen Einfluss die disperse Phase auf die Phasenanteile in der Mischkammer und somit auf die Dispersion hat. Bei steigender Zufuhr konnte beobachtet werden, dass der Phasenanteil der dispersen Phasen im Mischer-Abscheider anstieg.

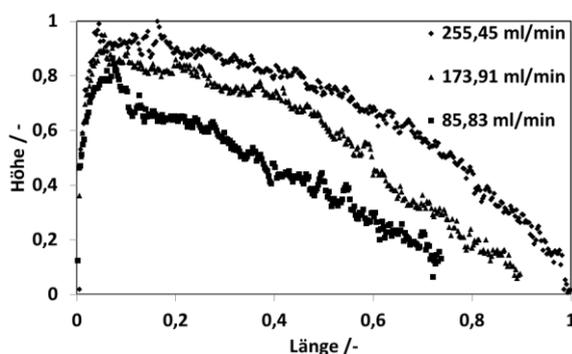


Abbildung 1: Höhenprofil des Dispersionskeils bei unterschiedlichem Dispersphasenzufluss

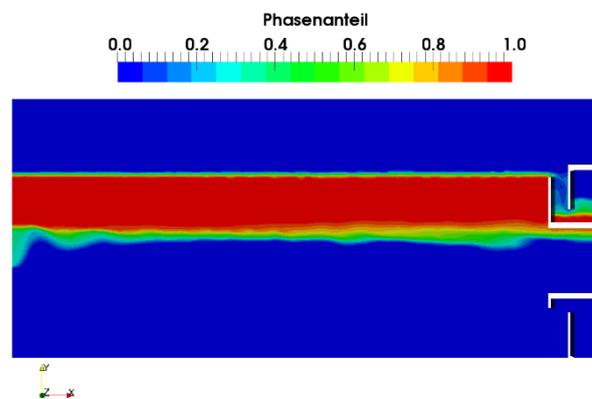


Abbildung 2: Simulation des Mischer-Abscheiders mit Populationsbilanzmodellierung

Tabelle 1: Versuchsparameter für die optische Auswertung mit MatLab (l_s : Dispersionskeillänge, H_{max} : Max. Dispersionssschichthöhe)

\dot{V} in ml/min	Rührerdrehzahl in min^{-1}	l_s in mm	H_{max} in mm	Dispersphasenanteil in %
85,83	300	209	18,37	5,79
173,91	300	254	20,23	8,69
255,45	300	282	21,27	11,51

Die reproduzierbaren Ergebnisse konnten eindeutige Trends und Regelmäßigkeiten feststellen. So ist die Länge des Dispersionskeils stark abhängig von dem Zufluss der dispersen Phase. Dabei gilt: Je größer der Zufluss, desto länger der Keil. Dieser Zusammenhang ist allerdings nicht proportional. Daneben konnte festgestellt werden, dass die Rührerdrehzahl die Keillänge ebenfalls beeinflusst. Liegt diese zu tief wird keine vollständige Dispersion erzeugt und es entsteht kein Keil.

Ist die Rührerdrehzahl zu hoch mischt sich Luft in die Dispersion, wodurch ein unsauberer und unregelmäßiger Keil entsteht. In dem dadurch begrenzten Operationsbereich konnte festgestellt werden, dass mit steigender Rührerdrehzahl die Keillänge leicht zunimmt. Ein weiterer Einflussfaktor auf die Dispersionssschicht ist die gewählte Rührergeometrie.

Die Beschreibung der Koaleszenz für die Simulation wird mit einem binären Ansatz nach Hartland und Vohra (Hartland, Vohra 1978) als Annäherung angenommen und in den Koaleszenzkernel des Populationsbilanzmodelles unter dem OpenFOAM Solver „multiphaseEulerFoam“ eingebaut.

Der Ansatz nach Hartland und Vohra (Hartland, Vohra 1978) basiert auf den experimentellen Ergebnissen aus Versuchsreihen in vertikal dichtgepackten Dispersionen. Zur Implementierung in den Solver wird angenommen, dass ein Zerfall der Tropfen nicht stattfindet.

$$\text{Zerfall} = 0 \quad (6)$$

Es wird nur von einer reinen Koaleszenz ausgegangen, die nach folgender Gleichung angenähert wird,

$$\text{Koaleszenz} = \frac{C_1 \cdot \alpha \cdot d_{30}^3}{t_{KO}(d_{30})} \quad (7)$$

bei der α das Phasenverhältnis, d_{30} den volumetrischen Durchmesser und t_{KO} die Koaleszenzzeit in Abhängigkeit der Tropfengröße darstellt. C_1 ist ein Parameter, der zusätzlich zu der Koaleszenzzeit experimentell ermittelt werden muss.

