



DECHEMA

VDI

TAGUNGSHANDBUCH

29. Februar– 02. März 2016

Rheintal Kongresszentrum / NH-Hotel • Bingen

**Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen
Agglomerations- und Schüttguttechnik,
Computational Fluid Dynamics
und Mehrphasenströmungen**

PROCESSNET
EINE INITIATIVE VON DECHEMA UND VDI-GVC

VORBEREITUNGSKOMITEE

Prof. Dr.-Ing. habil Udo Fritsching, Universität Bremen
Dr. Oliver Bey, BASF SE, Ludwigshafen
Prof. Dr.-Ing. Martin Sommerfeld, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Dr. Georg Skillas, Evonik Industries AG, Hanau
† Prof. Dr.-Ing. habil. Jürgen Tomas, Otto-von-Guericke-Universität, Magdeburg
Dipl.-Ing. Harald Heinrici, Schwedes + Schulze Schüttguttechnik GmbH, Wolfenbüttel
Dr.-Ing. Uwe Delfs, VDI e.V., Düsseldorf
Dr. rer. nat. Richard Sass, DECHEMA e.V., Frankfurt am Main

SPONSOR

Wir danken für die finanzielle Unterstützung durch



Sonntag, 28.02.2016

ab 19:30 *Vorabendliches Beisammensein auf Selbstzahlerbasis im Restaurant Zollamt, Hafenstraße 3 (direkt am Rheinufer), Bingen am Rhein, Tel.: 0672 1-1869666, www.zollamtbingen.de, Stichwort: ProcessNet
Anmeldung erforderlich*

Montag, 29.02.2016

09:40 – 09:50	<i>Raum 9+10 im UG Agglomerations- und Schüttguttechnik Begrüßung</i>	
09:50 – 10:20	Mechanics of millimeter sized particles - A comprehensive overview <u>A. Russell</u> ¹ ; P. Müller ¹ ; J. Tomas ¹ ¹ Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg	13
10:20 – 10:50	Vergleich der Modelle von Hertz und Zener beim elastischen Stoßvorgang <u>P. Müller</u> ¹ ; R. Böttcher ² ; M. Trüe ¹ ; A. Russell ¹ ; J. Tomas ¹ ¹ Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg	14
10:50 – 11:20	Charakterisierung des mikromechanischen Kontaktverhaltens feiner adhäsiver Partikel - Ein Überblick <u>K. Mader-Arndt</u> ¹ ; J. Tomas ¹ ¹ Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg	15
11:20 – 11:50	Einfluss der Prozessparameter beim Pelletieren auf die mechanischen Eigenschaften der erzeugten γ- Aluminiumoxid (γ-Al₂O₃) Pellets <u>Z. Radeva</u> ¹ ; J. Tomas ¹ ¹ Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg	16

09:40 – 09:50	<i>Raum 5 im EG - Rochus-Saal</i> Computational Fluid Dynamics - Blasen/Blasensäulen <i>Begrüßung</i>	
09:50 – 10:20	Detaillierte Beschreibung der Chemisorption in Blasensäulen mit einem OpenFOAM basierten Euler-Euler/PBM CFD Code <u>M. Hlawitschka</u> ¹ ; S. Drefenstedt ¹ ; J. Schäfer ¹ ; H. Bart ¹ ¹ TU Kaiserslautern	17
10:20 – 10:50	Simulation von Blasenströmungen mit Modellierung der ellipsoiden Form der Blasen <u>A. Weber</u> ¹ ; H. Bart ¹ ¹ TU Kaiserslautern	18
10:50 – 11:20	Modelling of bubble dynamics in the frame of Euler/Lagrange calculations of bubble columns M. Sommerfeld ¹ ; <u>M. Muniz</u> ¹ ¹ Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg	19
11:20 – 11:50	Euler-Euler Modeling of Mass-Transfer in Bubbly Flows <u>R. Rzehak</u> ¹ ; E. Krepper ¹ ¹ Helmholtz-Zentrum Dresden – Rossendorf	20
09:40 – 09:50	<i>Raum 3+4 im EG</i> Mehrphasenströmungen - liquid/liquid - Emulsionen <i>Begrüßung</i>	
09:50 – 10:20	Einfluss der Fluidynamik auf das Koaleszenzverhalten von Einzeltropfen in O/W und W/O-Systemen <u>J. Villwock</u> ¹ ; J. Kamp ¹ ; M. Kraume ¹ ¹ TU Berlin	21
10:20 – 10:50	Tropfengrößenverteilungen in der zweiphasigen Rohrströmung <u>M. Lichti</u> ¹ ; H. Bart ¹ ¹ TU Kaiserslautern	22
10:50 – 11:20	<i>Der ursprünglich vorgesehene Vortrag von Herrn Walzel fällt aus. NEU:</i> Modellierung und numerische Simulation des kapillaren Flüssigkeitsaufstieges in idealen Kugelschüttungen in einem dünnen Spalt <u>T. Neumann</u> ¹ ; K. Boettcher ¹ ; P. Ehrhard ¹ ¹ TU Dortmund	58
11:20 – 11:50	Tropfenbildung beim Premix-Emulgieren mit porösen Strukturen <u>L. Luhede</u> ¹ ; U. Fritsching ¹ ¹ Universität Bremen	24
11:50 – 12:50	<i>Mittagspause</i>	
	<i>Raum 9+10 im UG</i> Agglomerations- und Schüttguttechnik	
12:50 – 13:20	Influence of liquid injection on collision dynamics of colliding solids: rebound and rotation analysis <u>B. Crüger</u> ¹ ; S. Heinrich ¹ ; S. Antonyuk ² ; Y. Tang ³ ; N. Deen ³ ; J. Kuipers ³ ¹ TU Hamburg-Harburg; ² TU Kaiserslautern; ³ Eindhoven University of Technology/NL	25
13:20 – 13:50	Mechanische Eigenschaften von gesinterten Polymerpartikeln – Temperatur-, zeit- und größenabhängiges Kontaktverhalten <u>R. Fuchs</u> ¹ ; T. Weinhart ² ; L. Gilson ¹ ; H. Butt ¹ ; S. Luding ² ; M. Kapp ¹ ¹ MPI für Polymerforschung, Mainz; ² University of Twente, Enschede/NL	26
13:50 – 14:20	Kontinuumsmechanische Simulation von Kapillarbrücken zwischen Nanopartikeln <u>M. Dörmann</u> ¹ ; H. Schmid ¹ ¹ Universität Paderborn	27
14:20 – 14:50	Numerische und experimentelle Untersuchungen an durchströmten Schüttungen nicht-sphärischer Partikel <u>H. Kruggel-Emden</u> ¹ ; K. Vollmari ¹ ; T. Oschmann ¹ ; B. Kravets ¹ ¹ Ruhr-Universität Bochum	28

Raum 5 im EG - Rochus-Saal
Computational Fluid Dynamics - Blasen/Blasensäulen

12:50 – 13:20	Direct Numerical Simulations of Gas-liquid Flows in Subdomains of Structured Innovative Multiphase Chemical Reactors <u>X. Cai</u> ¹ ; M. Wörner ¹ ; H. Marschall ² ; O. Deutschmann ¹ ¹ Karlsruher Institut für Technologie (KIT); ² TU Darmstadt	29
13:20 – 13:50	Simulation von einzelnen aufsteigenden Blasen mit der Gradienten-Lattice-Boltzmann-Methode <u>P. Malli</u> ¹ ; M. Sommerfeld ¹ ¹ Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg	30
13:50 – 14:20	Eine Interface Tracking Methode für Stofftransport an einer aufsteigenden Blase <u>P. Weber</u> ¹ ; H. Marschall ¹ ; D. Bothe ¹ ¹ TU Darmstadt	31
14:20 – 14:50	On the Various Facets, Models & Applications of Industrial Multiphase Flow <u>D. Lakehal</u> ¹ ¹ ASCOMP AG, Zürich/CH	32

Raum 3+4 im EG
Mehrphasenströmungen - gas/liquid - Blasenströmungen

12:50 – 13:20	Fluidynamik von Einzelblasen mit überlagertem Stofftransport <u>D. Merker</u> ¹ ; L. Böhm ¹ ; M. Kraume ¹ ¹ TU Berlin	35
13:20 – 13:50	Experimentelle Analyse der Grenzschichtdynamik in Blasenströmungen <u>J. Timmermann</u> ¹ ; M. Hoffmann ¹ ; M. Schlüter ¹ ¹ TU Hamburg-Harburg	36
13:50 – 14:20	Relation between Bubble Dispersion and Liquid Flow Field in Bubble Columns: A Complementary Study using Ultrafast X-Ray Tomography and Radioactive Particle Tracking <u>S. Azizi</u> ¹ ; A. Yadav ² ; Y. Lau ¹ ; S. Roy ² ; M. Schubert ¹ ¹ HZDR, Dresden; ² Indian Institute of Technology Delhi, New Delhi/IND	37
14:20 – 14:50	Simulation des Einzelblasenaufstiegs in engen Kanälen mittels OpenFOAM L. Böhm ¹ ; <u>M. Kolano</u> ¹ ; M. Kraume ¹ ¹ TU Berlin	38

14:50 – 15:00 *Wechselpause*

15:00 – 15:30 *Raum 3+4 im EG*
Verleihung Johannes Möller-Preis 2016 und Vortrag des Preisträgers

Posterprogramm

ab 15:30 *Raum 3+4 im EG*
Posterkurzvorträge aller Fachgruppen jeweils 2 Folien, max. 3 min.

P.01	Highly dispersible surface modified dry powder inhalable formulation of voriconazole for invasive pulmonary aspergillosis S. Arora ¹ ; M. Haghi ² ; <u>M. Kapp</u> ³ ; D. Traini ² ; S. Jain ¹ ¹ National Institute of Pharmaceutical Education and Research, India, Nagar/IND; ² The University of Sydney/AUS; ³ MPI für Polymerforschung, Mainz	39
P.02	Usage of bonded-particle model to investigate packings of non-spherical particles <u>M. Dosta</u> ¹ ; S. Heinrich ² ¹ TU Hamburg-Harburg; ² Hamburg University of Technology	40

P.03	Entwicklung einer Austrageinrichtung zur Steuerung der Massenstromdichte von Schüttgütern <u>G. Franke</u> ¹ ; F. Weigler ¹ ; J. Mellmann ¹ ; J. Tomas ² ¹ Leibniz-Institut für Agrartechnik Potsdam-Bornim e.V.; ² Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg	41
P.04	Determination of the fractal dimension of soft agglomerates produced in spray fluidized bed R. Pashminehazar ¹ ; A. Kharaghani ¹ ; <u>A. Bück</u> ¹ ; E. Tsotsas ¹ ¹ Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg	42
P.05	Charakterisierung des Partikelaustauschs in mehrstufigen Wirbelschichtprozessen – CFD Simulation und experimentelle Validierung <u>P. Lau</u> ¹ ; M. Potthoff ² ; M. Kind ¹ ¹ Karlsruher Institut für Technologie (KIT); ² Uhde Fertilizer Technology, Roermond/NL	43
P.06	Veränderung des Fließverhaltens von kohäsiven Schüttgütern durch Oberflächenmodifizierung <u>Z. Todorova</u> ¹ ; W. Hintz ¹ ; J. Tomas ¹ ¹ Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg	44
P.07	Functionalization of protein-based aerogels by coating in a spouted bed <u>M. Goslinska</u> ¹ ; S. Heinrich ¹ ; I. Selmer ¹ ; I. Smirnova ¹ ; C. Kleemann ² ; U. Kulozik ² ¹ TU Hamburg-Harburg; ² TU München	45
P.08	Röntgentomografische Analyse der Mikrostruktur unterschiedlich stark verdichteter Lithium-Ionen-Batterieelektroden <u>A. Diener</u> ¹ ; L. Torbahn ¹ ; W. Haselrieder ¹ ; A. Kwade ¹ ¹ TU Braunschweig	46
P.09	Modifizierung der Flieseigenschaften von feinen Glaspartikeln durch die Veränderung der Oberflächenhaftkräfte <u>L. Torbahn</u> ¹ ; A. Kwade ¹ ¹ TU Braunschweig	47
P.10	Quantitative Strukturbeschreibung von Granulaten dichter zufälliger Packung: Strukturparameter und Eigenschaften <u>J. Harnacke</u> ¹ ; R. Kohlus ¹ ¹ Universität Hohenheim, Stuttgart	48
P.11	Untersuchung zur dreidimensionalen Verfolgung der Partikelbewegung in einer zylindrischen Wirbelschicht <u>V. Idakiev</u> ¹ ; A. Bück ¹ ; E. Tsotsas ¹ ; L. Mörl ¹ ¹ Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg	49
P.12	Untersuchung der Granulateigenschaften bei der Wirbelschichtgranulation mit induktiver Beheizung <u>V. Idakiev</u> ¹ ; A. Bück ¹ ; E. Tsotsas ¹ ; L. Mörl ¹ ¹ Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg	50
P.13	On the hydrodynamics of airlift reactors: CFD Simulations <u>T. Ziegenhein</u> ¹ ; R. Rzehak ¹ ; D. Lucas ¹ ¹ Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf	51
P.14	Modellierung und numerische Simulation der Strömung eines Elektrolyts in einem Lithium-Ionen-Akkumulator <u>K. Boettcher</u> ¹ ; T. Neumann ¹ ; P. Ehrhard ¹ ¹ TU Dortmund	52
P.15	Segregationsverhalten von unterschiedlich benetzenden Partikelsystemen in feuchten Feststoffmischprozessen <u>S. Schmelzle</u> ¹ ; H. Nirschl ¹ ¹ Karlsruher Institut für Technologie (KIT)	53
P.16	Simulation der Wirkstofffreisetzung in der Blattrührer-Apparatur des Arzneibuchs <u>G. Schaldach</u> ¹ ; M. Thommes ² ; M. Kelz ² ¹ TU Dortmund; ² TU Dortmund	54
P.17	Simulation eines Reaktors zur ablativen Flash-Pyrolyse mit COMSOL Multiphysics <u>B. Harder</u> ¹ ; T. Schulzke ¹ ; S. Schlüter ¹ ; G. Deerberg ¹ ¹ Fraunhofer-Institut für Umwelt-, Sicherheits- und Energietechnik UMSICHT, Oberhausen	55

P.18	catFM: ein Algorithmus zur automatischen Erzeugung von detaillierten Schwammstrukturen für CFD-Simulationen	56
	G. Wehinger ¹ ; <u>M. Kraume</u> ¹ ¹ TU Berlin	
P.19	Modellierung und numerische Simulation des kapillaren Flüssigkeitsaufstieges in idealen Kugelschüttungen in einem dünnen Spalt	58
	<u>T. Neumann</u> ¹ ; K. Boettcher ¹ ; P. Ehrhard ¹ ¹ TU Dortmund	
P.20	Optimierung der Durchströmung von Kunststoffgroßkisten für die Apfellagerung in einem Windkanal	59
	<u>H. Scaar</u> ¹ ; U. Praeger ¹ ; M. König ¹ ; K. Gottschalk ¹ ; J. Mellmann ¹ ; M. Geyer ¹ ; M. Geyer ¹ ¹ Leibniz-Institut für Agrartechnik Potsdam-Bornim e.V.	
P.21	Einfluss verschiedener Kräfte auf Partikel in instationären Strömungen in Fluidphasenresonanzmischern	61
	<u>S. Schmalfuß</u> ¹ ; M. Sommerfeld ¹ ¹ Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg	
P.22	Lineare Stabilitätsuntersuchung der Ausbreitungsströmung eines dünnen Tropfens auf einer rotierenden Platte mit aufgeprägtem Temperaturverlauf	62
	<u>K. Boettcher</u> ¹ ; T. Externbrink ¹ ; M. Blank ¹ ¹ TU Dortmund	
P.23	Experimentelle Untersuchung des Einflusses von turbulenten Strömungsstrukturen auf den Stofftransport	63
	<u>S. Rüttinger</u> ¹ ; M. Hoffmann ¹ ; M. Schlüter ¹ ¹ TU Hamburg-Harburg	
P.24	Einfluss Hydrodynamischer Instabilitäten auf das Zerstäubungsverhalten von Hohlkegeldüsen	64
	<u>S. Egger</u> ¹ ; M. Piesche ¹ ¹ Universität Stuttgart	
P.25	Analyse der Phasenseparation in liegenden Abscheidern mittels CFD und optischer Bildmesstechnik	65
	<u>J. Steinhoff</u> ¹ ; M. Lichti ¹ ; H. Bart ¹ ¹ TU Kaiserslautern	
P.26	Liquid Circulation and Swarm Dynamics in Bubble Columns with Internals	66
	<u>F. Möller</u> ¹ ; U. Hampel ² ; M. Schubert ¹ ¹ Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf; ² TU Dresden / Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf	
P.27	Gewinnung eines feinen Aerosols mittels Tropfenabscheidung	67
	<u>R. Gorny</u> ¹ ; G. Schaldach ¹ ; P. Walzel ¹ ; M. Thommes ¹ ¹ TU Dortmund	
P.28	PAT für die Schmelzextrusion: Implementierung einer neuen UV/Vis-Spektroskopie-Methode	68
	<u>J. Wesholowski</u> ¹ ; A. Berghaus ² ; M. Thommes ³ ¹ TU Dortmund; ² ColVisTec AG, Berlin; ³ TU Dortmund	
LMP.29	Influence of hydrophobic/hydrophilic surfaces on gas/liquid membrane separation	129
	<u>K.M. Dyrda</u> ¹ ; K. Haas-Santo ¹ ; R. Dittmeyer ¹ ¹ Karlsruher Institute für Technologie, Eggenstein-Leopoldshafen	

anschließend **Posterdiskussion** im Foyer mit Kaffee und Kuchen

18:00 – 19:00 **Raum 3+4 im EG**
Beiratssitzung der FGr-Mehrphasenströmungen (nur berufene Mitglieder)

ab 19:30 **Bustransport zum Abendlichen Beisammensein auf dem Weingut Hildegardshof in Bingen-Büdesheim - Weinprobe mit 4 Weinen und anschließender rustikale Vesper mit Blutwurst, Leberwurst, Hausmacher Wurst, Schinken, Käse und Brot**
€ 35,50 pro Person inkl. Bustransport, Anmeldung erforderlich

Dienstag, 01.03.2016

08:30 – 08:50	<i>Raum: Hildegardis-Saal im EG</i> <i>Begrüßung zur Gemeinsamen Plenarsitzung mit Erinnerungsvortrag für Professor Tomas</i>	
08:50 – 09:35	Direct numerical simulation of a liquid-solid fluidized bed: comparison with experimental data A. Ozel ^{a,b,d} ; J.C. Brändle de Motta ^{a,b} ; M. Abbas ^{c,d} ; P. Fede ^{a,b} ; O. Masbernat ^{c,d} ; S. Vincent ^e ; J.-L. Estivalezes ^{a,b} ; O. Simonin ^{a,b} ^a Université de Toulouse/F; ^b CNRS, Toulouse/F; ^c Université de Toulouse/F; ^d Fédération de recherche FERMAT, Toulouse/F; ^e Université Paris-Est Marne-La-Vallée/F	69
09:35 – 10:05	Solving process engineering problems by applying CFD and DEM as a versatile tool in chemical industry S. Lipp ¹ ; C. Kunkelmann ¹ ; M. Schilling ¹ ¹ BASF SE, Ludwigshafen	70
10:05 – 10:35	Aufgabenstellungen aus den Bereichen Agglomerations- und Schüttguttechnik, Mehrphasenströmungen und Computational Fluid Dynamics in der Kunststoff-Aufbereitung H. Schneider ¹ ; T. König ² ; R. Hingmann ³ ; H. Wilms ⁴ ¹ Zeppelin Systems GmbH, Friedrichshafen; ² Covestro Deutschland AG, Leverkusen; ³ BASF SE, Ludwigshafen; ⁴ Zeppelin Power Systems GmbH & Co KG, Achim	71
10:35 – 11:05	T-MAPPP EU project - short overview on Multiscale Analysis of Multi-Phase Particulate Processes S. Luding ¹ ¹ Universität Twente, AE Enschede/NL	73
11:05 – 11:30	<i>Kaffeepause</i>	
	<i>Raum 9+10 im UG</i> Agglomerations- und Schüttguttechnik	
11:30 – 12:00	Simulation of an Tablet-Coating Process at the Industrial Scale P. Böhling ¹ ; J. Khinast ² ; A. Funke ³ ; H. Rehbaum ⁴ ; K. Knop ⁵ ; P. Kleinebudde ⁵ ¹ Research Center Pharmaceutical Engineering GmbH, Graz/A; ² TU Graz/A; ³ Bayer Global Chemical and Pharmaceutical Development, Berlin; ⁴ L.B. Bohle Maschinen + Verfahren GmbH, Ennigerloh; ⁵ Heinrich Heine University Düsseldorf	74
12:00 – 12:30	Kalibrierung von Diskrete-Elemente-Modellen für schlecht fließfähige Pulver C. Bierwisch ¹ ; A. Hashibon ¹ ; T. Breinlinger ¹ ; T. Kraft ¹ ¹ Fraunhofer IWM, Freiburg	76
12:30 – 13:00	Beschreibung des Einflusses der Partikelform auf das Verhalten des Schüttgutes beim Mischen mittels DEM-Simulationen S. Kozhar ¹ ; M. Dosta ¹ ; S. Heinrich ¹ ; S. Antonyuk ² ; R. Grudda ³ ; U. Bröckel ³ ¹ TU Hamburg-Harburg; ² TU Kaiserslautern; ³ Umwelt-Campus Birkenfeld	77

Raum 5 im EG - Rochus-Saal
Computational Fluid Dynamics - Flüssig/Flüssig-Systeme

11:30 – 12:00	Simulation der Extraktion in einer flüssig/flüssig Pfropfen-strömung in einem Mikrokapillarreaktor <u>C. Heckmann</u> ¹ ; P. Ehrhard ¹ ¹ TU Dortmund	78
12:00 – 12:30	CFD-Modellierung von Dispersionen in Schwerkraftabscheidern <u>J. Steinhoff</u> ¹ ; F. Gebauer ¹ ; M. Hlawitschka ¹ ; H. Bart ¹ ¹ TU Kaiserslautern	79
12:30 – 13:00	Numerical study of binary droplet collisions at high Weber numbers <u>M. Liu</u> ¹ ; D. Bothe ¹ ¹ TU Darmstadt	80

Raum 3+4 im EG
Mehrphasenströmungen - gas/liquid - Zerstäubung

11:30 – 12:00	Bewegung und Zerfall feststoffbeladener Flüssigkeitsstrahlen im Zentrifugalfeld bei aufgeprägter Gasströmung <u>T. Kalmbach</u> ¹ ; M. Hauber ¹ ; M. Liebing ¹ ; M. Piesche ¹ ¹ Universität Stuttgart	81
12:00 – 12:30	Kontaktlinien-Modellierung in einer algebraischen Volume-of-Fluid Methode auf unstrukturierten Gittern mit OpenFOAM® <u>D. Rettenmaier</u> ¹ ; D. Deising ¹ ; H. Marschall ¹ ; C. Tropea ¹ ¹ TU Darmstadt	82
12:30 – 13:00	Wechselwirkung von Sprühnebeln in einem Labortrockner <u>L. Pasternak</u> ¹ ; M. Sommerfeld ¹ ¹ Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg	83

13:00 – 14:00 *Mittagspause*

Raum 9+10 im UG
Agglomerations- und Schüttguttechnik

14:00 – 14:30	Fließeigenschaften von feuchtem Glasgemenge <u>A. Schumann</u> ¹ ; T. Mütze ¹ ; U. Peuker ¹ ¹ TU Bergakademie Freiberg	85
14:30 – 15:00	Einsatz von Fließhilfsmittel beim Lagern von Glasgemenge <u>K. Krüger</u> ¹ ; A. Schumann ¹ ; T. Mütze ¹ ¹ TU Bergakademie Freiberg	86
15:00 – 15:30	Comparing dry and wet granular matter <u>L. Gilson</u> ¹ ; R. Fuchs ¹ ; G. Auernhammer ¹ ¹ MPI für Polymerforschung, Mainz	87
15:30 – 16:00	Messung von Normal-, Scher-Kräften und Drehmomenten auf Partikel unter Verwendung eines Rheometers <u>R. Grudda</u> ¹ ; U. Bröckel ¹ ; S. Heinrich ² ; M. Dosta ² ; S. Kozhar ² ; S. Antonyuk ³ ¹ HS Trier, Umwelt-Campus Birkenfeld; ² TU Hamburg-Harburg; ³ TU Kaiserslautern	88

Raum 5 im EG - Rochus-Saal
Computational Fluid Dynamics - Partikelbeladene Strömungen

14:00 – 14:30	Analyse des Einflusses von Turbulenz auf den Wärmeübergang zwischen sphärischen Partikeln und planaren Oberflächen <u>G. Brösigke</u> ¹ ; J. Repke ¹ ; A. Herter ² ; M. Rädle ² ¹ TU Freiberg; ² HS Mannheim	90
14:30 – 15:00	Experimental and numerical investigation of a zigzag air classifier C. Roloff ¹ ; K. Kerst ¹ ; E. Lukas ¹ ; J. Tomas ¹ ; <u>D. Thevenin</u> ¹ ¹ Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg	91
15:00 – 15:30	Analysis of the effect of wall roughness and inter-particle collisions on free jet dispersion from a long injection pipe* <u>O. Sgrott</u> ¹ ; G. Novelletta-Ricardo ¹ ; M. Sommerfeld ¹ ¹ Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg	92
15:30 – 16:00	Inertial Dilute Particulate Fluid Flow Simulations with an Euler-Euler Lattice Boltzmann Method for Cross Flow Filtration <u>R. Trunk</u> ¹ ; T. Henn ¹ ; H. Nirschl ¹ ; M. Krause ¹ ¹ Karlsruher Institut für Technologie (KIT)	93

Raum 3+4 im EG
Mehrphasenströmungen - gas/liquid/solid - Messtechnik und Modellierung

14:00 – 14:30	Thermodynamische Modellierung von Polymerlösungen <u>S. Hooshyar</u> ¹ ; N. Germann ¹ ¹ TU München, Freising	94
14:30 – 15:00	Modellierung von Rührreibschweißprozessen mit Hilfe eines gekoppelten Immersed-Boundary-/Volume-of-Fluid Ansatzes <u>U. Janoske</u> ¹ ; M. Bürger ¹ ¹ Bergische Universität Wuppertal	95
15:00 – 15:30	Selektive Phasengeschwindigkeitsmessung in Blasenströmungen durch den kombinierten Einsatz einer Heißfilmsonde und der ultraschnellen Röntgentomographie <u>R. Kipping</u> ¹ ; H. Kryk ² ; U. Hampel ² ¹ TU Dresden; ² Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf	96
15:30 – 16:00	Gittersensormesstechnik zur Aufklärung der Phasenverteilung in mehrphasigen Apparaten <u>C. Hecht</u> ¹ ; L. Schlusemann ¹ ; F. van Holt ¹ ; A. Lesniak ¹ ; M. Grünewald ¹ ¹ Ruhr-Universität Bochum	97

16:00 – 16:30 *Kaffeepause*

Raum 9+10 im UG
Agglomerations- und Schüttguttechnik

16:30 – 17:00 **Spouted bed spray granulation for fabricating metal-polymer composites** 98
E. Eichner¹; V. Salikov¹; M. Dosta¹; S. Heinrich¹; G. Schneider¹
¹ TU Hamburg-Harburg

17:00 – 17:30 **Methodik zur Berechnung des Partikelwachstums bei der Wirbelschicht-Sprühgranulation unter Verwendung von CFD-Simulation und Populationsbilanzierung** 99
P. Lau¹; M. Potthoff²; M. Kind¹
¹ Karlsruher Institut für Technologie (KIT); ² Uhde Fertilizer Technology, Roermond/NL

Vortrag fällt aus

17:30 – 18:00 **Wirbelschichtcoating mit schmelzbaren Überzügen - experimentelle Ansätze zur Aufklärung von mesoskaligen Effekten** 100
M. Müller¹; K. Sommer¹; P. Först¹
¹ TU München, Freising

Raum 5 im EG - Rochus-Saal
Computational Fluid Dynamics - CFD-DEM

16:30 – 17:00 **CFD-DEM simulation of particle collision dynamics in a polydisperse gas-solid fluidized bed** 101
Z. Jiang¹; A. Bück¹; E. Tsotsas²
¹ Otto-von-Guericke University Magdeburg

17:00 – 17:30 **CFDEM®-Modellierung eines Coatingprozesses in einer dreidimensionalen prismatischen Strahlschicht** 102
S. Pietsch¹; S. Heinrich¹; K. Karpinski²; M. Schönherr²; F. Kleine-Jäger²
¹ TU Hamburg-Harburg; ² BASF SE, Ludwigshafen

17:30 – 18:00 **Strömungsmechanische Optimierung des Dächerschachttrockners mittels CFD und DEM** 103
H. Scaar¹; F. Weigler¹; F. Georg¹; M. Jochen¹
¹ Leibniz-Institut für Agrartechnik Potsdam-Bornim e.V.

Raum 3+4 im EG
Mehrphasenströmungen - gas/solid - Partikeltechnik

16:30 – 17:00 **Funktionalisierung von Polymermaterialien für Laserstrahlschmelzverfahren** 104
M. Sachs¹; J. Schmidt¹; W. Peukert¹; K. Wirth¹
¹ Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

17:00 – 17:30 **Experimentelle Untersuchung der lokalen Strömungsverhältnisse in einer 1 MWth Wirbelschichtanlage mittels eines kapazitiven Messsystems** 105
A. Daikeler¹; J. Ströhle¹; B. Eppe¹
¹ TU Darmstadt

17:30 – 18:00 **Dynamische Fließschemasimulation der Fluidmechanik in gekoppelten Wirbelschichtreaktoren für das Chemical-Looping-Verfahren** 106
J. Haus¹; E. Hartge¹; J. Werther¹; S. Heinrich¹
¹ TU Hamburg-Harburg

18:00 – 19:30 *Raum 9+10 im UG*
Beiratssitzung der FGr-Agglomerations- und Schüttguttechnik (nur berufene Mitglieder)

18:00 – 19:30 *Raum 5 im EG - Rochus-Saal*
Beiratssitzung der FGr-Computational Fluid Dynamics (nur berufene Mitglieder)

19:00 – 22:00 **Abendliches Beisammensein mit Kollegen bei Bier, Wein und rustikalem Buffet im NH-Hotel, € 42,00 pro Person, Anmeldung erforderlich**

Mittwoch, 02.03.2016

Raum 9+10 im UG

Agglomerations- und Schüttguttechnik

09:00 – 09:30	Einfluss der Partikelgrößenverteilung auf die Dispergierbarkeit von Agglomeraten in oszillierender gasförmiger Umgebung <u>T. Wollborn</u> ¹ ; C. Knoop ¹ ; U. Fritsching ² ¹ IWT-Stiftung Institut für Werkstofftechnik, Bremen; ² Universität Bremen	107
09:30 – 10:00	Quantifizierung und Charakterisierung der Stofffreisetzung bei der Verarbeitung von Pulvern und Schüttgütern <u>M. Parey</u> ¹ ; E. Schmidt ¹ ¹ Bergische Universität Wuppertal	108
10:00 – 10:30	Simulation zur Quantifizierung der Staubungsneigung von Pulvern <u>T. Londershausen</u> ¹ ; E. Schmidt ¹ ¹ Bergische Universität Wuppertal	109

Raum 5 im EG - Rochus-Saal

Computational Fluid Dynamics - Einphasige Strömungen, Turbulenz

09:00 – 09:30	A numerically robust Reynolds stress model for improved prediction of industrially relevant flow applications <u>R. Maduta</u> ¹ ; S. Jakirlic ² ¹ Outotec GmbH, Oberursel; ² TU Darmstadt	110
09:30 – 10:00	Gas flow over catalytic surfaces <u>S. Mühlbauer</u> ¹ ; S. Strobl ¹ ; T. Pöschel ¹ ¹ Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg	111
10:00 – 10:30	Efficient CFD Simulation of Complex Flow Problems Requiring Special Meshing Strategies <u>O. Mierka</u> ¹ ; S. Turek ¹ ¹ TU Dortmund	112

10:30 – 11:00 *Kaffeepause*

Raum 9+10 im UG

Agglomerations- und Schüttguttechnik

11:00 – 11:30	Bestimmung des Deformationsverhaltens von Einzelpartikeln und dessen Einfluss auf die Festigkeit von Tabletten <u>I. Krautstrunk</u> ¹ ; T. Rook ¹ ; D. Sleziona ¹ ; J. Finke ¹ ; E. John ² ; M. Juhnke ² ; A. Kwade ¹ ¹ TU Braunschweig; ² Novartis Pharma AG, Basel/CH	113
11:30 – 12:00	Beitrag zur Brikettierung und Pyrolyse von Braunkohlengranulaten für die stoffliche Nutzung <u>F. Fehse</u> ¹ ; H. Schröder ² ; J. Repke ² ; M. Scheller ³ ; M. Spöttle ⁴ ¹ TU Bergakademie Freiberg; ² TU Bergakademie Freiberg; ³ ThyssenKrupp Industrial Solutions AG, Dortmund; ⁴ ThyssenKrupp Industrial Solutions AG, Freiberg	114
12:00 – 12:30	Prozessdynamik kontinuierlicher Agglomerationsprozesse mit externer Produktklassierung <u>A. Bück</u> ¹ ; M. Wegner ¹ ; C. Neugebauer ¹ ; S. Palis ¹ ; E. Tsotsas ¹ ¹ Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg	115

Raum 5 im EG - Rochus-Saal
Computational Fluid Dynamics - Prozesssimulation, Prozessmodellierung

11:00 – 11:30	OpenLB – Strömungssimulation und -kontrolle für verfahrenstechnische Anwendungen <u>M. Krause</u> ¹ ; W. Dörfler ¹ ; M. Maier ¹ ; A. Mink ¹ ; H. Nirschl ¹ ; G. Thäter ¹ ; R. Trunk ¹ ¹ Karlsruher Institut für Technologie (KIT)	116
11:30 – 12:00	Scale-Up of an HME Process Supported by 3D SPH and 1D Mechanistic Modelling <u>J. Matic</u> ¹ ; A. Eitzlmayr ¹ ; J. Khinast ¹ ¹ Institut für Prozess- und Partikeltechnik, Graz/A	117
12:00 – 12:30	Einfluss von Partikelkollisionen auf die Erosion in einem Rohrkrümmer: Berechnungen mit dem Euler/Lagrange-Verfahren <u>M. Sommerfeld</u> ¹ ; S. Lain ² ¹ Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg; ² Universidad Autónoma de Occidente, Cali/CO	118
12:30 – 13:30	<i>Mittagspause</i>	

Raum 9+10 im UG
Agglomerations- und Schüttguttechnik

13:30 – 14:00	Feuchtgranulierung im Doppelschneckengranulierer – Einfluss von Füllgrad und Verweilzeit auf die Produktqualität <u>R. Meier</u> ¹ ; K. Moll ² ; M. Krumme ² ; P. Kleinebudde ¹ ¹ HHU Düsseldorf; ² Novartis Pharma AG, Basel/CH	121
14:00 – 14:30	Strukturierung von Oberflächen mittels feindisperser Partikeln zur Verbesserung von tribologischen Eigenschaften <u>S. Buhl</u> ¹ ; K. Schmidt ¹ ; S. Antonyuk ¹ ; S. Ripperger ¹ ¹ TU Kaiserslautern	122
14:30 – 15:00	Einfluss verschiedener Prozess- und Materialparameter auf die Partikeldynamik in einem Sphäronisationsprozess D. Weis ¹ ; M. Thommes ² ; <u>S. Antonyuk</u> ¹ ¹ TU Kaiserslautern; ² TU Dortmund	123
15:00 – 15:30	Description of anisotropies in pharmaceutical tablets in DEM with an elasto-plastic hysteretic contact model <u>R. Cabiscol</u> ¹ ; L. Torbahn ¹ ; H. Zetzener ¹ ; A. Kwade ¹ ¹ TU Braunschweig	124

Raum 5 im EG - Rochus-Saal
Computational Fluid Dynamics - Prozesssimulation, Prozessmodellierung

13:30 – 14:00	Untersuchung der Fluidodynamik von zweiphasigen Strömungen in strukturierten Packungen mithilfe der CFD-Methoden <u>A. Olenberg</u> ¹ ; E. Kenig ¹ ¹ Universität Paderborn	125
14:00 – 14:30	Untersuchung des Einflusses der Entlastungsbohrungen auf die Leistung einer Kreiselumwälzpumpe <u>Y. Sha</u> ¹ ; S. Antonyuk ¹ ; S. Ripperger ¹ ¹ TU Kaiserslautern	126
14:30 – 15:00	Dynamische integrale Prozessmodellierung von Elektroabscheidern <u>S. Sander</u> ¹ ; U. Fritsching ² ¹ Institut für Werkstofftechnik, Bremen; ² Universität Bremen	127
15:00 – 15:30	Numerische Optimierung eines mehrstufigen Rührkessels <u>T. Eppinger</u> ¹ ; A. Newale ² ; Y. Dewan ² ; R. Aglave ² ¹ Computational Dynamics Ltd, London/UK; ² CD-adapco, Melville/USA	128

15:30 *Ende des Jahrestreffens*

Mechanics of millimeter sized particles - A comprehensive overview

Alexander Russell, Peter Müller, Jürgen Tomas

Mechanical Process Engineering, OVGU Magdeburg, Magdeburg, Germany

Uncertainties regarding the influences of material properties and process conditions on the mechanics of millimeter-sized particle products (which amount to $\approx 10^8$ t/a in Germany) continue to exist. Thus, practical problems in efficiently carrying out unit operations as well as developing accurate simulations of the realistic dynamics of representative particle collectives remains to be a challenge.

The contribution will begin with a capsule discussion of a pragmatic multi-scale approach (see Figure) to comprehensively address this challenge, followed by a detailed discussion of recent experimental results from the authors (determined by model-based data evaluation of uniaxial compression and impact measurements) that describe the statistically distributed mechanical properties and failure probability of single elastic, plastic as well as viscous particles considering the influences of:

- material properties: binder contents (structural property), coating contents and thicknesses (surficial properties), and
- process conditions: system humidity (represented by particle moisture content), quasi-static stressing conditions (represented by compressive loading force, loading velocity and frequency) and quasi-dynamic stressing conditions (represented by particle impact velocities, impact plate thicknesses and stiffnesses).

Alas, with a discussion on the process-specific input parameter choice for simulations (by comparing energy dissipation at compression and impact), the contribution will conclude with an elucidation of the challenges that remain.

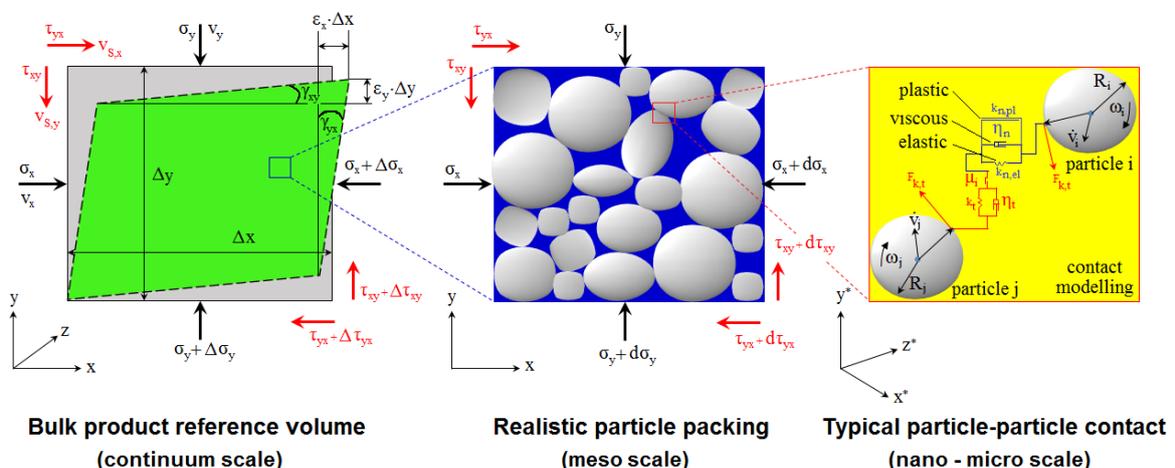


Figure: An efficient approach to comprehensively study the continuum behavior of particle products.

