

## Bericht zur Max-Buchner-Forschungsarbeit

„Entwicklung eines neuartigen Verfahrens zur Berechnung der elektrostatischen Partikelaufladung in technischen Strömungen“ (MBFSt-Kennziffer: 3736)

PD Dr. habil. Holger Grosshans

Leiter der Arbeitsgruppe „Analyse & Simulation im Explosionsschutz“ (3.51)  
Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB), Bundesallee 100, 38116 Braunschweig

### 1. Aufgabenstellung und Zielsetzung

Während des Transports von Pulvern in der verfahrenstechnischen und chemischen Industrie findet häufig eine Aufladung von Partikeln und Rohrleitungswänden durch triboelektrische Effekte statt. Die resultierende lokale Akkumulation elektrostatischer Energie stellt eine Gefahrenquelle im Sinne des Explosionsschutzes dar. Um ein grundlegendes Verständnis, der diesem Prozess zugrunde liegenden Mechanismen zu erreichen wurden verschiedene numerische Ansätze zur Berechnung partikelbeladener turbulenter Strömungen formuliert. Diesen Ansätzen ist gemeinsam, dass ein *Euler-Lagrange Verfahren* verwendet wird. Hierin wird die Gasphase durch die Navier-Stokes Gleichungen beschrieben, während die Trajektorie jedes einzelnen Partikels mithilfe der Newton'schen Bewegungsgleichungen berechnet wird. Der Nachteil des Lagrange'schen Bezugssystems ist allerdings, dass der rechnerische Aufwand quadratisch mit der Anzahl der betrachteten Partikel steigt. Dadurch wird die Vorhersage technischer Strömungssysteme, bestehend aus mehreren Millionen Partikeln, verhindert.

Dies motivierte jüngst die Anwendung von *Euler-Euler Verfahren* zur Berechnung der triboelektrischen Aufladung von Pulvern [1–3]. Hierbei wird auch das Pulver als kontinuierliche Phase aufgefasst. Folglich werden (ähnlich wie bei den Navier-Stokes Gleichungen) Transportgleichungen für lokal gemittelte Eigenschaften der Partikel gelöst. Dadurch ist der Rechenaufwand unabhängig von der Anzahl der Partikel und die Berechnung realer Strömungen in Anlagen möglich. Nachteil dieser Verfahren ist allerdings, dass die Reduktion der Partikeleigenschaften auf gemittelte Größen lediglich die Behandlung von mono- oder bi-dispersen Pulvern zulässt. Dies widerspricht den Gegebenheiten in realen Pulvern, die stark polydisperse Eigenschaften aufweisen.

Einen Ausweg bietet die *Direct Quadrature Method Of Moments* (DQMOM) [4]. Hierbei werden die Momente der Verteilungsfunktionen der Partikeleigenschaften (z.B. Durchmesser, Geschwindigkeiten) im Euler'schen Bezugssystem transportiert. Dadurch werden die Vorteile des Euler'schen Bezugssystems, die Recheneffizienz bei einer großen Anzahl Partikeln, mit der Möglichkeit der akkuraten Beschreibung polydisperser Systeme kombiniert.

Daher war die Zielsetzung der Forschungsarbeit die Entwicklung eines numerischen Modells zur Vorhersage der triboelektrischen Aufladung während des pneumatischen Transports von realen polydispersen Pulvern. Dies beinhaltete die Erweiterung der DQMOM und die Implementierung entsprechender Modelle zur Berechnung der Partikelaufladung. Die beantragten Fördermittel wurden zur Unterstützung eines Studenten eingesetzt, durch den das Projekt unter wissenschaftlicher Leitung des Antragstellers bearbeitet wurde. Diese Arbeiten werden im folgenden zusammenfassend dargestellt.

### 2. Durchgeführter Arbeitsplan

#### AP I. Entwicklung der DQMOM für Strömungen geladener Partikel

Der entwickelte DQMOM Löser berechnet die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion von sich aufladenden Partikeln,

$$\zeta_p = \zeta_p(\mathbf{u}_p, r_p, Q_p; \mathbf{x}, t), \quad (1)$$

am Ort  $\mathbf{x}$  zum Zeitpunkt  $t$ . Hierin ist  $\zeta_p$  die wahrscheinliche Anzahl Partikeln mit der Geschwindigkeit  $\mathbf{u}_p$ , dem Radius  $r_p$  und der Aufladung,  $Q_p$ . Gemäß DQMOM wird  $\zeta_p$  durch  $N$  Quadraturen

