

Abschlussbericht SO 204/32-1

**Modellierung des Einflusses von
Partikelagglomeration und -bruch
für eine verbesserte numerische Berechnung von Gaszyklonen**

Antragsteller:	Prof. Dr.-Ing. M. Sommerfeld
Zuwendungsempfänger:	MLU Halle-Wittenberg Zentrum für Ingenieurwissenschaften Professur für Mechanische Verfahrenstechnik
Berichtszeitraum:	1.6.2006 – 31.11.2011
Mitarbeiter:	Dipl.-Ing. J. Lipowsky

Allgemeine Angaben

1.1 DFG-Geschäftszeichen

SO 204/32-1

1.2 Antragsteller

Prof. Dr.-Ing. M. Sommerfeld

1.3 Institut/Lehrstuhl

Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Zentrum für Ingenieurwissenschaften
Professur für Mechanische Verfahrenstechnik

1.4 Aus DFG-Mitteln bezahlte wissenschaftliche Mitarbeiter

Dipl.-Ing. J. Lipowsky (Beschäftigungszeitraum: 1.6.2006 – 31.10.2009)

1.5 Thema des Projekts

Modellierung des Einflusses von Partikelagglomeration und -bruch für eine verbesserte numerische Berechnung von Gaszyklonen

1.6 Berichtszeitraum, Förderungszeitrauminsgesamt

Berichtszeitraum: 1.6.2006 – 31.11.2011

Förderzeitraum: 1.6.2006 – 31.10.2009

1.7 Fachgebiet

Verfahrenstechnik, numerische Strömungsmechanik, Zyklone, Zweiphasenströmungen, Agglomerate

1.8 Verwertungsfelder

Prozesstechnik, Aufbereitungstechnik, Numerik, Chemische Industrie

1.9 Kooperationspartner

keine

2 Zusammenfassung

2.1 Allgemeinverständliche Darstellung wesentlicher Ergebnisse

Ziel des Projektes war die Weiterentwicklung von Simulationstechniken zur Berechnung von staub-beladenen Gasströmungen. Die dabei entwickelten Verbesserungen der numerischen Modellierungsansätze führen zunächst zu einer Erweiterung der numerischen Darstellungsmöglichkeiten und in der Folge zu einer Verbesserung der erreichbaren Vorhersagequalität. Reale Prozesse können in der Simulation also genauer wiedergegeben und damit besser verstanden werden. Dieses erweiterte Prozessverständnis eröffnet in der Folge zusätzliche Möglichkeiten für die Prozessoptimierung und die Weiterentwicklung von prozessrelevanten Anlagenteilen.

Die in diesem Projekte betrachteten Strömungsprozesse finden sich in vielen industrie-relevanten Anwendungen. So bilden die hier untersuchten Gas-Partikel-Strömungen die Grundlage für Prozesse wie Staubabscheidung oder Kohlenstaubfeuerungen. Die Ergebnisse lassen sich jedoch auch auf andere disperse Mehrphasensysteme wie Flüssigkeits-Partikel-Strömungen in der Wasseraufbereitung oder Flüssig-Gas-Strömungen in Blasensäulen übertragen.

Disperse Mehrphasenströmungen werden maßgeblich durch die Interaktion zwischen den einzelnen Phasen beeinflusst: einerseits trägt die kontinuierliche Gasphase die in ihr enthaltenen Partikel und beeinflusst ihre Bewegung über die Strömungskräfte. Andererseits bildet die Partikelphase, insbesondere bei hohen Beladungen und großer Dichtedifferenz, eine zusätzliche Impulsquelle bzw. -senke für den umgebenden Gasstrom. Während die kontinuierliche Phase im Euler/Lagrange-Verfahren analog zur klassischen CFD-Methodik modelliert wird, werden die einzelnen Partikel der dispersen Phase mit Hilfe eines Lagrange-Ansatzes dargestellt. Die einzelnen Partikel werden also als sich durch das umgebende Kontinuum bewegende Massepunkte betrachtet. Aus den an jedem Partikel aufgestellten Kräftebilanzen werden dabei Beschleunigungen ermittelt und in der Folge die Bahnkurve des jeweiligen Partikels berechnet.

Die in diesem Projekt implementierten numerischen Modelle lassen sich in zwei Gruppen aufteilen: zum einen wurden zusätzliche Möglichkeiten zur genaueren Modellierung der Interaktion zwischen Partikel- und Gasphase geschaffen, zum anderen wurde die Darstellung von Agglomerationsprozessen und der damit verbundenen Agglomeratporosität besser an die realen Vorgänge angepasst.

Zu Beginn des Projektes konnten Euler-/Lagrange-Simulationen nur auf der Basis von Fluidsimulationen durchgeführt werden, welche den Reynolds-Averaged-Navier-Stokes (RANS) Ansatz zur Turbulenzmodellierung verwendeten. Dieser Ansatz der Turbulenzmodellierung ist jedoch für komplexe Strömungsvorgänge nur begrenzt einsetzbar und wird daher zunehmend von genaueren Large-Eddy-Simulationen (LES) abgelöst. Daher wurden zusätzliche Modelle entwickelt, welches auch eine Kombination von Lagrangeschem Tracking mit LES-Rechnungen ermöglicht. Weiterhin wurde ein Modell implementiert, welches den Einfluss der lokalen Partikelkonzentration auf die zwischen Partikel und Fluid wirkenden Kräfte wiedergibt. Dieses Modell ermöglicht damit die Abbildung von konzentrations-abhängigen Prozessen (z.B. Schwarm sedimentation) im Rahmen der Simulation.

Auf der Seite der Partikelphase wurde ein zusätzliches Modell entwickelt, welches nach einer Partikelkollision die durch Anlagerungsprozesse entstehende Struktur von Agglomeraten speichert und der Simulation zugänglich macht. Bisherige Ansätze stellten Agglomerate als volumenäquivalente Kugeln dar und vernachlässigten somit die aus dem Anlagerungsprozess resultierende Porosität der in der Strömung entstehenden Agglomerate. Zusätzlich ermöglicht die Speicherung der Agglomeratstruktur auch die Auflösung späterer Bruchvorgänge, welche durch Strömungsbeanspruchung als auch durch Kollisionereignisse ausgelöst werden können.