Vergleich der Modelle von Hertz und Zener beim elastischen Stoßvorgang

Peter Müller*, Ronny Böttcher, Michael Trüe, Alexander Russell, Jürgen Tomas

Dr.-Ing. Peter Müller, peter.mueller@ovgu.de

Ronny Böttcher, ronny.boettcher@st.ovgu.de

Michael Trüe, michael.truee@st.ovgu.de

Alexander Russell, alexander.russell@ovgu.de

Prof. Dr.-Ing. habil. Jürgen Tomas, juergen.tomas@ovgu.de

Mechanical Process Engineering, Otto von Guericke University of Magdeburg, Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg, +49-391-6751886

Mit einer Fallversuchsanlage wurden die Stoßzahl und die Kontaktzeit von Stahlkugeln beim Stoßvorgang gegen goldbeschichtete dünne Glasplatten gemessen. Untersucht wurden der Einfluss der Aufprallgeschwindigkeit, der Partikelgröße und der Prallplattendicke.

Da das Hertzgesetz [1] nur für den elastischen Stoßvorgang einer Kugel gegen eine unendlich ausgedehnte, dicke Platte gilt, werden die Messergebnisse mit dem Modell von Zener [2] beschrieben. Das Modell gilt für den Stoßvorgang einer Kugel gegen eine unendlich ausgedehnte, dünne Platte, wobei Longitudinal- und Transversalwellen diese unterhalb des Stoßgebiets während des Stoßvorgangs mehrmals durchlaufen können, wodurch BiegeWellen entstehen.

Die Ergebnisse lassen sich gut mit dem Modell von Zener [2] wiedergeben. Die gemessenen Stoßzahlen bleiben allerdings im gesamten Messbereich etwas unterhalb der theoretischen Zenerkurve, da das Modell lediglich die Energiedissipation aufgrund elastischer Wellen (BiegeWellen) beinhaltet, weitere Energiedissipationen jedoch nicht beachtet. Bei den Experimenten können zusätzlich Reibung, viskose Einflüsse und plastische Deformation auftreten. Zudem unterschätzt das Modell von Zener [2] die Kontaktzeit bei dünnen Platten.

[1] H. Hertz, Ueber die Berührung fester elastischer Körper, *J. reine u. angew. Math.* **1881**, 92, 156-171

[2] C. Zener, The intrinsic inelasticity of large plates, *Phys. Rev.* **1941**, 59, 669-673

Charakterisierung des mikromechanischen Kontaktverhaltens feiner adhäsiver Partikel - Ein Überblick

Katja Mader-Arndt, Jürgen Tomas

*Otto-von-Guericke Universität Magdeburg, Institut für Verfahrenstechnik, Lehrstuhl
für Mechanische Verfahrenstechnik, Magdeburg, Deutschland*

In der vorliegenden Arbeit wurden detaillierte Untersuchungen zur Verbesserung der Handhabung von kohäsiven Schüttgütern durchgeführt. Dadurch konnte neues Wissen über den Einfluss der Fließeigenschaften von Pulvern erworben werden.

Mit Hilfe von Kalknatronglaspartikeln ($10 \mu\text{m} \leq d \leq 600 \mu\text{m}$) wurde das Kontaktverhalten von glatten, sphärischen und trockenen Einzelpartikeln untersucht. Zur Bestimmung der mikromechanischen Kontakteigenschaften wurde hierbei sowohl das Kontaktverhalten zwischen Partikel-Partikel wie auch zwischen Partikel und Wand betrachtet. Die Untersuchung für die mikroskopisch feindispersen ($d < 100 \mu\text{m}$) und ultrafeinen ($d < 10 \mu\text{m}$) Partikel erfolgte unter Anwendung der Methode der Rasterkraftmikroskopie (AFM) und der Nanoindentation. Für die makroskopisch feindispersen Produkte ($d > 100 \mu\text{m}$) wurde eine designte und selbstgebaute Kompressionsapparatur verwendet.

Unter Aufzeichnung der Normalkraft-Weg-Kurven wurden die physikalischen Stoffeigenschaften mit den verwendeten Methoden modellbasiert rückgerechnet. Die Quantifizierung und der Vergleich der elastisch-plastischen Kontakteigenschaften erfolgte hierbei mit dem Kontaktmodell ‚steife Partikel mit weichen Kontakten‘.

Um den Einfluss der unverfestigten, charakteristischen Haftkraft untersuchen zu können, wurden die Partikeloberflächen hydrophilisiert und hydrophobiert. Während die Erzeugung der hydrophilen Oberflächen mittels chemischer Reinigung mit Peroxomonoschwefelsäure erfolgte, wurde zur Funktionalisierung der hydrophoben Oberflächen die Silanisierung eingesetzt.

Die zentrale Fragen, die in dieser Arbeit beantwortet werden sollten: Ist das angewandte Modell für die Rückrechnung der mikromechanischen Kontakteigenschaften der verwendeten Untersuchungsmethoden geeignet? Inwiefern unterscheiden sich die gewonnenen Ergebnisse untereinander?

Einfluss der Prozessparameter beim Pelletieren auf die mechanischen Eigenschaften der erzeugten γ - Aluminiumoxid (γ - Al_2O_3) Pellets

Zheni Radeva*, Juergen Tomas

Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik, Institut für Verfahrenstechnik (IVT),
Lehrstuhl Mechanische Verfahrenstechnik, Otto von Guericke Universität,
Magdeburg, Deutschland Telefon: 391 67 54931, zheni.radeva@ovgu.de

Pelletieren (Pelletierung) ist ein verbreitetes Verfahren für Partikelvergrößerung und für Verbesserung der mechanischen Eigenschaften von Schüttguten. Das Endprodukt des Pelletierens – Pellets verschiedener Form und Größe, werden in vielen Industriebranchen angewandt. Ziel dieser Forschungsarbeit ist die Verbindung zwischen den Prozessparamater beim Pelletieren und die mechanischen Eigenschaften der erzeugten Pellets zu untersuchen. Industriell hergestellte Aluminiumoxid (γ - Al_2O_3) Granulaten wurden als Modell-Primärpartikel ausgewählt. Das Pelletieren wurde in einem horizontal angeordneten Labor-Pelletierteller durchgeführt. Die Prozessdauer für alle Experimente war 20 Minuten. Die Rotationsgeschwindigkeit wurde vor dem Anfang des Prozesses gemessen und der Pelletierteller wurde kalibriert. Als Bindemittel wurde wässrige Lösung von Hydroxypropylmethylcellulose (HPMC) verwendet. Die Feststoffdichte, die Porosität und das Druck-, und Bruchverhalten der erzeugten Pellets wurden analysiert. Die Feststoffbrücken zwischen den Primärpartikeln wurden mittels eines Rasterelektronmikroskops untersucht. Die Pellet wurde danach mit einem Granulatfestigkeits-Prüfsystem bis zum Bruch belastet und aus den gemessenen Kraft-Weg-Kurven wurden die mechanischen Eigenschaften und die Bruchwahrscheinlichkeit der Pellets ermittelt. Die Ergebnisse beitragen zu der Weiterentwicklung der Grundlagen und der Steuerung der Pelletierungsprozesse im Bereich der Partikeltechnologie.

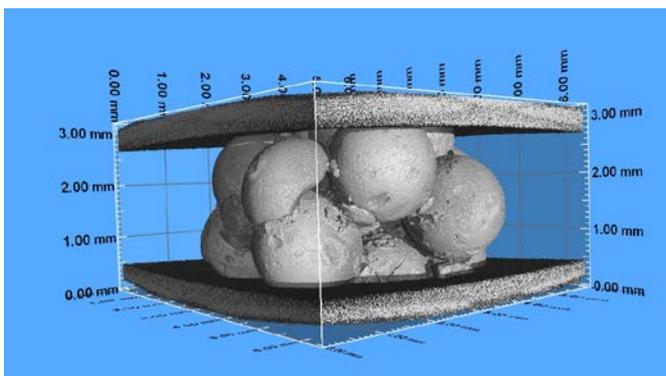


Abb.1 Dreidimensionale Ansicht eines Aluminiumoxid-Pellets bei Belastung

Detaillierte Beschreibung der Chemisorption in Blasensäulen mit einem OpenFOAM basierten Euler-Euler/PBM CFD Code

M. W. Hlawitschka, S. Drefenstedt, J. Schäfer, H.-J. Bart

TU Kaiserslautern, 67663 Kaiserslautern

Die Auslegung von reaktiven Blasensäulen basiert maßgeblich auf dem axialen Dispersionsmodell unter Berücksichtigung einer veränderlichen Blasengröße mit Hilfe der Populationsbilanzmodellierung (PBM)[1]. Hierbei werden die hydrodynamischen Nichtidealitäten im Reaktor durch den geometrie- sowie stoffsystemabhängigen axialen Dispersionskoeffizienten beschrieben, wodurch eine universelle Auslegung der Apparate unmöglich wird. Die dreidimensionale CFD hingegen ermöglicht eine Beschreibung der lokalen Hydrodynamik in Blasensäulen bei reduzierter Verwendung empirischer Korrelationen (Widerstandskoeffizient, Virtuelle Massenkraft, ...). Zur Berücksichtigung der stattfindenden Reaktion wurden in der Literatur erste Simulationen basierend auf einem Euler-Lagrange+Reaktionsansatz durchgeführt [2]. In dieser Arbeit wurden die gewonnenen Erkenntnisse auf die Beschreibung einer Blasensäule mit Hilfe eines Euler-Euler/PBM Codes übertragen, der den Stoffübergang sowie eine Beschreibung der Reaktion in der flüssigen Phase ermöglicht. Zur Beschreibung der Blasengröße wurden der IATE Algorithmus [3], das OPOSPM Modell [4], sowie die gängigen QMOM und DQMOM [5] in den OpenSource Code multiphaseEulerFOAM implementiert. Es zeigte sich hierbei eine sehr gute Übereinstimmung zu Literaturangaben sowie zu eigenen Messergebnissen in Bezug auf Blasengröße, Stofftransport und Chemisorption.

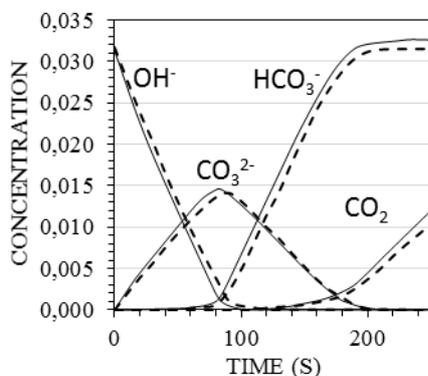


Abb. 1: Simulation der Chemisorption (- -) im Vergleich zu Literaturangaben (-) [2].

[1] Fleischer et al., *Chemical Engineering Science* 51, pp. 1715–1724, 1996.

[2] Darmana et al., *Chemical Engineering Science* 62 (9), pp. 2556–2575, 2007.

[3] Ishii et al., *Nuclear Engineering and Technology* 37, pp. 525-536, 2005.

[4] Drumm et al., *Ind. Eng. Chem. Res.* 49 (7), pp 3442–3451, 2010.

[5] Marchisio & Fox, *Aerosol Science* 36, pp. 43-73, 2005.

Danksagung: Wir danken der DFG (SPP 1740, HL 67/1-1) sowie dem Nachwuchsring der TU Kaiserslautern für ihre finanzielle Unterstützung.

Simulation von Blasenströmungen mit Modellierung der ellipsoiden Form der Blasen

Andreas Weber und Hans-Jörg Bart

Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik, TU Kaiserslautern

Kaiserslautern/Germany, <http://www.uni-kl.de/tvt/>

Zur Simulation von Blasenströmungen werden verschiedene Ansätze genutzt, deren Anwendungsgebiete von der detaillierten Auflösung einzelner Blasen bis hin zur Vorhersage von industriellen Reaktoren mit Millionen Blasen im Inneren reichen. Bei der Simulation von Blasensäulen bilden viele dieser Simulationen die Hydrodynamik einzelner Blasen nicht detailliert ab. Deshalb wird im Rahmen des DFG-Graduiertenkollegs 1932 ("Stochastic Models for Innovations in the Engineering Sciences") eine Simulation auf Basis stochastischer Modelle und des Euler-Lagrange Ansatzes entwickelt. Insbesondere durch die Modellierung der Form der Blasen und der daraus hervorgehenden oszillierenden Bewegung wird eine detailliertere Abbildung der Blasenströmung ermöglicht.

Im ersten Teil dieses Beitrags werden einige Ergebnisse aus vorhergehenden Arbeiten zur Validierung der Modelle präsentiert. Die Daten einer experimentell durchgeführten Messung kommen hier als Referenz zum Einsatz und werden anhand der Blasengrößenverteilung sowie der Geschwindigkeitsverteilung innerhalb der Blasensäule bewertet. Es wird besprochen, wie verschiedene Kräfte Modelle die Strömungsdynamik beeinflussen und welche dieser Modelle eine möglichst realistische Lösung bieten. Des Weiteren wird die Auswirkungen verschiedener Zerfalls- und Koaleszenzmodelle auf die erzielte Blasengrößenverteilung demonstriert.

Im zweiten Teil des Beitrags wird ein Einblick in den derzeitigen Stand der Modellierung von ellipsoiden Blasen gewährt. Dazu werden die theoretischen Grundlagen erläutert und an einigen Beispielen erklärt. Durch die Erweiterung der Simulation durch Modellierung ellipsoider Blasen wird es möglich, die oszillierende Bewegung aufsteigender Blasen abzubilden (Abb. 1). Wie bereits in „Direct Numerical Simulations“ (DNS) gezeigt wurde, hat diese einen großen Einfluss auf die Nachlaufströmung und somit auch auf den Stoffaustausch. Um eine effiziente Simulation größerer Blasenanzahlen zu bewerkstelligen, wird der Euler-Lagrange Ansatz gewählt und mit einem Modell für ellipsoide Partikel erweitert.

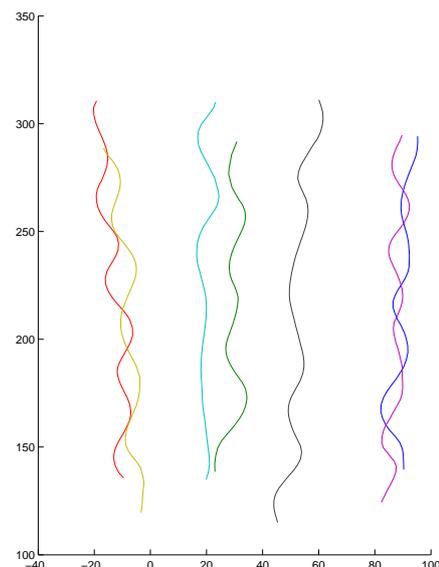


Abbildung 1: Trajektorien einiger oszillierender Blasen

Modelling of bubble dynamics in the frame of Euler/Lagrange calculations of bubble columns

M. Muniz and M. Sommerfeld

Zentrum für Ingenieurwissenschaften, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, D-06099 Halle (Saale), Germany; e-mail: marcelo.muniz@student.uni-halle.de

Bubble dynamics is still a big challenge for the mathematical modelling in connection with numerical calculations (CFD) when applied to bubble columns. The flow in bubble columns is inherently unsteady and basically induced by the buoyancy force acting on bubbles. However, there are other important forces which depend on bubbles shape, size, orientation and its motion, such as drag, added mass, Basset force and transverse lift forces. Especially the transverse lift force is important for accurate predictions of the bubble volume fraction distribution. In this framework, a CFD model is developed and implemented in an open source platform (OpenFOAM[®]), based on an Euler/Lagrange approach, considering all these forces. The importance of the different forces on the resulting bubble distribution will be emphasised. Flow field and turbulence of the carrier phase was modelled by the Large Eddy Simulation (LES) approach, considering also turbulence induced by bubbles (Lain et al. 2002). The effect of sub-grid scale turbulence on bubble motion was described by a stochastic single-step Langevin equation, based on Lagrangian and Eulerian time scales (Lipowsky and Sommerfeld 2007). Moreover, the bubble dynamics in the point-particle approach was modelled by stochastic variations of bubble shape and orientation according to experimental observations. Numerical simulations, including comprehensive parameter studies (e.g. different force correlations), were compared with experiments from Sommerfeld and Brüder (2009).

References

- Lain, S., Brüder, D., Sommerfeld, M. and Göz, M.F.: Modelling hydrodynamics and turbulence in a bubble column using the Euler-Lagrange procedure. *International Journal of Multiphase Flows*, Vol. 28, 1381-1407 (2002)
- Lipowsky, J. and Sommerfeld, M.: LES-simulation of the formation of particle strands in swirling flows using an unsteady Euler-Lagrange approach. *Proceedings of the 6th International Conference on Multiphase Flow, ICMF2007, Leipzig Germany, Paper No. S3_Thu_C_54* (2007)
- Sommerfeld, M. and Brüder, D.: Analysis of hydrodynamics and micro-structure in a bubble column by planar shadow image velocimetry. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol. 48, 330-340 (2009)

Support from CNPq (National Council for Scientific and Technological Development – Brazil) and DAAD (German Academic Exchange Service) is gratefully acknowledged.

Euler-Euler Modeling of Mass-Transfer in Bubbly Flows

Roland Rzehak and Eckhard Krepper

Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf,

Bautzner Landstrasse 400, 01328 Dresden, Germany

E-mail: r.rzehak@hzdr.de

CFD simulations of dispersed bubbly flow on the scale of technical equipment are feasible within the Eulerian two-fluid framework of interpenetrating continua. However, accurate numerical predictions rely on suitable closure models. Concerning the fluid dynamics of bubbly flows a certain degree of predictive capability has been reached recently. However, concerning mass transfer only few studies have been performed to date.

The present contribution gives an overview over the available results on closure relations for physical absorption/desorption, i.e. mass transfer without chemical reactions. Unsolved issues are highlighted, in particular on which parameters a suitable correlation for the mass transfer coefficient should be based.

In addition, a preliminary study on model validation is presented which makes use of experimentally determined mass transfer coefficients. The need for and requirements on suitable data for this purpose are emphasized.

Einfluss der Fluiddynamik auf das Koaleszenzverhalten von Einzeltropfen in O/W und W/O-Systemen

J. Villwock, J. Kamp, M. Kraume, Fachgebiet Verfahrenstechnik, TU Berlin

In industriellen Anwendungen, in denen Dispersionen nicht mischbarer Flüssigkeiten eingesetzt werden, ist die Tropfengrößenverteilung (TGV) von entscheidender Bedeutung für die Prozesseffizienz. Mit bestehenden Modellen kann die TGV nicht verlässlich vorhergesagt werden. In den Modellen sind sowohl Stoffeigenschaften als auch fluiddynamische Einflussparameter, wie z.B. die Relativgeschwindigkeit oder die Energiedissipation implementiert, jedoch mit unterschiedlichen und teils widersprüchlichen Proportionalitäten. Durch die Reduzierung der Komplexität auf Einzeltropfenexperimente und mittels einer vollautomatisierten Messzelle ist die systematische Untersuchung der einzelnen Parameter möglich. Dafür wird die Kollision eines aufsteigenden bzw. fallenden Tropfens mit einem fixierten Tropfen mittels einer Hochgeschwindigkeitskamera aufgezeichnet (s. Abb. 1).

Es konnten somit Reihenuntersuchungen zum Einfluss fluiddynamischer Größen wie der Kollisionsgeschwindigkeit und der Tropfengröße auf die Koaleszenzwahrscheinlichkeit im EFCE Standardtestsystem Toluol/Wasser durchgeführt und eingehend untersucht werden. Darüber hinaus wurden die Auswirkungen einer Phasenumkehr näher betrachtet. Es zeigte sich, dass sowohl Kollisionsgeschwindigkeit und Tropfengröße als auch der Oszillationszustand des Tropfens einen bedeutenden Einfluss auf die Koaleszenz besitzen und die Umkehr der Phasen zusätzlich das eigentliche Koaleszenzverhalten verändert. Zudem überlagern sich die fluiddynamischen Größen häufig in komplexer Weise und beeinflussen sich gegenseitig. Die systematische Untersuchung der Abhängigkeiten wird vorgestellt und diskutiert.

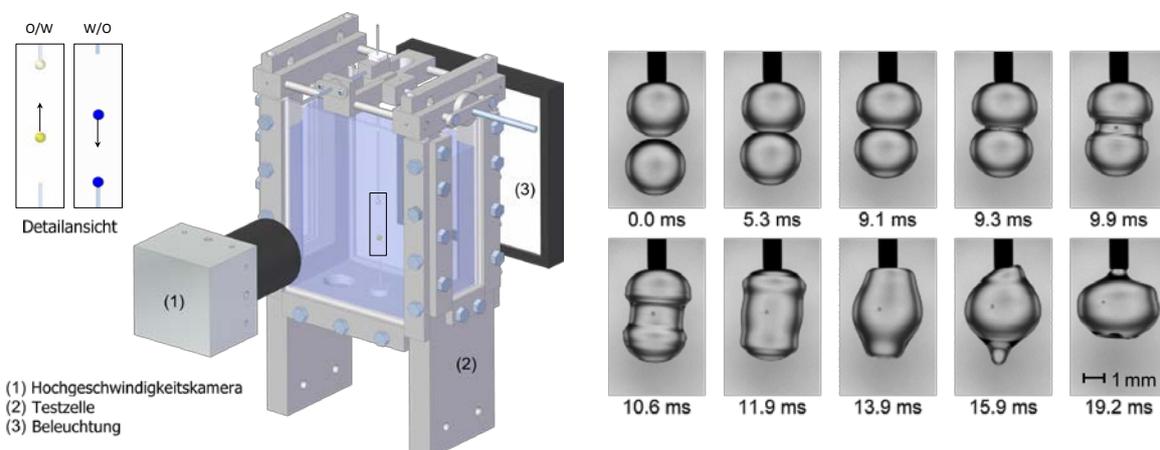


Abb. 1: Schematischer Testzellenaufbau (links) und Hochgeschwindigkeitsaufnahmen eines Koaleszenzvorgangs (rechts)

Die Autoren danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die finanzielle Unterstützung im Rahmen des Projektes „Koaleszenzeffizienz in binären Systemen“.

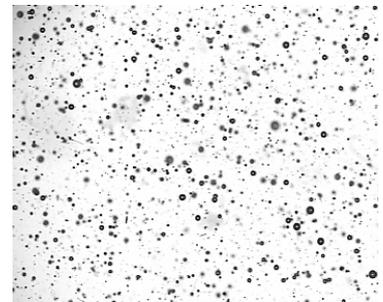
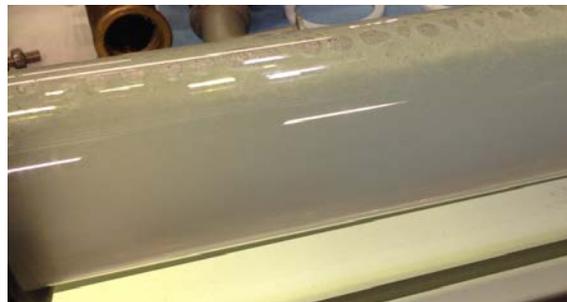
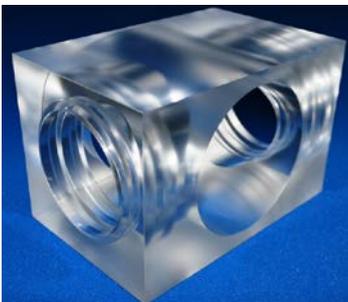
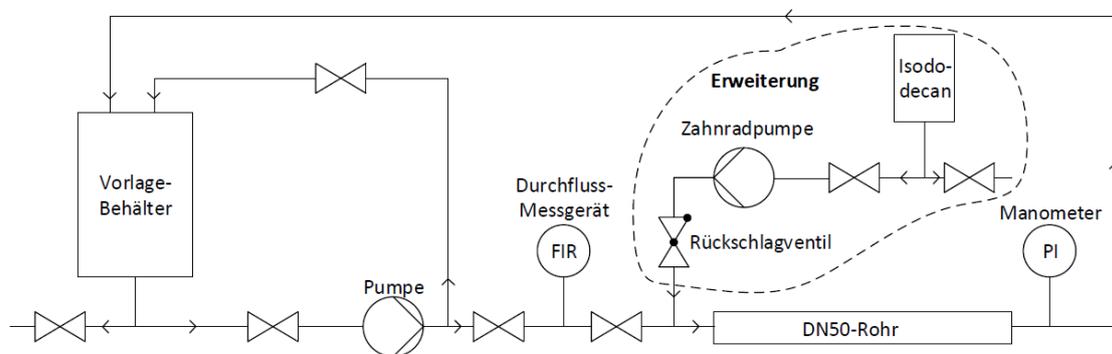
Tropfengrößenverteilungen in der zweiphasigen Rohrströmung

M. Lichti, H.-J. Bart,

Thermische Verfahrenstechnik, TU Kaiserslautern, Kaiserslautern

Bei vielen verfahrenstechnischen Anwendungen treten Mehrphasenströmungen auf. Die Entwicklung der Tropfengrößenverteilungen bei moderaten Strömungsgeschwindigkeiten in Rohrleitungen wurde im Gegensatz zu Gas-flüssig für flüssig-flüssig-Systeme bisher kaum messtechnisch erfasst.

In diesem Beitrag werden dazu Ergebnisse zur direkten optischen Erfassung von transienten Feintropfengrößenverteilungen in einem Rohr präsentiert. Eine für die flüssig-flüssig-Gegenstromextraktion entwickelte Sondenkonstruktion (Mickler et al. 2013) wurde auf die veränderten Bedingungen der Rohrströmung angepasst. Es werden Aufnahmen von transienten Tropfengrößenverteilungen (Isododekan in Wasser) in DN50 und DN25 Rohren vorgestellt (s. Abb. unten). Dabei werden Parameter wie die Strömungsgeschwindigkeit, Dispersphasenkonzentration, etc. variiert. Es werden die Grenzen sowohl bei der Detektion von Tropfengrößenverteilungen als auch Limits bei der Messzugänglichkeit aufgezeigt und diskutiert.



Literatur:

[1] Matthias Mickler, Burkhard Boecker, Hans-Jörg Bart; *Drop swarm analysis in dispersions with incident-light illumination*, Flow Measurement and Instrumentation 30 (2013) 81-89

Vortrag fällt aus

Tropfendeformation während des Durchgangs durch Blenden

Peter Walzel

TU Dortmund, Fakultät Bio- und Chemieingenieurwesen, Dortmund/Deutschland

Bei der Hochdruckhomogenisation von Emulsionen wird üblicherweise eine Voremulsion mit groben Tropfen durch enge Spalten oder Lochblenden gedrückt. Dabei können zwei Strömungsbereiche unterschieden werden. Im Anströmbereich herrscht eine Senken-Strömung mit ortsabhängiger Dehnrates vor. Im Abströmbereich hinter der Blende bildet sich i.d.R. ein Freistrah in der Umgebungsflüssigkeit aus der je nach Kanaldurchmesser bestimmte Eigenschaften aufweist; vergl. [1]. Im Anströmbereich der Blende werden die Primärtropfen infolge der dort auftretenden Dehnströmung gestreckt [1, 2]. In Abhängigkeit von der Tropfen-Größe und dem Strömungszustand werden die Tropfen zunächst angenähert zu prolaten Ellipsoiden deformiert, wobei diese je nach Bedingungen sogar bis zu Fluidfäden verstreckt werden. Die lokale Deformation hängt von den Kräften ab die am Tropfen angreifen. In Abhängigkeit von der Viskosität der kontin. Phase liegen typische Re-Zahlen der Tropfen-Umströmung bei $10 < Re_d < 500$. Das führt zur vergleichbaren Größenordnung viskoser und trägheitsbedingter Spannungen.

Unter Vernachlässigung interner Zirkulation können lokale externe Kräfte im Gleichgewicht mit den Kapillarkräften und damit die Tropfendeformation angenähert bestimmt werden. Dazu ist ein Modell für das Strömungsfeld im Anströmbereich erforderlich. Unter der Annahme nicht ablösender Potential-Strömung an abgerundeten Blenden-Einläufen wurden Berechnungen ausgeführt. Es kann gezeigt werden, dass das Verhältnis von Primärtropfendurchmesser zum Blendendurchmesser für die Deformation und einen möglichen Tropfenaufbruch bei vorgegebenem Druck maßgeblich ist. Kleine Tropfen werden kaum deformiert und relaxieren anschließend nach dem Blendendurchgang, während große Tropfen stark, u. U. bis zu Fäden verstreckt werden welche dann die um Größenordnungen kleinere Sekundärtropfen bilden.

Obwohl diverse Einschränkungen in der Berechnung vorgenommen wurden, ist ein Einblick in die „Vorbereitung des eigentlichen Tropfenaufbruchs“ gegeben der im Wesentlichen erst nach der Blende im Freistrah erfolgt und derzeit noch nicht vollständig geklärt ist.

[1] K. Kelemen, *Dissertation KIT, 2014, Hut Verl. München*

[2] Ch. Budde, et al., *Chem.-Ing.-Techn.* 25, 2002, 1164-1167

Tropfenbildung beim Premix-Emulgieren mit porösen Strukturen

*Laura Luhede, Udo Fritsching, Graduate School MIMENIMA / Universität Bremen,
Bremen / Deutschland;*

Emulsionen sind Bestandteil vieler Produkte, insbesondere der Lebensmittel-, Kosmetik- und Pharmaindustrie. Herkömmliche Herstellungsprozesse für Emulsionen sind Rotor-Stator-Systeme, Kolloidmühlen oder die Hoch-Druck-Homogenisierung. Diese Verfahren zeichnen sich durch einen hohen Energieeintrag aus und zerteilen die Tropfen i.W. durch starke Scherkräfte. Beim Membranemulgieren wird dagegen der Tropfenbildungsprozess bei wesentlich geringeren Energieeinträgen durchgeführt. Beim Premix-Membranemulgieren wird ein vorformuliertes Zweikomponenten-Premix durch eine poröse Struktur gedrückt. In den Porenkanälen und am Porenaustritt bilden sich die Tropfen. Vorteile des Premix-Membranemulgierens sind, neben den geringeren Scherkräften und dem geringeren Energieaufwand, die die Verarbeitung empfindlicher Produkte ermöglicht, eine vergleichsweise enge Tropfengrößenverteilung. Eine geeignete Funktionalisierung der Membranoberflächen kann das Emulgierergebnis weiter verbessern, sodass auch Tropfengrößen unterhalb des Porendurchmessers erzeugt werden können.

Ziel der vorzustellenden Untersuchungen ist die Darstellung der Tropfengrößenverteilung beim Premix-Membranemulgieren in Abhängigkeit der Membranstruktur und –Funktionalisierung sowie der Fluideigenschaften. Es werden hierfür verschiedene poröse Strukturen untersucht, die unterschiedliche Oberflächeneigenschaften besitzen. CFD Berechnungen unterstützen die Experimente und geben Einblick in das Verhalten der Mehrphasenströmung in den funktionalisierten Membranen.

Es werden verschiedene poröse Strukturen durchströmt und das Emulgierergebnis verglichen. Dabei wird besonders auf die resultierende Tropfengrößenverteilung bei gleichen Einstellungsparametern geachtet. Die Simulation der Mehrphasenströmung durch die Membran, sowie die Tropfenbildung der Emulsion werden mit der Volume of Fluid Methode durchgeführt. Die Funktionalisierung der Membran wird über Kontaktwinkelmodelle dargestellt. Die Ergebnisse der Simulation werden mit den Daten aus den Experimenten verglichen.

Influence of liquid injection on collision dynamics of colliding solids: rebound and rotation analysis

Britta Crüger¹, Stefan Heinrich¹, Sergiy Antonyuk², Yali Tang³, Niels G. Deen³, J.A.M. Kuipers³

¹Institute of Solids Process Engineering and Particle Technology, Hamburg University of Technology, Hamburg, Germany

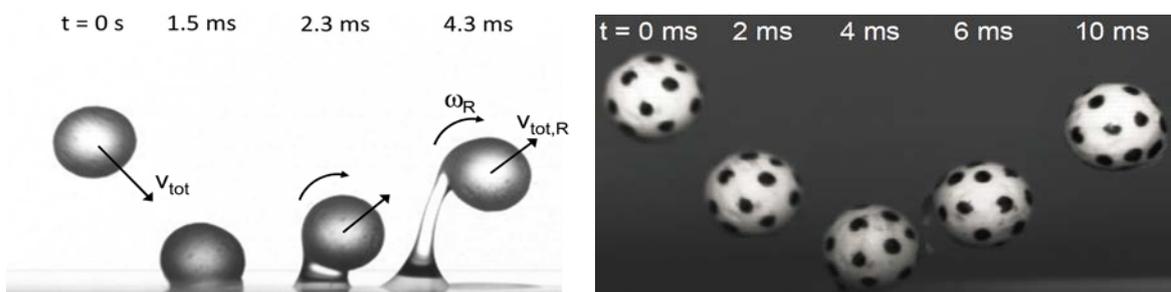
²Chair of Particle Process Engineering, Department of Mechanical and Process Engineering, University of Kaiserslautern, Kaiserslautern, Germany

³Multiphase Reactors Group, Department of Chemical Engineering and Chemistry, Eindhoven University of Technology, Eindhoven, The Netherlands

Particulate processes are characterised by intense particle-particle and particle-wall contacts. In agglomeration and granulation processes moreover liquids are involved in the form of liquid layers or droplets on the particle surface. Therefore, the knowledge about collision dynamics of wet solids is fundamental for the exact description of agglomeration or granulation processes.

In this work collision dynamics are analysed via coefficients of restitution. The coefficient of restitution is defined as ratio of rebound to impact velocity and as such characterizes the energy dissipated during collision. It is an important parameter for DEM simulations and depends strongly on the collision parameters, particle properties as well as on the properties of the injected liquid. To investigate the influence of these parameters on the effective coefficient of restitution, particles colliding with a wet wall are recorded by two synchronized high-speed cameras allowing a three-dimensional analysis of collision behaviour.

Besides translational rebound also particle rotation is investigated, which plays a significant role in collision dynamics. Therefore the influence of initial rotation on rebound behaviour was studied as well.



We gratefully acknowledge for financial support: DFG, Germany and STW, The Netherlands. Project number HE 4526/9-1.

Mechanische Eigenschaften von gesinterten Polymerpartikeln – Temperatur-, zeit- und größenabhängiges Kontaktverhalten

R. Fuchs¹, T. Weinhart², L. Gilson¹, H.-J. Butt¹, S. Luding² und M. Kappl^{1*}

¹ *Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Ackermannweg 10, 55128 Mainz, DE
(*kappl@mpip-mainz.mpg.de)*

² *Multiscale Mechanics, Dept. of Mechanical Engineering/ MESA⁺,
University of Twente, Enschede, NL*

Das Sintern von Polymerpartikeln ist ein wichtiges Verfahren in der industriellen Fertigung und findet Anwendung bei der Herstellung von z.B. Filtermaterialien mit definierter Porosität. Details der Sinterkinetik von mikrometergroßen Partikel-Agglomeraten auf einer Zeitskala von einigen Millisekunden bis hin zu Minuten sowie deren mechanischen Eigenschaften sind aufgrund bisheriger limitierter Messmethoden noch nicht systematisch untersucht wurden. Jedoch sind diese Informationen notwendig um eine realistische Modellierung des Sinterprozess eines Mehrpartikelsystems durchführen zu können und somit industrielle Prozessparameter zu optimieren.

Kernanliegen der hier vorgestellten Arbeit ist es mittels NanoIndentation einen Einblick in das mechanische Verhalten von gesinterten Materialien mit unterschiedlicher Sinterzeit, Sintertemperatur und Partikelgröße zu erhalten. Darüber hinaus wird die Strukturveränderung einer gesinterten Multilage bestehend aus Polystyrol-Partikel während dem Indentationsvorgangs mittels einer Kombination aus NanoIndenter und konfokale Mikroskopie analysiert.

Die resultierenden experimentellen Ergebnisse werden mit unterschiedlichen Modellen und Partikelsimulation (DEM) verglichen und diskutiert.

Kontinuumsmechanische Simulation von Kapillarbrücken zwischen Nanopartikeln

Michael Dörmann, Hans-Joachim Schmid

Lehrstuhl für Partikelverfahrenstechnik, Universität Paderborn, Deutschland

Adhäsionskräfte zwischen Partikeln beeinflussen das Fließverhalten von Pulvern deutlich. Dies gilt besonders für Kapillarkräfte, da diese in der Regel stärker als andere Adhäsionskräfte sind. Kapillarkräfte entstehen durch Flüssigkeitsbrücken zwischen Partikeln, die sich durch Zugabe von Flüssigkeit oder Kapillarkondensation bilden. Da jedoch die Berechnung der Brückenform und der resultierenden Kräfte sehr aufwändig ist, werden oft Vereinfachungen, basierend auf Kapillarbrücken zwischen mikrometergroßen Partikeln, verwendet. Diese Annahmen gelten jedoch nicht bei Flüssigkeitsbrücken zwischen nanoskaligen Partikeln, da die Krümmung der Partikeln und das kleinere Brückenvolumen einen zunehmenden Einfluss auf die entstehende Kraft haben. Weiterhin werden die Partikeln meistens als ideal glatte Kugeln angenommen, obwohl reale Partikeln eine gewisse Rauheit haben, die die Größe und Position der Kapillarbrücke und dadurch die entstehende Kraft beeinflusst.

Es wurde eine iterative, numerische Simulationsmethode entwickelt, mit der die exakte Form der Kapillarbrücke über die Kelvin-Gleichung und die Young-Laplace-Gleichung bestimmt werden kann. Anschließend wird das Volumen und die Kraft ermittelt. Es wurden umfangreiche Analysen zur Abhängigkeit der Kapillarbrücke von verschiedenen Parametern, wie Partikelgröße, Abstand und Kontaktwinkel durchgeführt. Hierbei wurde besonders auf den Übergang zu nanoskaligen Partikeln geachtet und wie sich dabei das Verhalten der Kapillarbrücke ändert.

Weiterhin wurde eine Möglichkeit erarbeitet, um Partikeln mit zufallsgenerierten Rauheiten zu modellieren. Über die Einstellung verschiedener Parameter können die Frequenz und Amplitude der Rauheit getrennt voneinander eingestellt werden und so sehr unterschiedliche Oberflächen erzeugt werden.

Außerdem werden Ansätze einer dreidimensionalen Simulation gezeigt, mit der es möglich ist, Kapillarbrücken zu berechnen, die nicht rotationssymmetrisch sind. Diese Simulation basiert auf der Volume-of-Fluid-Methode. Das gesamte betrachtete Volumen wird hierfür in ein kubisches Gitter unterteilt. In jeder Zelle wird die Krümmung der Flüssigkeits-Gas-Grenzfläche in Abhängigkeit der Flüssigkeitsanteile berechnet und die Flüssigkeitsanteile werden iterativ angepasst bis die Krümmung konstant ist.

Numerische und experimentelle Untersuchungen an durchströmten Schüttungen nicht-sphärischer Partikel

*Harald Kruggel-Emden, Kevin Vollmari, Tobias Oschmann, Bogdan Kravets
Ruhr-Universität Bochum, Bochum*

Festbetten und Wirbelschichten sind weit verbreitete Systeme, die im Bereich der Aufbereitungstechnik, Mechanischen Verfahrenstechnik und Energietechnik für vielfältige Aufgaben Anwendung finden. Durch die Kopplung der Diskreten Elemente Methode (DEM) mit einer kontinuums-basierten Strömungsfeldbetrachtung (CFD) können Detailvorgänge in diesen Systemen (Mischung, Druckverluste, Partikelorientierungen) betrachtet werden, auch wenn in ihnen Partikel nicht-sphärischer Gestalt vorliegen [1,2]. Durch umströmungsauflösende CFD-Simulationen um einzelne Partikel können weitere Details aufgelöst werden.