approximiert und anschließend die Stützstellen ( $u_{p,n}, r_{p,n}, Q_{p,n}, n = 1 \dots N$ ) und Wichtungen ( $w_n, n = 1 \dots N$ ) der Quadraturen direkt transportiert. Durch diesen Ansatz wird der Polydispersität des Pulvers mittels DQMOM voll Rechnung getragen. Hierbei ergab sich die Notwendigkeit, innerhalb dieses Arbeitsschritts eine zusätzliche Transportgleichung für die Stützstellen der Partikelladung zu implementieren und zu lösen,

$$\frac{\partial(w_n r_{p,n} Q_{p,n})}{\partial t} + \frac{\partial(w_n r_{p,n} Q_{p,n} u_{p,n})}{\partial x} = d_n. \quad (2)$$

Auf der rechten Seite der Gleichung findet sich ein Quellterm, der die Änderung der Partikelladung beschreibt. Die Transportgleichungen der übrigen Stützstellen ( $u_p, r_p$ ) werden entsprechend dem in Ref. [5] beschriebenen Verfahren berechnet.

### AP II. Implementierung von triboelektrischen Modellen

Während im vorhergehenden AP die Transportgleichungen für ein polydisperses aufgeladenes Pulver implementiert wurden, wurden in diesem AP Modelle formuliert, die die Änderung der Partikelladung wiedergeben. Die Partikelladung wird neben dem konvektiven Ladungstransport, der durch den zweiten Term auf der linken Seite von Gleichung (2) berechnet wird, durch zwei Mechanismen verändert: Zum einen durch triboelektrische Aufladung, z.B. an Rohrwänden, und zum anderen durch Ladungsübertragung während Kollisionen zwischen Partikeln, d.h. Ladungsdiffusion. Diese beiden Mechanismen wurden innerhalb dieses AP mathematisch so modelliert, dass sich hieraus der Quellterm auf der rechten Seite von Gleichung (2) bestimmen lässt.

### AP III. Simulation technischer Partikelströmungen

Im finalen AP des Projekts wurde der kontinuierliche Pulvertransport durch einen Kanal ( $\ell = 40 \text{ cm}, H = 4 \text{ cm}$ ) mittels des entwickelten DQMOM Lösers simuliert. Hierbei befinden sich zu jedem Zeitpunkt  $10^8 - 10^9$  Partikel im Rohr; eine Anzahl, die die Möglichkeiten heutiger Euler-Lagrange Verfahren bei weitem übersteigt.

## 3. Ergebnisse

Die mathematische Modellentwicklung und die Simulationsergebnisse wurden bei Projektende in einer Publikation [6] zusammengefasst und zur Veröffentlichung eingereicht. Im folgenden werden einige beispielhafte Ergebnisse dargestellt.

Der neu entwickelte Löser ist in der Lage, realistische Eulersche Felder für die Aufladung des polydispersen Pulvers vorherzusagen. Abbildung 1 zeigt die lokale durchschnittliche Partikelladung. Links repräsentiert die blaue Farbe die niedrig geladenen Teilchen am Einlass des Kanals. Die rote Zone nahe der oberen und unteren Wand besteht aus den Partikeln, die aufgrund von Kollisionen mit der Wand ihre Sättigungsladung ( $q_{eq}$ ) erreicht haben. Die Abbildung spiegelt den Anstieg der Teilchenladung in Strömungsrichtung wider. Während des Transports in  $x$ -Richtung nehmen die Partikel Ladung an den Wänden auf. Diese akkumulierte Ladung konvektiert gleichzeitig stromabwärts und wandert durch Diffusion in Richtung Kanalmitte. Aufgrund dieser Bewegung in beiden Raumrichtungen bildet sich die dreieckige Form der niedrig geladenen Teilchen,

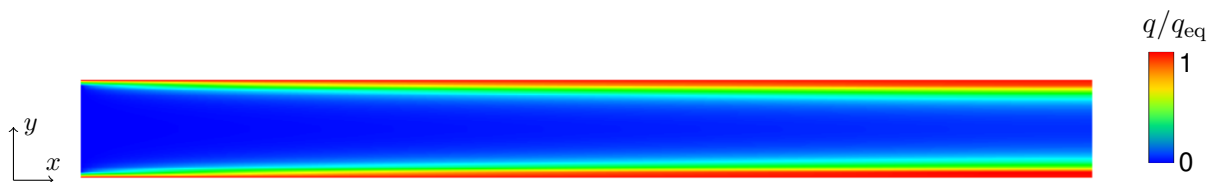


Abb. 1: Entwicklung der gemittelten Partikelladung im Strömungskanal.