Nach der Entwicklung der oben beschriebenen Modelle wurden diese in bereits bestehende Programme implementiert und anhand verschiedener Testfälle validiert.

Gleichzeitig wurde parallel zu den beschriebenen numerischen Arbeiten die Mehrphasenströmung in einem Gaszyklon experimentell untersucht und die Ergebnisse für weitere Validierungen aufbereitet.

2.2 Ausblick auf künftige Arbeiten und mögliche Anwendungen

Die möglichen Anwendungen liegen vor allem in den Bereichen der Prozessentwicklung und –optimierung. Aufgrund der hohen, meist jährlich anfallenden Kosten für kommerziell einsetzbare Strömungs-Simulationsprogramme besteht von Anwenderseite die Forderung, diese Programme möglichst flexibel und in einem breiten Spektrum von Anwendungen einsetzen zu können. Daher bestehen immer Bestrebungen, neue Anwendungsgebiete für die numerische Simulationen zu erschließen und gleichzeitig die Genauigkeit der verwendeten Modelle zu erhöhen.

Verbesserungsbedarf besteht bei der numerischen Performance. Kombiniert man alle im Rahmen dieses Projektes entwickelten Modelle in einer Simulation, so ergeben sich Rechenzeiten, die für Nutzer aus der angewandten oder industrienahen Forschung nicht mehr akzeptabel sind. Daher sollte hier über weitergehende Parallelisierung oder über eine Implementierung des Partikeltrackings auf Graphical Processing Units (GPUs) nachgedacht werden.

3 Arbeits- und Ergebnisbericht

3.1 Ausgangslage

Auf dem Gebiet der numerischen Modellierung sollten im Rahmen dieses Projektes vor allem zwei Themengebiete bearbeitet werden: einerseits sollte das bewährte Euler-/Lagrange-Verfahren zur Simulation disperser Mehrphasenströmungen dahingehend erweitert werden, das eine Kopplung mit hochauflösenden Large Eddy Simulationen (LES) möglich wird. Dabei waren vor allen Erweiterungen im Bereich der turbulenten Partikel-dispersion durch die nicht-aufgelöste Turbulenz und der Berechnung und Einkopplung der Partikelquellterme in die Fluidberechnung nötig, also der Beeinflussung der Feinstruktur-turbulenz durch die Partikel. Auf der anderen Seite sollten die Modelle zur Partikelinteraktion erweitert werden. Dies erfordert die Wiedergabe von Schwarmbildungs- und Sperreffekten in der Partikelbewegung, andererseits sollte die Abbildung des Agglomerationsprozesses von Partikeln verbessert werden. Bisherigen Simulationen gelang zwar eine Wiedergabe der Partikelagglomeration jedoch wurde das entstandene Agglomerat in der weiteren Berechnung nur als Kugel volumengleichen Durchmessers berechnet. Der für die Berechnung der Partikelbewegung verwendete Durchmesser ist dabei in der Regel viel zu klein. Mit diesem Ansatz konnte weder der Einfluss der mit jedem Anlagerungsvorgang steigenden Porosität wiedergegeben werden noch wurde der für die Berechnung des Widerstandskoeffizienten C_D und der berücksichtigten Strömungskräfte der Partikeldurchmesser d_p korrekt berechnet. Diese Schwachstellen des bisherigen Modells sollten mit Hilfe einer neuen Art der Agglomerat-Darstellung, in welcher die Anlagerungshistorie gespeichert wird, beseitigt werden. Zusätzlich sollte die neu zu entwickelnde Agglomerat-Darstellung es auch ermöglichen, durch Strömungs- und Kollisionsvorgänge implizierte Bruchvorgänge wiederzugeben und eine effiziente Möglichkeit bieten, die in Folge des Bruches entstehenden Agglomerat-Fragmente weiter zu verfolgen.

Jede Neuimplementierung numerischer Modelle bedarf der Validierung anhand experimenteller Daten. Daher sollten durch Untersuchung eines Industriezyklons zusätzliche Daten zur Validierung der oben beschriebenen Modelle generiert werden. Es sollte dabei einerseits die Partikelbewegung innerhalb des Zyklons, andererseits der Einfluss der Partikelagglomeration auf die Partikelbewegung untersucht und anschließend die erhaltenen Daten mit den Ergebnissen der numerischen Simulation verglichen werden.

3.2 Beschreibung der durchgeführten Arbeiten

3.2.1 Experimentelle Arbeiten

Für die experimentellen Untersuchung eines Zyklons der Firma Kreisel (Typ AA 16 KN 018) wurde eine bestehende Versuchsanlage umgebaut und auf die Bedürfnisse der Messungen innerhalb des Zyklons angepasst. Anschließend wurden an verschiedenen Stellen sowohl die gemittelten tangentialen und axialen Geschwindigkeiten der Partikelphase als auch die Fluktuation der Partikelkonzentration über einen längeren Zeitraum (ca. 1,5 Umläufe des präzedierenden Wirbelkerns) gemessen.

Die Geschwindigkeitsmessungen wurden mit Hilfe von Particle Image Velocimetry (PIV) (siehe Raffel [1]) durchgeführt. Dabei wurde eine CMOS-Hochgeschwindigkeitskamera der Firma PCO (PCO 1200 HS) mit einem Nikon Nikkor Objektiv (50 mm f/1.4 D-AF) eingesetzt. Der Lichtschnitt wurde von einem Argonlaser (Lexel 3500, 10W) erzeugt. Es wurden zwei Messgebiete bestimmt, die beide eine radiale Sektion von der Mittelachse zur Zyklonwandung abdecken. Eine Messstelle befindet sich im oberen zylindrischen Teil auf der Höhe des unteren Tauchrohrendes, eine weitere im konischen Teil des Zyklons. Um die Bereiche optisch zugänglich zu machen, wurden vier Segmente der Außenhülle entfernt und mit dünnen Glasscheiben wieder verschlossen.