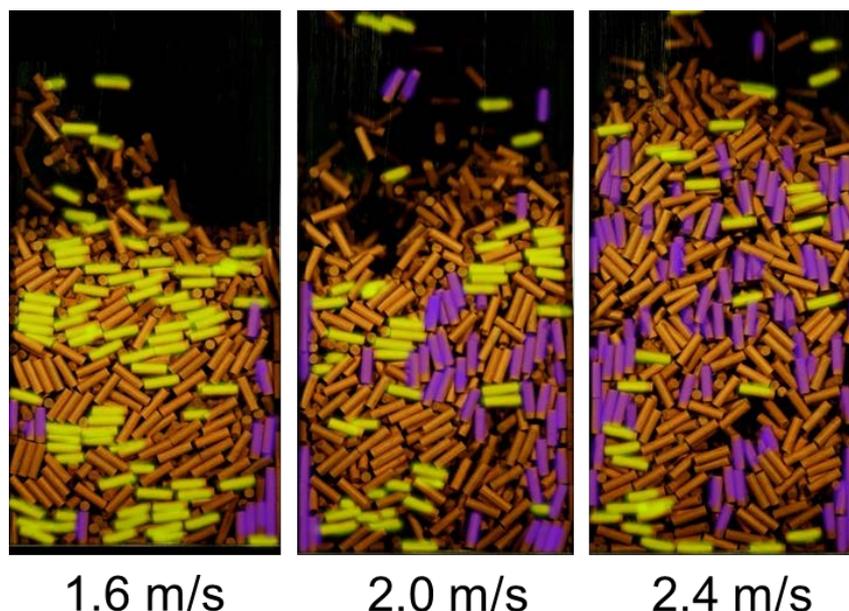


Abbildung: Orientierung von nicht-sphärischen Partikeln in einer Wirbelschicht.

1. Vollmari K., Oschmann T., Wirtz S., Kruggel-Emden H., 2015, Pressure drop investigations in packings of arbitrary shaped particles, Powder Technology 271, 109–124.
2. Vollmari K., Kruggel-Emden H., 2015, Experimental and numerical investigation of the behavior of complex shaped particles in a model scale fluidized bed, Particles 2015, Barcelona, Spanien.

Danksagung: Für die finanzielle Unterstützung des Projektes bedanken wir uns bei der DFG, Projekt Nr. KR 3446/6-1

Direct Numerical Simulations of Gas-liquid Flows in Subdomains of Structured Innovative Multiphase Chemical Reactors

X. Cai¹, M. Wörner¹, H. Marschall² and O. Deutschmann¹

¹*Karlsruher Institut für Technologie, Deutschland*

²*Technische Universität Darmstadt, Deutschland*

For characterization of innovative structured multiphase chemical reactors, it is essential to investigate the hydrodynamic interaction of the gas-liquid flow with the solid surface. Reliable numerical simulations of such complex processes require accurate modeling of the motion of the three-phase contact line. Sharp interface models suffer from a paradox between moving contact line and no-slip boundary condition at the solid wall. Phase-field methods treat the interface as a region of small but finite thickness and resolve this paradox by providing a pure diffusive mechanism for the motion of the contact line. Recently, we coupled the two-phase Navier-Stokes equations in single-field formulation with a phase-field description for the interface evolution and implemented this method in OpenFOAM[®] [1], entitled phaseFieldFoam. We validated the method for fundamental wetting processes such as drop spreading on chemically homogeneous or patterned substrates and demonstrated its capability for 3D simulations with adaptive mesh refinement near the interface [2]. This contribution highlights our pore-scale simulations of gas-liquid flows in solid foam structures (Fig. 1), to get quantitative information, e.g. for gas-liquid interfacial area. These data are not only useful for characterization of the gas-liquid flow but also for developing closure relations for engineering CFD simulations with the Euler-Euler approach. Besides, we present numerical studies on the rise of a bubble through a periodic open cellular structure (POCS) and show that the bubble dynamics strongly depends on the structure's wettability (Fig. 2).

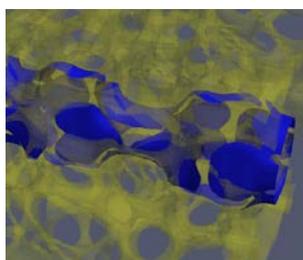


Fig. 1: 3D simulation of the gas-liquid flow in a representative subdomain of a SiSiC foam.

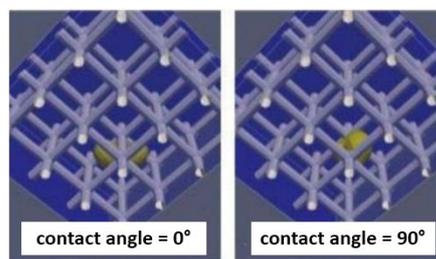


Fig. 2: 3D simulation of a rising bubble interacting with POCS of different surface wettability.

References

- [1] H. Marschall, X. Cai, M. Wörner and O. Deutschmann, Conservative Finite Volume Discretisation of the Two-Phase Navier-Stokes Cahn-Hilliard and Allen-Cahn Equations on General Grids with Application to Dynamic Wetting in preparation.
- [2] X. Cai, H. Marschall, M. Wörner and O. Deutschmann, *Chem. Eng. Technol.* **38** (2015) 1985–1992.

Simulation von einzelnen aufsteigenden Blasen mit der Gradienten-Lattice-Boltzmann-Methode

P. Malli und M. Sommerfeld

*Zentrum für Ingenieurwissenschaften, Martin-Luther-Universität Halle/Wittenberg,
D-06099 Halle (Saale), email: Philipp.Malli@iw.uni-halle.de*

Die Simulation von Zwei-Fluid-Systemen stellt generell eine große Herausforderung an Strömungssimulationen dar und seit dem Aufkommen der Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) wurden verschiedene Modellerweiterungen zur Simulation von mehrphasigen Strömungen vorgeschlagen. Eine dieser Erweiterungen ist der auf Farb-Gradienten aufbauende Ansatz. Da dieser Ansatz jedoch über lange Zeit hinweg nicht in der Lage war große Dichteunterschiede korrekt zu behandeln, wurde in den meisten Studien zu Flüssig-Gas-Systemen das Shan-Chen oder das "free surface" Modell verwendet.

Jedoch, wurden kürzlich Modellerweiterung zur Farb-Gradienten-Methode vorgeschlagen, wie etwa die Verwendung einer isotropen Berechnung des Gradienten [1] oder die Einführung eines zusätzlichen Recoloring-Operators [2], die es ermöglichen auch größere Dichtunterschiede zwischen zwei Fluiden zu berücksichtigen.

Das Farb-Gradienten-Modell wurde für den dreidimensionalen Fall in C++ implementiert wobei auch die Schwerkraft durch einen zusätzlichen Kopplungsterm berücksichtigt wurde. Mit diesem LBM-Verfahren wurde die Bewegung einzelner aufsteigender Blase für verschiedene Kombinationen der Eötvös- und Morton-Zahl simuliert. Die Ergebnisse wurden anschließend in Bezug auf die sich ausbildende Blasenform und statische Aufstiegs geschwindigkeit mit den zur Verfügung stehenden experimentellen Daten in Abhängigkeit der Reynoldszahl verglichen.

Es kann gezeigt werden, dass das Farb-Gradienten-Modell in der Lage ist einzelne Blasen unter dem Einfluss von Schwerkraft zu behandeln und für moderate Morton- und Eötvös-Zahlen korrekte Blasenformen und Aufstiegs geschwindigkeiten liefert.

Literatur:

[1] S. Leclaire; M. Reggio; J.-Y. Trépanier: Isotropic color gradient for simulating very high-density ratios with a two-phase flow lattice Boltzmann model, *Computers & Fluids*, 48, 98 – 112, **2011**.

[2] M. Latva-Kokko; Daniel H. Rothman: Diffusion properties of gradient-based lattice Boltzmann models of immiscible fluids, *Physical Review E*, 71, 056702, **2005**.

Eine Interface Tracking Methode für Stofftransport an einer aufsteigenden Blase

*Paul S. Weber, Graduate School of Computational Engineering, Technische
Universität Darmstadt*

*Holger Marschall, Center of Smart Interfaces, Technische Universität Darmstadt
Dieter Bothe, Center of Smart Interfaces und Fachbereich Mathematik, Technische
Universität Darmstadt*

Mehrphasenströmungen sind grundlegend für viele technische Prozesse, etwa für Polymerisations- und Oxidationsvorgänge, und stellen gleichzeitig eine große Herausforderung dar [1]. Die zur Reaktorauslegung eingesetzten mathematischen Modelle beinhalten unbekannte Terme, für deren Schließung ein genaues Verständnis der jeweiligen Transportprozesse unabdingbar ist.

In diesem Beitrag wird eine dreidimensionale Interface Tracking Methode vorgestellt, mittels der detaillierte numerische Analysen von zweiphasigem Stofftransport an Einzelblasen durchgeführt werden [2]. Die Kopplung der Transportgleichungen am Interface basiert auf dem Dirichlet-Neumann Algorithmus, der hinsichtlich Stabilität und Konvergenz analysiert und optimiert wird. Anhand eines semi-analytischen Testfalls für Konvektion und Diffusion wird die Methode validiert, wobei gezeigt wird, dass Systeme mit Péclet-Zahlen von bis zu 77.000 genau berechnet werden können. Zusätzlich zum reinen Stofftransport ist eine Methode zur Simulation von instantanen Reaktionen zweiter Ordnung implementiert worden, welche neben den Konzentrationsverteilungen der Edukte auch die des generierten Produkts bestimmt. Weiterhin werden lokale und globale Verstärkungsfaktoren bestimmt und diskutiert, wobei insbesondere auf die Abhängigkeit der globalen Verstärkung von der Reynolds-Zahl eingegangen wird.

[1] H. A. Jakobsen. *Chemical reactor modeling*. Springer Berlin Heidelberg, 2008

[2] P. S. Weber, H. Marschall und D. Bothe. *An ALE Interface Tracking method for highly accurate species transport*. (Status: submitted), 2015

Die Arbeit von Paul S. Weber wird im Rahmen der Exzellenzinitiative des Bundes und der Länder und von der Graduate School of Computational Engineering der Technischen Universität Darmstadt finanziell unterstützt.

‘On the Various Facets, Models & Applications of Industrial Multiphase Flow’

Dr Habil. Djamel Lakehal

ASCOMP AG Zurich, Switzerland

(lakehal@ascomp.ch; www.ascomp.ch)

Abstract

The ability to predict the motion and the physics of multi-phase flow systems with or without heat and mass transfer is essential for refining the design of various industrial processes, in both conventional and novel technologies. In practical applications, the flow may involve phenomena acting at different time/length scales. At each level of the scale cascade, the physics of the flow is amenable to numerical prediction by scale-specific strategies. Particles, interfaces, mixtures need to be resolved with specific approaches, and so is the case as to their interaction with turbulence.

We will show how Computational Fluid Dynamics and Computational Multi-Fluid Dynamics (CFD or CMFD) are (and will) playing an extremely important role to respond to particular design needs and technology challenges. We will proceed by highlighting the main differences between the various existing predictive techniques, their strengths and deficiencies, before evoking new routes for transcending the classical approaches.

We then report on recent advances made in predicting complex and multi-phase flows for both conventional and new technologies, including e.g. microfluidics devices, conventional and renewable energy sectors, chemical and process engineering, including the design of innovative processes plants. Examples will include desalination heat exchangers, chemical reaction in automotive catalysis systems, convective-radiative-conductive heat transfer in solar panels and natural convection in solar towers, multiphase flow separation. We will also show examples of simulations of single and multiphase flow processes through porous media in relation with Carbon sequestration, CCS, and Enhanced Oil Recovery, EOR.

Bio-sketch

Djamel Lakehal is the CEO of ASCOMP Switzerland & ASCOMP Inc. USA. He is also

appointed as a Research Scientist at the MIT (USA). He studied mechanical engineering, and obtained his M.S. in Fluid Mechanics from Ecole Centrale of Nantes, France in 1991, and his PhD in December 1994. In the period 1995-1997, he collaborated with Prof. W. Rodi at the University of Karlsruhe as a post-doctoral researcher. As a Research Associate at the Institute of Fluid Mechanics at TU-Berlin (1997-1998), he collaborated with Prof. F. Thiele. In 1998 he joined the Institute of Energy Technology of the ETH Zurich Switzerland (Nuclear Eng. Laboratory) as a Group Leader and Lecturer. He initiated the creation of the Computational Multifluid Dynamics Group, hosting doctoral and post-doctoral scientists, performing cutting-edge research in computational multi-fluid flows for conventional and renewable energy technologies. In June 2004 he was awarded the French Habilitation Degree jointly from the Ecole Centrale of Lyon and ETH Zurich. In January 2004, he founded ASCOMP GmbH, a Spin-off Company of ETH Zurich specialized in industrial fluid dynamics and heat transfer for energy-related technologies. Dr Lakehal was hosted as invited Professor in various universities, including MIT, KTH Stockholm, UC Sta Barbara, ENS Cachan Paris, Imperial College London. Dr Lakehal acts as a reviewer of research projects for the EU (DG Energy), and the US Department of Energy DOE.

Dr Lakehal authored more than 70 archived journal papers in the broad area of energy and environmental engineering. Selected journal papers (from 2002) include:

Lakehal D., Narayanan C., Caviezel D., von Rickenbach J., Reboux S.: *Microfluidics and Nanofluidics*, 15, 2013.

Lakehal D.: *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 9999, 2013.

Di Bari, S., Lakehal D., Robinson A.J.: *I. J Heat & Mass Transfer*, 64 , 2013.

Lakehal, D.: *AIP Conf. Proc.* 1479, 2012.

Simiano M., Lakehal D.: *I. J. Multiphase Flow*, 47, 2012.

Liovic P., Lakehal D.: *Comp. & Fluids*, 63, 2012.

Simiano M., Lakehal D.: *Int. J. Multiphase Flow*, 47, 2012.

Lakehal D., Reboux S.: *J. Fluid Mech.*, (in press), 2012.

Lakehal D., Liovic P.: *J. Fluid Mech.*, 674, 2011.

Lakehal D., Labois M.: *Int. J. Multiphase Flow*, 37(6), 2011.

Labois M., Lakehal D.: *Nucl. Eng. Design*, 241(6), 2011.

Icardi, M.; Gavi, E.; Marchisio D., Lakehal D.: *Chem. Eng. Design*, 1661, 2011.

Qu, X.L., Khezzer, L., Danciu, D., Lakehal D.: *Int. J. Multiphase Flow*, 37(7), 2011.

Lakehal D.: *Nucl. Eng. Design*, 240, 2010.

Simiano M., Lakehal D., Lance M., Yadigaroglu G.: *J. Fluid Mech.*, 627, 2009.

Lakehal D., Fulgosi M., Banerjee S., Yadigaroglu G.: *Phys. Fluids*, 20, 2008.

Lakehal D., Fulgosi M., Yadigaroglu G.: *ASME J. Heat Transfer*, 130, 2008.

Lakehal D., Liovic P.: *SIAM J Scientific Computing*, 31, 2008.

Lakehal D., Narayanan C.: *ASME J. Heat Transfer*, 131, 2008.

Reboux S., Sagaut P., Lakehal D.: *Phys. Fluids*, 18 (10), 2006.

Narayanan C., Lakehal, D.: *Phys. Fluids*, 18(9), 2006.

Simiano M., de Cachard F., Lakehal D., Yadigaroglu G.: *Int. J. Multiphase Flow*, 32(10), 2006.

Liovic P., Lakehal D.: *J. Comp. Physics*, 219(1), 2006.

Botto L., Narayanan C., Fulgosi M., Lakehal D.: *Int. J. Multiphase Flow*, 31(8), 2005.

Banerjee S., Lakehal D., Fulgosi M.: *Int. J. Multiphase Flow*, 30, 2004.

Lakehal D., Fulgosi M., Banerjee, S: *ASME J. Heat Transfer*, 125(6), 2003.

Lakehal D., Narayanan C.: *Int. J. Multiphase Flow*, 29(6), 2003.

Fulgosi M., Lakehal D., Banerjee S., De Angelis V.: *J. Fluid Mech.*, 482, 2003.

Narayanan C., Lakehal D., Botto L., Soldati A.: *Phys. Fluids*, 15(3), 2003.

Narayanan C., Lakehal D.: *Physics Fluids*, 14(11), 2002.

Lakehal D.: *Int. J. Multiphase Flow*, 28(5), 2002.

Fluidynamik von Einzelblasen mit überlagertem Stofftransport

*D. Merker, L. Böhm, M. Kraume, Technische Universität Berlin, Fachgebiet
Verfahrenstechnik, Berlin/Deutschland*

Um einen Stofftransport zwischen einer Gas- und Flüssigphase zu realisieren werden in der Industrie häufig Blasensäulen als Kontaktapparate eingesetzt. Die Auslegung basiert jedoch teils auf groben Abschätzungen. Das grundlegende Ziel des DFG Schwerpunktprogramms SPP 1740 („Einfluss lokaler Transportprozesse auf chemische Reaktionen in Blasenströmungen“) ist es ein tieferes Verständnis auf Basis von Untersuchungen verschiedenster Größen- und Zeitskalen für Blasensäulen zu erlangen. Es sollen sowohl Einzelblasen als auch Blasenschwarmuntersuchungen und deren mathematischer Beschreibung erarbeitet werden.

Gasblasen weisen je nach Form und Größe ein unterschiedliches fluidynamisches Verhalten auf. Neben dem integralen meist volumenspezifischen Stoffübergangskoeffizienten wird in diesem Teilprojekt der Stofftransport auch lokal und zeitlich hoch aufgelöst an Einzelblasen und verdünnten Blasenschwärmen untersucht werden. Es werden Stoffsysteme betrachtet, bei denen ein Stoff aus der Gasphase in die Flüssigphase übergeht und in dieser schnell abreagiert. Als experimentelle Aufbauten werden ein Aufstiegskanal und eine Gegenstrommesszelle verwendet, bei denen der Druck, die Temperatur, die Blasengröße (Flüssigkeitsgeschwindigkeit) sowie die verwendeten Stoffsysteme variiert werden. Mit Hilfe einer Hochgeschwindigkeitskamera kann ein zeitlich aufgelöster, nicht-volumenspezifischer Stoffübergangskoeffizient ermittelt werden, der proportional zur zeitlichen Veränderung der Blasengröße ist. Zunächst wurden Experimente mit Kohlenstoffdioxidblasen in Wasser durchgeführt. Es werden die instationäre Aufstiegs geschwindigkeit, die Trajektorie sowie die lokale Blasengröße und –form aufgenommen. Reproduzierbare Reihenuntersuchungen für Stoffsysteme mit farbigen Reaktionsprodukten (z.B. Kupfer-Ammin-Komplex) sollen die Möglichkeiten der Untersuchungen von lokalen Stofftransportphänomen erweitern.

Danksagung

Wir bedanken uns bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die finanzielle Unterstützung im Rahmen des DFG Schwerpunktprogramm SPP 1740 “Einfluss lokaler Transportprozesse auf chemische Reaktionen in Blasenströmungen.

Experimentelle Analyse der Grenzschichtdynamik in Blasenströmungen

*M.Sc. Jens Timmermann, Dr.-Ing. Marko Hoffmann, Prof. Dr.-Ing. Michael Schlüter,
Institut für Mehrphasenströmungen, Technische Universität Hamburg-Harburg
Eißendorfer Straße 38, 21073 Hamburg*

Eine der grundlegenden Aufgaben der Verfahrenstechnik in der chemischen Industrie ist die Sicherstellung hoher Ausbeuten und Selektivitäten. Bei stofftransportlimitierten Reaktionen von gasförmigen Substanzen mit einer kontinuierlichen Phase müssen hierfür definierte Vermischungsverhältnisse eingestellt werden, wobei die Zeitskalen der Vermischung durch die Transportvorgänge in der Grenzschicht, nah an der Phasengrenze und durch die vorliegende Schwarmturbulenz bestimmt werden. Durch Abstimmung der Zeitskalen von Stofftransport und Reaktion sollte somit eine Optimierung von Ausbeute und Selektivität erreicht werden können.

An Gasblasen wird die grenzschichtnahe Vermischung maßgeblich durch Grenzflächendeformationen in Form von Oberflächenwellen bestimmt, wie bereits Tsuchiya 2001 anhand von aufsteigenden Kohlenstoffdioxid-Blasen in Wasser zeigen konnte [1]. Ziel dieser Arbeit ist daher die Untersuchung des Einflusses der Grenzschichtdynamik auf den Stofftransport sowie auf eine nachgeschaltete Reaktion.

Hierfür werden mittels einer am Institut entwickelten Versuchsanordnung reproduzierbare Grenzflächendeformationen mit gezielt herbeigeführten Blasenkollisionen erzeugt. Untersuchungen an Kohlenstoffdioxid-Blasen in VE-Wasser, ohne zusätzliche chemische Reaktion, zeigen eine Erhöhung der Stofftransportrate in Abhängigkeit der Stoßfrequenz. Mit Hilfe der planaren Laserinduzierten Fluoreszenz (LIF) kann dies u.a. auf die Ablösung von Wirbeln erhöhter Sauerstoffkonzentration während einer Blasenkollision zurückgeführt werden. Der Einfluss dieser Phänomene auf eine chemische Reaktion wird zunächst mit Hilfe der Oxidation von Natriumsulfit untersucht, wobei eine 3D-Scanning LIF Messtechnik zur Anwendung kommt, um die Stoffströme und Reaktionsprodukte zu quantifizieren. Parallel kommen Stoffsysteme von Partnern aus SPP1740 „Reaktive Blasenströmungen“ mit definierter einstellbarer Kinetik zur Anwendung, um den Einfluss hydrodynamischer Randbedingungen auf chemische Reaktionen gezielt untersuchen, modellieren und künftig besser beherrschen zu können.

Relation between Bubble Dispersion and Liquid Flow Field in Bubble Columns: A Complementary Study using Ultrafast X-Ray Tomography and Radioactive Particle Tracking

Salar Azizi¹, Ashutosh Yadav², Lau Yuk Man¹, Shantanu Roy², Markus Schubert¹

¹Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Dresden, Germany

²Indian Institute of Technology – Delhi, Hauz Khas, New Delhi, Delhi 110016, India

Bubble column reactors are widely used in chemical and petrochemical industries due to their simple design and beneficial mass and heat transfer rates. The design of bubble columns requires thoughtful information about the complex gas-liquid hydrodynamics. The bubble size distribution, which results from bubble-liquid interactions, has a crucial impact on the reactor performance. Furthermore, reliable modeling of bubble columns requires validated hydrodynamic information.

In the present work, Radioactive Particle Tracking (RPT) and Ultrafast X-Ray Tomography (XRT) were applied for the first time *at one bubble column setup* to study the liquid velocity field and the corresponding bubble size distributions at different axial positions (Fig.1). In particular, the relation between the bubble dispersion, i.e. size and velocity, and the liquid flow field will be discussed. The velocity distribution of the liquid phase influences the bubble breakup and coalescence rates and accordingly the bubble size. In turn, turbulence and recirculation of the liquid phase depend on the bubble sizes. This mutual interaction will be revealed based on experiments with different distributor designs.

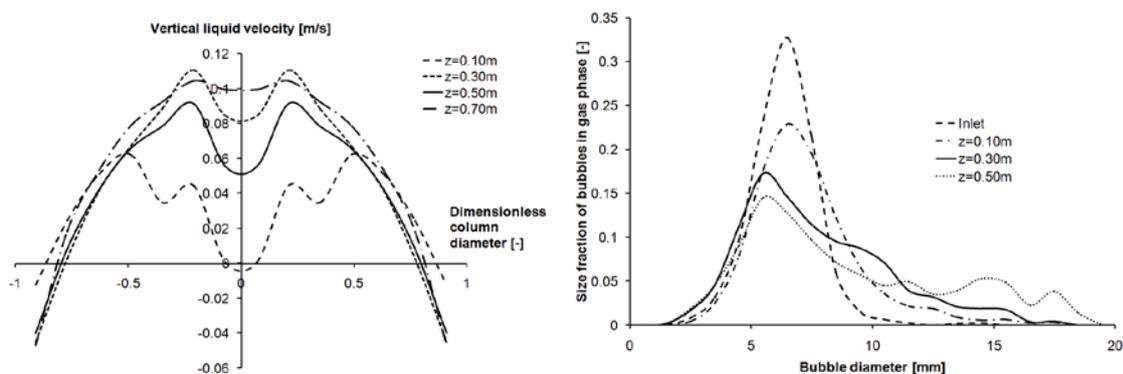


Fig.1 Liquid velocity profiles obtained from RPT (left) and corresponding bubble size distributions obtained from XRT (right).

Simulation des Einzelblasenaufstiegs in engen Kanälen mittels OpenFOAM

L. Böhm, M. Kolano, M. Kraume, Technische Universität Berlin, Fachgebiet Verfahrenstechnik, Berlin/Deutschland

In dieser durch die Abreinigung von Deckschichten in Plattenmembranmodulen motivierten Forschungsarbeit wird die vom Autor in den letzten Jahren durchgeführte, experimentelle Fundamentalbetrachtung des Einzelblasenaufstiegs aufgegriffen und mittels des CFD-Tools OpenFoam simuliert (Abb.1). Bereits vor der extensiven experimentellen Betrachtung wurden Simulationen mittels Ansys Fluent durchgeführt. Dabei wurde ebenfalls der Einzelblasenaufstieg in engen Kanälen (Tiefe \ll Breite; Blasendurchmesser \approx Tiefe) betrachtet. Aufgrund der damaligen Rechenleistungsbegrenzungen wurde nur die Hälfte der Kanaltiefe (Wand bis Tiefe/2) als Rechengebiet genutzt. Da beim Fall Blasendurchmesser $<$ Tiefe durchaus

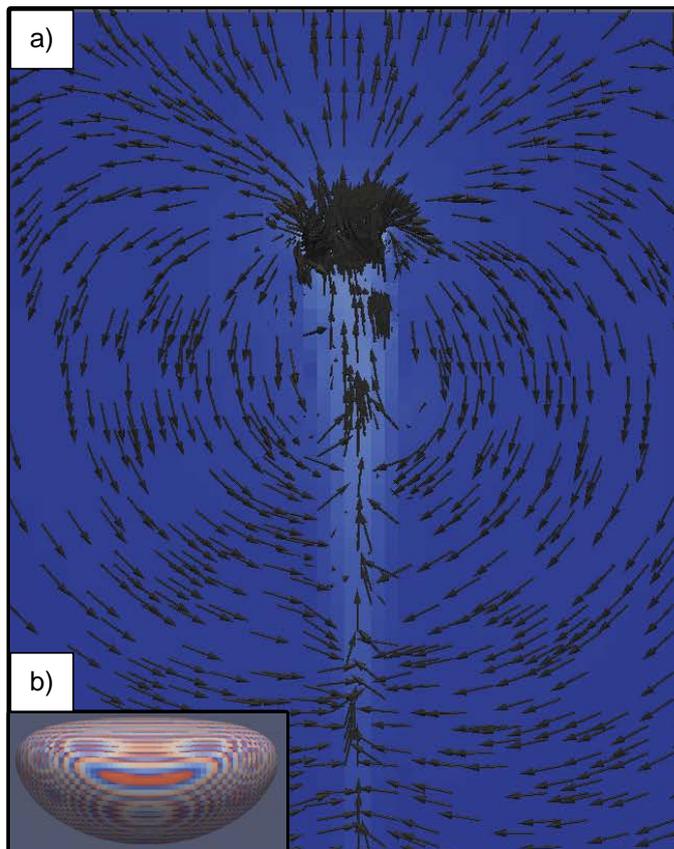


Abb.1: a) Vektorfeld um eine beschleunigende Blase und b) Detaildarstellung der verformten Blaseoberfläche

Bewegungen normal zu den Wänden zu Stande kommen, wird u.a. dies nun in den neuen Simulationen mit betrachtet. Validiert werden die Ergebnisse mit den in großer Menge vorhandenen Messdaten die mittels Hochgeschwindigkeitskamera, PIV und Elektrodiffrusionsmethode gewonnen wurden. Auf lange Sicht soll das CFD-Modell dahingehend erweitert werden, dass die kontinuierliche Phase nicht-Newton'sche Eigenschaften (inkl. Viskoelastizität) hat, was die Bewegung der Blase stark beeinflusst.

Highly dispersible surface modified dry powder inhalable formulation of voriconazole for invasive pulmonary aspergillosis

Sumit Arora^{1, 2, 3}, Mehra Hagh², Paul M. Young², Michael Kappf³, Daniela Traini², Sanyog Jain¹

¹ Centre for Pharmaceutical Nanotechnology, Department of Pharmaceutics, National Institute of Pharmaceutical Education and Research (NIPER), Sector 67, S.A.S. Nagar (Mohali) Punjab- 160062 INDIA

² Respiratory Technology, Woolcock Institute of Medical Research and Discipline of Pharmacology, Sydney Medical School, The University of Sydney, NSW 2037, Australia

³ Max Planck Institute for Polymer Research, 55128 Mainz, Germany

The purpose of this study was to develop and characterise dry powder inhalable formulation of voriconazole (VRZ) for the treatment of invasive pulmonary aspergillosis. The developed formulations were studied for their aerosol and physico-chemical properties as well as their interaction with simulated pulmonary surfactant.

The colloid probe technique was employed to study inter-particle adhesion between the developed formulations. Interaction between simulated pulmonary surfactant (DPPC monolayer) prepared by Langmuir-Blodgett approach and the microparticulate formulation was also investigated using the colloid probe technique. In addition, the effect of leucine on the Young's modulus of the composite particles were explored.

Colloid probe experiments showed a decrease in force of cohesion within the formulations with increase in the concentration of leucine and this decrease was very well correlated ($r^2 = 0.999$) with the increase in fine particle fraction of the formulations. This clearly revealed that the addition of leucine lead to decrease in cohesive energy within the formulation. Furthermore, with the increase in concentration of leucine, the interaction with the simulated pulmonary surfactant with the microparticles were found to be reduced owing to decrease in the surface energetics of the developed formulations. Lastly, spray drying leucine with VRZ does not found to possess any influence ($p > 0.05$) on the young's modulus of the composite particles.

Usage of bonded-particle model to investigate packings of non-spherical particles

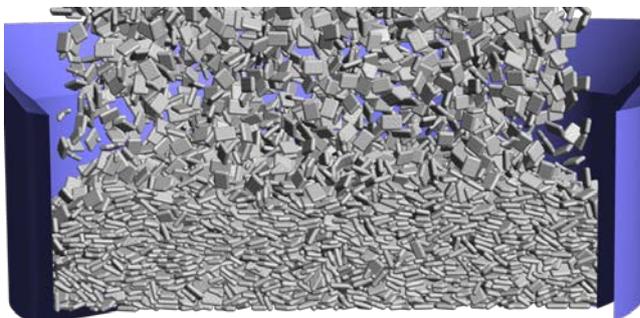
Maksym Dosta, Stefan Heinrich

Institute of Solids Process Engineering and Particle Technology

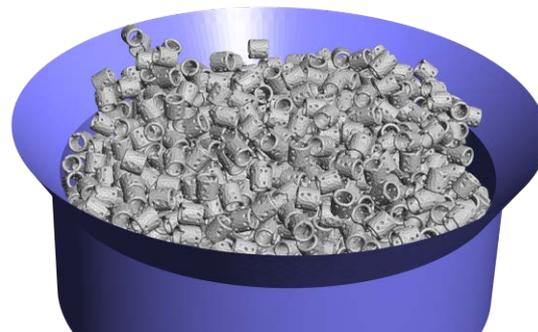
Hamburg University of Technology

Nowadays the Discrete Element Method (DEM) is widely used for modeling of particulate materials on the microscale. This approach allows to consider properties of individual particles and to perform simulations of particle collectives. Initially the DEM has been proposed for modeling of ideally spherical particles. Today, however, there exist several extensions and modifications of it, such as a bonded-particle model (BPM), that gives a possibility to simulate non-spherical particles, composite materials or wet granules. In this contribution the BPM, which has been implemented into the simulation framework MUSEN, will be described and will be applied to investigate packings of non-spherical particles.

In the BPM the primary particles are coupled with each other via solid or liquid bonds. Similar to particles, bonds are considered as separate discrete elements and within each simulation time step the forces and moments acting in them are calculated according to the behavior of the modeled material (elastic, visco-elastic, liquid, etc.). A criterion of bonds breakage can be also implemented into the BPM. If, for example, stress acting in a solid bond is larger than strength, or prolongation of a liquid bridge is larger than some critical values, then the breakage or rupture can occur. Consequently, the material destruction or deformation can be modeled. However, due to the minimization of a computational effort the bonds are excluded from the contact detection algorithm.



a) *Plate-like particles*



b) *Cylindrical particles*

Fig. Simulated packings of non-spherical particles.

Entwicklung einer Austrageinrichtung zur Steuerung der Massenstromdichte von Schüttgütern

Georg Franke, Fabian Weigler, Jochen Mellmann; Leibniz Institut für Agrartechnik Potsdam Bornim e.V.; Jürgen Tomas; Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Bei vielen Schüttgutprozessen kann die Erzeugung von Massenfluss in einem Behälter eine große Herausforderung darstellen. Durch den gezielten Einsatz ganzflächiger Austrageinrichtungen (z.B. Räumschnecken, Schneckenböden oder Dreh- bzw. Kippbalkenböden) bei der Behälterentleerung umgeht man den Einfluss des Auslauftrichters auf die Fließbewegung. Die Gestaltung und die Arbeitsweise ganzflächiger Austrageinrichtungen sorgen für eine gleichmäßigere Geschwindigkeitsverteilung über dem Behälterquerschnitt. Experimentelle Untersuchungen haben jedoch gezeigt, dass statt eines idealen Kolbenflusses noch immer Massenfluss mit überlagertem Kernfluss dominiert und sich dadurch ausgeprägte Fließprofile ergeben, die in vielen Aufbereitungsprozessen zur Qualitätsminderung und einem erhöhtem Energiebedarf führen.

Es wurde eine neuartige Austrageinrichtung im Technikumsmaßstab entwickelt, die Gegenstand fortlaufender Untersuchungen ist. Ihr konstruktiver Aufbau ist den ganzflächigen Austragsystemen angelehnt, die über eine Vielzahl parallel liegender Auslauftrichter verfügen und dadurch längliche Öffnungsschlitze über dem Apparatequerschnitt erzeugen. Aufgrund ihrer Gestaltung haben derartige Systeme bisher nur in rechteckigen Schüttgutapparaten Anwendung gefunden. Die Arbeitsweise der neuartigen Vorrichtung unterscheidet sich jedoch von den bislang eingesetzten Systemen und ermöglicht eine lokale Freigabe der Öffnungsschlitze unter Berücksichtigung eines gleichmäßigen Schüttgutabzugs. Ferner lässt sich durch die Steuerung je nach Bedarf auch auf Fließprofile reagieren. Dadurch könnten Schüttgutprozesse der Getreide-, Glas-, Granulat- oder Grundstoffindustrie zukünftig von einer Vergleichmäßigung profitieren.

Determination of the fractal dimension of soft agglomerates produced in spray fluidized bed

Reihaneh Pashminehazar, Abdolreza Kharaghani, Evangelos Tsotsas

Thermal Process Engineering, Otto von Guericke University Magdeburg, Germany

Maltodextrin agglomerates produced in spray fluidized bed are composed of primary particles forming irregular structures [1]. The most common way to quantify this morphological irregularity is to use the concept of fractal dimension, which is very useful for describing shapes and the way a fractal object fills the space. The value of fractal dimension ranges from unity for strings to three for regular three-dimensional objects, and it can have a non-integer value [2]. Therefore, the fractal dimension is an expression which describes the deviation of a particle from the perfect spherical shape. For real agglomerates with non-spherical shapes, calculating the fractal dimension is more difficult and thus a challenging issue.

In this study, maltodextrin agglomerates are scanned using an X-ray micro computed tomograph and the acquired images are employed to determine the corresponding fractal dimensions. The general method of calculation is based on the scaling law and the box counting method. For scaling method the primary particle is separated by preflooded watershed method. By considering each primary particle as a sphere with the same volume, the agglomerate is represented as a collection of spherical particles. From this representation of the agglomerate, the radius of gyration and thus the fractal dimension are calculated. In addition to this method, for higher accuracy and comparison, the radius of gyration and fractal dimension are also calculated for the real structure of the agglomerate from the voxel coordinates and the voxel values of 3D X-ray images. For applying box counting method, the 3D matrix of each agglomerate is created. The box counting method yields a higher value of fractal dimension. Also, for avoiding the cumbersome task of analyzing the three-dimensional properties of aggregates with X-ray tomography, the relationships between the actual and 2D projected images is established.

References

[1] R. Pashminehazar*, A. Kharaghani, E. Tsotsas, Three dimensional characterization of morphology and internal structure of soft material agglomerates produced in spray fluidized bed by X-ray tomography, Powder Technology, under review.

[2] M.L. Eggersdorfer, S.E. Pratsinis, The structure of agglomerates consisting of polydisperse particles, Aerosol Sci. Technol. 46 (2012) 347–353. doi:10.1080/02786826.2011.631956.

Charakterisierung des Partikelaustauschs in mehrstufigen Wirbelschichtprozessen – CFD Simulation und experimentelle Validierung

Philipp Lau, Institut für Thermische Verfahrenstechnik, KIT, Karlsruhe/Deutschland,

Matthias Potthoff, Uhde Fertilizer Technology, Roermond/Niederlande,

Matthias Kind, Institut für Thermische Verfahrenstechnik, KIT, Karlsruhe/Deutschland

Wirbelschichten werden zur Herstellung, Formulierung und Funktionalisierung von partikulären Systemen unter anderem bei der Trocknung und Granulation eingesetzt. Im großtechnischen Maßstab werden hintereinandergeschaltete Wirbelschichtkammern verwendet, welche durch herabhängende Wände voneinander getrennt bzw. durch einen bodennahen Spalt so miteinander verbunden sind, dass sich Partikel zwischen den Kammern bewegen können. Die Produktqualität hängt deutlich von der Verweilzeit der Partikel im System ab, welche über die Höhe des Spalts gesteuert werden kann. Die Kenntnis der optimalen Spalthöhe zwischen den Kammern ist somit bei der Optimierung und beim Scale-Up von Wirbelschichtprozessen wichtig und erfolgsentscheidend.

Bisher gibt es jedoch keine zufriedenstellenden Möglichkeiten, um experimentell den Partikelaustausch in dreidimensionalen Wirbelschichten zu charakterisieren. Optische Methoden können nicht verwendet werden und das aufwändige Tracking von Einzelpartikeln liefert keine repräsentativen Ergebnisse für das Partikelkollektiv. Für die Quantifizierung des Partikelaustauschverhaltens in Wirbelschichten wird in dieser Arbeit ein CFD-Mehrphasenmodell vorgeschlagen und die Abhängigkeiten verschiedener Prozessparameter, wie z.B. Spalthöhe und Bett Höhe, auf das Austauschverhalten überprüft. Experimentelle Validierung mit einer Doppelkammer-Wirbelschichtanlage im Batchbetrieb mit höhenverstellbarer Trennwand zeigt die erfolgreiche Implementierung des Mehrphasenmodells. Hierbei wird der instationäre Massenverlauf verschieden farbiger Partikel mittels Bildanalyse gemessen, woraus sich charakteristische und prozessabhängige Mischzeiten berechnen lassen. Das validierte CFD-Modell wird anschließend auf kontinuierliche Wirbelschichtanlagen mit mehr als 2 Kammern erweitert. Im stationären Betrieb ist das Austauschverhalten aufgrund des Segregationseffekts partikelgrößenabhängig. Das charakteristische Rücklaufverhältnis zwischen den Kammern verschwindet ab einem kritischen extern zugeführten Massenstrom.

Veränderung des Fließverhaltens von kohäsiven Schüttgütern durch Oberflächenmodifizierung

Zinaida Todorova, Werner Hintz, Jürgen Tomas

*Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Institut für Verfahrenstechnik,
Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik, Magdeburg, Deutschland*

Die interpartikulären Haftkräfte bestimmen das Verhalten von feinen und ultrafeinen Partikeln in einer Reihe von verfahrenstechnischen Prozessen. Unter allen Auslösern der interpartikulären Adhäsion, sind bei trockenen, feindispersen Partikeln die van-der-Waals Kräfte am wichtigsten. Die van-der-Waals Kräfte hängen von dem Abstand zwischen den Haftpartnern und deren chemischen Zusammensetzung ab. Aus diesem Grund ist es möglich die Adhäsion und demzufolge das Fließverhalten von kohäsiven Pulvern durch Oberflächenmodifizierung zu beeinflussen.