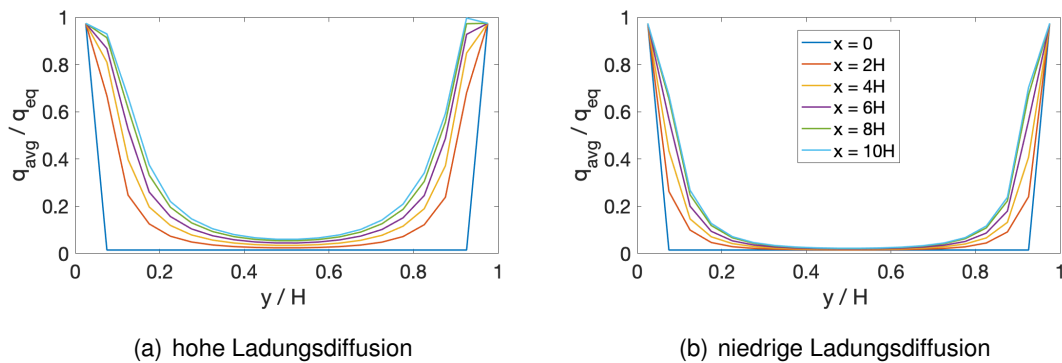


Abb. 2: Profile der gemittelten Partikelaufladung an mehreren Kanalquerschnitten.

also der blaue gefärbte Bereich am Einlass aus. Der Ladungstransport in wandnormaler Richtung ist auch für das Wachstum des roten Bereichs in Richtung des Auslasses verantwortlich.

Für die gleiche Simulation sind in Abbildung 2(a) Profile der gemittelten Partikelaufladung an mehreren Kanalquerschnitten dargestellt. Das Profil, das sich am nächsten zum Einlass befindet, spiegelt die Einlass- und Wandgrenzbedingungen wider. Dann wandert die Ladung in Strömungsrichtung von den gesättigten Wänden durch Ladungsdiffusion zur Mitte der Strömung. In jedem Querschnitt in stromabwärtiger Richtung steigt die durchschnittliche Teilchenladung an.

Abbildung 2(b) zeigt eine Simulation in der der Ladungsdiffusionskoeffizient im Vergleich zum vorherigen Fall verringert ist. In dieser Rechnung laden sich die Teilchen langsamer auf. Dieser Effekt lässt sich durch das Gleichgewicht der Ladungsbewegung senkrecht und parallel zur Wand erklären. Aufgrund der verringerten Diffusion wird der senkrechte Ladungstransport verzögert, was zu einer dünneren Ladungsgrenzschicht führt.

#### 4. Fazit

Im Rahmen des geförderten Projekts entstand durch einen interdisziplinären Ansatz ein neuer numerischer Löser, der die Untersuchung der elektrostatischen Aufladung polydisperser Partikelströmungen ermöglicht. Unter anderem auf Grundlage der in diesem Vorhaben erzielten Ergebnisse, wurden umfangreiche Fördermittel eingeworben. Diese ermöglichen die langfristige Etablierung einer Forschungsgruppe auf dem Gebiet der elektrostatischen Aufladung von Strömungen. Ich danke der Max-Buchner Forschungsförderung für die Unterstützung der wissenschaftlichen Arbeiten.

#### 5. Literatur

- [1] Kolehmainen J, Ozel A, and Sundaresan S. *J. Fluid Mech.*, 848:340–369, 2018.
- [2] Ray M, Chowdhury F, Sowinski A, Mehrani P, and Passalacqua A. *Chem. Eng. Sci.*, 197:327–344, 2018.
- [3] Ray M, Chowdhury F, Sowinski A, Mehrani P, and Passalacqua A. *Phys. Fluids*, 32(2):023302, 2020.
- [4] Marchisio D L and Fox R O. *J. Aerosol Sci.*, 36(1):43–73, 2005.
- [5] Grosshans H, Gopireddy S R, and Gutheil E. In *ILASS – Europe 2014, 26th Ann. Conf. Liquid Atomiz. Spray Syst., 8-10 Sep. 2014, Bremen, Germany*. 2014.
- [6] Zeybek M and Grosshans H. *submitted to Phys. Fluids*, 2020.