Die im Antrag geplante isokinetische Absaugung von Agglomeraten aus dem Inneren des Zyklons und deren anschließende Strukturanalyse ließen sich aufgrund der vom präzedierenden Wirbelkern verursachten Geschwindigkeitsfluktuationen nicht realisieren. Daher wurden lokale Konzentrationsschwankungen berührungslos auf der Basis von Bildern einer Hochgeschwindigkeits-

kamera ermittelt. Eine anschließende Fast-Fourier-Transformation (FFT) in den Frequenzraum, erlaubte die Identifikation dominierender Frequenzen. Unter der Annahme, dass die Konzentrationsschwankungen im Zykloninneren durch die Umlauffrequenz des präzedierenden Wirbelkerns dominiert werden, können auf Basis dieser Messungen Aussagen über die Drehgeschwindigkeit des Wirbels gemacht werden und diese zur Validierung der numerischen Modelle verwendet werden.

3.2.2 Numerische Arbeiten

Im Rahmen des Projektes wurde das Programm FASTEST4.0 [2] zur Berechnung der kontinuierliche Fluidströmung und das Programm Lag3D [3] zur Berechnung der Bewegung der dispersen Partikelphase verwendet. Diese Programme wurden um verschiedene numerische Modelle erweitert. Neben der Modellierung der turbulenten Partikeldiffusion auf Basis von LES-Berechnungen wurde hauptsächlich im Bereich der Partikelinteraktion gearbeitet. Hierbei wurden die Schwarmbildung von Partikeln in Bereichen lokaler Konzentrationsüberhöhungen und die durch van-der-Waals Kräfte verursachten Agglomerations- und Bruchvorgänge modelliert.

Folgende Modelle wurden implementiert:

- **Turbulente Partikeldiffusion auf Basis von LES-Berechnungen**
Die turbulente Bewegung wird in einer LES-Rechnung zum Teil aufgelöst, zum Teil durch das Sub-Grid-Scale-Modell (SGS) abgebildet. Die durch den aufgelösten Anteil der Turbulenz bewirkte Partikeldispersion wird vom Lagrangeschen Tracking also bereits korrekt wiedergegeben. Es wurden daher zusätzliche Modelle entwickelt, welche die vom SGS-Anteil der Turbulenz verursachte Partikeldiffusion wiedergeben.
- **Beeinflussung der SGS Turbulenz durch die Partikelphase**
Da die Partikel durch Impulsaustausch auch einen Einfluss auf die nicht-aufgelöste Feinstruktur turbulenz haben wurde ein Kopplungsmodell in Analogie der klassischen RANS-Modellierung implementiert.
- **Schwarmbildung**
Die im ursprünglichen Antrag geplante Modellierung der in Bereichen hoher Partikelkonzentrationen auftretenden Sperreffekte und der damit einhergehenden Clusterbildung sollte auf der Auswertung lokaler Konzentrationsgradienten basieren. Dieser Ansatz erwies sich im Laufe des Projekts jedoch als unrealistisch, da die erwähnten Sperreffekten nicht in Abhängigkeit des Konzentrationsgradienten, sondern in Abhängigkeit der absoluten Partikelkonzentration und damit des lokalen Fluidanteils auftreten. Diffusionseffekte aufgrund von Gradienten der Partikelkonzentration werden schon durch Partikelkollisionen erfasst. Diese Abhängigkeit wurde mit Hilfe der bekannten Modelle nach Ergun [4] und Wen und Yu [5] wiedergegeben. Zusätzlich wurde das Modell von Di Felice [6] in das Euler-/Lagrange-Framework implementiert.
- **Agglomerationsmodell mit Anlagerungshistorie**
Dieses Modell basiert auf dem Stochastischen Kollisionsmodell von Sommerfeld [7] unter Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit [8]. Da im Rahmen dieses Projektes ausschließlich trockene und isolierende Partikel untersucht wurden, werden nur van-der-Waals Kräfte als Bindungskräfte betrachtet. Um die Anlagerungshistorie eines Agglomerats im Speicher zu repräsentieren wurde eine baumförmige Datenstruktur implementiert (Abb. 1). Das Grundelement sind dabei Datenobjekte (Knoten), die jeweils die Daten eines Primärpartikels und des zugehörigen Kontaktpunktes speichern. Jeder Knoten enthält zusätzlich einen Pointer auf ein Datenobjekt gleichen Typs, so dass alle sich an ein gegebenes Primärpartikel anlagernde Partikel zu einer Liste verkettet werden können. Weiterhin enthält jeder Knoten die Basis einer weiteren verketteten Liste, in die alle Partikel aufgenommen werden, die sich an dieses Primärpartikel anlagern. Aufgrund der in den Kontaktpunkten gespeicherten Festigkeiten können später auch Agglomeratbrüche beschrieben werden

- Agglomeratporosität
Die Porosität des gesamten Agglomerats wird über die Porosität eines dualen Agglomerats bestimmt. Hier wird das Porenvolumen als das Volumen des um zwei Kugelkalotten reduzierten Kegelstumpfes zwischen den Primärpartikel definiert (Abb. 1). Diese dualen Agglomerate werden in höheren Anlagerungsstufen als poröse Kugel betrachtet und weitere Anlagerungen können damit wieder auf den beschriebenen dualen Fall zurückgeführt werden. Der resultierende volumenäquivalente Durchmesser des porösen Agglomerats wird schließlich für die Bestimmung der auf das Agglomerat wirkenden Strömungskräfte benutzt. Ebenso wird die effektive Dichte des Agglomerats berücksichtigt.

Das neue Agglomerationsmodell ist damit wesentlich realistischer als das von Ho und Sommerfeld [8] vorgeschlagene Modell wo die Agglomerate als volumenäquivalente Kugel aller involvierten Primärpartikel betrachtet werden. Weiterhin ist das neue Modell wesentlich weniger komplex als das Strukturmodell von Stübing et al. [9], liefert aber trotzdem einen effektiven Agglomeratdurchmesser.