Als Referenzpartikelsystem für den Beschichtungsprozess wurden kohäsive, vergleichsweise steife Mikrogaskugeln ($d_{50,3} = 7 \mu\text{m}$) mit einer glatten Oberfläche verwendet. Eine Modifizierung der Oberflächenzusammensetzung, und dadurch eine Veränderung der Oberflächenenergie, wurde mittels Beschichtung mit hydrophoben Silanen erreicht. Die Oberflächenrauigkeit wurde mit Hilfe von Nanopartikeln verändert. Für die Beschichtung wurden verschiedene Nanopartikel-Suspensionen hergestellt. Die Beschichtung erfolgte in einer wässrigen Phase mittels eines Heteroagglomerationsprozesses. Dies basiert auf einer elektrostatischen Anziehung zwischen den Gast- und Trägerpartikeln. Das Ergebnis ist eine gleichmäßige Beschichtung aus nicht agglomerierten Nanopartikeln.

Die Messung der makroskopischen Fließfunktion erfolgte mit einem Schulze-Ringschergerät. Um die Kontakteigenschaften zu quantifizieren und zu vergleichen, wurde das Modell „steife Partikel mit weichen Kontakten“ angewandt. Anhand dieses Modells werden die wesentlichen mikroskopischen Eigenschaften der chemisch modifizierten Glaspartikel mittels des sogenannten umgekehrten Mikro-Makro-Übergangs bestimmt und diskutiert.

Functionalization of protein-based aerogels by coating in a spouted bed

Monika Goslinska¹, Stefan Heinrich¹, Ilka Selmer², Irina Smirnova²,
Christian Kleemann³, Ulrich Kulozik³

¹*Institute of Solids Process Engineering and Particle Technology,
Hamburg University of Technology, Hamburg, Germany*

²*Institute of Thermal Separation Processes,
Hamburg University of Technology, Hamburg, Germany*

³*Department of Food Process Engineering and Dairy Technology,
Munich University of Technology, Munich, Germany*

Due to their biocompatibility and biodegradability protein-based aerogels are sustainable for food applications. Large surface area and open pore structure enable to use them as matrices for active substances, e.g. in pharmaceutical industry. To protect the loaded drugs from environmental impact and to design a controlled drug release the drug-containing particles can be coated with polymeric films.

In this work a novel process for coating micrometre-sized (~50-100 μm) and light weighting protein-based aerogels (Fig. 1) is proposed. The particles are functionalized by coating in a prismatic spouted bed apparatus with common coating materials in pharmaceutical industry. For processing of such fine particles stable spouting operating conditions can be achieved, when particles are highly dispersed in the apparatus at high gas velocities (dilute spouting regime). This process is excellent for coating of very small particles with thin, uniform and dense layers giving the possibility to produce sustainable particles, which enable controlled drug release in human body at different pH levels. This contribution will give a detailed overview about the coating study.

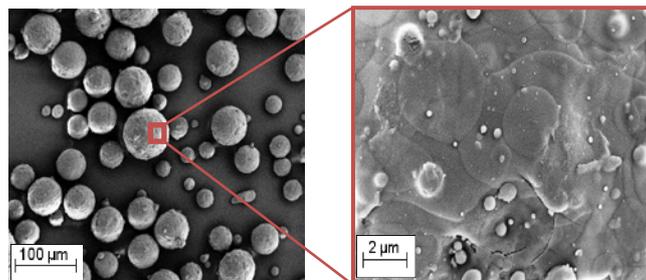


Fig.1: SEM of coated protein-based aerogels.

We acknowledge for financial support: German Ministry of Economics and Energy (via AiF) and the FEI. Project number AiF 17485 N.

Röntgentomografische Analyse der Mikrostruktur unterschiedlich stark verdichteter Lithium-Ionen-Batterieelektroden

A. Diener, L. Torbahn, W. Haselrieder, A. Kwade

Institut für Partikeltechnik, TU Braunschweig, Deutschland

Die sichere Auslegung von Fertigungsprozessen zur Elektrodenherstellung erfordert ein detailliertes Verständnis der Elektrodenstruktur und ihres Einflusses auf die Funktionseigenschaften der Zellen, wie Energie und Leistungsdichte als auch Lebensdauer. Ziel der Kalandrierung, d.h. der Verdichtung der Elektroden im Anschluss an die Trocknung der Elektrodenschicht bestehend aus Aktivmaterialpartikeln, Binder und Additiven ist die Ausbildung einer homogenen Schicht mit einheitlichen mechanischen Eigenschaften und definierter Porosität. Dabei wird die Porenstruktur und hiermit der Ionentransport maßgeblich beeinflusst. Die partikuläre Feststoff-Phase bildet demgegenüber die Elektronentransportstruktur der Beschichtung. Die Struktur und die damit verknüpften Ionen- wie auch Elektronentransporte bestimmen das elektrochemische Verhalten der Elektroden. Ein tieferes Verständnis hinsichtlich der Ladungsträgerstrukturen fehlt bisher allerdings.

In dieser Arbeit wird die Auswirkung der Kalandrierung auf die Morphologie der partikulären Elektrodenstruktur durch die numerische Berechnung von topologischen Merkmalen untersucht. Die innere Struktur der funktionalen Beschichtung von Lithium-Ionen-Elektroden wird dazu auf partikulärer Ebene mithilfe der Röntgenmikrotomografie (XMT) methodisch quantifiziert. Betrachtet werden drei Aktivmaterial-Partikelgrößenverteilungen, die zu Schichten verarbeitet werden. Schwerpunkt ist die Analyse der Schichtmorphologie in Abhängigkeit des durch Kalandrierung erzeugten Verdichtungszustandes. Die unterschiedlichen Verdichtungszustände werden insbesondere im Hinblick auf Änderungen der Hohlraumstruktur der Elektroden mittels XMT analysiert. Als Referenz dienen nicht verdichtete Elektroden. Der Einfluss der Kalandrierung auf die Morphologie wird über die Bestimmung von lokaler Porosität, Porengrößenverteilung und Tortuosität verfolgt. Eine Evaluierung der Qualität der XMT-Porenstrukturanalyse wird mithilfe der etablierten Methode der Quecksilberintrusion durchgeführt.

Modifizierung der Fließeigenschaften von feinen Glaspartikeln durch die Veränderung der Oberflächenhaftkräfte

Lutz Torbahn, Arno Kwade

Technische Universität Braunschweig

Das Verhalten von Pulvern auf von außen wirkende Kräfte kann durch die Pulverfließeigenschaften beschrieben werden. Diese spielen eine wichtige Rolle in allen Anwendungen, in denen es um Lagerung, Transport und weiterverarbeitende Prozesse von Schüttgütern geht. Bei sehr feinen Schüttgütern mit Partikelgrößen insbesondere unter 10 μm dominieren zunehmend die Haftkräfte an den Kontakten gegenüber den Schwerkraften. Das hierbei beobachtbare Schüttgutverhalten ist sehr komplex, dann aber durch XMT-Aufnahmen von gescherten Schüttgütern aufgenommen werden. Für qualitativ hochwertige XMT-Aufnahmen auf Partikelskala sollten die Partikelgrößen 10 μm aber nicht deutlich unterschreiten.

In dieser Arbeit wurden die Oberflächenkräfte von kugelförmigen, etwa 30 μm großen Glaspartikeln chemisch verändert und hierüber die Haftkräfte kontrolliert. Die Haftkraftveränderung an den Partikelkontakten basiert auf der Anwendung von funktionalisierten chemischen Verbindungen, die entweder mehr hydrophob oder mehr hydrophil wirken. Nach der Modifizierung der Partikel wurden diese mit dem Mikroschertester untersucht, welcher die Verwendung von sehr kleinen Probenvolumina ca. 6 μm^3 zulässt. Für die Analyse der Mikrostruktur während der Kompression und der Scherung wurde der Mikroschertester mit einem Mikro-Computertomographen kombiniert. Auf diese Weise ist die Beobachtung des Kompressions- als auch des Schervorgangs auf der Partikelebene sehr detailliert möglich. Im Weiteren wurde der Einfluss der Haftkraftmodifikation auf die Kenngrößen der Dichteverteilungen, Porositäten und Scherzonenausbildung hin untersucht. Die gemessenen Fließeigenschaften und Strukturgrößen wurden mit den Haftkräften korreliert, die mittels AFM-Kraftspektroskopie und kolloidaler Beprobungsmethode ermittelt wurden. So konnte gezeigt werden, dass sehr hohe Haftkräfte zu schmalen Scherzonen führen.

Quantitative Strukturbeschreibung von Granulaten dichter zufälliger Packung: Strukturparameter und Eigenschaften

Julia Harnacke, Reinhard Kohlus

Institut für Lebensmittelwissenschaften und Biotechnologie, Universität Hohenheim

Physikalische Eigenschaften wie zum Beispiel das Auflöseverhalten und die mechanische Stärke sind wichtige Eigenschaften granulierter Materialien. Sie hängen dabei stark von der Struktur der Granulate ab. Das Ziel dieser Arbeit ist es deshalb die räumliche Verteilung der verschiedenen Phasen in einem Granulat zu charakterisieren und mit den oben genannten Produkteigenschaften zu korrelieren.

Es wurden Granulate hergestellt, die aufgrund ihres Herstellungsprozesses eine dichte zufällige Verteilung der Primärpartikel aufweisen sollen. Dabei wurden grobe und feine Primärpartikel (Kalkstein und Natriumchlorid) verwendet und die so erhaltene bimodale Partikelgrößenverteilung systematisch variiert. Als Binder wurde geschmolzenes Polyethylenglykol verwendet mit einer Sättigung von eins so dass alle Partikelzwischenräume damit ausgefüllt wurden.

Die Strukturanalyse erfolgte dann mit Hilfe von Mikrotomographie Aufnahmen, wobei unter anderem die Sehnenlängenverteilung, die Kovarianzfunktion und das Sternvolumen ausgewertet wurden. Von Interesse war dabei vor allem die 3-dimensionale Verteilung von Abständen zwischen den Phasen.

Die mechanische Stärke der Granulate wurde über die Druckfestigkeit von Einzelpartikeln bestimmt, das Auflöseverhalten über eine Leitfähigkeitsmessung.

Die Ergebnisse zeigen, dass der Abstand zwischen groben Primärpartikeln eine wesentliche Rolle spielt. In Abbildung 1 der mittlere Partikelabstand der aus den XRT-Bildern berechnet wurde gegen die Festigkeit aufgetragen. Je näher die groben Primärpartikel zusammen liegen desto größer ist die Festigkeit der Granulate.

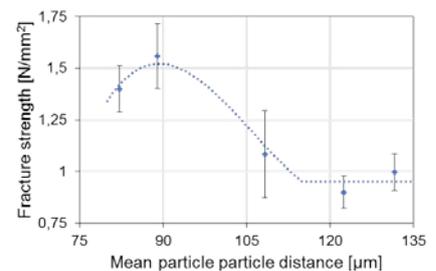


Abb. 1: Mittlerer Abstand der groben Primärpartikel in Korrelation zur Druckfestigkeit der Granulate.

Folgende Experimente sollen den Einfluss der Packungsdichte detaillierter mit einbeziehen sowie die Generierung poröser Granulate mit definierter Porosität.

Außerdem soll untersucht werden welche Strukturinformationen bereits über die Größenverteilung der Primärpartikel erhalten werden können und welche Aussagen diese bereits über Granulateigenschaften liefern können.

Untersuchung zur dreidimensionalen Verfolgung der Partikelbewegung in einer zylindrischen Wirbelschicht

V. V. Idakiev, L. Mörl, A. Bück, E. Tsotsas

*Lehrstuhl für thermische Verfahrenstechnik / NaWiTec, Otto-von-Guericke-Universität,
Magdeburg*

In Wirbelschichtapparaten werden disperse Feststoffe in intensiven Kontakt mit einem Fluidisierungsmedium gebracht. Die Bewegungskennwerte der Partikel in diesen Apparaten sind bisher nicht ausreichend beschrieben. Die Ermittlung von Partikelposition, Partikelgeschwindigkeit, Partikelrotation, auf die Partikel wirkende Kräfte und Energien, Kollisionen mit anderen Partikeln im Partikelkollektiv zu jedem beliebigen Zeitpunkt stellt einen bedeutsamen Aspekt der Untersuchungen zu komplexen Mehrphasenprozessen in Wirbelschichten dar. Diese Information über die Kenngrößen verbessert das Prozessverständnis, wodurch u. a. die Optimierung der Betriebsparameter, der Apparategeometrie sowie der Einbauten in der Wirbelschicht realisiert werden kann, was letztendlich eine höhere Qualität der Produkte und größere Durchsätze bei industriellen Prozessen zur Folge haben kann.

Im Rahmen dieser Forschungsarbeit wird die Partikelbewegung eines magnetisch dotierten Partikels in einer zylindrischen Wirbelschicht mittels eines neuartigen magnetischen Monitorings-Messverfahrens untersucht. Die Bahn- und Orientierungsparameter des Teilchens werden in definierten Zeitabständen (alle 6 Millisekunden) gemessen. Das magnetische Monitoring nutzt das von einem Permanentmagneten erzeugte magnetische Feld zur Bestimmung der Position des Magneten in einem Raum. Der Betrag der Feldstärke wird von 12 Messsensoren gemessen. Jeder Sensor erfasst dabei Informationen über die Position und die räumliche Ausrichtung des magnetisch dotierten Teilchens im dreidimensionalen Raum.

Als Versuchsmaterial werden Kunststoffkugeln mit einem Durchmesser von 6 mm verwendet. Die magnetisch dotierte Kugel ist eine Kugel mit nahezu gleichen fluiddynamischen Eigenschaften wie die Kunststoffkugel. Im Rahmen der Forschungsarbeiten werden der Gasdurchsatz, die Schichtmasse und die Eindüsungsparameter variiert.

Im Beitrag werden die Autoren die Eignung dieser neuartigen Methode zur Partikelverfolgung in Wirbelschichtapparaten mit Eindüsung einer Flüssigkeit ausführlich demonstrieren.

Untersuchung der Granulateigenschaften bei der Wirbelschichtgranulation mit induktiver Beheizung

V. V. Idakiev, L. Mörl, A. Bück, E. Tsotsas

*Lehrstuhl für thermische Verfahrenstechnik / NaWiTec, Otto-von-Guericke-Universität,
Magdeburg*

Seit der Erfindung der Wirbelschichttechnik zu Beginn des zwanzigsten Jahrhunderts erlebt dieses Verfahren eine stetig steigende Bedeutung in verschiedensten technischen Anwendungen. Diese Technologie zeichnen sich durch eine gute Durchmischung von Feststoffpartikeln mit einem fluiden Medium sowie einen intensiven Stoff- Wärme- und Impulstransport in der Schüttung aus. In Wirbelschichtprozessen ist oft die Erwärmung des Fluidisierungsmediums notwendig, was gegenwärtig hauptsächlich durch dessen Vorheizung vor dem Eintritt in den Apparat erfolgt.

Außer dieser konventionellen Methode der Energieeinbringung in Wirbelschichten durch konvektive direkte Aufheizung des Fluidisationsmediums kann der Energieeintrag auch durch Induktion mit Hilfe von elektrisch leitfähigen Inerpartikeln und einem elektromagnetischen Feld realisiert werden. In diesem Fall ist nicht das Fluidisierungsgas der Energieträger, sondern es sind die elektrisch leitfähigen Partikeln (z.B. Eisenhohlkugeln) in der fluidisierten Partikelschüttung, auf welche über ein Induktionsfeld berührungslos Energie übertragen wird. Da hier die Wärme über eine sehr große Wärmeübertragungsfläche an das Wirbelmaterial abgegeben wird, kann bei vergleichsweise geringen Temperaturdifferenzen ein effizienter Wärmeaustausch erreicht werden. Die Induktionstechnik ermöglicht außerdem hohe Energiedichten, wodurch sich die Aufheiz- und Abkühlphasen der Wirbelschicht deutlich verkürzen. Weiterhin ist eine zielgerichtete Erwärmung möglich, sodass sich die Temperatur des Gases genauer einstellen lässt, was besonders bei temperaturempfindlichen Gütern wichtig ist.

Das Hauptziel dieser Forschungsarbeit ist die Ermittlung der Qualität der beschichteten Partikeln bei der Verwendung von konventioneller und induktiver Beheizung. Im Beitrag wird eine detaillierte Analyse der Granulateigenschaften (Oberfläche, Korngrößenverteilung, Dicke und Porosität des entstandenen Mantels) dargestellt. Die Mantelporosität wird mit zwei unterschiedlichen Methoden untersucht, und die Ergebnisse werden verglichen. Im Beitrag soll nachgewiesen werden, dass Verbesserungen im Energieverbrauch (bei der induktiven Energieeinbringung) sich nicht nachteilig auf die Partikeleigenschaften auswirken.

On the hydrodynamics of airlift reactors: CFD Simulations

T.Ziegenhein, R.Rzehak, D.Lucas,

Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. Dresden/Germany;

It is more and more possible to design bubbly flow reactors with methods of the computational fluid dynamics (CFD). Simulations of such up to industrial dimensions are feasible within the Eulerian two-fluid framework of interpenetrating continua, for which suitable closure models are needed. However, measurements that can be used for model validation are often missing, especially for complex setups like airlift reactors. In the present work the recently described baseline model, which has been validated in pipe flows and bubble columns [1][2], is validated for our airlift reactor [3]. Reynolds stresses, liquid velocity and gas void fraction profiles as well as bubble size distributions at several positions in the riser and the downcomer are compared to the experiments. Particularly, the necessity of a sufficient discretization of the bubble size distribution in airlift reactors is discussed.

[1] Ziegenhein, T., Rzehak, R. & Lucas, D., 2015. Transient simulation for large scale flow in bubble columns. *Chemical Engineering Science* , 122(0), pp. 1-13.

[2] Rzehak, R. & Krepper, E., 2015. Bubbly flows with fixed polydispersity: Validation of a baseline closure model. *Nuclear Engineering and Design*, Volume 287, pp. 108-118.

[3] T. Ziegenhein, J. Zalucky, R. Rzehak, D. Lucas. On the hydrodynamics of airlift reactors, Part I: Experiments. *Chemical Engineering Science*, submitted

Modellierung und numerische Simulation der Strömung eines Elektrolyts in einem Lithium-Ionen-Akkumulator

Tim Neumann, Konrad Boettcher, Peter Ehrhard,

Strömungsmechanik, Bio- und Chemieingenieurwesen, TU Dortmund, Deutschland;

Motivation

Es wird die Strömung eines Elektrolyts in einem Lithium-Ionen-Akkumulator modelliert, um diverse Strategien zur Optimierung eines Befüllprozesses zu untersuchen. Ein solcher Akkumulator besteht aus vielen identischen Elementarzellen, welche jeweils aus Anode, Separator und Kathode gebildet werden. Die beiden Elektroden sind von einer porösen Matrix umgeben und werden durch einen porösen Separator räumlich getrennt. Diese sich wiederholende Einheit in dem Akkumulator stellt den strömungsrelevanten Bereich dar.

Numerik

Die Verdrängungsströmung des Elektrolyts in einer Elementarzelle wird unter Berücksichtigung der relevanten physikalischen Effekte numerisch simuliert. Dazu sind unter anderem die Berücksichtigung des Wandeffekts, die Implementierung von Kapillarkräften in den porösen Medien, sowie die Modellierung des Übergangsbereiches zwischen zwei Schichten zu nennen.

Experimente

Die mittleren Permeabilitäten, sowie die für die Benetzung ausschlaggebenden Matrixeigenschaften der porösen Schichten werden experimentell bestimmt. Dazu wird der kapillardruckgetriebene Aufstieg verschiedener Flüssigkeiten in den einzelnen Schichten transient gemessen. Die daraus resultierenden Aufstiegskurven werden an eine Lösung einer vereinfachten Form der Erhaltungsgleichungen angepasst. Die mittleren Porositäten werden getrennt davon durch Messungen an den einzelnen Schichten bestimmt, des Weiteren wird der Wandeffekt berücksichtigt. Zur Validierung der Ergebnisse der numerischen Simulationen und des beschriebenen Modells wird die druckgetriebene Befüllung einer Elementarzelle experimentell untersucht.

Segregationsverhalten von unterschiedlich benetzenden Partikelsystemen in feuchten Feststoffmischprozessen

Steffen Schmelzle, Hermann Nirschl

Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik (KIT), 76131 Karlsruhe

Abstract

Infolge verschiedener, physikalischer Materialeigenschaften der Ausgangskomponenten - z.B. Partikelgröße oder Feststoffdichte – und den damit verbundenen unterschiedlichen Partikelbeweglichkeiten ist die größtmögliche Homogenität in Feststoffmischprozessen nicht immer zu erreichen. Durch die Zugabe geringer Flüssigkeitsmengen können diese unterschiedlichen Beweglichkeiten infolge interpartikulärer Flüssigkeitsbrückenkräfte ausgeglichen werden. Die Flüssigkeitsbrückenkräfte hängen allerdings maßgeblich von den Flüssigkeitsmengen und den Benetzungseigenschaften der Partikelsysteme ab, sodass eine Flüssigkeitszugabe nicht zwangsläufig segregationsmindernd wirkt. Sind beispielsweise hydrophile und hydrophobe Komponenten zu mischen, kann eine Zugabe von Wasser auch den gegenteiligen Effekt hervorrufen. Das Wasser lagert sich selektiv im Bereich der hydrophilen Komponente an, sodass sich inhomogene Agglomerate ausbilden, die hauptsächlich aus gut benetzendem Material bestehen. Dementsprechend kann nicht grundsätzlich davon ausgegangen werden, dass die Flüssigkeitszugabe segregationshemmend wirkt, sondern ist in Abhängigkeit der Produkteigenschaften individuell zu beurteilen.

Durch die Modellierung von Flüssigkeitsbrücken und deren Implementierung in die Diskrete Elemente Methode (DEM) lässt sich der Zusammenhang zwischen Segregationsmechanismen und deren Reduktion durch Flüssigkeitszugabe näher verstehen. Im Rahmen dieses Beitrags werden Modelle zur Flüssigkeitsbrückenkraft bei unterschiedlichen Benetzungseigenschaften und der damit verbundenen, variablen Flüssigkeitsverteilung innerhalb des Schüttguts präsentiert und erste Erkenntnisse gezeigt, wie sich die Beweglichkeiten durch Flüssigkeitszugabe im diskontinuierlichen Feststoffmischer beeinflussen lassen.

Simulation der Wirkstofffreisetzung in der Blattrührer-Apparatur des Arzneibuchs

Marcus Kelz, Gerhard Schaldach, Markus Thommes, TU Dortmund, Lehrstuhl für Feststoffverfahrenstechnik, Dortmund, Deutschland

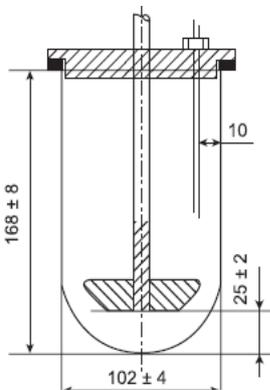


Abb.1: Technische Zeichnung der Blattrührer-Apparatur [2,3]

Im Jahr 2012 beschrieben Kutz und Wolff in [1] die Tablette mit bis zu 70 Prozent Anteil als die meist verwendete Arzneiform. Um die Freisetzung von Arzneistoffen aus Tabletten zu untersuchen, wird der in Abbildung 1 dargestellte United States Pharmacopeia (USP) Apparatus 2 - paddle genutzt. Dieser ist ein mit Flüssigkeit gefüllter Behälter, in dem unter Rühren eine Tablette aufgelöst wird. Während der Agitation wird die Konzentration des Wirkstoffs in der Flüssigkeit erfasst. Aufgrund schlechter Reproduzierbarkeit

der Messergebnisse wird diese Methode von verschiedenen Stellen seit 1999 in Frage gestellt [4]. Zwar existieren bereits Veröffentlichungen zur Fluidynamik im Apparat, diese beschränken sich jedoch darauf, Turbulenzen für die schlechte Reproduzierbarkeit verantwortlich zu machen. In dieser Arbeit wird die Strömung in der Blattrührer-Apparatur des Arzneibuchs durch CFD und Particle Imaging Velocimetry (PIV) untersucht. Die Freisetzung von Theophyllin aus Tabletten wird experimentell ermittelt, und in Modell für die Wirkstofffreisetzung in Abhängigkeit von den Betriebsparametern des Apparates entwickelt. Hier wird der Ansatz für eine ebene Platte genutzt, der es erlaubt eine direkte Abhängigkeit des

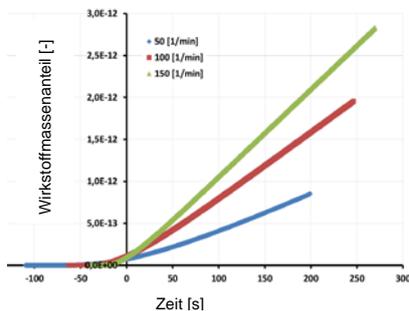


Abb.2: CFD Simulation der Freisetzung

Stoffübergangskoeffizienten von der unbekanntenen Anströmgeschwindigkeit aufzustellen. Die Anströmgeschwindigkeit an die Tablette lässt sich mit Hilfe von CFD ermitteln und eine zeitabhängige Freisetzung des Wirkstoffs kann simuliert werden. In Abb.2 ist ein erstes qualitatives Ergebnis zur Freisetzung des Wirkstoffs Theophyllin bei verschiedenen Drehzahlen durch CFD Modellierung dargestellt.

[1] Gerd Kutz, Armin W. (Hrsg.): Pharmazeutische Produkte und Verfahren. John Wiley & Sons, 2012

[2] United States Pharmacopeia. 2014

[3] Europäisches Arzneibuch 8.0, 2015, ISBN 978-3-7692-6597-2

[4] Qureshi, Saeed A. ; McGilveray, Iain J.: European Journal of Pharmaceutical Sciences 7 (1999), Nr. 3, 249 - 258.

Untersuchung der Wärmesenken bei der ablativen Flash-Pyrolyse mittels numerischer Simulation

*Benjamin Harder, Tim Schulzke, Stefan Schlüter, Görgo Deerberg,
Fraunhofer UMSICHT, Oberhausen/Deutschland;*

Die ablativ Flash-Pyrolyse ist ein thermochemisches Verfahren, bei dem ein Biomassefestkörper, wie Holz oder gepresstes Stroh, auf eine heiße rotierende Oberfläche gepresst wird. Bei ca. 500 °C entstehen Koks und ein Produktdampf, bei dessen Kondensation ein Permanentgas und ein Öl entstehen, wobei das Öl das Hauptprodukt ist. Die hier betrachtete Anlage zur ablativen Flash-Pyrolyse von halmgutartiger Biomasse wird untersucht, um dezentral nahe an der Biomasseentstehung transportwerte und lagerfähige flüssige Produkte für eine stoffliche und energetische Nutzung zu produzieren. Hierdurch werden Kosten sowie Treibhausgasemissionen für den Transport von Biomasse zu einer großen zentralen Anlage vermieden. Zum besseren Verständnis und zur Optimierung des Prozesses wird der Reaktor mit Hilfe der numerischen Simulation untersucht [1].

Es kommt das Programm COMSOL Multiphysics zum Einsatz, wodurch das Modell zukünftig um zusätzliche physikalische Effekte erweiterbar ist. Beim Rauchgasstrom handelt es sich um eine turbulente Strömung, die in der Reaktorgeometrie rotiert. Um den Rechenaufwand zu reduzieren, wird ein Turbulenzmodell mit analytischer Wandfunktion verwendet, das für die Berechnung weniger finite Elemente erfordert. Ein weiteres Kriterium für die Wahl des Turbulenzmodells ist die Rotation der Strömung. Von den in COMSOL möglichen Modellen wird daher das k - ω -Modell verwendet [1].

Das vorliegende Temperaturniveau zwischen 900 °C am Rauchgaseintritt zur Beheizung und der Zielgröße von 500 °C für die Pyrolysereaktion machen eine Berücksichtigung der Wärmestrahlung erforderlich. Die Discrete Ordinates Method (DOM) ist anwendbar, erzeugt aber hohe Berechnungszeiten. Es wird gezeigt, dass für das vorliegende System ein Oberflächenstrahlungsmodell (Surface-to-Surface Method) anstelle der DOM verwendet werden kann [1].

[1] B. Harder, T. Schulzke, S. Schlüter, G. Deerberg, *Chem. Ing. Tech.* **2015**, 87, No. 8, 1111

© 2015 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

catFM: ein Algorithmus zur automatischen Erzeugung von detaillierten Schwammstrukturen für CFD-Simulationen

Gregor D. Wehinger & Prof. Matthias Kraume

Technische Universität Berlin, Fachgebiet Verfahrenstechnik, Fraunhoferstr. 33-36,
10587 Berlin

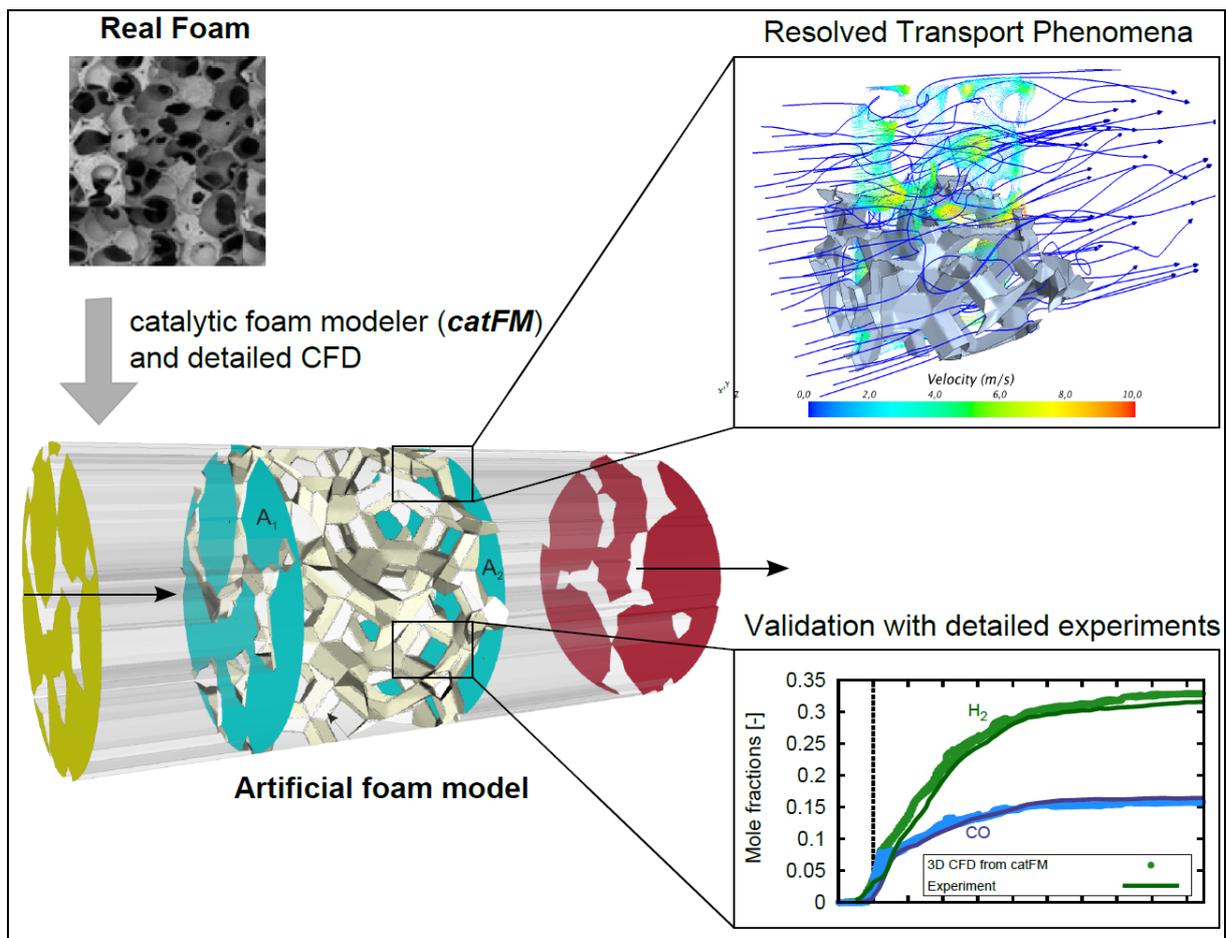


Abbildung 1. Workflow des catFM (catalytic foam modeler)

Katalytische Schwämme stellen eine vielversprechende Alternative zu Festbetten in vielen Bereichen der chemischen Industrie dar. Das Planen und Auslegen von Schwamm-Reaktoren kann durch die Einbeziehung detaillierter CFD-Simulationen unterstützt werden. Hier präsentieren wir einen vollautomatischen Workflow (catalytic

foam modeler: catFM¹, siehe Abb. 1), der es ermöglicht einen realistischen Schwamm zu modellieren, ohne auf zeitintensive Bildanalyse-Daten zurückzugreifen. Der Algorithmus basiert auf einer zufälligen Punktmengen, gefolgt von einer Voronoi-Zerlegung dieses Raums. Zur Erzeugung der Schwammstruktur können typische Schwamm-Charakteristika als Inputparameter gewählt werden, wie Porosität, spezifische Oberfläche und Stegprofile. Mit der so erzeugten dreidimensionalen Schwammstruktur lassen sich CFD-Simulationen durchführen um Interaktionen zwischen Strömungsfeld und Kinetik zu quantifizieren. Als Beispiel wurde die partielle Methanoxidation (CPOX) an Rhodium in einem Schwammreaktor simuliert. Die Kinetik der CPOX wird mit einem detaillierten Reaktionsmechanismus beschrieben, der auf der Schwammoberfläche implementiert wird. Neben einer konstanten Oberflächentemperatur kann auch der Wärmetransport in die Schwammstege abgebildet werden. In beiden Fällen konnten die experimentellen Daten² mit guter Genauigkeit wiedergegeben werden.

Mit catFM ist es möglich einen Schwammreaktor detailliert zu modellieren um in kurzer Zeit Aussagen über die Interaktionen zwischen Transportphänomenen und Kinetik machen zu können ohne auf Transportkorrelationen zurückzugreifen.

¹ Wehinger et al. (2016) *Chemical Engineering Journal*, 284, 543-556

² Dalle Nogare et al. (2008) *Journal of Catalysis*, 258, 131-142

Modellierung und numerische Simulation des kapillaren Flüssigkeitsaufstieges in idealen Kugelschüttungen in einem dünnen Spalt

Tim Neumann, Konrad Boettcher, Peter Ehrhard,

Strömungsmechanik, Bio- und Chemieingenieurwesen, TU Dortmund, Deutschland;

Motivation

Gegenstand der Untersuchungen ist eine Flüssigkeit, die in eine Kugelschüttung einströmt und das zuvor enthaltene Gas verdrängt. Die Schüttung befindet sich in einem dünnen Spalt zwischen zwei ebenen Begrenzungen (Platten). Dabei ist die Partikelgröße nur eine Größenordnung kleiner als der Plattenabstand, womit der Wandeffekt berücksichtigt werden muss.

Das Ziel ist eine Modellierung auf Grundlage lokal volumengemittelter Größen und die anschließende Berechnung einer kapillarkraftgetriebenen Aufstiegsströmung in einem solchen Medium mit einer kommerziellen CFD-Software (Ansys CFX). Hierbei soll die gleichzeitige Berücksichtigung von Wandreibung und bewegter Flüssigkeitsfront an den Platten, der Wandeffekt und ein Temperatureinfluss modelliert werden.

Modellvorstellung, Experimente und numerische Simulation

Bis zum Erreichen des stationären Gleichgewichts wird für das betrachtete System der Pre-Darcy Bereich durchlaufen. Sorgfältige Experimente zeigen jedoch, dass auch bei Reynolds-Zahlen $Re_{d_h} < 10^{-4}$ das Darcy-Gesetz gültig bleibt.

Die mittleren Matriceigenschaften (Porosität, Benetzungskoeffizient, Permeabilität) werden durch Experimente an dem untersuchten Medium bestimmt. Die wandeffektbedingten Verläufe der Modellgrößen werden durch Experimente an idealisierten Kugelschüttungen und ihre Abhängigkeiten zum hydraulischen Durchmesser d_h ermittelt. Die schrittweise Implementierung wird mit Hilfe von analytischen Lösungen der Strömung in homogenen und heterogenen porösen Schichten und mit Hilfe von Aufstiegsversuchen validiert. Die abschließende Validierung erfolgt mit temperierten Aufstiegsversuchen.

Optimierung der Durchströmung von Kunststoffgroßkisten für die Apfellagerung in einem Windkanal

*Holger Scaar, Ulrike Präger, Marcel König, Klaus Gottschalk, Jochen Mellmann,
Martin Geyer, Leibniz-Institut für Agrartechnik Potsdam-Bornim e.V.*

Während der CA Lagerung von Früchten in Großkisten werden etwa 40% des elektrischen Energieverbrauches für die Lagerbelüftung benötigt. Diese ist notwendig, um die durch Atmung der Frucht entstehende Wärme abzuführen und die Produktqualität zu sichern. Um den Masseverlust durch Transpiration zu minimieren und die Früchte vor Verderb zu schützen ist es ausschlaggebend, homogene klimatische Bedingungen (Temperatur, Luftströmung, relative Luftfeuchte) während der gesamten Lagerphase zu gewährleisten. Jedoch gibt es bisher nur wenige Untersuchungen zum Einfluss der Kistengeometrie, Stapelanordnung, Verdampferleistung und Belüftungsstrategie (Dauer der Belüftung, Belüftungsintervall) auf die Gleichmäßigkeit der klimatischen Bedingungen in der Einzelkiste, im Lager bzw. an der Frucht.

Um die o.g. Prozessparameter zu analysieren und zu optimieren, wurden Strömungssimulationen an der Einzelkiste durchgeführt und anhand experimenteller Untersuchungen im Windkanal validiert. Um die umfangreichen Prozessparameter zu quantifizieren, wurde ein am ATB entwickeltes Modell für die Getreidetrocknung auf Basis der klassischen Thermodynamik und der CFD [1] weiterentwickelt, welches die Wärme- und Stofftransportvorgänge im porösen Medium beschreibt. Anschließend wurde mit diesem Modell eine Parameterstudie bezüglich Luftgeschwindigkeit, Art und Anzahl der Öffnungen, Schüttungsporosität, etc. durchgeführt.

Bei einer Anströmgeschwindigkeit von beispielsweise 2 m/s stellte sich in der Großkiste zwischen den Früchten eine Luftgeschwindigkeit von ca. 0,1 m/s ein. Zur Verbesserung der Luftströmungsverteilung sollten die Öffnungen an den Behälteroberflächen und deren Anordnung u.a. der Porosität der Früchte angepasst werden. Des Weiteren wurde festgestellt, dass der Stapelabstand zwischen den Kisten und die Öffnungen am Boden (Gabelstapleröffnungen) einen wesentlichen Einfluss auf die Durchströmung der Großkisten haben.

Das laufende Projekt COOL (VP 2050828CL4) wird vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) gefördert.

[1] Scaar, H.; Franke, G.; Weigler, F.; Delele, M.A.; Tsotsas, E.; Mellmann, J.: Experimental and numerical study of the airflow distribution during mixed-flow grain drying. *Drying Technology* 2015, 33, accepted.

Einfluss verschiedener Kräfte auf Partikel in instationären Strömungen in Fluidphasenresonanzmischern

Silvio Schmalfuß, Martin Sommerfeld, Zentrum für Ingenieurwissenschaften, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, D-06099 Halle (Saale)

Ralph Säuberlich, Fachbereich Ingenieur- und Naturwissenschaften, Hochschule Merseburg, D-06217 Merseburg

Fluidphasenresonanzmischen

Das Fluidphasenresonanzmischen ist ein Mischverfahren, bei dem in eine sich in einem Behälter befindende Flüssigkeit ein Rohr eintaucht. Oberhalb der Flüssigkeit entstehen Gaspolster innerhalb des Rohres und im oberen Teil des Behälters. Das Gaspolster im Rohr wird mit harmonisch oszillierendem Druck beaufschlagt, der die Flüssigkeit in Bewegung setzt. Diese schwingende Bewegung induziert im Behälter eine Strömung, die für die Mischaufgabe genutzt wird. Die Strömung kann unter anderem durch die Geometrie und Positionierung des Rohres beeinflusst werden.