Der neue numerische Ansatz zur Beschreibung von Mischer-Abscheidern kann eingesetzt werden und liefert plausible Ergebnisse. Die Kombination aus einem dynamischem Rechenetz, zur besseren Auflösung der Dispersionsschicht und Populationsbilanzmodell zur Darstellung der Tropfengröße über den Abscheider bildet somit ein funktionierendes Grundgerüst. Eine Erweiterung mit der Implementierung von SQMOM in den OpenFOAM Solver „multiphaseEulerFoam“ ist bereits erfolgt und die Simulationen zeigen erste vielversprechende Ergebnisse und sind die Basis weitere Untersuchungen.

Ausblick

Auf Basis der durchgeführten Arbeiten wurde mittlerweile ein DFG Antrag zu dieser Thematik, gemeinsam mit Mathematikern der TU Kaiserslautern, gestellt.

Literatur

- Attarakih, Menwer M.; Drumm, Christian; Bart, Hans-Jörg (2009): Solution of the population balance equation using the sectional quadrature method of moments (SQMOM). In *Chemical Engineering Science* 64 (4), pp. 742–752. DOI: 10.1016/j.ces.2008.05.006.
- Bart, Hans-Jörg; Garthe, Daniel; Grömping, Tobias; Pfennig, Andreas; Schmidt, Stephan; Stichlmair, Johann (2006): Vom Einzeltropfen zur Extraktionskolonne. In *Chemie Ingenieur Technik* 78 (5), pp. 543–547. DOI: 10.1002/cite.200500146.
- Díaz, M. Elena; Montes, Francisco J.; Galán, Miguel A. (2008): Experimental study of the transition between unsteady flow regimes in a partially aerated two-dimensional bubble column. In *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* 47 (9-10), pp. 1867–1876. DOI: 10.1016/j.cep.2007.10.012.
- Drumm, Christian; Attarakih, Menwer; Hlawitschka, Mark W.; Bart, Hans-Jörg (2010): One-Group Reduced Population Balance Model for CFD Simulation of a Pilot-Plant Extraction Column. In *Industrial & Engineering Chemistry Research* 49 (7), pp. 3442–3451. DOI: 10.1021/ie901411e.
- Hartland, S.; Vohra, D. K. (1978): Koaleszenz in vertikalen dichtgepackten Dispersionen. In *Chemie Ingenieur Technik* 50 (9), pp. 673–682. DOI: 10.1002/cite.330500906.
- Jeffreys, G. V.; Davies, G. A.; Pitt, K. (1970): Rate of coalescence of the dispersed phase in a laboratory mixer settler unit. Part I. In *AIChE Journal* 16 (5), pp. 823–827. DOI: 10.1002/aic.690160521.
- Marchisio, Daniele L.; Fox, Rodney O. (2013): Computational models for polydisperse particulate and multiphase systems. Cambridge: Cambridge Univ. Press (Cambridge Series in Chemical Engineering).
- Schmidt, R. (1994): Anlagen und Apparate für Destillation, Sorption, Permeation, Extraktion. In *Chemie Ingenieur Technik* 66 (11), pp. 1448–1462. DOI: 10.1002/cite.330661105.

Tomiyaama, Akio; Kataoka, Isao; Zun, Iztok; Sakaguchi, Tadashi (1998): Drag Coefficients of Single Bubbles under Normal and Micro Gravity Conditions. In *JSME International Journal Series B* 41 (2), pp. 472–479. DOI: 10.1299/jsmeb.41.472.

Wardle, Kent E.; Weller, Henry G. (2013): Hybrid Multiphase CFD Solver for Coupled Dispersed/Segregated Flows in Liquid-Liquid Extraction. In *International Journal of Chemical Engineering* 2013, pp. 1–13. DOI: 10.1155/2013/128936.

Wissenschaftliche Beiträge

Publikationen

Steinhoff, J., Hlawitschka, M. W., Bart, H.-J. (2016), CFD-basierte Auslegung von Schwerkraftabscheidern mit der Untersuchung von dichten Dispersionen. *Chemie Ingenieur Technik*, 88: 1302. doi:10.1002/cite.201650101.

Vorträge in Tagungen

M.W. Hlawitschka, J. Steinhoff, H.-J. Bart (2016), Hydrodynamik in Schwerkraftabscheidern – ein mehrskaliger Ansatz, Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen Extraktion und Grenzflächenbestimmte Systeme und Prozesse, 14.– 15.03.2016, Weimar, Germany.

J. Steinhoff, F. Gebauer, M.W. Hlawitschka, H.-J. Bart (2016), CFD-Modellierung von Dispersionen in Schwerkraftabscheidern, Jahrestreffen der Fachgruppen Agglomerations- und Schüttguttechnik, Mehrphasenströmungen und Computational Fluid Dynamics, 29.2.-2.3.2016, Bingen, Germany.

Poster Präsentation in Tagungen (Best Poster Award)

J. Steinhoff, M. Lichti, M.W. Hlawitschka, H.-J. Bart (2016), Analyse der Phasenseparation in liegenden Abscheidern mittels CFD und optischer Bildmesstechnik, Jahrestreffen der Fachgruppen Agglomerations- und Schüttguttechnik, Mehrphasenströmungen und Computational Fluid Dynamics, 29.2.-2.3.2016, Bingen, Germany.