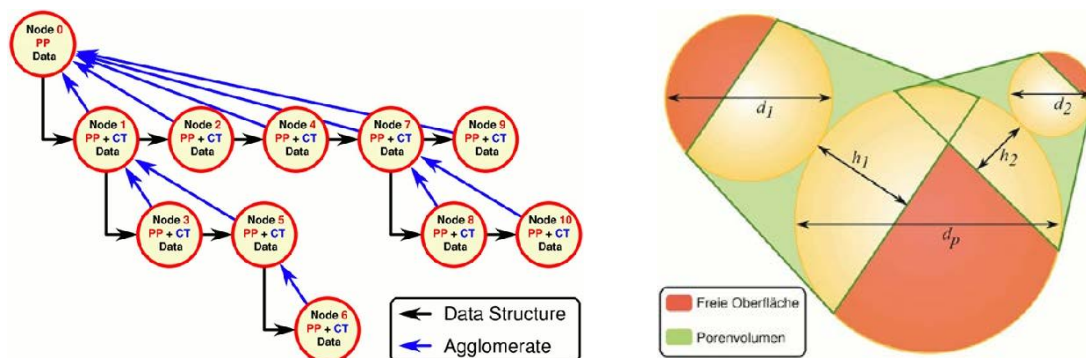


Abbildung 1: Links: Datenstruktur zur Speicherung der Anlagerungshistorie. Die Daten sind in einer Baumstruktur aus verketteten Listen (schwarz) abgelegt. Jeder Knoten repräsentiert dabei ein Primärpartikel mit dem zugehörigen Kontaktpunkt. Die Agglomeratstruktur ist in Blau dargestellt. Rechts: Berechnung der freien Oberfläche (rot) und des Porenvolumens (grün) eines trinären Agglomerats.

3.3 Darstellung der erzielten Ergebnisse

3.3.1 Experimentelle Ergebnisse

Mit Hilfe der PIV-Messungen wurde die Bewegung der Partikelphase im Inneren des Kreisel-Zyklons bei verschiedenen Gasvolumenströmen und Beladungen ermittelt (siehe Tabelle 1). Beispielhaft für die Ergebnisse sind in Abb. 2 die Felder der Partikelgeschwindigkeit an zwei Orten im Zyklon für zwei Feststoffbeladungen dargestellt. Am Eintritt zum Tauchrohr ist deutlich eine ausgeprägte Kurzschlussströmung (aufwärts gerichtet) erkennbar. Zur Tauchrohrmitte hin (also im Bereich des Wirbelkerns) ergibt sich dann eine nach unten gerichtete Strömung. Weiter unten (untere Bilder), im konischen Teil des Zyklons, ist die aufwärts gerichtete Strömung Richtung Tauchrohereintritt erkennbar. Die vier Profile verdeutlichen, dass der Wirbel nicht axialsymmetrisch ist sondern auch im Mittel spiralförmig nach oben verläuft. Bei der niedrigeren Feststoffbeladung ist das Geschwindigkeitsniveau besonders am Tauchrohereintritt deutlich höher als bei der höheren Beladung.

Die Leistungsdichtespektren der zeitlichen Signale der Partikelgeschwindigkeiten ergaben kein klares Bild bezüglich der dominanten Frequenzen des Wirbels. Daher wurde die Volumenkonzentration der Partikelphase mit Hilfe einer Grauwertanalyse ausgewertet. Die daraus abgeleiteten Leistungsdichtespektren zeigten klare Maxima, welche als Kreiselbewegung des Wirbelkerns interpretiert werden können. In Abb. 3 (links) ist ein typische Ergebnis gezeigt und in Abb. 3 (rechts) sind geglättete Leistungsdichtespektren in verschiedenen Höhen innerhalb des Zyklons dargestellt. Besonders kurz unterhalb des Tauchrohres kann deutlich eine charakteristische Frequenz von ca. 45 Hz identifiziert werden. Im unteren Teil des Zyklons ist die Präzession des Wirbels weniger ausgeprägt, da sich das Maximum im Leistungsdichtespektrum abflacht (Abb. 3, rechts).

Tabelle 1: Im Rahmen der PIV-Messungen realisierte Gasmassenströme und Beladungen

Konfiguration	Gasmassenstrom [g/s]	Partikelmassenstrom [g/s]	Beladung [g/g]
A1	103,9	0,363	0,003
A2		1,813	0,015
A3		9,067	0,073
B1	125,8	0,363	0,002
B2		1,813	0,012
B3		2,72	0,018
B4		10,88	0,073