Strömungssimulationen

Zur Untersuchung der Strömung wurden zunächst CFD-Simulationen als instationäre, kompressible Strömung zweier getrennt vorliegender Phasen durchgeführt. Hierfür wurde der OpenFOAM-solver compressibleInterFOAM genutzt, der auf der Volume-of-Fluid-Methode mit Grenzflächenkompression basiert. Berücksichtigt wurden jeweils zwei verschiedene Rohrgeometrien und -positionen.

Partikelsimulationen

Um das Dispergieren von Partikeln in den hier untersuchten Mischern zu bestimmen, wurden Partikelsimulationen nach dem Euler-Lagrange-Ansatz durchgeführt. Neben den bereits in OpenFOAM implementierten Kräften – Widerstandskraft, Druckgradientenkraft, hydrostatischer Auftrieb, Schwerkraft – wurden zusätzlich noch die transversalen Auftriebskräfte, die virtuelle Masse und die Basset-Kraft implementiert. Für die verschiedenen Rohrgeometrien und -positionen wurden nun die Bewegungen von Partikeln verschiedener Dichten und Durchmesser, also Stokeszahlen, simuliert. Auf der Grundlage dieser Berechnungen wurde die Mischgüte mit Hilfe der Korrelationsdimension und des Segregationsgrades charakterisiert. Damit lassen sich schließlich die Einflüsse von Geometrie- und Betriebsparametern auf die Partikeldispersion als auch die Bedeutung der einzelnen Kräfte quantitativ ermitteln.

Lineare Stabilitätsuntersuchung der Ausbreitungsströmung eines dünnen Tropfens auf einer rotierenden Platte mit aufgeprägtem Temperaturverlauf

Konrad Boettcher, Timo Externbrink, Mirja Bensing

Strömungsmechanik, Bio- und Chemieingenieurwesen, TU Dortmund, Deutschland

In der Halbleiterindustrie ist das Spin-Coating (Rotationsbeschichtung) ein häufig eingesetztes Verfahren. Dabei wird ein Flüssigkeitstropfen auf ein Substrat aufgebracht. Das Substrat wird in Rotation versetzt, was die Ausbreitung unterstützt. Während dieser Ausbreitung kann die Ausbreitungsfront (die sog. Kontaktlinie) wellig werden und daraus Flüssigkeitsfinger entstehen, über welche die Flüssigkeit bevorzugt abläuft. Der Bereich zwischen den Fingern bleibt dabei unbenetzt und die Beschichtung ist fehlgeschlagen. Da Temperaturgradienten bei einer vorhandenen freien Oberfläche über die entstehenden Marangoni-Spannungen zu Strömungen führen, kann die Fingerbildung damit vielleicht beeinflusst werden. Dies ist Gegenstand der Untersuchung.

Ausgehend von den grundlegenden Erhaltungsgleichungen wird mit der Schmierfilmapproximation eine Entwicklungsgleichung unter Berücksichtigung aller Randbedingungen hergeleitet. Diese berücksichtigt Reibungs-, Flieh-, Gewicht- und Druckkräfte, den Krümmungsdrucksprung, Marangoni-Spannungen, Wärmetransport durch die Grenzfläche und ermöglicht zudem eine bewegte Kontaktlinie. Die Dynamik der Kontaktlinie wird durch das empirische Tanner'sche Gesetz abgebildet. Unter Berücksichtigung der geometrischen Eigenschaften wird zunächst der symmetrische Grundzustand numerisch gelöst. Der isotherme Verlauf der freien Grenzfläche wird mit experimentell bestimmten Verläufen verglichen. Anschließend wird eine Störungsrechnung für den nicht-isothermen Grundzustand durchgeführt, um bei verschiedenen Temperaturverläufen des Substrates die Entstehung der Finger untersuchen zu können. Dabei zeigt sich, dass die Fingerbildung tatsächlich durch geschickte Wahl des Temperaturverlaufs beeinflusst werden kann.

Experimentelle Untersuchung des Einflusses von turbulenten Strömungsstrukturen auf den Stofftransport

*Dipl.-Ing. Sophie Rüttinger, Dr.-Ing. Marko Hoffmann, Prof. Dr.-Ing. Michael Schlüter
Institut für Mehrphasenströmungen, Technische Universität Hamburg Harburg,
Eißendorfer Str. 38, 21073 Hamburg*

In verfahrenstechnischen Mehrphasenströmungen wird in der Regel ein turbulentes Strömungsregime bevorzugt, um optimale Impuls-, Wärme- und Stofftransportverhältnisse zu schaffen. Hierbei werden die Transport-, sowie Koaleszenz- und Zerfallsprozesse von Blasen und Tropfen bisher im Wesentlichen durch die spezifische turbulente Energiedissipationsrate beschrieben. Die Bedeutung von turbulenten Strömungsstrukturen wurde aufgrund mangelnder messtechnischer Möglichkeiten bislang nur wenig berücksichtigt. Durch die rasante Entwicklung von örtlich und zeitlich hochauflösenden bildgebenden Messverfahren stehen inzwischen Möglichkeiten zur detaillierten Erfassung von Strömungs- und Konzentrationsfeldern zur Verfügung, die eine Untersuchung des Zusammenhangs zwischen turbulenten Strömungsstrukturen, lokalen Energiedissipationsraten und dem Stoffübergang an einer Einzelblase zulassen. Somit soll im Rahmen dieser Forschungsarbeit geklärt werden, ob die Einflussnahme von Turbulenz auf den Stoffübergang allein mit Hilfe der Energiedissipationsrate ausreichend beschrieben werden kann, oder ob weitere charakteristische Kenngrößen zur Beschreibung der turbulenten Mehrphasenströmung herangezogen werden sollten.

Der Einfluss von Turbulenz auf den Stoffübergang an einer Einzelblase wird in einem Strömungskanal untersucht, wobei die Anströmungsverhältnisse der Blase durch verschiedene Maßnahmen variiert werden (z.B. Wirbelablösung hinter kugelförmigen/ellipsoiden Festkörpern oder Durchströmung einer strukturierten Packung, jeweils bei unterschiedlichen Reynoldszahlen). Das Strömungsfeld wird mittels Highspeed Particle Image Velocimetry vermessen und zur Bestimmung charakteristischer turbulenter Größen wie der Energiedissipationsrate und der turbulenten kinetischen Energie genutzt. Gleichzeitig wird der volumetrische Stoffübergangskoeffizient aus der Volumenabnahme der Blase bestimmt, die mittels Highspeed-Videographie ermittelt wird. Im Poster werden erste Ergebnisse dargestellt und diskutiert.

Einfluss Hydrodynamischer Instabilitäten auf das Zerstäubungsverhalten von Hohlkegeldüsen

Sebastian Egger, Manfred Piesche, Universität Stuttgart, Institut für Mechanische Verfahrenstechnik, Stuttgart / Deutschland

Hohlkegeldüsen kommen als Zerstäuber in zahlreichen Anwendungen, wie beispielsweise der Zerstäubung von Düngemitteln, zum Einsatz. Aufgrund des günstigen Betriebsverhaltens werden die Düsen dabei meist im Bereich des „aerodynamischen Zerwellens“ betrieben. Dieser Zerfallsvorgang lässt sich mittels einer linearen Stabilitätsanalyse mathematisch beschreiben, wobei die Anfangsstörung der Flüssigkeitslamelle bisher unbekannt ist. Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, die unbekannt Störung aus den sich ausbildenden Instabilitäten innerhalb der Düse abzuleiten.

Taylor-Görtler Instabilitäten an der Düsenwand

Die Drallströmung entlang der konkaven Düseninnenwand erfüllt das Kriterium nach Rayleigh für das Auftreten einer zentrifugalen Instabilität. Diese gegenläufig rotierenden Wirbelsysteme entsprechen den erstmals von Görtler untersuchten Wirbeln und sind in der Größenordnung der Grenzschicht. Sie treten ab einer kritischen Düsenreynoldszahl auf und hängen maßgebend von der Düsengeometrie ab.

Numerische Strömungssimulation der Düseninnenströmung

Ausgangspunkt der Untersuchungen sind numerische Berechnungen mittels der freien CFD-Software OpenFOAM®. Hierfür wird ein rotierender, mit Flüssigkeit gefüllter Hohlzylinder abgebremst. Die entstehenden Instabilitäten werden mit experimentellen Ergebnissen aus der Literatur abgeglichen. Die Untersuchungen zeigen hohe Anforderungen an die Gitterqualität und die numerischen Diskretisierung. Es ist insbesondere notwendig die Grenzschicht ausreichend fein auszulösen.

Die Simulation der zweiphasigen Düsenströmung erfolgt unter Verwendung der „Volume-of-Fluid“ Methode. Der Abgleich mit experimentellen Ergebnissen aus der Literatur zeigt eine gute Übereinstimmung hinsichtlich des Druckverlusts und der Ausbildung des Flüssigkeitshohlkerns innerhalb der Düse.

Analyse der Phasenseparation in liegenden Abscheidern mittels CFD und optischer Bildmesstechnik

J. Steinhoff, M. Lichti, H.-J. Bart, Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik TU Kaiserslautern, 67663 Kaiserslautern

Die Phasentrennung ist eine Grundoperation in der Verfahrenstechnik und der chemischen Industrie. Neben Tropfenabtrennung aus der Gasphase ist eine solche aus der Flüssigphase (z.B. Extraktion, Heteroazeotropdestillation, etc.) von entscheidender Bedeutung. Der einfache Schwerkraftabscheider kann dabei durch Fasern, Gestricken, Lamellen, etc. in seiner Wirkweise verbessert werden, doch schon der einfache Abscheider ohne Einbauten ist schwierig zu skalieren.

Mit einem auf der Inline-Durchlichtsondenmesstechnik (Mickler 2013) basierenden Sondenkonzept werden dazu Messergebnisse (s. Abb. 1) der sich separierenden Zweiphasenströmungen (EFCE-Testsystem Isododecan/Wasser) im liegenden Abscheider (s. Abb. 2) präsentiert. Das kommerzielle CFD-Programm Ansys/Fluent und das OpenSource-Programm OpenFoam werden für eine Modellierung von Tropfengrößen, der Simulation von Rohrströmungen und der Validierung der vorliegenden Zweiphasenströmung benutzt.

In diesem Beitrag werden erste Ansätze zur Modellierung der Sedimentationsgeschwindigkeiten in der Dispersionsschicht und der Vorhersage von Tropfengrößen im Auslass bei gegebener Einlassverteilung in einer Rohrströmung vorgestellt und diskutiert.

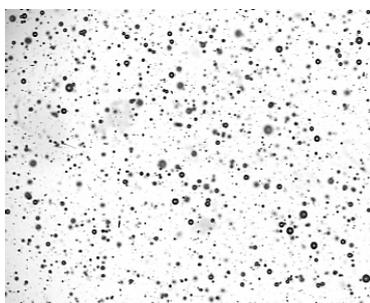


Abb.1: Aufnahme der Strömung

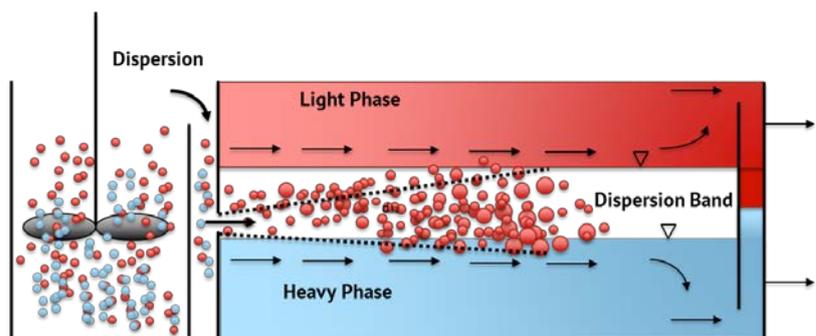


Abb.2: Prinzipskizze eines horizontalen Abscheiders

Liquid Circulation and Swarm Dynamics in Bubble Columns with Internals

Felix Möller, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Dresden/Germany;

*Uwe Hampel, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf / Technische Universität
Dresden, Dresden/Germany;*

Markus Schubert, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Dresden/Germany

Bubble column reactors are apparatuses of choice for many gas-liquid and gas-liquid-solid reactions due to their superior mixing, heat and mass transfer behavior as well as their simple design without any moving part. In particular, they are often used for exothermic reaction processes such as methanol synthesis, Fischer-Tropsch synthesis etc. Hence, the heat has to be removed out of the system in order to guarantee safe operation at optimal reaction conditions. For this purpose a variety of heat exchangers e.g. internal heat exchanging tube bundles, which can also be used to generate steam, are applied. However, the effects of heat exchanger installation in bubble columns on the gas-liquid flow are still fragmentary.

This contribution focusses on the effect of internals on liquid circulation and swarm dynamics. Internal longitudinal flow heat exchanging bundles with various tube pattern configurations (triangular, and square pitch) and tube diameters between 8 and 13 mm while covering a cross sectional area of ~25% are subject to hydrodynamic and mixing studies in a column of 100 mm diameter.

Wire-mesh sensors with measurement points suitably distributed in the cross-section between the internals' tubes were installed at different axial positions to study liquid mixing and dispersion in the bubble column as well as lateral fluid exchange between sub-channels. Tracer studies were performed and suitable transfer functions were applied for the determination of the liquid dispersion coefficient. It was found that bubble columns with tube bundle internals show similar behavior as airlift reactors. In addition, ultrafast X-ray tomography is applied to study the effect of the internal configurations on the axial bubble size distribution and gas fraction evolution as well as on the prevailing flow regimes.

Gewinnung eines feinen Aerosols mittels Tropfenabscheidung

Ramona Gorny, Gerhard Schaldach, Peter Walzel, Markus Thommes

TU Dortmund, Lehrstuhl für Feststoffverfahrenstechnik, Dortmund/Deutschland

Die geringe Löslichkeit der Arzneistoffe stellt eine große Herausforderung bei der Entwicklung von Arzneistoffformulierungen dar. Die Herstellung von submikron Partikeln ($0.1 \mu\text{m} - 1 \mu\text{m}$) mittels Sprühtrocknung ist aufgrund der geringen Größe und folglich großen spezifischen Oberfläche der Partikel eine Möglichkeit, die Bioverfügbarkeit schwer löslicher Arzneistoffe zu verbessern.^[1] Da die Partikelgröße maßgeblich durch die Tropfengröße bestimmt wird, ist die Gewinnung eines feinen Aerosols von zentraler Bedeutung. Dafür wird ein Zyklonabscheider (Labora, Deutschland) eingesetzt, der entsprechend der Trenncharakteristik ($d_T=7 \mu\text{m}$) große Tropfen aus dem eintretenden Aerosol abscheidet. Für das eintretende Aerosol wird eine Zweistoffdüse (Schlick, $D = 1.8 \text{ mm}$, Ringspalt = 1 mm) eingesetzt. Für einen konstanten Luftmassenstrom ($\dot{m}_G = 10.5 \text{ kg/h}$) und einen variierenden Wassermassenstrom ($\dot{m}_L = 1-6 \text{ kg/h}$) resultieren Beladungen ($\mu = \dot{m}_L/\dot{m}_G$) zwischen 0.1 und 0.6. In Abbildung 1 ist die mittlere Tropfengröße $d_{50,3}$ gegen die Beladung μ

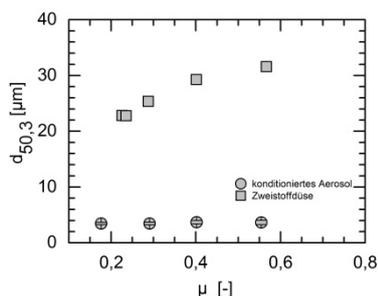


Abbildung 1: Mittlere Tropfengröße $d_{50,3}$ für das konditionierte Aerosol und die Zweistoffdüse ($\Delta p=1 \text{ bar}$)

aufgetragen. Während für die Zweistoffdüse die Tropfengröße mit zunehmendem Massenstrom zunimmt, ist die mittlere Tropfengröße beim konditionierten Aerosol konstant und reproduzierbar bei $3.5 \pm 0.3 \mu\text{m}$ und unabhängig von der Beladung. Darüber hinaus zeichnet sich das konditionierte Aerosol durch eine enge Tropfengrößenverteilung mit einem *span* ($(d_{90,3} - d_{10,3})/d_{50,3}$) von 1.2 aus. Die Abscheidung der großen Tropfen vor dem Sprühtrocknungsprozess ermöglicht die gezielte Trocknung feiner Tröpfchen, sodass keine weiteren Klassierverfahren der Partikel notwendig sind.

Im Rahmen dieser Arbeit wird das Zyklondesign zur Verringerung der Trennkorngröße optimiert. Zur Erhöhung der bisher geringen Ausbeute (5 %) werden abgeschiedene Tropfen zurückgeführt. Darüber hinaus muss die eintretende mittlere Tropfengröße möglichst gering und der Anteil an feinen Tropfen ($<d_T$) möglichst hoch sein.

[1] X. Li, N. Anton, C. Arpagaus, *J. Control. Release*, **2010**, *147*, 304-310

PAT für die Schmelzextrusion: Implementierung einer neuen UV/Vis-Spektroskopie-Methode

Jens Wesholowski¹, Andreas Berghaus², Markus Thommes¹,

¹ TU Dortmund, Lehrstuhl für Feststoffverfahrenstechnik, Dortmund/Deutschland

² ColVisTec AG, Max-Planck-Straße 3, 12489 Berlin-Adlershof, Germany

Einen vielversprechenden Ansatz zur Verbesserung der Bioverfügbarkeit von Wirkstoffen mit einer Löslichkeitslimitierung stellt die Herstellung von sogenannten *Solid Dispersions* dar. Als Verfahrenstechnik zur Herstellung dieser Darreichungsform kombiniert die Doppelwellenextrusion mehrere Grundoperationen miteinander und bietet als kontinuierlicher, robuster und effizienter Prozess einige Vorteile [1]. Als kritische Parameter kontrollieren die Verweilzeit und die Verweilzeitverteilung innerhalb dieses Prozesses die Lösungs- und Mischvorgänge und definieren die Dauer von mechanischen und thermischen Belastungen auf das Material. Diese stehen in direktem Zusammenhang mit Degradationsprozessen.

Das Ziel dieser Arbeit war die Quantifizierung der Verweilzeit von Extrusionsprozessen. Auf Grund der typischerweise kurzen Prozesszeiten ist ein Inline-Monitoring unumgänglich, um ausreichend Datenpunkte zu generieren. Hierfür wurde eine neue und robuste inline Methode der Firma ColVisTec verwendet, die auf dem Prinzip der UV/Vis-Spektroskopie beruht.

Erste experimentelle Untersuchungen mit einer Testformulierung und Chinin als Markersubstanz zeigten, dass diese Technik deutlich geringere Konzentrationen nachweist im Vergleich zu typischen, hierfür angewendeten Methoden wie NIR- [2] oder Raman-Spektroskopie [3]. Zur Validierung der Ergebnisse wurde eine offline HPLC-Methode für die verwendete Testformulierung als Referenz entwickelt. Dabei zeigte sich für beide Messmethoden eine gute Reproduzierbarkeit. Die ermittelten Kinetiken werden miteinander verglichen und darauf basierend die Anwendbarkeit der neuen inline UV/Vis-Spektroskopie-Methode zur Messung von Verweilzeiten für HME-Prozesse diskutiert.

- [1] Breitenbach, J., *Melt extrusion: from process to drug delivery technology*. European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics, 2002. **54**(2): p. 107-117.
- [2] Saerens, L., et al., *In-line NIR spectroscopy for the understanding of polymer-drug interaction during pharmaceutical hot-melt extrusion*. European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics, 2012. **81**(1): p. 230-237.
- [3] Saerens, L., et al., *Validation of an in-line Raman spectroscopic method for continuous active pharmaceutical ingredient quantification during pharmaceutical hot-melt extrusion*. Analytica Chimica Acta, 2014. **806**(0): p. 180-187.

Direct Numerical Simulation of a Liquid-Solid Fluidized Bed: Comparison with Experimental Data

A. Ozel^{a,b,d}, J. C. Brändle de Motta^{a,b}, M. Abbas^{c,d}, P. Fede^{a,b}, O. Masbernat^{c,d}, S. Vincent^e, J.-L. Estivalezes^{a,b}, O. Simonin^{a,b}

a Université de Toulouse, INPT,/UPS / IMFT, Allée du Professeur Camille Soula, F-31400 Toulouse, France

b CNRS, Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, F-31400 Toulouse, France

c Université de Toulouse, INPT-UPS, Laboratoire de Génie Chimique, 4, Allée Emile Monso BP 44362, 31030 Toulouse Cedex 4, France

d Fédération de recherche FERMAT, FR 3089 1, Allée du Professeur Camille Soula, 31400 Toulouse, France

e Université Paris-Est Marne-La-Vallée, Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME UMR 8208 CNRS, 5 Boulevard Descartes, 77454 Marne la Vallée, France

Direct numerical simulations of a fully resolved 3-D liquid-solid fluidized bed experimentally investigated by Aguilar-Corona (2008) have been performed at different fluidization velocities (corresponding to a range of bed solid volume fraction between 0.1 and 0.4). Particle Reynolds number and Stokes number are $O(100)$ and $O(10)$ respectively. In these simulations, the flow is solved by a one-fluid formulation of the incompressible Navier-Stokes equations, where the pressure coupling is provided by an algebraic augmented Lagrangian method and particle presence is modeled by an implicit penalty fictitious domain method, sub-grid scale lubrication force and soft-sphere collisions. In this paper we compare statistical quantities calculated from flow field numerical simulations with experimental values obtained from 3-D trajectography and High Frequency PIV. Fluidization law nicely predicts the experimental curve and main features of the trajectories and Lagrangian velocity signal of the particles are well reproduced by the simulations. The evolution of particle and flow velocity variances as a function of bed solid volume fraction is also well captured by the simulations. In particular, the numerical simulations predict the right level of anisotropy of the dispersed phase fluctuations and its independence with bed solid volume fraction in the range [0.1, 0.4]. They also conform the high value of the ratio between the fluid and the particle phase fluctuating kinetic energy, suggesting that collective effects induced large-scale motion in the bed are correctly accounted for by the numerical model. Lagrangian autocorrelation function of particle fluctuating velocity exhibits large-scale oscillations, which are not observed in the corresponding experimental curves, a difference probably due to a statistical averaging effect. Evolution as a function of bed solid volume fraction, of collision frequency based upon transverse component of particle kinetic energy correctly matches the experimental trend, and is well fitted by a theoretical expression derived from Kinetic Theory of Granular Flows.

Solving process engineering problems by applying CFD and DEM as a versatile tool in chemical industry

Christian Kunkelmann, Stefan Lipp, and Martin Schilling

BASF SE, Ludwigshafen

Over the past two decades first-principle modelling tools like CFD and DEM matured to a level at which they become a versatile tool to solve engineering problems in chemical industry. They benefited both from the increasing computational resources, the public availability of high quality sources codes, and the progress in academic research on the underlying physics.

The range of process engineering challenges involved span from the design of mixing devices and stirred tanks, over fixed bed and jet loop reactors, to rotary kilns, or calciners. All systems demand a high fidelity and physical soundness of the included sub-models for turbulence, multi-phase flow, chemical reactions, and particle dynamics.

Three examples from chemical industry shall show exemplarily the application of CFD and DEM modelling for the solution of process engineering tasks in solids processing and reactor design.

Aufgabenstellungen aus den Bereichen Agglomerations- und Schüttguttechnik, Mehrphasenströmungen und Computational Fluid Dynamics in der Kunststoff-Aufbereitung

Roland Hingmann, BASF SE, Ludwigshafen;

Thomas König, Covestro Deutschland AG, Leverkusen

Hans Schneider, Harald Wilms, Zeppelin Systems GmbH, Friedrichshafen

In den Fachausschüssen des VDI treffen sich die Fachleute aus Forschung und Industrie eines jeweiligen Fachbereiches, präsentieren neue Ergebnisse sowie Entwicklungen und diskutieren Lösungsmöglichkeiten für zahlreiche Probleme. Dabei fehlt häufig der Austausch zwischen den verfahrenstechnischen und branchentypischen Fachausschüssen. Aus diesem Grund bemühen sich die entsprechenden Fachausschüsse um eine Intensivierung der Kooperation und gegenseitigen Austausch.

Beim kommenden gemeinsamen Jahrestreffen der drei Processnet Fachgruppen Agglomerations- und Schüttguttechnik, Mehrphasenströmungen und Computational Fluid Dynamics sollen verfahrenstechnische Aufgabenstellungen in der Kunststofftechnik insbesondere der Aufbereitungstechnik exemplarisch vorgestellt sowie Anwendungen aufgezeigt werden, um damit die gegenseitige Diskussion und die Kooperation zu verbessern.

Der Beitrag umfasst Themen aus Kunststoffherstellung und -verarbeitung. Es wird beschrieben welche verfahrenstechnischen Grundoperationen durchgeführt werden und welche Lösungen vorliegen. Die aktuellen Fragestellungen und zukünftige Entwicklungen beider Bereiche werden erläutert, um Anregungen für die Zusammenarbeit zu geben.

Vorgestellt werden

aus dem „flüssigen“ Bereich der Compoundierung:

- Verfahrenstechnische Aufgaben
- Prinzipien der Maschine(n)
- Stoffeigenschaften/Viskosität
- Verfahrenszonen
- Prozessgrenzen

aus dem Bereich der Aufbereitung und Handhabung der festen Rohstoffe und Endprodukte

- Pneumatischer/Hydraulischer Transport
- Erzeugung von Feinanteil und Sichtung
- Anforderungen an die Lagertechnik in Silos
- Temperierung von Schüttgütern, Trocknung und Entgasung in Silos
- Mischen von Schüttgütern in Intensiv-Mischern und Mischsilo
- Prozesse in Intensiv-Mischern (Anhaften/Bonding, Masterbatch Mischen)

Da alle Fachgruppen thematisch in diesem Beitrag angesprochen werden, eignet sich dieser Beitrag als Plenarvortrag. Damit wird auch das ursprüngliche Ziel des Informationsaustauschs zwischen dem VDI Fachausschuss und den Fachgruppen optimal erreicht.

T-MAPPP EU project – short overview:
Multiscale Analysis of Multi-Phase Particulate Processes

Stefan Luding, Universität Twente, Enschede, Niederlande

Text - Arial 12 pt., Blocksatz, 1,5-zeilig

Goal of this presentation is to give a short overview on the progress and results in the EU-ITN project T-MAPPP (for details and a list of all participants see: www.t-mappp.eu), with 15 researchers working in several European countries on various problems related to particle technology, multi-phase and multi-scale processes. In particular, three areas will be discussed:

- 1 – cohesive powders under high pressure
- 2 – wet, pendular systems and granulation
- 3 – particles in fluids and their modeling

T-MAPPP is an Initial Training Network funded by FP7 Marie Curie Actions with 10 full partners and 6 associate partners. The role of the network is to train the next generation of researchers who can support and develop the emerging inter- and supra-disciplinary community of Multiscale Analysis (MA) of multi Phase Particulate Processes. The goal is to develop skills to progress the field in both academia and industry, by devising new multiscale technologies, improving existing designs and optimising dry, wet, or multiphase operating conditions.

Simulation of an Tablet-Coating Process at the Industrial Scale

P. Böhling, Research Center Pharmaceutical Engineering GmbH, Graz, Austria

J. G. Khinast, Institute for Process and Particle Engineering, TU Graz, Austria

*K. Knop, Institute of Pharmaceutics and Biopharmaceutics, Heinrich Heine
University, Düsseldorf, Germany*

*P. Kleinebudde, Institute of Pharmaceutics and Biopharmaceutics, Heinrich Heine
University, Düsseldorf, Germany*

H. Rehbaum, L.B. Bohle Maschinen + Verfahren GmbH, Ennigerloh, Germany

*A. Funke, Bayer Global Chemical and Pharmaceutical Development, Bayer Pharma AG,
Berlin, Germany*

Abstract

Tablet coating is a widely used unit operation in the pharmaceutical industry. Inter tablet coating mass variation (CoV) is a critical quality attribute and has to be low when an active pharmaceutical ingredient is coated onto a tablet. A consistent high product quality is the goal when developing the coating process. Therefore, a good understanding of the process is needed. Experiments focus mostly on the laboratory scale, due to costs. Thus, for large-scale optimization simulation is a promising tool. In this work, simulations were performed using an in house developed Discrete Element Method (DEM) code called “eXtended Particle System” (XPS). XPS allows fast simulation of millions of particles on a single graphical processing unit. To model the tablet shape, the glued sphere approach was used. Each model tablet consists of 8 overlapping spheres to approximate the non-sphericity of the tablet.

This work is based on an active coating process. Gastrointestinal therapeutic systems (GITS) were used as starting material. GITS are round-shaped biconvex tablets with a diameter of 9 mm and a height of 5 mm. The central aim of this study was to reduce the CoV by comparing different process settings, e.g., drum load, rotational velocity, number of nozzles. For this purpose, simulations were performed where the drum coater was filled with up to 290 kg (1,028,369 tablets) and the drum rotational speed was varied between 8 and 10 rpm. The number of nozzles and the spray rate was taken into account in the post processing, which allows a better adaptability.

The spray rate and number of nozzles had the biggest impact on the CoV. The CoV results from the simulation match results from experiments closely. This work shows

that simulations can be used to get more insight into the tablet coating process on the industrial scale based on state-of-the-art simulation tools.

Kalibrierung von Diskrete-Elemente-Modellen für schlecht fließfähige Pulver

C. Bierwisch, A. Hashibon, T. Breinlinger, T. Kraft, Fraunhofer IWM, Freiburg

Die Simulation des Fließ- und Füllverhaltens rieselfähiger Pulver mit der Diskrete-Element-Methode (DEM) ist derzeit Stand der Technik. Herausforderungen für die Modellierung bereiten hingegen schlecht fließfähige Pulver. Diese bestehen einerseits oftmals aus sehr kleinen Partikeln verglichen mit typischen Prozessabmessungen, was eine sehr große Partikelanzahl zur Folge hat. Andererseits verhindert die Kohäsion im Pulver mitunter das Ausfließen aus Kalibrierungsapparaturen wie dem Hall Flowmeter (ISO 4490).

Methodik

Zur Kalibrierung des Fließverhaltens eines schlecht fließfähigen Pulvers wird der Massenfluss aus definierten Trichtern ermittelt, während die Trichter in Vibration versetzt werden. Der damit verbundene Eintrag kinetischer Energie führt zur Fluidisierung des Pulvers. In entsprechenden DEM-Simulationen werden geeignete Modellparameter identifiziert, die das Fließverhalten reproduzieren. Das Problem der enormen Partikelanzahl wird durch einen dimensionsanalytischen Ansatz zur Vergrößerung der Modellpartikel in den Simulationen gelöst.

Ergebnisse

Durch die beschriebene Kalibrierung des DEM-Modells können nichtlineare Eigenschaften des Fließverhaltens von den Simulationen erfasst werden (s. Abbildung 1). Eine unabhängige Validierung des Modells erfolgte durch die Analyse des Böschungswinkels.

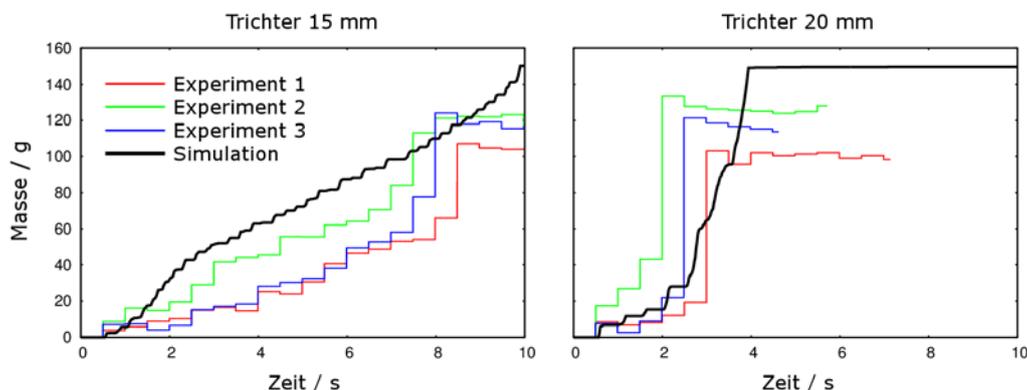


Abbildung 1: Gemessener und berechneter Massenfluss unter Vibration aus Trichtern mit unterschiedlichen Öffnungsdurchmessern. Zu beachten ist der starke Anstieg im Massenfluss für den 20 mm-Trichter nach 2-3 Sekunden, welcher auch von der Simulation abgebildet wird.

Beschreibung des Einflusses der Partikelform auf das Verhalten des Schüttgutes beim Mischen mittels DEM-Simulationen

S. Kozhar, M. Dosta, S. Heinrich, Institut für Feststoffverfahrenstechnik und Partikeltechnologie, Technische Universität Hamburg-Harburg, Hamburg

S. Antonyuk, Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik, Technische Universität Kaiserslautern, Kaiserslautern

R. Grudda, U. Bröckel, Umwelt-Campus Birkenfeld, Institut für Mikroverfahrenstechnik und Partikeltechnologie, Birkenfeld

Das Mischen von Schüttgütern ist ein wichtiger Prozess der Pharma-, Chemie-, Lebensmittel- sowie Keramikindustrie. Durch Untersuchungen des Mischverhaltens können die Mischprozesse optimiert und damit die Produktqualität verbessert werden. Ziel dieser Arbeit ist die Erfassung der Partikelbewegung und -geschwindigkeit bei der Durchmischung von Schüttgütern in einem Mischer mit Hilfe der Simulation mittels der Diskreter-Elemente-Methode (DEM). Dabei wurde der Einfluss der Partikelform auf das Mischverhalten untersucht (Abb. 1). Irreguläre Partikelformen wurden in Form von Primärpartikeln, die mittels Feststoffbrücken miteinander verbunden sind, dargestellt. Dabei können auch der Partikelbruch und Abrieb von nicht festen Granulaten während der Simulation der Durchmischung modelliert werden.

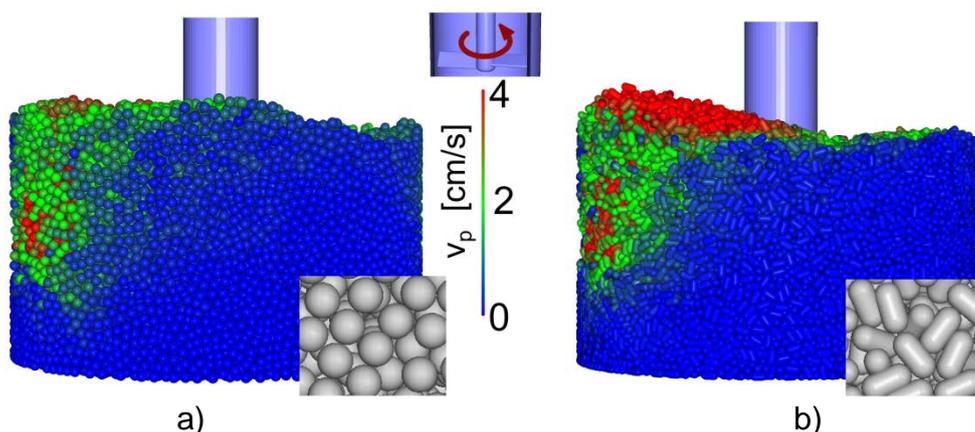


Abb.1. Vergleich der Partikelgeschwindigkeiten in zwei DEM-Simulationen während des Mischvorgangs bei Rotation um 30°: a) sphärische Partikel; b) zylindrische Partikel. Das Schüttgutgewicht und das Partikelvolumen sind gleich in beiden Simulationen.

Förderung: Wir danken der DFG für die finanzielle Unterstützung des SPP 1486 „PiKo“ im Rahmen des Projektes HE 4526/7-3.

Simulation der Extraktion in einer flüssig/flüssig Pfropfenströmung in einem Mikrokapillarreaktor

*Christian Heckmann, Peter Ehrhard, TU Dortmund, Bio- und Chemieingenieurwesen,
Strömungsmechanik, Dortmund/Deutschland*

Der Stofftransport in mehrphasigen Systemen findet breite Anwendung im Chemieingenieurwesen, wie etwa bei chemischen Reaktoren oder Extraktionsapparaten. Bei der Betrachtung des Stofftransports nehmen flüssig/flüssig-Systeme einen besonderen Stellenwert ein, da der Transport über die Grenzfläche maßgeblich durch die Eigenschaften beider Phasen beeinflusst wird – dieser Fall wird auch als konjugiertes System bezeichnet. Numerische Simulationen eignen sich besonders, um den Stofftransport in solchen Problem detailliert zu untersuchen, da experimentelle Ansätze meist nur integrale Informationen liefern.

Mit unserem aktuellen Konzept wird der lokale Stofftransport über die freie Grenzfläche des konjugierten flüssig/flüssig Problems numerisch berechnet. Ausgangspunkt bildet eine importierte stationäre Grenzfläche, wie sie im Mikrokapillarreaktor auftritt. Auf beiden Seiten der Grenzfläche werden Rechengebiete arrangiert, die explizit an der Grenzfläche gekoppelt sind, so dass zunächst die stationäre Hydrodynamik, aus der Sicht eines mitbewegten Beobachters, als Basis für die Simulation des Stofftransports berechnet werden kann. Die Simulation des Stofftransports findet unter der Annahme kleiner Konzentrationen statt. Es werden also gekoppelte skalare Transportgleichungen auf beiden Seiten der Grenzfläche unter Berücksichtigung des Löslichkeitsgleichgewichts (Henry-Gesetz) und der Kontinuität gelöst. Der numerische Simulationsansatz ist bereits gegen analytische Lösungen für einfache Grenzfälle validiert.

CFD-Modellierung von Dispersionen in Schwerkraftabscheidern

J. Steinhoff, F. Gebauer, M. W. Hlawitschka, H.-J. Bart, Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik TU Kaiserslautern, 67663 Kaiserslautern

Die Untersuchungen werden mit dem EFCE Flüssig-Flüssig-Testsystem (Wasser-Toluol) in einem kontinuierlich betriebenen vertikalen DN80 Abscheider durchgeführt. Der Volumenstrom der dispersen Phase (Toluol) wird über eine drehzahlgesteuerte Zahnradpumpe über einen Disperser in eine stehende wässrige, kontinuierliche Phase eingeleitet.

Die sich einstellende dichtgepackte Dispersions-schicht (s. Abb. 1) ist wesentlich von der zugeführten Tropfengröße, den Koaleszenzeigenschaften und der lokalen Hydrodynamik abhängig. Eine Modellierung des Koaleszenz-vorgangs in dicht gepackten Dispersionen ist nur über Korrelationen mit angepassten Parametern möglich und benötigt daher neue, prädiktive Auslegungsmethoden.

Als erster Schritt wird die Tropfengrößenverteilung zweier Disperser (Lochdurchmesser $d_N = \varnothing 1,2$ und $\varnothing 1,5$ mm mit 8 und 12 Bohrungen) in einem vertikalen DN 80 Abscheider mit Volumenströmen von 224-728 ml/min untersucht, ehe die Koaleszenz über Trofenpopulationsmodelle erfasst wird.

Die sich ausprägende Dispersionsschicht wird optisch aufgenommen. Mit einer grafischen Methode wird die Dispersionshöhe in Abhängigkeit des Volumenstromes und der Höhe der ruhenden Flüssigkeiten ausgewertet. Es wird der Zusammenhang in Bezug auf den Auf- und Abbau der Dispersionsschicht formuliert.

Parallel zu den Experimenten werden CFD-Simulationen für den Tropfenaufstieg des Tropfenschwarms, Euler-Lagrange und Euler-Euler, zur Validierung der lokalen Größen (Druck, Geschwindigkeit, Kräftebilanzierung) durchgeführt. Die Ergebnisse werden diskutiert.