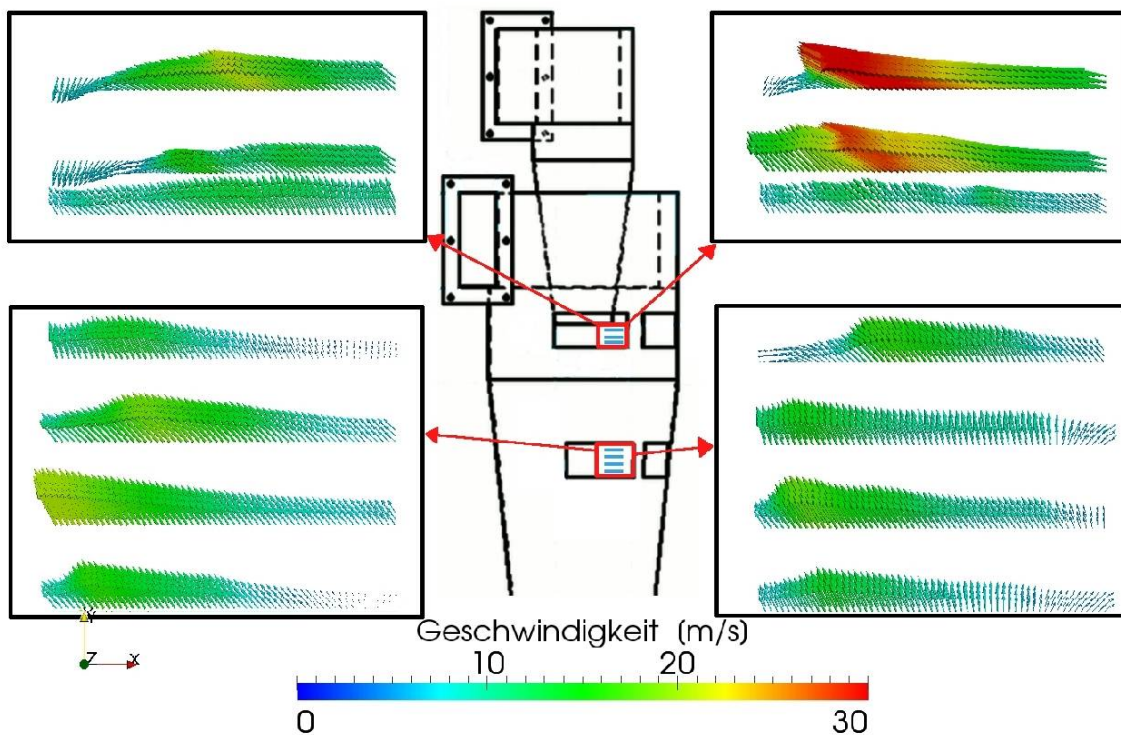


Abbildung 2: Messung der Partikelgeschwindigkeit für zwei Bereiche im Kreiselschleuderer mittels PIV. Dargestellt sind zwei Messungen mit gleichem Luftvolumenstrom ($\dot{q} = 0,1 \text{ m}^3/\text{s}$) aber unterschiedlicher Partikelbeladung (Links: $\eta = 0,015 \text{ g/g}$ Rechts: $\eta = 0,003 \text{ g/g}$)

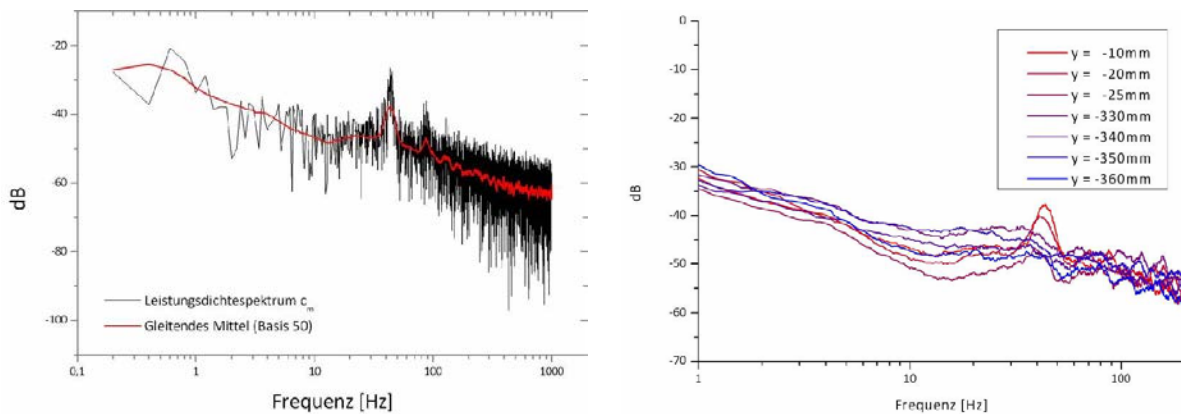


Abbildung 3: Links: Typisches Leistungsdichtespektrum des Signals der Partikelkonzentration c_m . Versuchparameter: Luftvolumenstrom $\dot{q} = 0,13 \text{ m}^3/\text{s}$; Beladung $\eta = 0,012 \text{ g/g}$. Rechts: Vergleich der geglätteten Leistungsdichtespektren der Partikelkonzentration c_m in verschiedenen Höhen des Zyclons.

3.3.2 Numerische Ergebnisse

Bei den durchgeführten numerischen Berechnungen wurden die entwickelten Modelle und Lösungsstrategien schrittweise an eigenen oder aus der Literatur entnommenen Testfälle überprüft. Die Kopplung zwischen LES-Rechnungen und Lagrangeschem Tracking und das neu implementierten Modells zur Beschreibung der turbulenten Partikeldispersion durch die Feinstruktur der Turbulenz wurde zunächst anhand einer bereits bekannten Drallbrenner-Geometrie [10, 11] überprüft. Die momentane Partikelbewegung und die Feststoffkonzentration in Abb. 4 (links) verdeutlichen den stark instationären Charakter der Drallströmung und die schraubenförmige Bewegung des Wirbels. Sowohl aus Messungen als auch den Simulationen wurde das Frequenzspektrum ermittelt und miteinander verglichen (Abb. 4, rechts). Die charakteristische Umlauffrequenz liegt bei etwa $f_s \approx 10$ Hz, was auch mit Angaben in der Literatur übereinstimmt [12].

Der Einfluss der Modellierung von Schwarmeffekten wurde ebenfalls an der Drallströmung untersucht. Das Verhalten der unterschiedlichen Schwarmmodelle zeigt Abb. 5. Das Modell von Ergun [4]/Wen und Yu [5] zeigt eine relativ verschmierte Verteilung der Partikel. Demgegenüber werden mit dem konsistenteren Modell von Di Felice [6] die in einer Drallströmung beobachteten Staubstrahlen und die Bildung eines sekundären Partikelschwarms im mittleren Bereich des Berechnungsgebietes vorhergesagt.

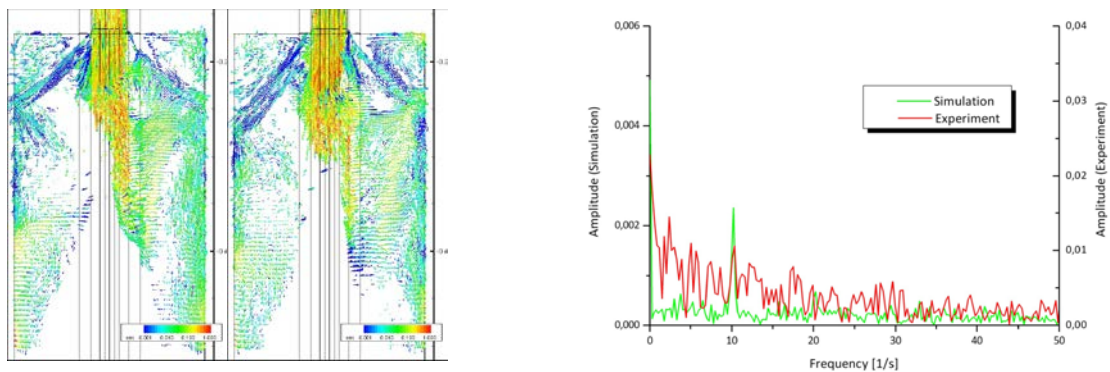


Abbildung 4: Gekoppelte LES der Drallströmung; links: Zeitliche Entwicklung der Partikelbewegungen (Vektoren) und -konzentrationen (Farben) in einem vertikalen Schnitt entlang der Hauptachse der Drallbrennergeometrie; rechts Vergleich von gemessenem und berechnetem Frequenzspektrum (Drallzahl: 2, $\Delta t_e = 0,005$ s).

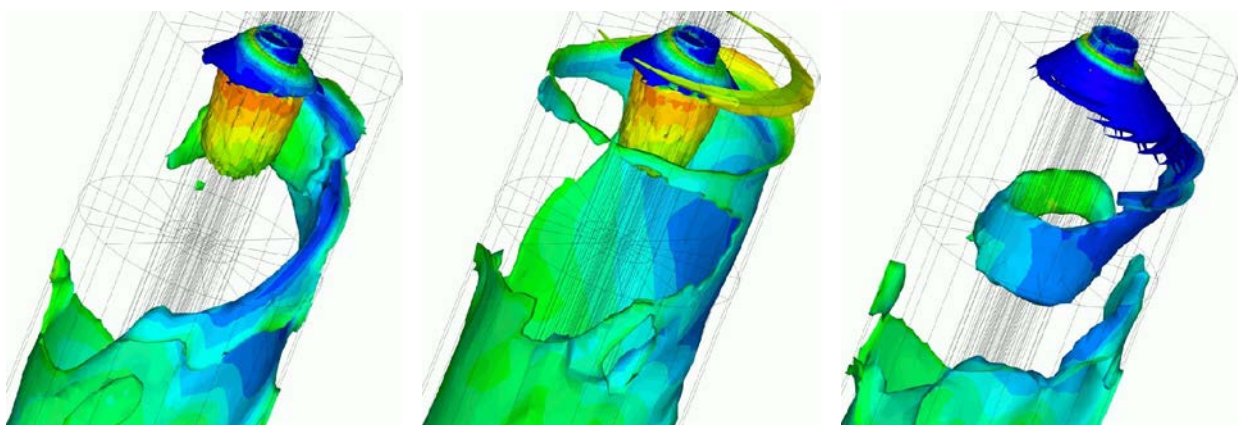


Abbildung 5: Oben: Isoflächen der Partikelkonzentration $c_m = 0; 01$ in einer vereinfachten Drallbrennergeometrie [10]. Links: Ohne Schwarmbildungsmodell, Mitte: Ergun [4]/Wen und Yu [5]; Rechts: Di Felice [6].

Zum Vergleich der beiden Agglomerationsmodelle wurde ein Stairmand-Zyklon [13] simuliert und die Feststoffkonzentration als auch der resultierende Trenngradverlauf verglichen. Aus Abb. 6 (links) wird deutlich, dass ohne Agglomeration die Feststoffkonzentration im Tauchrohr deutlich höher ist als ohne Berücksichtigung der Agglomeration. Beide Agglomerationsmodelle liefern nahezu gleiche

Verteilungen des Feststoffs im Zyklon. Der Trenngradverlauf ist zunächst definiert als $T(d_p) = N_{P,bin} / N_{P,in}$. Durch Agglomeration werden kleinere Partikel in höhere Größenklassen verschoben und tragen damit nicht mehr zu $N_{P,bin}$ in den kleinen Größenklassen bei. Dies bedeutet, dass in diesen kleinen Größenklassen wo Partikel durch Agglomeration „verschwinden“ der Trenngrad per Definition verschlechtert wird. Allerdings wird dadurch der Trenngrad in höheren Größenklassen verbessert und kann damit Werte von größer als Eins annehmen. In Größenklassen oberhalb der Ausgangsverteilung wird dagegen $N_{P,in} = 0$ während $N_{P,bin}$ weiter definiert bleibt. Hier ergeben sich also theoretisch unendlich hohe Abscheideraten.

Um diese Problematik zu umgehen wurde der Trenngradverlauf aus den Rechnungen bestimmt mit: $T(d_p) = N_{P,bin} / (N_{P,out} + N_{P,bin})$. Diese Größe ist für den gesamten Größenbereich definiert und strebt mit steigender Partikelgröße dem Wert Eins entgegen. Die Trenngradverläufe für die drei Rechnungen sind in Abb. 6 (rechts) gegenübergestellt. Während die Kurve für den Trenngrad der Simulation ohne Berücksichtigung der Agglomeration den erwarteten Verlauf zeigt (kleine Partikel passieren den Zyklon teilweise, große Partikel werden abgeschieden), ergibt sich in beiden Simulationen mit Berücksichtigung der Agglomeration ein scharfer Knick zwischen 3 μm und 4 μm . Durch Agglomeration nimmt sowohl die Anzahl der feinen Partikel im Tauchrohr als auch im Staubbunker ab, wodurch als Resultat der Trenngrad deutlich ansteigt. Agglomeration ist also für Partikelgrößen unterhalb des Knicks in Abb. 6 (rechts) am bedeutendsten (siehe auch [8]). Mit dem neuen Agglomerationsmodell verbessert die Abscheideleistung im Bereich von Partikelgrößen zwischen etwa 1 und 4 μm nochmals deutlich. Dies liegt an dem größeren effektiven Durchmesser der Agglomerate und der damit verbundenen höheren Kollisionsrate zwischen Agglomeraten und Primärpartikeln.