Abb. 1: Darstellung der Dispersionsschicht

Numerical study of binary droplet collisions at high Weber numbers

M. Liu and D. Bothe, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt/Germany

Droplet collisions at high Weber numbers occur especially in multi-nozzle spray processes and strongly affect the spray characteristics. We study head-on collisions of binary water droplets at high Weber numbers by means of Direct Numerical Simulations, employing the Volume of Fluid method. To avoid the artificial rupture of the thin lamella arising at high energy collisions, the lamella is stabilized by correcting surface tension computations and surface construction in the lamella region. By means of properly chosen white noise disturbances, instabilities are triggered and very good agreement between the simulation results and the experiments is achieved, as illustrated in figure 1. To investigate the rim instability, which results in secondary droplets, we measure the perturbation growth on the rim by conducting several simulations with the same disturbance strength and averaging the spectrum diagram of the rim perturbation. We show that the rim perturbation evolution can be predicted by the Plateau-Rayleigh theory in the long time span.

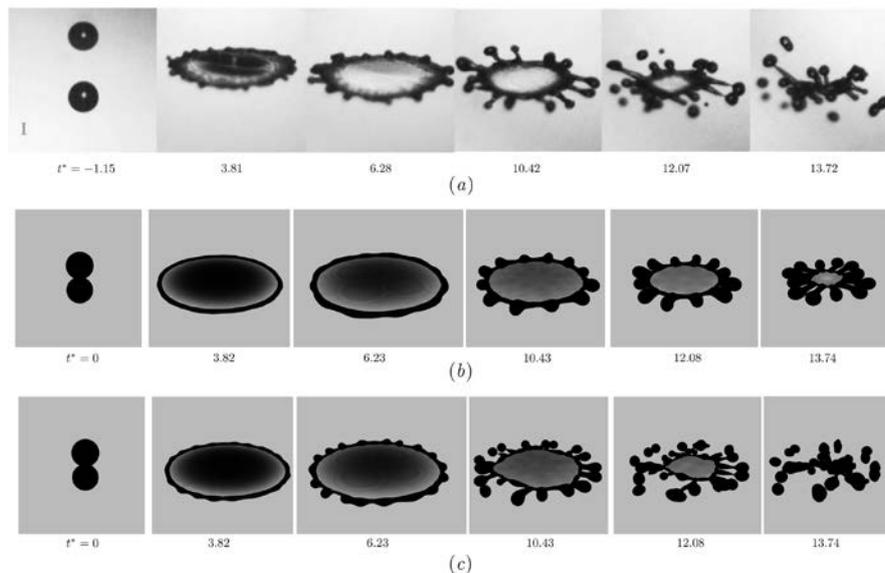


Figure 1. Comparison of collision-complex shapes. (a) Experiment of Pan et al. [1]. (b) Simulation without initial disturbance. (c) Simulation with an initial disturbance.

The authors gratefully acknowledge the financial support provided by the German Research Foundation (DFG) within the scope of SFB-TRR 75.

References

[1] PAN, K.-L., CHOU, P.-C. and TSENG, Y.-J. (2009). Binary droplet collision at high Weber number. *Phys. Rev. E* 80, 036301.

Bewegung und Zerfall feststoffbeladener Flüssigkeitsstrahlen im Zentrifugalfeld bei aufgeprägter Gasströmung

Thomas Kalmbach, Markus Hauber, Manuel Liebing und Manfred Piesche,

Institut für Mechanische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart,

Stuttgart/Deutschland

Die Applikationstechnik und die Sprühtrocknung sind Beispiele für industrielle Anwendungen in denen die Zerstäubungstechnik einen grundlegenden Verfahrensschritt darstellt. Neben der reinen Zerteilung von Flüssigkeiten müssen oftmals weitere Anforderungen, wie die Bildung möglichst einheitlicher Tropfen mit definierter Bewegungsrichtung bei gleichzeitig hohem Durchsatz, erfüllt werden. Bei Lackier- und Sprühtrocknungsprozessen müssen ferner zumeist partikelbeladene Flüssigkeiten zerstäubt werden, die zu Verstopfungen und Verschleiß am Zerstäubungsapparat führen können. Rotationszerstäuber im Betriebsbereich des Rayleigh'schen Strahlzerfalls erfüllen diese Randbedingungen sehr gut. Zusätzlich eingesetzte Gasströme, die parallel zur Rotationsachse des Zerstäubers ausgerichtet sind, sorgen für die Ausrichtung der gebildeten Tropfen und beeinflussen Wärme- und Stofftransportvorgänge zur Trocknung und Verdampfung.

Modellierung und Experiment

Ziel des vorliegenden Projekts ist es, die dreidimensionale Bewegung und den Zerfall eines laminaren partikelbeladenen Flüssigkeitsstrahls zu untersuchen, der an einem Rotationszerstäuber gebildet wird und einer zusätzlichen Gasanströmung parallel zur Rotationsachse ausgesetzt ist. Hierzu werden sowohl Experimente als auch eine modelltheoretische Untersuchung unter Variation der Randbedingungen (z.B. Fluid- und Feststoffdichte, Feststoffanteil, Drehzahl, Volumenströme, etc.) eingesetzt.

Der konzipierte Versuchsstand ermöglicht durch zwei Schattenlichtsysteme die Bestimmung der Größe der gebildeten Tropfen, der Strahllänge, der Strahldehnung als auch der Bewegung des Strahls inklusive des Absinkens normal zur Rotationsebene. Ausgehend von einer Massen- und Kräftebilanz kann auf Basis des entwickelten Modells die mittlere Strahldehnung sowie die dreidimensionale spiralförmige Strahlbahn vorausberechnet werden. Mittels räumlicher und zeitlicher linearer Stabilitätsanalyse wird darüber hinaus die kapillare Instabilität untersucht und schließlich die mittlere Tropfengröße vorausberechnet. Die experimentellen Ergebnisse unterstützen und bestätigen die numerischen Berechnungen.

Kontaktlinien-Modellierung in einer algebraischen Volume-of-Fluid Methode auf unstrukturierten Gittern mit OpenFOAM®

Daniel Rettenmaier^a, Daniel Deising^a, Holger Marschall^b, Cameron Tropea^a

^a Institut für Strömungslehre und Aerodynamik, ^b Mathematische Modellierung und Analysis, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt/Deutschland

Ziel der Forschungsarbeit ist die numerische Untersuchung von Benetzungsvorgängen von Tropfen auf Oberflächen. Zur Beschreibung der dynamischen Drei-Phasen-Kontaktlinie existieren verschiedene Modelle, welche den Kontaktwinkel als Funktion der Kontaktliniengeschwindigkeit beschreiben. Allerdings beobachtet man in Experimenten eine Hysterese, innerhalb derer sich die Kontaktlinie nicht bewegt. Diesen Effekt bilden wir numerisch durch eine Dirichlet/Neumann-Randbedingung ab, wobei der fortschreitende und rückschreitende Kontaktwinkel als Materialparameter vorgegeben werden (Linder, 2015).

Im Rahmen dieser Arbeit ist eine modulare Modellbibliothek zur Modellierung der Kontaktliniendynamik entstanden. Zur Laufzeit kann dabei eine gewünschte Kombination von Modellen zur Berechnung der Kontaktliniengeschwindigkeit und des Kontaktwinkels verwendet werden. Zur genaueren Bestimmung der Kontaktlinienposition und des Kontaktwinkels, wird zusätzlich eine Isoflächenbasierte Rekonstruktion der Phasengrenzfläche nach Batzdorf (2015) genutzt. Mit dieser rekonstruktion der gesamten Gas-Flüssigkeits Grenzfläche werden auch Parasitäre Strömungen durch eine verbesserte Oberflächenspannungs- bzw. Krümmungsberechnung signifikant reduziert.

Die entstandene Modellbibliothek ist an den Strömungslöser interFoam gekoppelt. Vorgestellt werden numerische Ergebnisse der Untersuchung von Tropfenbildungsprozessen und Tropfenbewegung auf geneigten Oberflächen, sowie der Vergleich mit experimentellen Daten.

Literatur

Batzdorf, S. (2015). „Heat transfer and evaporation during single drop impingement onto a superheated wall.“ PhD Thesis, Technische Universität Darmstadt

Linder, N. (2015). „Numerical simulation of complex wetting.“ PhD Thesis, Technische Universität Darmstadt



Tropfen (50 µl) auf beschichtetem Plexiglas (Hysterese mit Winkeln: fortschreitend: 126°, rückschreitend: 68°)

Wechselwirkung von Sprühnebeln in einem Labortrockner

L. Pasternak, M. Sonnenberg und M. Sommerfeld

Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Zentrum für Ingenieurwissenschaften,

D-06099 Halle/Saale, Deutschland, email: lars.pasternak@iw.uni-halle.de

Die numerische Berechnung der Sprühtrocknung, z.B. mit Hilfe eines Euler/Lagrange-Ansatzes, stellt immer noch eine große Herausforderung dar. Dies liegt an den vielen Elementarprozessen, welche die Bewegung und Trocknung der flüssigen Lösungstropfen beeinflussen. Um eine zuverlässige Berechnung der Sprühtrocknung zu erlauben, wurde ein Kollisionsmodell für Suspensionstropfen (Sommerfeld und Kuschel 2013) und ein neues Trocknungsmodell entwickelt (Darvan und Sommerfeld 2014). Für die notwendige Validierung der Modelle wurde ein Laborsprühtrockner aufgebaut, der aus einem vertikalen Kanal mit einer Höhe von ca. 2 m und einem Querschnitt von 200 mm x 1000 mm besteht (Abb. 1). Der Kanal wird von oben nach unten mit heißer Luft im Temperaturbereich von bis zu 200°C mit bis zu etwa 1 m/s durchströmt. Im Einlaufbereich sind zwei Flachstrahldüsen (Druckzersäuber) zur Zerstäubung der Lösung (Austrittsgeschwindigkeit ca. 5 – 10 m/s) installiert, welche in ihrem horizontalen Abstand variiert werden können. Dadurch kann der Bereich der Wechselwirkung zwischen den Sprühkegeln in seiner Lage gezielt eingestellt werden, so dass Tropfen unterschiedlichen Trocknungsgrades kollidieren können (Abb. 1). Zur Bestimmung der Tropfeneigenschaften wurde ein bildgebendes Messverfahren mit LED-Hintergrundbeleuchtung und Hochgeschwindigkeitskamera eingesetzt. Als Bildfrequenz wurde 60.000 Hz verwendet womit sich eine Bildgröße von 400 x 256 Pixel ergab und in Verbindung mit dem Objektiv ein Bereich von ca. 22mm x 14mm erfasst wurde. Durch dieses Messverfahren werden lokale Tropfengrößenverteilungen sowie deren Geschwindigkeiten mittels PTV (particle tracking velocimetry) bestimmt. Weiterhin werden aus Serien von typischerweise 60.000 Bildern Kollisionsereignisse herausgefiltert und deren Ausgang analysiert.

Danksagung

Die experimentellen Untersuchungen wurden im Rahmen des SPP 1423 „Prozess Spray“, Förderkennzeichen: SO 204-35/1 bis 3 durchgeführt. Die Autoren bedanken sich für die finanzielle Unterstützung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft.

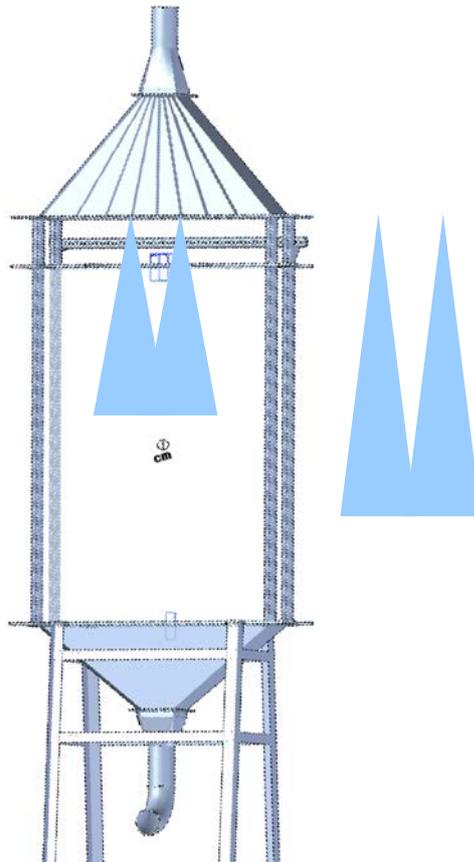


Abb. 1 Geometrie des Labor-Sprührockners mit der Anordnung der Flachstrahldüsen für zwei Abstände

Literatur

Darvan, A. and Sommerfeld, M.: Modeling and numerical analysis of the drying stages during single droplet drying. 19th International Drying Symposium (IDS 2014), Lyon, France, August 24. – 27. 2014

Sommerfeld, M. and Kuschel, M. (keynote lecture): Collisions of high viscous droplets: Experiments and modelling. CD-ROM Proceedings 8th International Conference on Multiphase Flow, ICMF2013, Jeju, Korea, May 26. – May 31, 2013, Paper No. 849.

Fließeigenschaften von feuchtem Glasgemenge

*Anna Schumann, Dr.-Ing. Thomas Mütze, Prof. Dr.-Ing. Urs A. Peuker,
TU Bergakademie Freiberg*

Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Aufbereitungstechnik

Beim Lagern von Glasgemenge bilden sich häufig Materialanbackungen hoher Festigkeit im Wand- und Austragsbereich des Vorhaltesilos. Dies stört den Gemengeaustrag sowie die Produktqualität und erfordert ein regelmäßiges Entfernen der Verfestigungen. Verstärkend auf die Zeitverfestigung wirkt die Glaskomponente Soda, welche in Verbindung mit Wasser Hydrate bildet und bei der Rekristallisation im Verbund mit anderen Partikeln Festkörperbrücken aufbaut. Die Festigkeit der so gebildeten Agglomerate ist aber auch maßgeblich von anderen Einflussgrößen abhängig.

Zeitverfestigungsversuche im Ringschergerät mit einem Standardgemenge aus den Komponenten Quarzsand, Soda, Kalkstein, Dolomit und Feldspat bildeten die Lagerung im Silo nach und gaben Aufschluss über die Fließeigenschaften. Die Messungen zeigten den Einfluss von Temperatur, Lagerdauer, Feuchte und der Gestaltung des Mischprozesses. Die Änderung der Fließeigenschaften durch einen erweiterten Gemengesatz (u.a. mit Glasscherben) sowie die daraus resultierende Auswirkung auf die Gemengelagerung wird im aktuellen Beitrag vorgestellt. Dabei kam ein Großschergerät (Translationsschergerät nach Jenike, Zellendurchmesser 30 cm) zum Einsatz, welches die Untersuchung von Schüttgütern mit Stückgrößen bis 20 mm erlaubt [1].

Da sich in Voruntersuchungen die Hydratation von Soda als eine zentrale Einflussgröße zeigte, wurde bei der vorgestellten Untersuchung zwischen zwei Fällen des Feuchteintrags unterschieden:

- gezielt vor dem Mischen (z.B. durch Einsatz von feuchtem Sand oder das Befeuchten des Gemengesatzes) zum Verringern der Staubbelastung beim Produktionsprozess
- weniger definiert nach dem Mischen (z.B. durch nasse Scherben) wie oftmals in der industriellen Praxis zu finden

[1] K. Husemann et al.: Der Einfluss des Feinkornanteils auf die Fließeigenschaften von groben Schüttgütern. *Aufbereitungstechnik* **35** (1994) 2, 61-70

Einsatz von Fließhilfsmittel beim Lagern von Glasgemenge

Karl Krüger, Anna Schumann, Dr.-Ing. Thomas Mütze

TU Bergakademie Freiberg

Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Aufbereitungstechnik

Anbackungen von Glasgemenge im Gemengesilo verursachen in vielen Glaswerken Probleme beim Austrag der Rohstoffe und dem Einhalten der Glasqualität. Als Hauptursache für die Verfestigungen ist Natriumcarbonat (Soda) bekannt. Die starke Hydratationsneigung des Rohstoffs lässt in Anwesenheit von Feuchtigkeit bei günstigen Randbedingungen stabile Festkörperbrücken zwischen benachbarten Partikeln entstehen. Schlecht fließenden Schüttgütern werden üblicherweise Fließhilfsmittel beigesetzt, welche die Fließfähigkeit wesentlich verbessern.

Ziel der vorliegenden Untersuchungen war die Reaktivität des Sodas durch den Einsatz von Fließhilfsmitteln herabzusetzen. Dabei kann die Anlagerung des Fließhilfsmittels an die Sodapartikel chemisorptiv (durch eine chemische Bindung an die Oberfläche und damit Änderung der Oberflächeneigenschaften) oder physisorptiv (durch die physikalische Anlagerung an die Oberfläche und das Verhindern eines Kontaktes zwischen Zielpartikeln und Umgebungsmedium) erfolgen. In beiden Fällen wird die Kristallbildung beeinflusst, im besten Fall verhindert.

In Vorversuchen wurde SIPERNAT®D17 als geeignetes Fließhilfsmittel identifiziert und die optimale Zugabemenge von 0,8 Ma.-% zu einem Modellglasgemenge bestimmt. Dies erfolgte durch die Ermittlung der empirischen Materialgrößen Schütt- und Stampfdichte. Das Einbinden des FHM in den Mischprozess wurde durch Vorversuche mit variierendem Mischablauf optimiert. Mittels Zeitverfestigungsmessungen mit dem Ringschergerät wurde der Einfluss des Fließhilfsmittels SIPERNAT®D17 auf die Verfestigung des Gemenges untersucht. Dabei wurden Lagerzeit, Materialfeuchte und Lagertemperatur variiert. Es konnte eine deutliche Verbesserung der Fließfähigkeit des Modellgemenges durch den Einsatz von SIPERNAT®D17 bei einer Lagertemperatur von 20 °C erreicht werden. Die Verringerung der Einaxialen Druckfestigkeit ist umso größer, je geringer die Materialfeuchte und je kürzer die Lagerdauer ist.

Comparing dry and wet granular matter

Laurent Gilson, Regina Fuchs, Günter K. Auernhammer

Max Planck Institute for Polymer Research, Physics at Interfaces, Mainz, gilson@mpip-mainz.mpg.de

We will present a detailed experimental study on the mechanical properties of dry and wet granular matter. The focus will be on the influence of liquid droplets on the motion of particles during shear and compression. We imaged and tracked each individual particle and liquid droplet in a miniature shear cell in 3D during strain controlled shear experiments.

The strain-controlled shear cell is composed of a fixed bottom plate and a flat-punch diamond tip [1], forming a cell without lateral walls. The model system consists of polydisperse spherical silica particles with an average diameter of $7\mu\text{m}$ suspended in an index matching liquid. We added immiscible oil droplets to create a wet granular matter (c.f. Fig. 1) similar to a pickering emulsion. We used a laser scanning confocal microscope [1,2,3] developed in-house to record simultaneously position and size of the particles, as well as position and shape of the droplets for wet samples. The sample was imaged continuously in 3D during large amplitude oscillatory shear and compression. We follow the trajectories of each individual particle and droplet during the experiment. Besides the anisotropic contact network and caging effects for dry granular matter, our analysis shows an additional influence of the droplets on compression forces, as well as a correlation between particle and droplet motion.

The questions that we discuss in the presentation include: What are the specific characteristics in the trajectories of particles with and without contact to droplets? In how far does the formation of shear zones differ in wet granular matter from mechanisms known from dry granular matter?

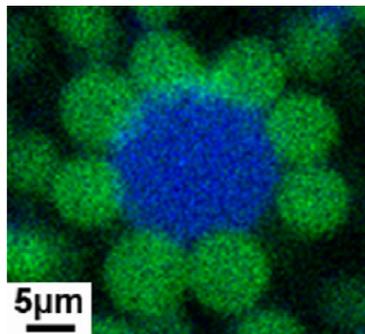


Fig. 1: Particle-Droplet ensemble. Particles are coloured in green, the droplet in blue.

[1] Wenzl, J., Seto, R., Roth, M., Butt, H.-J., Auernhammer, G., *Granul. Matter*, **15**, 391-400 (2012).

[2] Crocker, J.C., Grier, D.G, *J. Colloid Interface Sci.* **179(1)**, 298-310 (1996).

[3] Roth, M., Schilde, C., Lellig, P., Kwade, A., Auernhammer, G., *Eur. Phys. J. E*, **35(11)**, 124 (2012)

Messung von Normal-, Scher-Kräften und Drehmomenten auf Partikel unter Verwendung eines Rheometers

R. Grudda, U. Bröckel, Institut für Mikroverfahrenstechnik und Partikeltechnologie,
Umwelt-Campus Birkenfeld, Birkenfeld, Germany

S. Kozhar, M. Dosta, S. Heinrich, Institut für Feststoffverfahrenstechnik
und Partikeltechnologie, Technische Universität Hamburg-Harburg, Hamburg, Germany

S. Antonyuk, Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik,
Technische Universität Kaiserslautern, Kaiserslautern, Germany

Innerhalb des PiKo Programmes (Partikel in Kontakt) werden die mechanischen Kontakteigenschaften von feinen Partikeln ($<100\mu\text{m}$) messtechnisch erfasst. Die ermittelten Daten bilden die Grundlage für die Simulation von Partikelkontakten [1]. Besonders für die Erfassung der Scherkräfte und Drehmomente waren die Messgeräte in den vorherigen Versuchsreihen [2] nicht sensitiv genug. In der vorliegenden Studie wurde ein Rheometer der Firma Malvern als Messinstrument verwendet. Mit diesem Messinstrument ist es möglich, bei definierten klimatischen Bedingungen ($-40^\circ\text{C} - 200^\circ\text{C}$) und einer Temperaturauflösung von $0,01^\circ\text{C}$, der noch bevorstehenden Entwicklung einer Luftbefeuchtung von 5 - 90% für einen Bereich von $5^\circ\text{C} - 80^\circ\text{C}$, Messungen an den zu untersuchenden Partikel vorzunehmen. Dieses Setup wird benötigt, da die mechanischen Eigenschaften von Partikeln häufig von den klimatischen Bedingungen abhängig sind. Dabei können Drehmomentkräfte (Viskosität) über die Geschwindigkeit und Stresskontrolle ab einem Startwert von 5nNm bis zu 250mNm und Drehmomentkräfte (Oszillatorisch) Dehnungs- und Spannungssteuerung ab einem Startwert von $0,5\text{nNm}$ bis zu 250mNm mit einer Auflösung von $0,05\text{nNm}$ gemessen werden. Die Winkelgeschwindigkeit kann dabei einen Wert von 10rads^{-1} bis zu 500rads^{-1} betragen. Mit dieser Genauigkeit können derzeit Partikel bis zu einem Durchmesser von $\geq 40\mu\text{m}$ untersucht werden. Beispielhaft ist ein Drehmomentexperiment mit einem Maltodextrin DE6 Partikel in Abbildung 1 dargestellt.

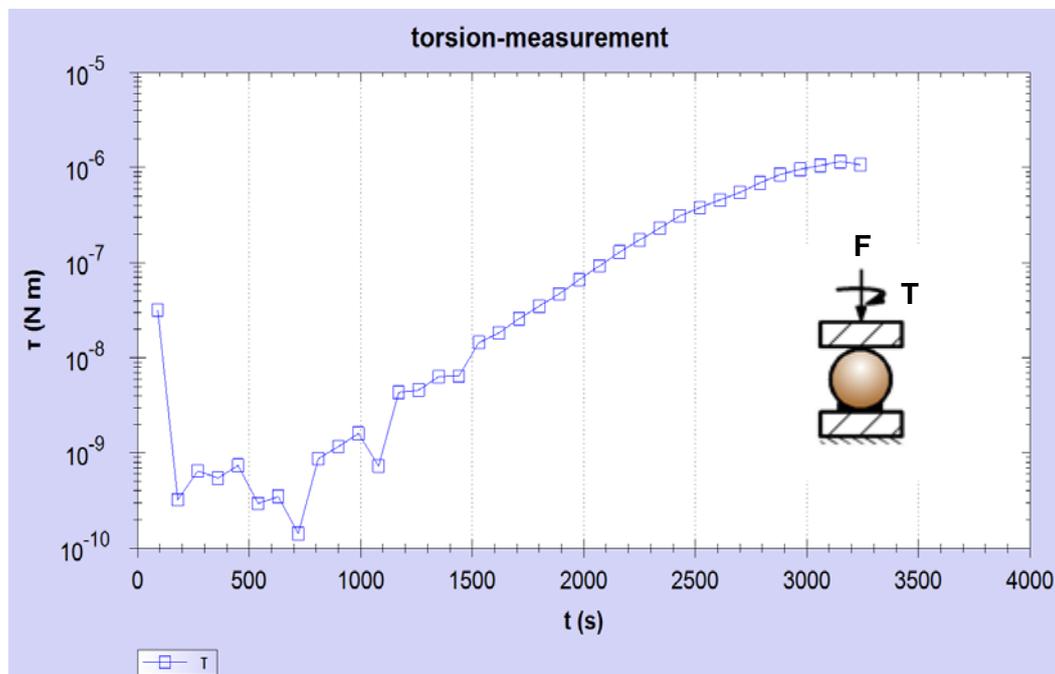


Abbildung 1: Drehmomentversuch an einem Maltodextrin DE6 Partikel

In der Abbildung ist zu sehen, dass das System mit der höchsten Auflösung startet und das minimale Drehmoment aufzeichnet. Der erste Messpunkt weicht deutlich vom zweiten Messpunkt ab. Dies hängt mit dem hohen Klirrfaktor zu Beginn der

Messung zusammen. Es zeigt sich, dass im Zeitraum von 1200s - 3000s das Drehmoment konstant mit der Zeit ansteigt. Dabei wurde eine oszillatorische Frequenz von 1Hz aufgegeben. Auf Grundlage dieser Versuchsreihen können Rückschlüsse auf die mechanischen Eigenschaften des untersuchten Materials gezogen werden. In dieser Präsentation wird auf die Methodik der verwendeten Messung eingegangen und die daraus gewonnenen Erkenntnisse für das Versuchsmaterial Maltodextrin DE6 analysiert.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danken wir für die finanzielle Unterstützung im Rahmen des SPP 1486 „PiKo“, ohne die diese Forschungsarbeiten nicht möglich wären.

- [1] L. Gilson, S. Kozhar, S. Antonyuk, U. Bröckel, S. Heinrich, Contact models based on experimental characterization of irregular shaped, micrometer-sized particles, *Granular Matter*, 16 (2014), pp. 313–326.
- [2] R. Kirsch, U. Bröckel, L. Brendel, J. Török: Measuring tensile, shear and torsional strength of solid bridges between particles in the millimeter regime, *Granular Matter* 13, 517–523, 2011

Analyse des Einflusses von Turbulenz auf den Wärmeübergang zwischen sphärischen Partikeln und planaren Oberflächen

G. Brösigke, J.-U. Repke, ITUN, TU Bergakademie Freiberg, Deutschland;

A. Herter, M. Rädle, Institut PI, Hochschule Mannheim, Deutschland

Der Wärmeübergang zwischen Partikeln und Wänden, sowie von Partikeln untereinander ist in unterschiedlichen industriellen Apparaten relevant. Dazu gehören unter anderem Festbettreaktoren, Wirbelschichten, Röhrentrockner und Drehrohröfen. Die dabei auftretenden Mechanismen sind derzeit noch nicht vollständig durchdrungen beziehungsweise deren Anteile quantifiziert. Für die Weiterentwicklung und die effiziente Beschreibung der genannten Apparate ist ein fundamentales Verständnis der vorherrschenden Mechanismen unabdingbar.

In einer voran gegangenen Arbeit wurde für das Modellsystem eines einzelnen kugelförmigen Partikels, welches in laminarer Umströmung auf einer ebenen Platte rollt,

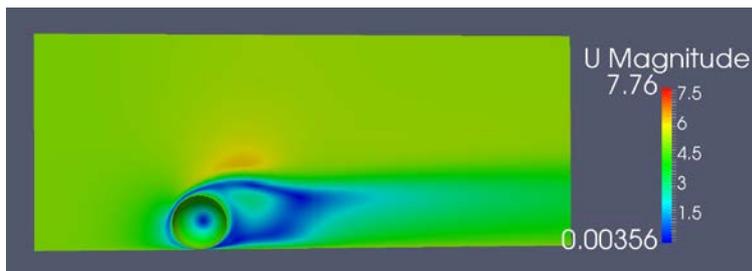


Abbildung 1: Geschwindigkeitsverteilung für 1mm Kugel bei 5m/s Rollgeschwindigkeit

die Wärmeleitung durch den Gasspalt als dominierender Mechanismus für den Wärmeübergang zwischen den Körpern mittels CFD-Simulationen identifiziert und das Ergebnis experimentell validiert.

Für eine grundlegende Beschreibung soll im nächsten Schritt der Einfluss von Turbulenz untersucht werden. Der Bereich der Transition von laminarer zu turbulenter Strömung ist dabei von besonderem Interesse für die Untersuchung, da zum einen die Ursachen und Bedingungen für die Ausbildung von Turbulenz charakterisiert werden, und zum anderen eine sukzessive Überlagerung von diffusivem und konvektivem Mechanismus erwartet wird. Da dieser Bereich nicht von Turbulenzmodellen beschrieben werden kann, erfolgt die Untersuchung mittels direkter numerischer Simulation. Dafür wird ein eigens weiterentwickelter OpenFOAM® Solver zusammen mit einem durch *snappyHexMesh* erzeugten Hexaeder-Gitter verwendet. Anhand der Ergebnisse aus der direkten numerischen Simulation erfolgt ein bewertender Vergleich mit etablierten Turbulenzmodellen für die voll ausgebildete Turbulenz. Zielstellung der Arbeit ist es, den Einfluss der Turbulenz auf den Wärmetransport zu identifizieren und zu quantifizieren.

Experimental and numerical investigation of a zigzag air classifier

Christoph Roloff, Institute of Fluid Dynamics and Thermodynamics

Kristin Kerst, Institute of Fluid Dynamics and Thermodynamics

Eduard Lukas, Institute of Process Engineering

Jürgen Tomas, Institute of Process Engineering

Dominique Thévenin, Institute of Fluid Dynamics and Thermodynamics

University of Magdeburg “Otto von Guericke”

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg, Germany

For separation by particle size, sieving is a widely used technique for mid-size to large particles. However, for particle diameters below a few millimeters, air classifiers are valuable alternatives. They are thus often found in applications related to waste treatment, recycling or food industry. The particulate material is fed into the channel and, depending on the operating conditions, “heavy” particles fall down while “light” particles are entrained upwards into a cyclone. Separation by density, size or shape is possible in this manner. Although the zigzag air classifier is a well-established apparatus, many aspects are still poorly understood, preventing an optimization of the system. It is therefore important to investigate the controlling processes in more detail in order to improve overall performance with respect to purity and efficiency.

The current work investigates the flow inside a seven-stage, pilot-scale zigzag classifier under different operating conditions. Pressure, temperature and humidity data as well as optical measurements based on Laser Doppler Velocimetry (LDV), Particle-Image Velocimetry (PIV) and Particle-Tracking Velocimetry (PTV) have been acquired and deliver a comprehensive view of the two-phase flow. Thanks to these data, boundary conditions for companion Computational Fluid Dynamics (CFD) simulations have first been derived. Steady and transient computations have been carried out and compared, proving that steady simulations can only partly describe the vortical structures controlling the separation process. To model the disperse particulate population, different coupling approaches, starting from one-way (based on the Discrete Phase Model – DPM) up to four-way coupling (based on the Discrete Element Method – DEM) have been considered in the CFD. The available experimental data deliver a valuable database for validating the simulations. Thanks to this combined analysis, a noticeably better process understanding is possible.

Analysis of the effect of wall roughness and inter-particle collisions on free jet dispersion from a long injection pipe*

O. Sgrott, G. Novelletto-Ricardo, and M. Sommerfeld

Zentrum für Ingenieurwissenschaften, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, D-06099 Halle (Saale), Germany; e-mail: oscar.sgrott-junior@student.uni-halle.de

Particle-laden flows are present in numerous industrial processes such as jet mixers, pneumatic conveying, cyclones, fluidized beds, and risers among others. All these flows are characterised by a confinement, so that the collision of particles with more or less rough walls have a major influence on particle behaviour. Moreover, in many situations segregation effects are observed occurring mainly due to inertial forces which give locally rise to a higher importance of inter-particle collisions. For allowing a numerically effective analysis of very complex particle-laden flows (e.g. particle separation in a cyclones), all relevant transport mechanisms (see e.g. Sommerfeld et al. 2008; Sommerfeld and Lain 2015) were implemented in OpenFOAM[®] in the framework of the Euler/Lagrange approach with full two-way coupling. Turbulence is modelled by means of the $k-\omega$ -SST model also accounting for two-way coupling. The important effects are transverse lift forces due to shear and rotation, particle rotation, particle collisions with rough walls and inter-particle collisions, where the latter is considered through the stochastic modelling approach. For validating the implementation in OpenFOAM first numerical simulations are performed considering pneumatic conveying, i.e. a 5 m horizontal pipe, a bend and a 5 m vertical pipe and comparing the results with experiments and other simulations (Sommerfeld and Lain 2015). Then numerical calculations are conducted for a narrow particle laden jet issuing into a chamber of quadratic cross-section (Hadinoto et al. 2005). For this situation the particle phase outlet conditions at the jet exit are strongly governed by wall collisions and wall roughness, which of course determines the jet dispersion characteristics. Additionally inter-particle collisions have a major influence on particle behaviour. Both effects are being analysed by parameter studies and the results are compared with measurements.

References

- Hadinoto, K., Jones, E.N., Yurteri, C. and Curtis, J.S.: Reynolds number dependence of gas-phase turbulence in gas-particle flows. *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 31, 416 – 434 (2005)
- Sommerfeld, M., van Wachem, B. and Oliemans, R.: *Best Practice Guidelines for Computational Fluid Dynamics of Dispersed Multiphase Flows*. ERCOFTAC (European Research Community on Flow, Turbulence and Combustion, ISBN 978-91-633-3564-8 (2008)
- Sommerfeld, M. and Laín, S.: Parameters influencing dilute-phase pneumatic conveying through pipe systems: A computational study by the Euler/Lagrange approach. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, **93**, 1-17 (2015)

* Support from CNPq (National Council for Scientific and Technological Development – Brazil) and DAAD (German Academic Exchange Service) is gratefully acknowledged.

Inertial Dilute Particulate Fluid Flow Simulations with an Euler-Euler Lattice Boltzmann Method for Cross Flow Filtration

*Robin Trunk, Thomas Henn, Hermann Nirschl, Mathias J. Krause,
Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Karlsruhe, Germany*

Systems of dilute particulates, affected by inertia, with sizes in the range of $1\mu\text{m}$ to 1mm are of great interest in the design of many mechanical devices. For the simulation of such particle-laden flows most often Euler-Lagrange approaches are applied, that yield massive computational costs, if a high accuracy e.g. in the deposition pattern is desired. In contrast to that, Euler-Euler approaches scale only with the resolution of the chosen discretization in computational effort, however, the stabilization required for the considered convection-dominated regime and in general the formulation of boundary conditions on this macroscopic scale are more challenging. In this article a stabilized extension to the Euler-Euler approach is proposed, together with appropriate boundary conditions, to also account for drag forces and yield viable results for a wide range of Péclet and Reynolds numbers. The two-component system is solved using a lattice Boltzmann method and the resulting scheme is applied to a cross flow filtration system and the numerical results are validated by comparison to other works, that apply an Euler-Lagrange approach, regarding the deposition and its dependency on the Stokes number. After consideration of the effect of artificial diffusion, the results are found to be in excellent accordance.

Thermodynamische Modellierung von Polymerlösungen

Soroush Hooshyar und Natalie Germann

Fluidodynamik komplexer Biosysteme, Wissenschaftszentrum Weihenstephan für Ernährung, Landnutzung und Umwelt, Technische Universität München

Polymerlösungen sind komplexe Flüssigkeiten, welche aufgrund der Dynamik ihrer Mikrostruktur viskoelastisches Verhalten aufweisen. In der Vergangenheit wurden einfache Flüssigkeitsmodelle (z.B. das Giesekus-Modell) benutzt, um die Rheologie von Polymerlösungen vorherzusagen. Diese Modelle beruhen auf der Annahme, dass die Polymerkonzentration im Strömungsfeld unverändert bleibt. Experimentelle Messungen widerlegen jedoch diese Vereinfachung (1-3). Da die Mikrostruktur eines Produkts dessen Textur erheblich beeinflussen kann, ist es dringend notwendig, realistischere mesoskopische Modelle zu entwickeln. In diesem Vortrag wird ein neues thermodynamisches Polymermodell vorgestellt werden (4). Für die Beschreibung der diffusiven Prozesse wurde eine Zwei-Flüssigkeits-Methode benutzt (5). Es wurde dabei angenommen, dass lokale Konzentrations- und Spannungsgradienten eine nichttriviale Geschwindigkeitsdifferenz zwischen den polymeren Bestandteilen und der Lösung generieren. Numerische Testrechnungen, welche für eine inhomogene Scherströmung im Zylinderspalt durchgeführt wurden, haben ergeben, dass die scherinduzierte Migration für die Ausbildung von lokalisierten Konzentrationsbändern verantwortlich ist. Aufgrund der Einfachheit des neuen Modells, kann dessen Verhalten in der Zukunft auch in prozessorientierten Strömungen untersucht werden.

- 1) Dill, K. A. and Zimm, B. H. (1979). A rheological separator for very large dna molecules. *Nucleic Acids Research*, 7(3):735–749.
- 2) MacDonald, M. and Muller, S. (1996). Experimental study of shear-induced migration of polymers in dilute solutions. *Journal of Rheology*, 40(2):259– 283.
- 3) Metzner, A., Cohen, Y., and Rangel-Nafaile, C. (1979). Inhomogeneous flows of non-Newtonian fluids: generation of spatial concentration gradients. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 5:449–462.
- 4) Hooshyar, S. and Germann, N. (2015). A thermodynamic study of shear banding in polymer solutions. *Physics of Fluids*, in preparation.
- 5) Germann, N., Cook, L., and Beris, A. (2014). Investigation of the inhomogeneous shear flow of a wormlike micellar solution using a thermodynamically consistent model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 207:21–31.

Korrespondierende Autorin:

Prof. Dr. Natalie Germann
Fluidodynamik komplexer Biosysteme
Wissenschaftszentrum Weihenstephan
Technische Universität München
Maximus-von-Imhof-Forum 2
D-85354 Freising
Email: natalie.germann@tum.de
Telefon: +49.8161.71.3785

Modellierung von Rührreibschweißprozessen mit Hilfe eines gekoppelten Immersed-Boundary-/Volume-of-Fluid Ansatzes

Uwe Janoske, Markus Bürger, Lehrstuhl für Strömungsmechanik, Bergische Universität Wuppertal, Wuppertal

Rührreibschweißen stellt eine Alternative zu Verbindungstechniken bei Aluminiumwerkstoffen dar. Durch die Prozesstemperaturen, die unterhalb der Liquidus-Temperatur des Werkstoffs liegen, treten zahlreiche Probleme, die bei konventionellen Verbindungstechniken vorkommen, nicht auf. Die Modellierung des Prozesses wurde in der Vergangenheit durch unterschiedlichste numerische Methoden und Ansätze durchgeführt.

Im Rahmen dieser Arbeit soll der Prozess mit Hilfe eines bislang nicht verwendeten Ansatzes, der auf der numerischen Strömungsberechnung beruht, untersucht werden. Dabei wird die Modellierung des Werkzeugs durch eine Immersed Boundary Methode umgesetzt, die eine frei wählbare Bewegungskurve des Werkzeugs im Rechenmodell gestattet. Die Betrachtung der zu fügenden Werkstoffe wird durch ein Volume-of-Fluid Modell durchgeführt, wobei beide Werkstücke als unterschiedliche Phasen angesehen werden. Dadurch lassen sich das Vermischungsverhalten, die Temperaturen in den Werkstücken als auch die Kräfte auf das Werkzeug ableiten. Durch die allgemeine Betrachtung der Werkstücke als getrennte Phasen ist das Modell auch zur Beschreibung des Fügeprozesses unterschiedlicher Werkstoffe geeignet. Die Umsetzung erfolgt in dem Open Source CFD-Code OpenFOAM® mit Hilfe einer am Lehrstuhl entwickelten Modellbibliothek für Immersed-Boundary Probleme.

Der Einfluss der Modellparameter auf die numerischen Ergebnisse als auch Parametervariationen bezüglich Drehzahl und Vorschubgeschwindigkeit des Werkzeugs werden dargestellt.