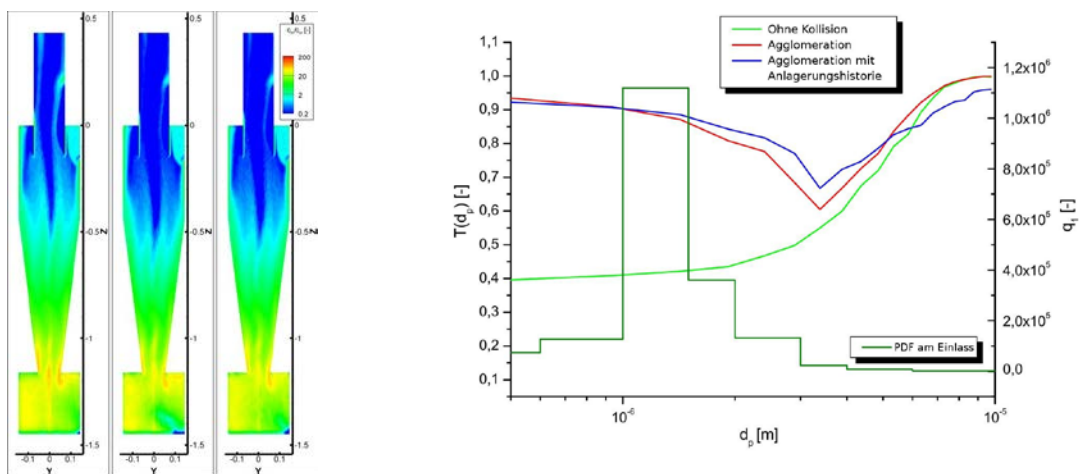


Abbildung 6: Simulation eines Stairmand-Zyklons mit unterschiedlichen Ansätzen zur Modellierung von Kollision und Agglomeration; linker Bildteil: dimensionslose Massenkonzentrationen des Feststoffs c_m/c_{in} (Links: ohne Kollision und Agglomeration; Mitte: mit Kollision und Agglomeration, aber ohne Agglomerationshistorie; Rechts: mit Kollision, Agglomeration und Agglomerationshistorie); rechter Bildteil: Trenngradverläufe.

Alle im Rahmen des Projektes implementierte Modelle (Lagrange-Tracking auf Basis von LES-Berechnungen, Anlagerungshistorie und Schwarmbildung) wurden abschließend in einer Simulation des auch experimentell untersuchten Kreisels-Zyklons getestet. Zunächst wurde dabei nur das Strömungsfeld in einer einphasig durchgeführten LES-Rechnung ermittelt und auf der sich ergebenden Lösung das Schwarmmodell in Rahmen eines stationären Partikeltrackings getestet. Die dabei ermittelten Massenkonzentrationen im Zykloninneren zeigen deutlich die gut aufgelöste Interaktion zwischen Fluid und Partikelphase (siehe Abb. 2, rechts).

Beim anschließenden Wechsel von der reinen LES-Simulation mit einmaligem stationären Tracking zu einem voll gekoppelten transienten Euler-/Lagrange-Verfahren zeigte sich jedoch, dass für die Gesamtsimulation extrem lange Rechenzeiten zu erwarten waren. Auch die zusätzlich eingeführte Parallelisierung des Partikeltrackings auf der Basis von OpenMP [14] und die Verteilung der Rechnung auf insgesamt 16 Prozessoren brachten dabei nur geringe Verbesserungen. Es kann abgeschätzt werden, dass etwa noch 10 Monate Rechenzeit nötig sind, bis der simulierte Zyklon einen Gleichgewichtszustand erreicht hat. Dies war innerhalb der Projektlaufzeit nicht mehr zu realisieren.

3.4 Ausblick auf zukünftige Arbeiten

Die meisten der im Antrag definierten Ziele konnten im Rahmen des Projektes erreicht werden. Jedoch bedingt die Anwendung des instationären Euler-/Lagrange-Verfahrens bei voller 4-Wege-Kopplung die mehrfache Berechnung der Partikeltrajektorien innerhalb jedes Euler-Zeitschrittes. Aufgrund der für die LES benötigten kurzen Zeitschritte führt dies zu einem deutlich erhöhten Rechenaufwand für die Gesamtsimulation.

Weiterhin beanspruchen die für die Modellierung der Anlagerungshistorie benötigten Baumstrukturen zusätzliche Rechenzeit. Der Randbereich eines Zyklons ist durch das Auftreten hoher Partikelkonzentrationen in einer hochturbulenten Strömung gekennzeichnet. Aus diesen Eigenschaften resultieren extrem viele Partikel-Partikel- und Partikel-Wand-Kollisionen. In jeder dieser Kollisionen muss ein Großteil der in einem Agglomerat vorliegenden Bindungen auf ihre Stabilität überprüft werden, in jeder Partikel-Partikel-Kollision muss überprüft werden, ob und wo eine Anlagerung stattfindet und möglicherweise die Agglomeratporosität über viele Anlagerungsstufen hinweg neu berechnet werden. Zusätzlich führt die Modellierung der Agglomerationshistorie zu deutlich höherem Speicherbedarf da die Baumstrukturen für jedes Partikel separat angelegt und verwaltet werden müssen.

Insgesamt führten die oben beschriebenen Effekte zu einer deutlichen Verlängerung der Rechenzeiten, so dass die alle neuen Modelle enthaltende Gesamtsimulation des Kreisel-Zyklon vorzeitig abgebrochen werden musste. Damit ergeben sich in diesem Bereich Möglichkeiten zu einer Optimierung des Berechnungssystems. Zwar wurden hier mit Hilfe von OpenMP erste Ansätze zu einer Parallelisierung der Berechnungsstrukturen implementiert, diese sollten jedoch in Zukunft weiterverfolgt und ausgebaut werden. Denkbar wäre hier auch eine Verlagerung der Berechnung auf GPUs, da sich das Partikeltracking aufgrund der geringen Kopplung zwischen den einzelnen modellierten Elementen gut für eine Vektorisierung eignet.

Im Bereich der experimentellen Arbeiten lieferten die berührungslose Messung der Konzentrationsschwankung auf der Basis von Hochgeschwindigkeitsaufnahmen gute Ergebnisse. Bei diesem Verfahren wären Ansätze zu einer Weiterentwicklung gegeben, insbesondere da sich dieses Verfahren gut mit der bereits weit verbreiteten PIV-Methodik kombinieren lässt. Hier ließe sich auf die am Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik vorhandene Erfahrung im Bereich optische Messtechnik aufbauen.

3.5 Interdisziplinäre Weiterentwicklung

Keine.