Selektive Phasengeschwindigkeitsmessung in Blasenströmungen durch den kombinierten Einsatz einer Heißfilmsonde und der ultraschnellen Röntgentomographie

Ragna Kipping¹, Holger Kryk², Uwe Hampel^{1,2}

¹*AREVA-Stiftungsprofessur für Bildgebende Messverfahren für die Energie- und Verfahrenstechnik, Technische Universität Dresden, 01062 Dresden, Deutschland.*

²*Institut für Fluidodynamik, Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf, Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden, Deutschland.*

Kurzfassung

Blasensäulenreaktoren bieten aufgrund ihrer einfachen Bauweise und ihres ausgezeichneten Wärme- und Stofftransportverhaltens einen häufig genutzten Reaktortyp in der chemischen Industrie. Besonders die Beschreibung der Hydrodynamik und der Geschwindigkeitsprofile der unterschiedlichen Phasen, sowie deren radiale Verteilung haben einen erheblichen Einfluss auf den Stofftransport und chemische Reaktion. In diesem Beitrag sollen die Ergebnisse der Untersuchung zur Flüssigphasengeschwindigkeit in Blasenströmungen vorgestellt werden. Die Anwendbarkeit von Heißfilmsonden ist bei Vorliegen einer Mehrphasenströmung stark begrenzt. In Blasensäulen beinhaltet das gemessene Geschwindigkeitssignal Anteile der Gas- und Flüssigphase. Zur Untersuchung der Umströmung von Blasen und zur Bestimmung von Turbulenzparametern ist es notwendig diese Anteile voneinander zu trennen. Ausschließlich bei geringen Gasgehalten bietet der charakteristische Signalverlauf bei der Interaktion von Blase und Sonde eine Möglichkeit dazu. In dieser Arbeit kann mit Hilfe der Zwei-Ebenen Tomographie, die genaue Position der Heißfilmsonde und die vorliegende Phase an dieser Stelle in der Blasensäule bestimmt werden. Weiterhin können neben der Flüssigphasengeschwindigkeit auch Parameter der Hydrodynamik der Gasphase, wie Blasenform, Blasengröße bestimmt werden und in Abhängigkeit zur Flüssigphasengeschwindigkeit gestellt werden.

Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) für die Förderung des Projektes (Reaktive Blasenströmungen SPP1740, HA 3088/8-1)

Gittersensormesstechnik zur Aufklärung der Phasenverteilung in mehrphasigen Apparaten

Hecht, C; Schlusemann, L.; Van Holt, F.; Lesniak, A. K.; Grünewald, M.; Ruhr-Universität Bochum, Deutschland

Apparate, in denen mehrere Phasen zur Kontaktierung gebracht werden sind in der chemischen Industrie weit verbreitet. Die Phasenverteilung innerhalb dieser Reaktoren oder Trennkolonnen ist entscheidend für deren Leistungsfähigkeit. Daher ist die Aufklärung der Phasenverteilung von großer Bedeutung für die Auslegung, Bewertung und Modellierung. Zur Aufklärung der Phasenverteilung wurde in den letzten Jahren eine Vielzahl an Messtechniken entwickelt, die sich zum Teil stark unterscheiden. In vielen Publikationen kommen lokale, als auch tomographische Messmethoden zur Ermittlung einzelner Parameter zum Einsatz. Eine Alternative zu diesen Techniken ist der Gittersensor.

Die Gittersensormesstechnik ist zwar nicht in der Lage eine tomographische oder eine lokale Messtechnik in ihrem Informationsgehalt zu ersetzen, allerdings verspricht ihr breites Anwendungsgebiet, die flexible Einbauposition und einer, mit niedrigem Aufwand verbundenen, Querschnittsmessung die Möglichkeit, das gesamte Verhalten innerhalb eines Reaktors zu ermitteln. Der Gittersensor besteht dazu aus 2 Drahtebenen, die um 90° zueinander verdreht sind, sodass es zu einer Kreuzung der Drähte kommt. An den Kreuzungspunkten wird die Leitfähigkeit, des sich zwischen den Drahtebenen befindlichen Mediums, gemessen. Da sich die Leitfähigkeit von Gasen und Flüssigkeiten stark unterscheidet kann auf die Phasenverteilung geschlossen oder mit Hilfe einer stark leitenden Flüssigkeit (Tracer) die Flüssigkeitsströmung sichtbar gemacht werden.

In den letzten Jahren wurde diese Messtechnik in den verschiedenen Mehrphasenapparaten, wie Blasensäulen, Absorptionskolonnen, Rieselbettreaktoren sowie neuartigen strukturierten Reaktoren eingesetzt. Die, aus diesen Messungen erhaltenen Daten werden in Kompartiment- und Zellenmodelle überführt und zur Bewertung und Auslegung von Verteilern und Reaktor-Katalysatorkonzepten genutzt.

Dieser Beitrag zeigt Anhand von Anwendungsbeispielen die Vielfältigkeit der Gittersensormesstechnik und beleuchtet dessen Vorteile und Herausforderungen zur Aufklärung von mehrphasigen Apparaten.

SPOUTED BED SPRAY GRANULATION FOR FABRICATING METAL-POLYMER COMPOSITES

Eduard Eichner¹, Vitalij Salikov¹, Maksym Dosta¹, Stefan Heinrich¹, Gerold A. Schneider²

1 Institute of Solids Process Engineering and Particle Technology

2 Institute of Advanced Ceramics, Hamburg University of Technology.

Spouted bed spray granulation process offers many advantages for the design of composite materials. Particles in μm -range can be structured with this technique, and optimal properties for further processing to bulk materials can be obtained. For achievement of high packing densities of particles also bimodal particle size distributions can be used. For this purpose, particles in nm-range are first suspended in a polymer solution and then the suspension is sprayed in a spouted bed on particles in μm -range.

Naturally occurring structural materials are always ceramic-polymer composites with several hierarchical levels, which are optimized for the specific surroundings and requirements. Even though the structure of biological materials and its relationship to their outstanding mechanical properties has been studied in detail in recent years, it has so far not been possible to reconstruct this structural design. We present a process route for the fabrication of hierarchical materials, which involves the spouted bed spray granulation process of prestructured particles. With this approach a genuine hierarchically structured ceramic-polymer composite material with brick-and-mortar-structure was fabricated. A further property of natural materials is a very high packing density of ceramic particles. With the spouted bed spray granulation process and a bimodal particle size distribution is it also possible to achieve very high packing densities in ceramic-polymer composites. High aspect ratio of particles in natural composites is a further important property. The influence of the aspect ratio on mechanical properties (elasticity modulus, strength) is investigated on metal-polymer composites. Spherical metal particles are first coated in the spouted bed and subsequently they are deformed in a rolling mill to platelets. The platelets are then compressed to form a bulk material. The experimental approach as well as experimental (4-point bending, nanoindentation) results of the manufactured samples will be presented and discussed. Also results of coupled CFD-DEM simulation of fluidization (spouting) process in the dilute spouting regime with many particles will be presented. Additionally to experimental determination of mechanical properties also results of DEM-simulations of mechanical properties of the composites will be presented.

Acknowledgments: We gratefully acknowledge financial support from the German Research Foundation (DFG) via the collaborative research center SFB986 "M3", project A3 and A6.

Methodik zur Berechnung des Partikelwachstums bei der Wirbelschicht-Sprühgranulation unter Verwendung von CFD-Simulation und Populationsbilanzierung

Philipp Lau, Institut für Thermische Verfahrenstechnik, KIT, Karlsruhe/Deutschland,

Matthias Potthoff, Uhde Fertilizer Technology, Roermond/Niederlande,

Matthias Kind, Institut für Thermische Verfahrenstechnik, KIT, Karlsruhe/Deutschland

Der Prozess der Wirbelschicht-Sprühgranulation vereint die Schritte der Feststoffbildung und –formulierung in einem Apparat, wobei je nach Anwendung und Stoffsystem eine nach Kundenwünschen erzeugte Produktpartikelgrößenverteilung gefordert wird. Die Fähigkeit, den zeitlichen Verlauf der Partikelgrößenverteilung im Prozess vorherzusagen, ist maßgeblich für die Optimierung und den Scale-Up von industriellen Granulationsanlagen. Zur Vorhersage können Populationsbilanzen verwendet werden, welche allerdings nur bei Kenntnis von partikelgrößenabhängigen Wachstumsgeschwindigkeiten gelöst werden können.

Diese experimentell schwer zugänglichen Wachstumsgeschwindigkeiten hängen stark von der Fluidodynamik in der Wirbelschicht sowie von der Bettpartikelgrößenverteilung ab. Daher werden in dieser Arbeit die Kinetiken aus einem CFD-Mehrphasenmodell mit fünf Phasen extrahiert, wobei drei Phasen die Partikelgrößenverteilung der Wirbelschicht repräsentieren. Fluidodynamik, Tropfenabscheidung, sowie Energiebilanzen werden in einem Granulationsprozess am Beispielsystem Stickstoffdünger mit einer zentrisch angeordneten industriellen Düse zeitlich und örtlich hochaufgelöst berechnet. Dabei tauschen die unterschiedlichen Phasen Masse, Impuls und Energie miteinander aus. Die für kurze Prozesszeiten (\sim s) extrahierten, auf unterschiedlichen Partikelgrößen abgeschiedenen Massenströme werden verwendet, um partikelgrößenabhängige Wachstumsgeschwindigkeiten zu berechnen. Zusammen mit Populationsbilanzen kann anschließend der zeitliche Verlauf der Partikelgrößenverteilung für lange Prozesszeiten (\sim min) vorhergesagt werden. Allerdings ist dabei von Zeit zu Zeit eine Aktualisierung der Wachstumsgeschwindigkeiten erforderlich. Der Vergleich mit experimentellen Daten einer Case-Studie aus einer 1-Düsen-Granulationsanlage im Batchbetrieb zeigt, dass das 5-Phasen-CFD-Modell erfolgreich validiert werden konnte.

Wirbelschichtcoating mit schmelzbaren Überzügen - experimentelle Ansätze zur Aufklärung von mesoscaligen Effekten

M.G. Müller, K.Sommer, P.Först*

Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik

**Lehrstuhl für Verfahrenstechnik disperser Systeme*

Technische Universität München, Freising

Das Verkapseln von pulverförmigen Stoffen und Stoffmatrixen stellt neben der Agglomeration und der Sprühgranulation eine der wichtigsten Prozessoptionen von Wirbelschichten dar. Je nach Anwendungsfall ist es möglich zielgerichtet pulverförmige Formulierungen herzustellen. Für gängige Anwendungen in der chemischen, pharmazeutischen und Futtermittelindustrie besteht eine breite wissenschaftliche Wissens- und anwenderbasierte Erfahrungsbasis. Für lebensmittelzugelassene schmelzbare Überzugsmaterialien ist die Datenbasis unzureichend. Dabei bietet das lösungsmittelfreie Coating gerade für die Lebensmittelindustrie deutliche Vorteile. Die Überzugsmaterialien werden in diesem Verfahren als Schmelze auf das fluidisierte Kernmaterial aufgezogen, aufgrund der Wärmetransportlimitierung verkürzen sich die Prozesszeiten und der Energieeinsatz. Um in diesem Bereich die Zusammenhänge zwischen den Materialeigenschaften, Prozessbedingungen und den zu erwartenden Coatingqualitäten und Produkteigenschaften zu erforschen, ist es notwendig die mesoscaligen Vorgänge genauer zu betrachten. Neben den temperaturabhängigen Materialeigenschaften (Schmelz- und Kristallisationsbereich, Solid Fat Content) die mittels differentieller Wärmestromkalorimetrie bestimmt werden können, sind die mechanischen Eigenschaften der Überzugsmaterialien (rheologisch bestimmt) von großer Bedeutung für die Schichtbildung am Partikel. Die Kombination der temperaturabhängigen Materialeigenschaften mit den mechanischen Eigenschaften ermöglicht eine Abschätzung über die Filmbildungseignung des Überzugsmaterials. Zur Validierung dieser Eigenschaft wurde mit Hilfe einer Einzel-Kugel-Coating Anlage die Filmbildungseigenschaft in einem kontrollierten Set-Up untersucht. In einem nächsten Schritt sollen die aus diesem Aufbau gewonnenen Erkenntnisse auf eine Laborwirbelschicht übertragen werden um die Produkteigenschaften der gecoateten Pulver zu untersuchen.

CFD-DEM simulation of particle collision dynamics in a polydisperse gas-solid fluidized bed

Zhaochen Jiang, Andreas Bück, Evangelos Tsotsas

Thermal Process Engineering, Otto-von-Guericke University Magdeburg, Germany

Agglomeration product quality is considerably influenced by the collision dynamics, such as collision frequency, impact velocity and impact force. Unfortunately, it is very difficult to accurately measure the collisions in granular flow. However, CFD-DEM approach provides the advantage to obtain collision behaviors on the particle level in the different formation zones of fluidized beds.

In this study, an open source CFD-DEM system [1] is used to simulate the particles collision dynamics in a polydispersed gas-solid fluidized bed under different operation conditions. The sizes of γ - alumina particles are 1.8 mm, 2.5 mm and 3 mm. The simulation results of average particles height and particles velocity distribution are firstly validated by Color-PTV measurements. Further, the collision frequency with respect to solid volume fraction and granular temperature is compared with the theoretical collision model [2]. The distributions of collision frequency, impact velocity and impact force are evaluated to improve the performance of the population balance model (PBM) in agglomeration modeling.

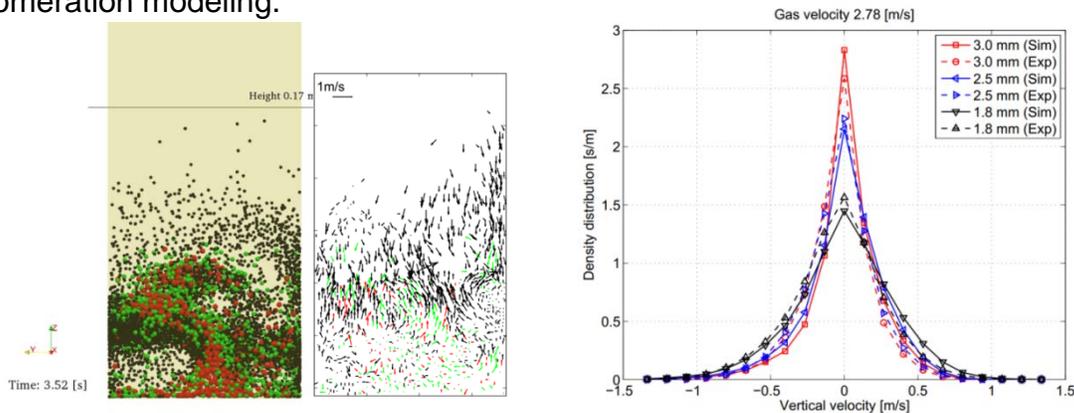


Fig. 1: The comparison between CFD-DEM simulation and Color-PTV measurement

[1] Goniva, C., Kloss, C., Deen, N. G., Kuipers, J. A., & Pirker, S. (2012). Influence of rolling friction on single spout fluidized bed simulation. *Particuology*, 10 (5), 582-591.

[2] Gidaspow, Dimitri. *Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions*. Academic Press, 1994.

CFDEM®-Modellierung eines Coatingprozesses in einer dreidimensionalen prismatischen Strahlschicht

Swantje Pietsch, Stefan Heinrich, Technische Universität Hamburg-Harburg, Hamburg;

Katja Karpinski, Michael Schönherr, Frank Kleine-Jäger, BASF SE, Ludwigshafen

Mithilfe von Strahlschichten sind Materialien fluidisierbar, welche in Wirbelschichten aufgrund ihrer Größe, Oberflächeneigenschaften oder nicht-sphärischen Form nicht behandelt werden können. Die Strahlschichttechnologie findet u.a. Anwendung im Bereich der Trocknung, der Sprühgranulation und des Coatings. Der erhöhte Wärme- und Stoffaustausch sowie die intensive Feststoffzirkulation in der Strahlschicht ermöglichen eine homogene Verteilung der Coatingsuspension einhergehend mit einer verringerten Agglomerationstendenz. In der betrachteten prismatischen Ausführungsform strömt die Fluidisationsluft über zwei den Gasdurchsatz regulierende Öffnungen in die Prozesskammer ein. Die Coatingsuspension wird über eine Zweistoffdüse in Bottom-spray-Konfiguration eingesprüht (Abb. 1).

Die Simulation des Prozesses wurde mit dem Open-Source-Paket CFDEM® durchgeführt, welches das CFD-Tool OpenFOAM® mit der DEM-Software LIGGGHTS® koppelt. Die für die Simulation benötigten Eingangsparameter und Stoffgrößen, wie z.B. der Restitutionskoeffizient und das Elastizitätsmodul, wurden experimentell ermittelt. Es wurde simulativ der Einfluss verschiedener Turbulenzmodelle untersucht. Durch die Parallelisierung der Simulationen und unter Verwendung eines Coarse-graining-Ansatzes konnte die Rechenzeit deutlich verkürzt werden. Mithilfe eines selbst geschriebenen Postprocessing-Programms wurde die Verweilzeitverteilung der Partikel in der Sprühzone berechnet. Der Vergleich von Simulationsergebnissen und experimentellen Daten zeigte eine hohe Übereinstimmung.

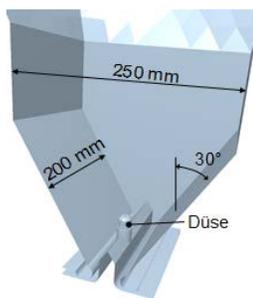


Abbildung 1: Strahlschichtgeometrie.

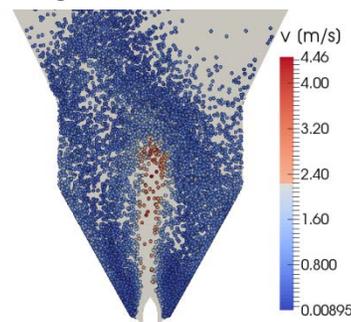


Abbildung 2: CFDEM®-Simulation der momentanen Partikelpositionen und -geschwindigkeitsverteilung.

Literaturangaben

C. Goniva, C. Kloss, N.G. Deen, J.A.M. Kuipers and S. Pirker. Influence of Rolling Friction Modelling on Single Spout Fluidized Bed Simulations. Particuology, DOI 10.1016/j.partic.2012.05.002, 2012.

Strömungsmechanische Optimierung des Dächerschachttrockners mittels CFD und DEM

*Holger Scaar, Fabian Weigler, Georg Franke, Jochen Mellmann, Leibniz-Institut für
Agrartechnik Potsdam-Bornim e.V., 14469 Potsdam, Deutschland*

In der Landwirtschaft werden weltweit Dächerschachttrockner zur Konservierung großer Massenströme von Getreide, Mais und Reis eingesetzt. Obwohl Schachttrockner hinsichtlich der Steuerung und Trocknungsleistung detailliert untersucht wurden, kann der Energieverbrauch des konvektiven Trocknungsprozesses, noch immer Werte von bis zu 10 MJ/kg_{H₂O}, erreichen. Gründe für diesen hohen Energieverbrauch liegen unter anderem in einer nicht optimalen Apparategestaltung die zu inhomogenen Luftströmungen, inhomogenen Partikelverweilzeiten und somit zur ungleichmäßigen Trocknung führt.

Um die Trocknergestaltung hinsichtlich der Anordnung, der Anzahl und der Größe der Luftkanäle zu optimieren wurde ein Modell entwickelt, welches die Gutströmung, die Luftströmung und den Wärme- und Stofftransport in der Getreideschüttung, die als poröses Medium definiert ist, beschreibt. Aus der DEM wurden charakteristische Schüttungsmerkmale, wie die Porosität und des sich unterhalb der Luftkanäle ausbildenden Schüttwinkels in einem CFD Modell implementiert. Das neuentwickelte Modell wurde anhand von Differenzdruck-, Tracergas- und Partikelverweilzeitmessungen validiert.

Anhand einer Parameterstudie unterschiedlicher Schachtgeometrien konnte nachgewiesen werden, dass eine horizontale Dachanordnung zu einer homogeneren Luftdurchströmung der Schüttung führt. Hingegen entstehen bei der diagonalen Dachanordnung Zonen im Trockner, in denen nahezu keine Luftströmung vorhanden ist. Betrachtet man jedoch die Partikelströmung im Trockner, führt die diagonale Dachanordnung zu einer gleichmäßigeren Trocknung im Kernstrom. Ferner wird jedoch der Getreidestrom an der Trocknerwand bei beiden Dachanordnungen über- bzw. untertrocknet. Durch die Umgestaltung der Trocknergeometrie und der Kombinierung der Vorteile beider Designs konnte die Trocknung vergleichmäßigt und der Energieverbrauch um bis zu 30% verringert werden.

Funktionalisierung von Polymermaterialien für Laserstrahlschmelzverfahren

Marius Sachs, Jochen Schmidt, Wolfgang Peukert, Karl-Ernst Wirth

Lehrstuhl für Feststoff- und Grenzflächenverfahrenstechnik (LFG),

Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Cauerstr. 4, 91058 Erlangen

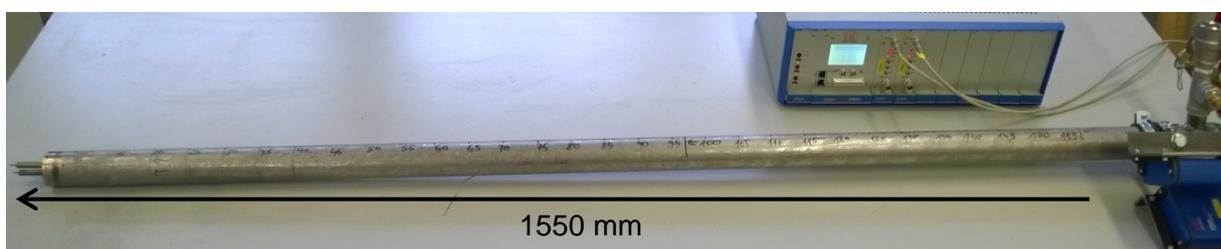
Bei generativen Fertigungsverfahren geht der Trend derzeit vom „Rapid Prototyping“ hin zu „Additive Manufacturing“, wodurch auch die Anforderungen an das Ausgangsmaterial steigen. Maßgeschneiderte Modifizierungen dieser können die Effizienz von Laserstrahlschmelzprozessen steigern. In diesem Beitrag soll ein Überblick über verschiedene Methoden zur Funktionalisierung und deren Einfluss auf das Materialverhalten im Fertigungsverfahren gegeben werden. Um neue Pulvermaterialien herzustellen, wurde eine Prozesskette etabliert [1]. Der erste Schritt ist eine Kaltnaßzerkleinerung, wobei Polymerpartikeln in einem Bereich von 10 – 15 µm gewonnen werden. Um die Fließfähigkeit der erhaltenen Partikeln zu verbessern, findet darauffolgend eine Verrundung der Partikeln in einem beheizten Downer-Reaktor statt. Die wichtigsten Prozessparameter sind hier Strömungs- und Temperaturführung, sowie die Partikelbeladung des Gasstromes. Eine weitere Optimierung der Fließfähigkeit kann durch trockenes Beschichten erreicht werden. Das Ergebnis der Beschichtung und der resultierenden Fließfähigkeit wird durch verschiedene Messverfahren bestimmt. Weiterhin ist die Grenzfläche zwischen den verschiedenen, während des Bauprozesses vorkommenden Phasen (fest, schmelzflüssig, wiedererstarrt) essentiell. Diese kann durch eine Modifikation der einzelnen Partikeln gezielt beeinflusst werden. Die Behandlung erfolgt mit einem atmosphärischen Plasmajet welcher in einen Wirbelschichtreaktor integriert ist. Hierbei kann durch den Einsatz von verschiedenen Plasmagasen die Oberfläche der Partikeln mit reaktiven Gruppen (z.B. –COOH; -OH) angereichert werden. Wichtig für eine Bestimmung der Behandlungszeiten ist genaue Kenntnis über die Wechselwirkungen des dichten Jets und der Partikelschüttung im fluidisierten Zustand. Der Prozess hat erheblichen Einfluss auf die Oberflächenenergie, was zu einer Verbesserung der Benetzungseigenschaften führt. Die Einflüsse der beschriebenen Prozesse und Funktionalisierungen werden an gesinterten Probekörpern untersucht. Der Einfluss auf die Bauteilgüte wird ebenfalls dargestellt.

- [1] J. Schmidt et al: "A novel process route for the production of spherical LBM polymer powders with small size and good flowability," Powder Technol., vol. 261, pp. 78–86, 2014.

Experimentelle Untersuchung der lokalen Strömungsverhältnisse in einer 1 MW_{th} Wirbelschichtanlage mittels eines kapazitiven Messsystems

*Dipl.-Ing. Alexander Daikeler, Dr.-Ing. Jochen Ströhle, Prof. Dr.-Ing. Bernd Epple
TU Darmstadt, Institut für Energiesysteme und Energietechnik, Otto-Berndt-Str. 2,
64287 Darmstadt*

Die Wirbelschichttechnologie wird für verschiedenste chemische Prozesse wie der Wirbelschichtverbrennung oder neuartiger, effizienter CO₂-Abscheidungs-Verfahren verwendet. Da das hydrodynamische Verhalten einer Wirbelschicht einen großen Einfluss auf reaktionsbestimmende Parameter wie den Wärme- und Stoffübergang oder die Partikelverweilzeit im Reaktor hat, wurden in den vergangenen Jahren eine Vielzahl von Strömungssimulationen von Wirbelschichten durchgeführt. Zur Validierung dieser Ergebnisse sind experimentell gewonnene charakteristische Parameter wie der Partikelkonzentration und Partikelgeschwindigkeit notwendig. Aufgrund der widrigen Umgebungsbedingungen in einer Wirbelschicht und der hohen Komplexität verfügbarer Messverfahren wurden bisher allerdings vergleichsweise wenige lokal aufgelöste Messungen dieser Größen in realen Wirbelschichten durchgeführt. Am Institut für Energiesysteme und Energietechnik der TU Darmstadt wurde ein kapazitives Messsystem aufgebaut, mit dem lokal hochaufgelöst Partikelkonzentrationen und Partikelgeschwindigkeiten erfasst werden können. Hierbei wird mittels zweier kompakter Zylinderkondensatoren die Kapazität der Gas-Feststoff-Suspension gemessen, welche eine starke Abhängigkeit von der Partikeldichte aufweist. Messungen wurden in einem Wirbelschichtreaktor einer 1 MW_{th} Versuchsanlage mit einem Innendurchmesser von 0,6 m und einer Höhe von 8,5 m und in einem skalierten Wirbelschicht-Kaltmodell mit einem Innendurchmesser von 0,2 m und einer Höhe von 3,4 m durchgeführt. Die Messungen bestätigen die allgemein vorherrschende Vorstellung einer Kern-Ring Struktur mit einem niedrig konzentrierten, schnell aufsteigenden Partikelstrom in der Mitte und einem dichten, langsamer abströmenden Partikelstrom nahe der Reaktorwand.



Kapazitives Messsystem

Fließschemasimulation der Fluidmechanik in gekoppelten Wirbelschichtreaktoren für das Chemical-Looping-Verfahren

Johannes Haus, Ernst-Ulrich Hartge, Stefan Heinrich, Joachim Werther
Institut für Feststoffverfahrenstechnik und Partikeltechnologie, Technische Universität Hamburg-Harburg, Hamburg, Germany

Eine neuartige Umgebung für Fließschemasimulation *DYSSOL* wird für die Simulation des Chemical-Looping Prozesses für feste Brennstoffe angewendet. Ziel ist es, die Dynamik der Fluidmechanik des Prozesses abzubilden. Der Prozess wird zumeist in gekoppelten Wirbelschichtreaktoren umgesetzt. Die Anlage, die an der TU Hamburg betrieben und nun simuliert wird, besteht aus einem zirkulierenden Wirbelschichtreaktor, der als Luftreaktor bezeichnet wird und einer zweistufigen blasenbildenden Wirbelschicht, genannt Brennstoffreaktor.

Alle in der Abbildung dargestellten Prozesseinheiten werden mit eindimensionalen fluiddynamischen Modellen abgebildet, um dynamische Effekte des gekoppelten Systems einzufangen. Der Luftreaktor wird mit einer dichten Bodenzone und einer exponentiell abfallenden Feststoffkonzentration darüber modelliert. Die Brennstoffreaktoren bestehen aus einer zweiphasigen blasenbildenden Wirbelschicht und einem Freeboard aus ausgetragenen Partikeln. Der Zyklon wird gemäß dem Muschelknautz-Modell abgebildet. Die Siphone werden als blasenbildende Wirbelschichten angenommen und bestehen aus zwei Kammern.

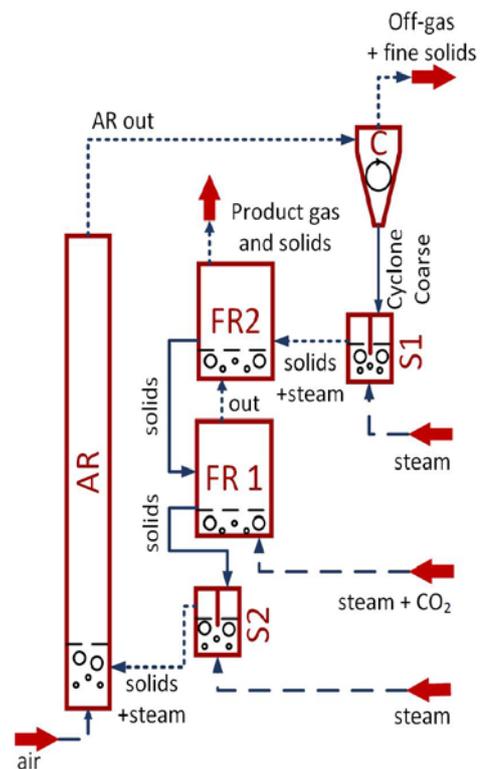


Abb.: Fließbild des CLC-Prozesses
(FR1/FR2 = Brennstoffreaktoren, S1/S2 = Siphone, AR = Luftreaktor, C = Zyklon)

Das Systemverhalten bei Lastenwechsel, mit abgeriebenen Partikeln, beim An- und Abfahren wird thematisiert.

Einfluss der Partikelgrößenverteilung auf die Dispergierbarkeit von Agglomeraten in oszillierender gasförmiger Umgebung

Tobias Wollborn, Claas Knoop, Udo Fritsching, IWT – Stiftung Institut für Werkstofftechnik, Universität Bremen, Bremen/Deutschland

Bei partikulären Prozessen kommt es zur Agglomeration beziehungsweise Dispergierung von Partikeln und Agglomeraten. Auf der einen Seite kann die Agglomeration den weiteren Verarbeitungsprozess begünstigen, auf der anderen Seite kann sie die Weiterverarbeitung, wie zum Beispiel in Mischprozessen, erschweren. Die Verwendung von steuerbaren Strömungsfeldern bietet dabei eine Möglichkeit, den Agglomerationsprozess zu kontrollieren. In dieser Arbeit wird der Einfluss der Primärpartikelgrößenverteilung von Agglomeraten auf die Dispergierung von Agglomeraten in oszillierender gasförmiger Umgebung analysiert.

Experimentelle Untersuchungen der Agglomerat-Dispergierung finden in oszillierender gasförmiger Umgebung unter Verwendung einer stehenden Ultraschallwelle ($f = 20 \text{ kHz}$) statt. Die Dispergierung erfolgt dabei durch die Beschleunigung mehrerer Agglomerate im Ultraschallfeld und der Dispergierung durch Agglomerat-Agglomerat- und Agglomerat-Wand-Aufprall. Zur besseren Auswertung wird der Agglomerat-Aufprall in Einzelversuchen durch gezielten Wandaufprall der Ultraschalldispergierung nachempfunden.

In den Experimenten werden feuchte und feststoffgebundene Agglomerate mit unterschiedlicher Primärpartikelverteilung untersucht. Zudem wird die Auswirkung einer Kombination dieser Verteilungen zu polydisperseren oder binären Verteilungen betrachtet. Die Bewertung des unterschiedlichen Dispergierverhaltens der Agglomerate erfolgt über die Ermittlung der Bruchwahrscheinlichkeiten unter Berücksichtigung der aufgewendeten spezifischen Dispergierenergie.

Für eine detaillierte Analyse des Bruchvorgangs von Partikel-Agglomeraten werden DEM-Simulationen durchgeführt, in denen neben Zug- und Stauchbelastungen der Agglomerat-Wand-Aufprall für verschieden partikelgrößenverteilte Agglomerate dargestellt wird.

Dieses Projekt ist in das SPP 1486 PiKo „Partikeln im Kontakt“ eingebunden, welches durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) gefördert wird.

Quantifizierung und Charakterisierung der Stofffreisetzung bei der Verarbeitung von Pulvern und Schüttgütern

*M. Parey, E. Schmidt, Institut für Partikeltechnologie,
Bergische Universität Wuppertal*

In vielen industriellen Bereichen werden Pulver und feindisperse Schüttgüter eingesetzt und hergestellt, bei deren Handhabung Arbeitnehmer potenziell durch in die Luft freigesetztes Material gefährdet sind und nicht unerhebliche Risiken durch Kontamination, Anlagenverschmutzung oder Qualitätseinbußen am Produkt bestehen. Nicht zuletzt kann die Stofffreisetzung den Einsatz kostspieliger Entstaubungstechnik erfordern. Eine Vorhersage des Stoffaustrages aus einem beliebigen partikulären System ist überaus komplex und derzeit nicht möglich. Die Analyse der Staubungsneigung von Pulvern und Schüttgütern liefert jedoch vergleichbare Größen, die das Vermögen, Staub in die Atmosphäre freizusetzen, beschreiben. Durch Kombination von Dispersitätsparametern, Stoffeigenschaften und Daten zur Staubungsneigung lassen sich Zusammenhänge zwischen Stoffaustrag und Pulverdaten erarbeiten.

Im Beitrag werden Erkenntnisse einer laufenden Forschungsarbeit vorgestellt, in deren Rahmen das Freisetzungspotenzial unterschiedlich zusammengesetzter binärer Mischungssysteme, bestehend aus Calciumcarbonat und Aluminiumoxid, untersucht wird. Die Änderung der Mischungsanteile und der Partikelgrößen in den Modellpulvern erlaubt eine systematische Variation der wirkenden Haft- und Trennkräfte, die zu unterschiedlich hohen Stoffausträgen führen. Die mechanische Belastung sowie die quantitative Ermittlung der Staubfreisetzung werden mit dem in DIN 33897-4 verankerten Verfahren mit rotierender Trommel realisiert. Durch Analyse der freigesetzten Staubinhaltsstoffe mit Hilfe der energiedispersiven Röntgenspektroskopie (EDX) erfolgt letztlich eine qualitative Analyse des ausgetragenen Gutes.

Das Ziel ist es, den Einfluss und die Wechselwirkungen der dispersen und stofflichen Parameter herauszuarbeiten, die bei der Freisetzung von luftgetragenem Material wirksam werden. Langfristig sollen so anhand charakteristischer Merkmale von Pulvern und Pulvermischungen das Staubfreisetzungspotenzial abgeschätzt, Risiken beurteilt und staubarme Produkte entwickelt werden können.

Simulation zur Quantifizierung der Staubungsneigung von Pulvern

*Tim Londershausen, Eberhard Schmidt, Institut für Partikeltechnologie, Bergische
Universität Wuppertal*

Problemstellung

Die Staubungsneigung eines dispersen Feststoffes kann als Eigenschaft verstanden werden, bei bestimmter Handhabung in gasförmiger Umgebung eine Partikelfraktion spezieller Menge und Größenverteilung – zumindest kurzzeitig – gasgetragen freizusetzen. Diese Staubfreisetzung ist in der Regel unerwünscht, da sie mit einem Materialverlust (wertvoller Ressourcen oder Produkte) und oft mit einer Belastung oder Gefährdung der beteiligten Personen und einer Verschmutzung des Arbeitsumfeldes oder der Umwelt verbunden ist. Die Staubungsneigung ist demnach eine wichtige Produkteigenschaft, die sich entlang des Prozessweges beispielsweise durch Zerkleinerung, Agglomeration, Klassierung oder Mischung der beteiligten Feststoffe ändern kann. Einer vollständigen Modellierung entzieht sich die Staubungsneigung bisher.

Zielsetzung

Im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms 1679 „Dynamische Simulation vernetzter Feststoffprozesse“ sollen Eigenschaftsfunktionen bestimmt werden. Diese Eigenschaftsfunktionen beschreiben die Staubungsneigung von Pulvern bei unterschiedlichen Handhabungen.

Methode

Zur Beschreibung der Staubungsneigung von Pulvern werden zwei physikalisch basierte Modellsysteme entwickelt, diese werden in C++ selbst geschrieben. Hier soll Modell A vorgestellt und Ergebnisse von Simulationsrechnungen präsentiert werden. In diesem Modell wird eine von der Zeit abhängige Pulvermasse mit gegebener Partikelgrößenverteilung so beansprucht, dass im abgeschlossenen Bilanzraum des Gasvolumens eine von der Zeit abhängige Partikelraumkonzentration vorliegt. Hierzu wird der neu definierte Fraktionsfreisetzungsgrad $R(x,t)$ als gegebene Eigenschaftsfunktion eingeführt. Dieser Grad beschreibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit Partikeln gegebener Größe aus dem Pulver heraus in das Gas übergehen können. Im System B wird der mit dem Pulver belegte Raum vom Gas durchströmt, so dass eine Änderung der Partikeltransportkonzentration im Gasvolumen möglich wird.

A numerically robust Reynolds stress model for improved prediction of industrially relevant flow applications

R. Maduta¹, S. Jakirlic²

¹ *Outotec GmbH, Ludwig-Erhard-Strasse 21, 61440 Oberursel*

² *Technische Universität Darmstadt, Alarich-Weiss-Strasse 10, 64287 Darmstadt*

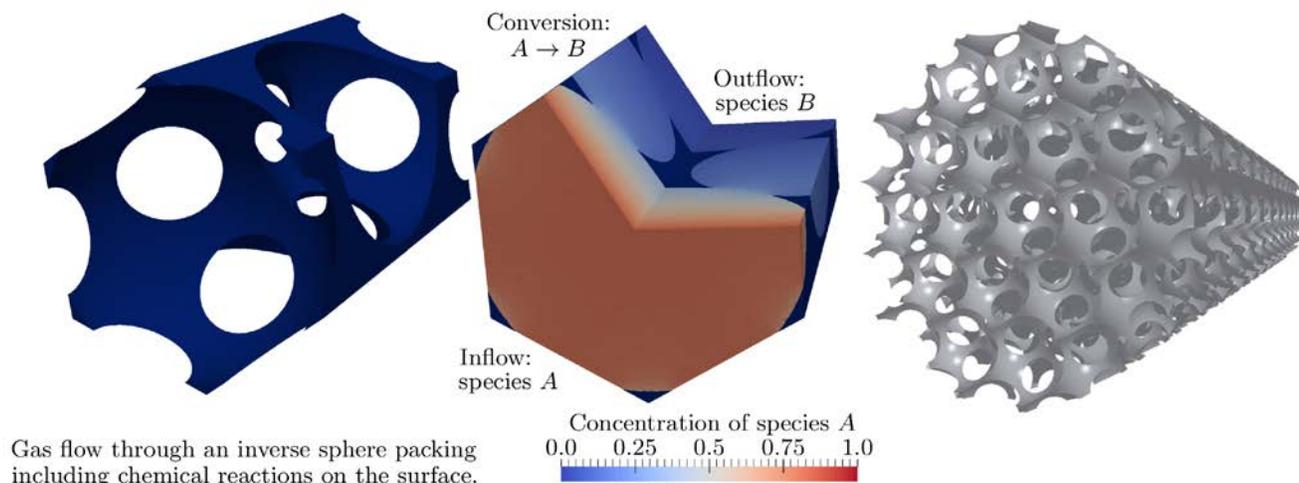
Abstract

Turbulence models within the RANS framework are still the preferred choice for computations of complex, industrially relevant flows. Even though the computer power has increased, the eddy-viscosity-based schemes are still the most widely used models in engineering practice. This is mostly due to the increased numerical robustness compared to the Reynolds stress model (RSM) group, implying the solution of transport equations for each individual Reynolds stress component. Furthermore, despite their inherent physical superiority, the RS models have not always proven to be advantageous compared to the EV model group. This is for instance the case with flow configurations subjected to separation from curved surfaces. Typical for both model groups is a lower turbulence activity level in the separated shear layer region and, consequently, a larger recirculation zone. The present work is concerned with appropriate modification of the scale-supplying equation pertinent to the Reynolds stress model group and its enhanced numerical robustness, both aiming at remedying the above-mentioned deficiencies. Two main modifications are going to be introduced: blending of the explicit treatment of the Reynolds stress divergence in the momentum equation with the implicit one utilizing the Boussinesq's ansatz (only a small portion of the implicit part suffices to make the model stable), as shown in Maduta et. al (2015), and the introduction of an additional term modelled in terms of the second derivative of the mean velocity field; the latter modification originates from the Rotta's (1972) exact equations governing the integral length scale, see Maduta (2013) and Jakirlic and Maduta (2015). It can be shown that the evaluation of the exact term in Rotta's equation at the region around the separation point yields a sink term (negative production) in the model equation governing the dissipation rate. This term exhibits appropriate enhancement within the boundary layer separating from continuous curved surfaces due to increased curvature of the velocity profile compared for instance to that encountered in flows separating from a suddenly (discontinuously) expanded channel/pipe. It causes the dissipation rate reduction resulting correspondingly in turbulence level increase and, consequently, in appropriate shortening of the recirculation zone. The predictive performance of the presently introduced modifications will be illustrated by computing some canonical test cases as well as some complex flow applications of industrial relevance.