3.6 Verwertungspotenzial

Die Ergebnisse des Projektes wurden auf nationalen und internationalen Kongressen der wissenschaftlichen Gemeinschaft vorgestellt. Somit sind die entwickelten Modelle, besonders das Agglomerationsmodell, für andere Forschungsgruppen verfügbar. Die entwickelten Modellen sind in das in der Arbeitsgruppe verwendete Berechnungsprogramm nach dem Euler/Lagrange-Ansatz eingeflossen und stehen somit für weitere Forschungsarbeiten sowie anderen Forschungseinrichtungen und der Industrie für Simulationen zur Verfügung. Sowohl das Fluid-Berechnungsprogramm (FASTEST) als auch der Lagrangesche Teil (Lag3D) steht anderen Institutionen als Quellprogramm kostenlos zur Verfügung.

3.7 Beteiligte Wissenschaftler

- Prof. Dr.-Ing. Martin Sommerfeld: Antragsteller, Projektleiter
- Dipl.-Ing. Justus Lipowsky: Entwicklung und Implementierung der numerischen Modelle, Durchführung von stationären und instationären Euler-/Lagrange-Berechnungen, Aufbau der experimentellen Versuchsanlage, Durchführung und Auswertung der Experimente

3.8 Weiterqualifikation

Studienarbeit, Mirko Maiss: Untersuchung von Partikelagglomeration und -bruch in einem Gaszyklon (2009)

Dissertation, Justus Lipowsky: Zur instationären Euler/Lagrange Simulation partikelbeladener Drallströmungen (Abschluss voraussichtlich 2012)

4 Publikationen

4.1 Publikationen mit wissenschaftlicher Qualitätssicherung

Nach Abschluss der Promotion von Herrn Lipowsky (voraussichtlich 2012) werden zwei Publikationen ausgearbeitet.

4.2 Andere Veröffentlichungen

Folgende Konferenzbeiträge basierten auf den Ergebnissen der in diesem Projekt durchgeführten Forschungsarbeiten:

- **Lipowsky, J. und Sommerfeld, M.** 2007: *LES-Simulation of the formation of particle strands in swirling flows using an unsteady Euler-Lagrange approach*. 6th International Conference on Multiphase Flow, ICMF 2007, Leipzig, Germany
- **Lipowsky, J. und Sommerfeld, M.** 2008: *Influence of Particle Agglomeration and Agglomerate Porosity on the Simulation of Gas Cyclones*. 6th International Conference on CFD in Oil & Gas, Metallurgical and Process Industries, SINTEF/NTNU, Trondheim, Norway
- **Lipowsky, J. and Sommerfeld, M.** 2010: *A quasi-transient Euler-Lagrange approach for the calculation of time-dependent dispersed two-phase flows*. Book of Abstracts Sixth International Conference on Computational Fluid Dynamics, pp. 218 – 219, St. Petersburg, Russia, 12. – 16. July 2010
- **Sommerfeld, M., Lipowsky, J. and Laín, S.** (keynote lecture) 2010: *Transient Euler/Lagrange modelling for predicting unsteady rope behaviour in gas-particle flows*. Proceedings of FEDSM2010 ASME Joint U.S. - European Fluids Engineering Summer Meeting, August 1 – 5, 2010, Montreal, Canada, Paper No. FEDSM-ICNMM2010-31335.

4.3 Patente

Keine.

5 Literaturhinweise

1. **Raffel, M., Willert, C. und Kompenhans, J.** *Particle image velocimetry -- A practical guide*. Springer, 1998.
2. **Schäfer, M.** FASTEST - Flow Analysis Solving Transport Equations with Simulated Turbulence. *FASTEST - Flow Analysis Solving Transport Equations with Simulated Turbulence*. 2010.
3. **Decker, S.** *Zur Berechnung von gerührten Suspensionen mit dem Euler-Lagrange-Verfahren*. Dissertation MLU Halle-Wittenberg, 2005.
4. **Ergun, S.** 1955, *Fluid flow through packed columns*. Chemical Engineering Progress, Vol. 48, 89-94.

5. **Wen, C.Y. und Yu, Y.H.** 1966, *Mechanics of Fluidisation*. Chemical Engineering Program Symposium Series, Vol. 62, 100-111.
6. **Felice, R. Di.** 1994, *The voidage function for fluid-particle interaction systems*. International Journal of Multiphase Flow, Vol. 20, 153-159.
7. **Sommerfeld, M.** 2001, Validation of a stochastic Lagrangian modeling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence. International Journal of Multiphase Flows, Vol. 27, 1828-1858.
8. **Ho, C.A. und Sommerfeld, M.** 2005, *Numerische Berechnung der Staubabscheidung im Gaszyklon unter Berücksichtigung der Partikelagglomeration*. Chemie Ingenieur Technik, Bd. 77, 282-290.
9. **Stübing, S., Dietzel, M. and Sommerfeld, M.** 2011, *Modelling agglomeration and the fluid dynamic behaviour of agglomerates*. Proceedings of ASME-JSME-KSME Joint Fluid Engineering Conference 2011 (AJK2011-FED) July 2011, Hamamatsu, Shizuoka, Japan, Paper No. AJK2011-04033.
10. **Sommerfeld, M. and Qiu, H.-H.** 1993, *Characterization of particle laden, confined swirling flows by phase-Doppler anemometry and numerical calculation*. International Journal Multiphase Flows, Vol. 19, 1093-1127.
11. **Lipowsky, J. und Sommerfeld, M.** 2005, *Time-dependent simulation of a swirling two phase flow using an anisotropic turbulent dispersion model*. Proceedings of the ASME Fluids Engineering Summer Conference, Houston, Texas, Paper No. FEDSM2005-77210.
12. **Wunenburger, R., Andreotti, B. und Petitjeans, P.** 1999, *Influence of precession on velocity measurements in a strong laboratory vortex*. Experiments In Fluids, Vol. 27, 181-188.
13. **Stairmand, C. J.** 1951, *The design and performance of cyclone separators*. Transactions of the Institution of Chemical Engineers, Vol. 29, 356-383.
14. **Chapmann, B., Jost, G. und der, R. van.** 2008, *Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming*. Massachusetts Institute of Technology.
15. **Hoekstra, A. J.** 2000, *Gas flow field and collection efficiency of cyclone separators*. TU Delft. Dissertation Delft University of Technology, 2000.
16. **Derksen, J. J.** 2003, *Separation performance predictions of a Stairmand high-efficiency cyclone*. AIChE Journal, Vol. 49, S. 1359-1371.