Gas flow over catalytic surfaces

Sebastian Mühlbauer, Severin Strobl and Thorsten Pöschel, Friedrich-Alexander Universität, Erlangen

Gas flow through porous structures including chemical surface reactions is an important issue in many technical applications, first of all heterogeneous catalysis. Simulating such gas flows requires to merge reaction kinetics into gas dynamics within complex geometries. Particle based simulation methods are eminently suitable for this, since chemical reaction models can be implemented on microscopic scale yielding results on macroscopic scale.



Employing a particle based approach, we simulate chemical reactions on catalytic surfaces in complex gas flows. The starting point is non-dissociative adsorption with subsequent desorption as can for example be observed for carbon-monoxide on a platinum surface [1]. The underlying gas dynamics is simulated using Direct Simulation Monte Carlo [2], which allows for following the trajectory of each quasi-particle. A qualitative surface reaction model can be implemented by changing the particle behaviour after desorption such that a second adsorption is prevented. This we use in order to simulate heterogeneous catalysis in inverse sphere packings. The figure above shows an example, for which the inflowing substance is denoted as species *A* and converted to species *B* at the surface following the mechanisms for ad- and desorption described in [1]. Employing a multiscale approach we can investigate complicated porous structures on macroscopic scale such as an entire catalytic converter.

[1] T. Engel and G. Ertl, *Advances in Catalysis* 28, pp. 1–78 (1979).

[2] G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Clarendon Press, 1994).

Efficient CFD Simulation of Complex Flow Problems Requiring Special Meshing Strategies

Otto Mierka, Stefan Turek, TU Dortmund, Chair of Applied Mathematics and Numerics – LS III, Dortmund/Germany

In this work we present a synergic combination of special mesh manipulation tools contributing with a huge potential to the computational performance of numerical simulations and which extend the availability of simulations analysis towards industrially relevant applications related to flows experiencing difficulties stemming from locally required high resolutions in dynamic frameworks. The main components of the developed method exploit the features of a 1) computationally affordable mesh deformation technique operating by means of multifunctional monitor functions in order to achieve required local resolutions in the underlying regions, 2) Fictitious Boundary Method so to filter out small scale geometrical features and correspondingly relax the requirements put on coarse meshes, 3) robust L2 projection based interpolation method allowing the simultaneous simulation of several mutually coupled transport equations on a sequence of several independently adapted meshes. The developed methods are embedded into the 3D FEM-multigrid based parallel CFD solver FeatFlow (www.featflow.de) being extended with Algebraic Flux correction stabilization methods guaranteeing the proper treatment of steep gradients occurring during the simulations. The numerical examples demonstrated on a wide variety of applications cover chemical reaction related flow problems in the framework of microreactors such as the T-micromixer or the superfocus mixer, and flow problems involving moving (free and/or solid) interfaces such as extrusion processes, particulate or gas/liquid liquid/liquid flows.

[1] Münster, R.; Mierka, O.; Turek, S.: Finite element-fictitious boundary methods (FEM-FBM) for particulate flow, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 69, 294-313, 2012

[2] Mierka, O.; Damanik, H.; Turek, S.: Numerical simulation of monodisperse droplet generation in nozzles, Academic Press, Proceedings of SPRAY 2012 10. Workshop über Sprays, 2012.

[3] Mierka, O.; Theis, T.; Herken, T.; Turek, S.; Schöppner, V.; Platte, F. Mesh Deformation Based Finite Element - Fictitious Boundary Method (FEM-FBM) for the Simulation of Twin-screw Extruders, TU Dortmund, 509, 2014.

Bestimmung des Deformationsverhaltens von Einzelpartikeln und dessen Einfluss auf die Festigkeit von Tabletten

*I. Krautstrunk^{1,2}, T. Rook¹, D. Sleziona^{1,3}, J.H. Finke^{1,2}, E. John³, M. Juhnke³,
A. Kwade^{1,2}*

¹ *Institut für Partikeltechnik, TU Braunschweig, Deutschland*

² *Zentrum für Pharmaverfahrenstechnik (PVZ), TU Braunschweig, Deutschland*

³ *Novartis Pharma AG, Basel, Schweiz*

Tabletten sind die am weitesten verbreitete Arzneiform in der pharmazeutischen Industrie. Ihre mechanischen und strukturellen Eigenschaften und die damit verbundene Funktionalität werden durch eine Vielzahl von Prozess- und Materialparametern beeinflusst. Aufgrund der hohen Komplexität und des fehlenden Prozessverständnisses erfolgt die Formulierungs- und Prozessentwicklung bis heute auf empirischem Weg.

Eine Verbesserung des Prozessverständnisses soll in dieser Arbeit durch die Untersuchung des Deformationsverhaltens von Einzelpartikeln der Ausgangspulver erreicht werden. Dieses wirkt sich sowohl auf die Verdichtung des Partikelbetts als auch auf die Ausbildung von Haftkräften zwischen den Einzelpartikeln aus und beeinflusst somit die Festigkeit der finalen Tablette. Verformen sich die Partikel während der Kompaktierung plastisch, führt dies zur Vergrößerung der Kontaktfläche zwischen den angrenzenden Partikeln, wodurch die insgesamt wirkende Van-der-Waals-Haftkraft zunimmt [1]. Bei sprödem Deformationsverhalten hingegen steigt die Bindungsanzahl bedingt durch den Bruch von Partikeln an. Das Deformationsverhalten von Einzelpartikeln wird häufig ausgehend von dem Verhalten des gesamten Partikelbetts während der Kompaktierung, zum Beispiel unter Verwendung des Modells von Heckel, abgeleitet.

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Nanoindentation zur direkten Bestimmung des Deformationsverhaltens von Einzelpartikeln unterschiedlicher pharmazeutischer Hilfsstoffe genutzt. Die gewonnenen Erkenntnisse werden für den Vergleich mit dem durch die Kompaktierung des Partikelbetts abgeleiteten Deformationsverhalten verwendet und deren Einfluss auf die Tablettenfestigkeit betrachtet. Des Weiteren wird für Mikrokristalline Cellulose der Einfluss der Partikelgröße auf das Deformationsverhalten und die Tablettenfestigkeit untersucht. Die Ergebnisse zeigen, dass die Tablettenfestigkeit unterhalb eines Pressdrucks von 100 MPa unabhängig von der Partikelgröße ist. Zu erwarten war jedoch die für höhere Pressdrücke gefundene Zunahme der Tablettenfestigkeit mit abnehmender Partikelgröße. An dieser Stelle werden die zuvor gewonnenen Erkenntnisse über das Deformationsverhalten der Einzelpartikel zur Verbesserung des Verständnisses der Zusammenhänge genutzt.

Die gewonnenen Erkenntnisse tragen auch zur Diskriminierung der unterschiedlichen Phasen während der Kompaktierung bei.

[1] H. Rumpf, K. Sommer und K. Steier (1976): Mechanismen der Haftkraftverstärkung bei der Partikelhaftung durch plastisches Verformen, Sintern und viskoelastisches Fließen, Chem.-Ing.-Tech. 48, S. 300-307

Beitrag zur Brikettierung und Pyrolyse von Braunkohlengranulaten für die stoffliche Nutzung

E. Fehse¹, H.-W. Schröder¹, J.-U. Repke¹, M. Scheller², M. Spöttle²;

*¹TU Bergakademie Freiberg, Institut für Thermische Verfahrenstechnik, Umwelt- und Naturstoff-
verfahrenstechnik, 09596 Freiberg;*

²ThyssenKrupp Industrial Solutions, Friedrich-Uhde-Straße 15, 44141 Dortmund

Für die Herstellung von Stückkoks aus Braunkohle ist die vorherige Brikettierung der Braunkohle ein unabdingbarer Verfahrensschritt. Sollen diese Kokse z. B. auch als Einsatzgut für metallurgische Prozesse analog zum Steinkohlenkoks dienen, sind hohe Qualitätsanforderungen zu erfüllen. Hierzu zählt u. a. die Festigkeit der Kokse. Die wichtigsten Verfahrensschritte zur Herstellung eines Braunkohlen-Stückkokes sind die Aufbereitung der Braunkohle, die Brikettierung der Braunkohle und die anschließende schonende Pyrolyse des Briketts. Mit dem klassischen Verfahren zur Herstellung von Braunkohlen-Hochtemperatur-Koks kann durch die Verpressung der durch Schlag und Prall zerkleinerten Braunkohle und die anschließende Pyrolyse nur eine eingeschränkte Festigkeit der Briketts und Kokse erreicht werden. Einen entscheidenden Einfluss auf die Festigkeit der Pyrolysebriketts und insbesondere der Kokse hat die Aufbereitung der Roh- bzw. Trockenkohle. Systematische Studien zur Agglomeration von Kohlen der Nassaufschlussmahlung oder von vorgranuliertem Trockenbraunkohlenstaub haben gezeigt, dass eine hohe Feinheit der Kohle einen positiven Effekt auf die Brikett- und Koksfestigkeit ausübt. Diese neuen Verfahrensansätze konnten z. T. bereits in den halbertechnischen Maßstab überführt werden, weisen jedoch einen erheblichen verfahrenstechnischen Aufwand auf.

Demgegenüber stellt die Granulierung von feuchtzerkleinerter Rohbraunkohle und die anschließende Brikettierung der Trockengranulate eine effiziente Alternative dar. In systematischen Untersuchungen wurden eine Lausitzer Weichbraunkohle (WBK) und eine indonesische Hartbraunkohle (HBK) sowohl durch Pressagglomeration als auch durch Mischeragglomeration granuliert. Hierdurch können z. B. die Brikett- und vor allem die Koksdruckfestigkeit der WBK von bisher max. 20 MPa auf bis zu 70 MPa um das 3,5-fache gesteigert werden. Die Abriebfestigkeit erhöht sich von 90 % auf > 98 %. Auch für die HBK kann die Koksdruckfestigkeit bereits um das 1,5 von ca. 70 MPa auf bis zu 110 MPa gesteigert werden. Die Abriebfestigkeit übersteigt ebenso 98 %. Entgegen den Erkenntnissen zur Verdichtung „klassisch“ zerkleinerter Braunkohlen konnte für die Korngrößenverteilung der Granulate der Mischeragglomeration kein Einfluss auf die Brikett- und Koksqualität nachgewiesen werden. Als viel entscheidender stellten sich die Granulierparameter (z. B. Dampfanteil, Wirblerumfangsgeschwindigkeit) heraus. Für die Briketts und Kokse aus Granulaten der Pressagglomeration zeigte sich, dass die Festigkeit mit zunehmender Rohdichte der Granulate zunimmt. Um die gewonnenen Erkenntnisse besser zu durchdringen wird in einem nächsten Schritt das Verdichtungsverhalten der Braunkohlen(-granulate) auf einer Universalprüfmaschine untersucht.

Prozessdynamik kontinuierlicher Agglomerationsprozesse mit externer Produktklassierung

A. Bück¹, M. Wegner¹, C. Neugebauer², S. Palis², E. Tsotsas¹

1 - Thermische Verfahrenstechnik/NaWiTec, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 2- Automatisierungstechnik/Modellbildung, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Agglomeration ist ein vielfach eingesetzter Prozess zur Erzeugung von Produktpartikeln durch den Zusammenschluss von mindestens zwei (Primär-)Partikeln. Der Zusammenschluss der Ausgangspartikel zu Agglomeraten kann auf verschiedenen Wegen erfolgen, z.B. durch die Zugabe von Bindemitteln oder über rein thermische Prozesse (z.B. Sinterung oder Glasübergang). In vielen Anwendungen wird ein in Flüssigkeit befindliches Bindemittel eingesprüht, das zunächst zur Flüssigkeitsbrückenbildung führt, aus denen sich nach einem Trocknungsschritt Feststoffbrücken ausbilden. Typische Apparate sind neben Wirbelschichten auch Tellergranulatoren, rotierende Trommeln, High- und Low-shear-Mischer, sowie Extruder. Um einen zeitlich konstanten Produktdurchsatz mit konstanten Produkteigenschaften zu realisieren, bietet sich der kontinuierliche Betrieb in einem stationären Zustand an.

Um gestellte Produkthanforderungen zu erfüllen, muss für gewöhnlich das Produkt am Auslass des Apparates klassiert werden, z.B. in Unterkorn, Produkt und Oberkorn. Während das Unterkorn direkt in den Apparat zurückgeführt wird, wird das Oberkorn zumeist in einer Mühle zerkleinert und dann zurückgeführt. Klassier- und Mahleinrichtung bestimmen damit wesentlich die Produktpartikelgröße.

In vorangegangenen Studien zur Wirbelschichtsprühgranulation (schichtweises Wachstum) wurde theoretisch und experimentell bestimmt, unter welchen Bedingungen überhaupt ein stationärer Zustand erreicht werden kann, anderenfalls kann es zum Auftreten von Oszillationen im Produktspektrum oder zum Zusammenbruch des Prozesses kommen.

Für Agglomerationsprozesse liegen solche Informationen bisher nicht vor. Daher wird in diesem Beitrag an Hand eines hinreichend generischen Prozessmodells das unterschiedliche dynamische und stationäre Verhalten des Agglomerationsprozesses in Abhängigkeit der Prozesskinetik und der Parameter der externen Sieb-Mahl-Kreislaufes diskutiert. Daraus wird eine Stabilitätskarte abgeleitet, die für die Auslegung und den Betrieb solcher Prozesse genutzt werden kann.

Diese Forschungsarbeit wurde von der Max-Buchner-Forschungstiftung unterstützt.

OpenLB – Strömungssimulation und -kontrolle für verfahrenstechnische Anwendungen

*Willy Dörfler, Thomas Henn, Mathias J. Krause, Marie-Luise Maier, Albert Mink,
Hermann Nirschl, Gudrun Thäter, Robin Trunk*

Karlsruhe Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, Deutschland

Viele praxisrelevante Probleme in der Verfahrenstechnik und Biotechnologie können mit Hilfe heutiger Mess- und numerischer Simulationstechnik, trotz erheblicher Fortschritte in beiden Gebieten, nur unzulänglich oder überhaupt nicht gelöst werden. Dies gilt besonders für die Erfassung zeitabhängiger Strömungen in komplexen Strömungsgebieten, in denen die Geometrie durch komplizierte biologische, chemische oder mechanische Vorgänge an der Strömungsgrenzfläche mit dem Strömungsverhalten gekoppelt ist. In diesem Bereich finden sich eine Reihe unbeantworteter grundlegender Fragen, für deren Beantwortung nur ein kombiniertes Verfahren von Mess- und Simulationstechnik zielführend ist. Dazu sind inverse Strömungsprobleme zu lösen, die bis heute, nicht zuletzt aufgrund der enormen einhergehenden Rechenkosten, nur ansatzweise erforscht sind und für die momentan kaum kommerzielle Software verfügbar ist. Im Vortrag wird ein ganzheitlicher Simulations- und Optimierungsansatz basierend auf *Lattice-Boltzmann-Methoden* und der Entwicklung umfangreicher paralleler Software vorgestellt. Eine Demonstration der *Open Source* Bibliothek *OpenLB* (www.openlb.net) erfolgt anhand mehrerer verfahrenstechnischer Anwendungen, wie ein Partikelabscheider mit turbulenter Partikelströmung, Magnetseparation mit Adsorption, Algenwachstum im Photobioreaktor oder die Auslegung eines Sicherheitsventils. Im Mittelpunkt steht schließlich ein kombinierter Simulations- und Messansatz, bei dem die Möglichkeiten aktueller 3D-Fluss MRI-Messtechnik durch Simulationstechnik verbessert und grundlegend erweitert werden.

Scale-Up of an HME Process Supported by 3D SPH and 1D Mechanistic Modelling

Josip Matic^{,**}, Andreas Eitzlmayr^{*}, Johannes Khinast^{*,**}*

**Institute for Process and Particle Engineering, Graz University of Technology, Inffeldgasse 13/III, 8010 Graz, Austria*

***Research Centre Pharmaceutical Engineering GmbH, Inffeldgasse 13/III, 8010 Graz, Austria*

Email for correspondence: khinast@tugraz.at

Introduction

The extrusion process, using twin-screw extruders (TSE) is well established in the polymer processing industry. Using the TSE, different continuous processes were developed, where the Hot-melt extrusion process (HME) is increasingly interesting for the pharmaceutical industry. The potential to increase the bioavailability of poorly soluble drugs, the steady product quality of a continuous process, the increased efficiency as well as a reduction of operational costs led to the specific interest of pharmaceutical industries in HME. In order to effectively predict the impact of screw configuration and process parameters on the HME process, an improved understanding of flow and mixing in individual screw elements as well as in the entire extrusion process is of high interest.

In our previous work, we showed that the Lagrangian based Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) simulation method provides significant benefits for extruder screw simulations. In contrast to Computational Fluid Dynamics (CFD), SPH inherently accounts for convective mixing and free-surface flows, allowing a detailed investigation of flow and mixing in fully filled and partially filled extruder screw elements. In order to provide correct boundary conditions for the complex screw geometries, a novel wall interaction method was developed.

Methodology

Due to the high computational expense of spatially resolved flow modeling, simplified modeling approaches are required for modeling of the entire extrusion processes. One-dimensional (1D) models consider the spatial dependencies along the screw axis and thus, provide the benefit of comparably low computational costs, suitable for the industrial use in design, optimization and scale-up of extruders. Following the idea of a continuous stirred tank reactor cascade with back-mixing, a 1D extruder model was developed in order to predict profiles of filling ratio, pressure, specific energy input, residence time distribution, material temperature and mixedness along the screw axis. Due to its strong simplifications, the 1D approach requires pre-computed data about flow and mixing in individual screw elements, which were obtained from the spatially resolved SPH model. This combination of the three-dimensional (3D) SPH approach for the detailed investigation of individual extruder screw elements and the 1D approach for the description of process variables along entire screw configurations results in a comprehensive tool, which increases the process understanding, supports design, optimization and scale-up, and reduces the need for experiments.

Results

An extruder scale-up scenario was analyzed based on proposed scaling laws for process parameters as throughput and screw speed which result in similar conditions at different length scales. Our results show the impact of the extruder dimensions on filling ratio, pressure, specific energy input, temperature distribution and residence time distribution.

Einfluss von Partikelkollisionen auf die Erosion in einem Rohrkrümmer: Berechnungen mit dem Euler/Lagrange-Verfahren

M. Sommerfeld^{1,2} und S. Lain²

¹Zentrum für Ingenieurwissenschaften, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, D-06099 Halle (Saale), Deutschland; e-mail: martin.sommerfeld@iw.uni-halle.de

²Universidad Autónoma de Occidente, Department of Mechanical Engineering, Cali, Kolumbien; e-mail: santiago.lain@gmail.com

Die numerische Berechnung der pneumatischen Förderung mit dem Euler/Lagrange-Verfahren konnte in der Vergangenheit sehr erfolgreich durchgeführt werden (Lain and Sommerfeld 2012, 2013; Sommerfeld and Lain 2015) und es ergab sich für verschiedene Rohrkonfigurationen eine sehr gute Übereinstimmung mit Messungen (Huber und Sommerfeld 1994, 1998). Bei diesen Berechnungen wurden alle relevanten Transportmechanismen für die Partikelphase berücksichtigt; transversale Auftriebskräfte, Partikelrotation, Partikelkollisionen mit rauen Wänden und Kollisionen zwischen Partikeln.

Ein großes Problem, z.B. bei der Öl- und Gasförderung, ist nach wie vor die Erosion der Rohrleitungen aufgrund des Partikelaufralls, obwohl dieses Problem seit vielen Jahrzehnten intensiv untersucht wird. Besonders in Verbindung mit numerischen Berechnungen der partikelbeladenen Strömung wurden in der Vergangenheit sehr viele Erosionsmodelle vorgeschlagen und angewandt (siehe z.B. Njobuenwu and Fairweather 2012 und Parsi et al. 2014). Die Hauptursache hierfür liegt in der Komplexität der bei einer Partikel-Wandkollision zu beobachtenden Erosionserscheinungen, welche neben der Eigenschaft des Wand- und Partikelmaterials (Materialeigenschaften und Partikelform) von der Aufprallgeschwindigkeit und dem Auftreffwinkel abhängen. So ist zum Beispiel bei plastischen Wandmaterialien eher ein Herausschaben und bei spröden Materialien eher ein Spröbruch aufgrund wiederholtem Partikelaufrall zu beobachten. All diese Phänomene müssen bei der Modellierung berücksichtigt werden. Für die Berechnung der Partikelerosion in einem Rohrkrümmer wurde daher ein erst „kürzlich“ von Oka et al. (2005) vorgeschlagenes Modell eingesetzt, welchem nachgesagt wird, dass es am allgemeingültigsten ist und alle Einflussparameter beinhaltet. Die volumetrische Erosionsrate (mm^3/kg Partikelmaterial) ist gegeben durch:

$$E_v = K(a \text{ Hv})^{b \cdot k_1} \left(\frac{U_p}{U_{p\text{ref}}} \right)^{k_2} \left(\frac{D_p}{D_{p\text{ref}}} \right)^{k_3} \cdot (\sin \alpha)^{n_1} [1 + \text{Hv}(1 - \sin \alpha)]^{n_2}$$

Hierbei berücksichtigt K die Partikeleigenschaften, der Term $(a H_v)^{b \cdot k_1}$ die Eigenschaften des Wandmaterials (H_v : Vickershärte), der Term mit U_p die Aufprallgeschwindigkeit mit $k_2 \sim 2$, der Term mit D_p die Partikelgröße (wobei $k_3 \sim 0,2$ ein nicht nachvollziehbarer Wert ist) und die Terme mit α die Abhängigkeit vom Auftreffwinkel. Der Term $(\sin \alpha)$ berücksichtigt Sprödbbruch und $[\dots]^{n_2}$ die abschälende Wirkung bei eher flachem Aufprall.

Als Grundlage für die Erosionsberechnungen im Rohrkrümmer wurde ein $D = 150$ mm Stahlrohr betrachtet, welches aus einem 5 m horizontalem Teil, einem Rohrkrümmer mit $R_K = 2,54 \cdot D$ und einem 5 m vertikalem Rohrelement besteht (Huber und Sommerfeld 1998, Lain and Sommerfeld 2013). Die mittlere Fördergeschwindigkeit betrug 27 m/s. Die Ergebnisse der Erosionsberechnungen sind in Abb. 1 und 2 zusammengefasst, wobei die Zweiwegekopplung (2-way) den Einfluss der Partikel auf die Gasphase (Impulsaustausch und Turbulenzbeeinflussung) beschreibt und der Terminus 4-way die zusätzliche Berücksichtigung von Partikelkollisionen beinhaltet. Die Ergebnisse und Fragestellungen lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Kleinere Partikel bewirken eine deutlich geringere Erosion.
- Warum resultiert die Berücksichtigung von Partikelkollisionen in einer Reduktion der Erosion, obwohl die Wandkollisionsfrequenz steigt?
- Warum reduziert sich die normierte Erosionstiefe mit steigender Feststoffbeladung η ?

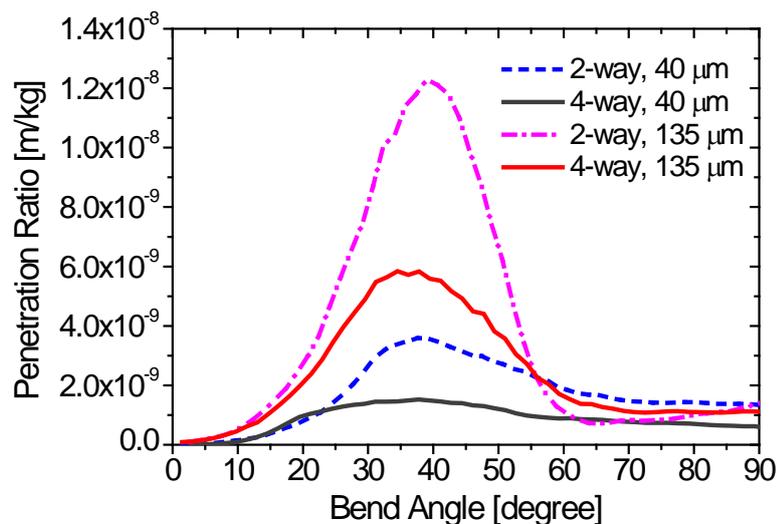


Abb. 1 Normierte Erosionstiefe für einen schmalen 5 mm breiten Streifen entlang der Außenwand des Krümmers, Einfluss der Partikelgröße (monodispers) und der Kopplung zwischen den Phasen ($U_{av} = 27$ m/s, $\eta = 0,3$)

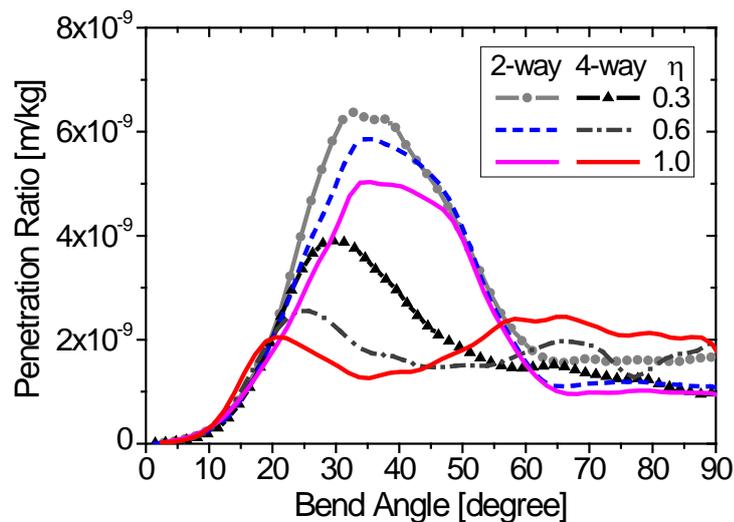


Abb 2 Normierte Erosionstiefe für einen schmalen 5 mm breiten Streifen entlang der Außenwand des Krümmers, Einfluss der Feststoffbeladung ($U_{av} = 27$ m/s, Größenverteilung 15 – 85 μ m).

Literatur

- Huber, N. and Sommerfeld, M.: Characterization of the cross-sectional particle concentration distribution in pneumatic conveying systems. *Powder Technology*, **79**, 191-210 (1994)
- Huber, N. and Sommerfeld, M.: Modelling and numerical calculation of dilute-phase pneumatic conveying in pipe systems. *Powder Technology*, **99**, 90-101 (1998)
- Lain, S. and Sommerfeld, M.: Numerical calculation of pneumatic conveying in horizontal channels and pipes: Detailed analysis of conveying behaviour. *Int. J. of Multiphase Flow*, **39**, 105–120 (2012)
- Lain, S. and Sommerfeld, M.: Characterisation of pneumatic conveying systems using the Euler/Lagrange approach. *Powder Technology*, **235**, 764-782 (2013)
- Njobuenwu, D. O. and Fairweather, M.: Modelling of pipe bend erosion by dilute particle suspensions. *Computers and Chemical Engineering* **42**, 235-247 (2012)
- Oka, Y., Okamura, K., Yoshida, T. Practical estimation of erosion damage caused by solid particle impact: part 1: effects of impact parameters on a predictive equation. *Wear*, **259**, 95 – 101 (2005).
- Parsi, M., Najmi, K., Najafifard, F., Hassani, S., McLaury, B. S., Shirazi, S. A.: A comprehensive review of solid particle erosion modeling for oil and gas wells and pipelines applications. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, **21**, 850-873 (2014)
- Sommerfeld, M. and Laín S.: Parameters influencing dilute-phase pneumatic conveying through pipe systems: A computational study by the Euler/Lagrange approach. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, **93**, 1-17 (2015)

Feuchtgranulierung im Doppelschneckengranulierer – Einfluss von Füllgrad und Verweilzeit auf die Produktqualität

Robin Meier¹, Klaus-Peter Moll², Markus Krumme², Peter Kleinebudde¹

¹Institut für Pharmazeutische Technologie und Biopharmazie, Heinrich-Heine-Universität, Düsseldorf, Deutschland, ²Novartis AG, Basel, Schweiz

Viele pharmazeutische Firmen arbeiten an der Doppelschneckengranulation, da diese eine einfache Möglichkeit darstellt, Feuchtgranulation mit anschließender Weiterverarbeitung der Granulate kontinuierlich durchzuführen.

In Vorversuchen zeigte sich, dass die Eigenschaften von Granulaten und daraus hergestellten Tabletten derselben Formulierung stark voneinander abwichen, wenn Drehzahl des Extruders oder Dosieraten von Pulver und Wasser verändert wurden. Da diese beiden Prozessparameter direkten Einfluss auf den Füllgrad des Extruders und die Verweilzeit des Guts im Extruder haben, wurde der Einfluss beider Größen auf resultierende Produkteigenschaften systematisch untersucht. Die Formulierung bestand zu 89,8 % aus Hydrochlorothiazid, zu 10 % aus Carboxymethylstärke-Natrium und zu 0,2 % aus hochdisperssem Siliciumdioxid.

Die im Rahmen dieser Versuche verwendeten Prozessbedingungen erlaubten eine Einteilung der Granulate, produziert bei niedrigem, mittlerem und hohem Füllgrad. Sowohl durch einen niedrigen als auch einen hohen Füllgrad des Extruders wurden schlechtere Granulate hergestellt als bei einem mittleren Füllgrad. Dies äußerte sich in breiten, teilweise bimodalen Partikelgrößenverteilungen und somit geringeren Ausbeuten für eine anschließende Tablettierung. Auch die Tabletten aus diesen Granulatchargen zeigten im Vergleich niedrigere Festigkeiten (1,5-2 MPa) und längere Zerfallszeiten (bis zu 1600 s). Besonders hohe und niedrige Füllgrade führten zu langen Verweilzeiten. Bei mittleren Füllgraden haben kurze Verweilzeiten einen positiven Effekt auf die resultierenden Granulat- und Tabletteneigenschaften: monomodale Partikelgrößenverteilungen der Granulate und Tabletten mit größerer Festigkeit (bis 2,5 MPa) und schnellerem Zerfall (unter ca. 600 s).

Der Zusammenhang von Füllgrad und Verweilzeit wird weiter untersucht, um optimale Bereiche für die Herstellung von Granulaten zu finden.

Strukturierung von Oberflächen mittels feindisperser Partikeln zur Verbesserung von tribologischen Eigenschaften

Sebastian Buhl, Kilian Schmidt, Sergiy Antonyuk, Siegfried Ripperger

*Technische Universität Kaiserslautern, Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik,
Kaiserslautern, Deutschland*

Feindisperse Partikel können mittels Kaltgasspritzverfahrens auf Oberflächen von Bauteilen fixiert werden. Im Vergleich zu anderen thermischen Spritzverfahren werden beim Kaltgasspritzen relativ geringe Temperaturen von ca. 300-1000 °C eingesetzt. Dadurch können ungewünschte Veränderungen des Werkstoffgefüges minimiert werden. Um dennoch eine feste Partikelbindung an Oberflächen beim Stoß zu erreichen, werden die Partikel mittels Lavaldüsen auf bis zu 800 m/s beschleunigt. Im Gegensatz zu bisherigen Arbeiten, ist es das Ziel dieser Arbeit einzelne Partikel auf Oberflächen zu fixieren, um deren Einfluss auf die tribologischen und adhäsiven Eigenschaften sowie die Interaktion mit lebenden Organismen zu untersuchen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden flache Titanoberflächen und zylindrische Kettenbolzen erfolgreich mikrostrukturiert. Die erzeugten Oberflächen werden mittels REM/EDX, SFM XPS und FIB-Schnitten charakterisiert (Abb. 1). Die Partikelstoßgeschwindigkeiten und -temperaturen wurden mit CFD-Simulationen der Lavaldüse bestimmt. Zur Untersuchung der Mikrostrukturierung auf das tribologische Verhalten von Kettenbolzen, wurde der Reibungskoeffizient über 100 000 Zyklen von strukturierten und unstrukturierten Bolzen verglichen (Abb. 2).

Diese Arbeit wurde im Rahmen des SFB 926 „Morphologie der Bauteiloberflächen“ der DFG durchgeführt.

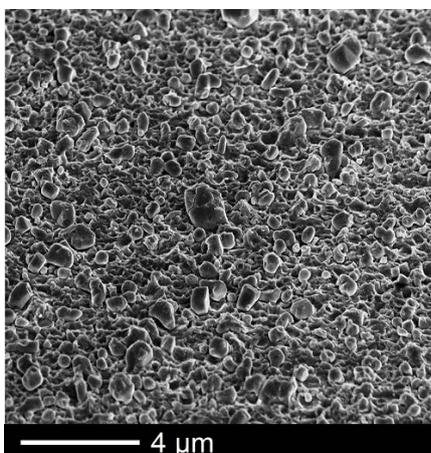


Abb. 1: Strukturierte Titanoberfläche mit TiO₂-Partikeln.

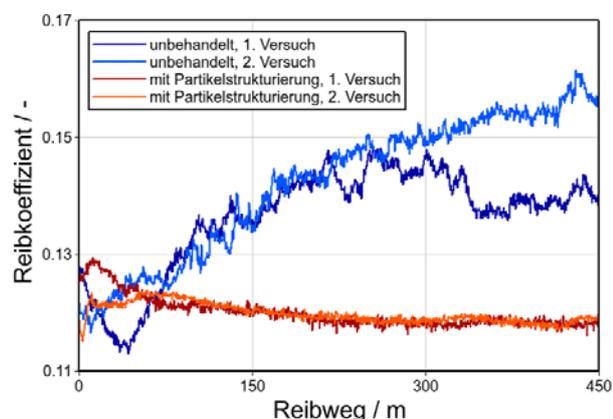


Abb. 2: Reibungskoeffizient von unstrukturierten Kettenbolzen (blau) zu strukturierten Bolzen (orange).

Einfluss verschiedener Prozess- und Materialparameter auf die Partikeldynamik in einem Sphäronisationsprozess

Dominik Weis¹, Markus Thommes², Sergiy Antonyuk¹

¹ Technische Universität Kaiserslautern,

Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik. Kaiserslautern, Deutschland

² Technische Universität Dortmund,

Lehrstuhl für Feststoffverfahrenstechnik. Dortmund, Deutschland

Sphärische Pellets mit einer engen Größenverteilung sind für viele pharmazeutische Anwendungen von großem Interesse. Zu deren Herstellung hat sich das Verfahren der Extrusion-Sphäronisation etabliert. Zylindrische Extrudate werden dabei in einem Sphäroniser, welcher aus einer rotierenden Bodenplatte (auch strukturierte Friktionsscheibe) und einer ruhenden Wand, welche die Prozesskammer umgibt, besteht, abgerundet. Diese Abrundung kann auf eine Vielzahl von Mechanismen zurückgeführt werden. Ein wichtiger Faktor der diese Rundungsmechanismen beeinflusst ist die Partikeldynamik, weshalb diese mithilfe der Diskreten-Elemente-Methode (DEM) für verschiedene Prozess- und Materialparameter simuliert wurde.

Zur realitätsnahen Beschreibung der Partikelinteraktionen wurden die Kontakteigenschaften der verwendeten MCC-Lactose Pellets in einachsigen Druckversuchen untersucht und mit einem geeigneten elastisch-plastischen Kontaktmodell beschrieben.

In diesem Beitrag wird der Einfluss verschiedener Prozess- und Materialparameter, wie z.B. Drehzahl der Scheibe oder Steifigkeit der Partikeln, auf die Partikelkinematik und -dynamik vorgestellt. Dabei liegt der Fokus insbesondere auf der Durchmischung des Haufwerks und den Stoßkräften bzw. Stoßraten der interpartikulären- sowie der Partikel-Wand Stöße.

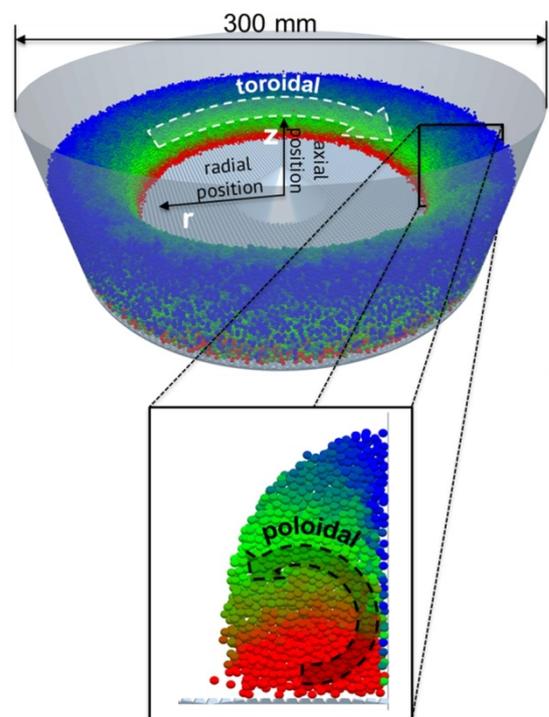


Abb. 1: DEM-Simulation der Partikeldynamik im Sphäroniser

Description of anisotropies in pharmaceutical tablets in DEM with an elasto-plastic hysteretic contact model

Ramon Cabiscol, Lutz Torbahn, Harald Zetzener and Arno Kwade

Institut für Partikeltechnik (iPAT)

Technische Universität Braunschweig (TUBS)

Volkmaroder Str. 5, 38104 Braunschweig (Germany)

e-mail: r.cabiscol@tu-braunschweig.de, webpage: <http://www.ipat.tu-bs.de/>

An uniaxial compaction process of powder materials generates a heterogeneous internal tablet structure. The pharmaceutical industry has a considerable interest on anisotropic behavior description; in particular, in the difference in strength and hardness between the parallel (axial) and perpendicular (radial) directions of tablets. These differences in mesoscopic properties are significant in order to characterize the macroscopic behavior of wearing processes that occur during transportation or coating. For this purpose we apply the Discrete Element Method (DEM), which is widely used to study the complex behavior of granular materials. In dynamic systems, it is suitable for identifying damaging processes produced in tablets or agglomerates and for quantifying its extent.

The aim of this work is the implementation of the elasto-plastic hysteretic Edinburgh Contact Model (ECM), for the description of the anisotropic behavior in final tablets. ECM is a nonlinear contact model based on the adhesive contacts between micron-sized particles. It takes into account the adhesion forces affected by the elasto-plastic contact deformation and the contact area. This study is placed in an intermediate step between some existing extremely idealized descriptions (with perfect spheres or no link with stress history of the sample) or studies which determine DEM model parameters at the single particle level, using microscopic techniques (e.g. AFM or nano-indentation).

On one hand, we perform the description of tablet's stiffness variations between radial and axial parts considering a description of tablet's granules with spheres. On the other hand, compacted tablets are characterized by means of micro-indentation and SEM imaging. From the micro-indentation and SEM imaging results, a clear decrease in plastic stiffness and surface coordination number is observed between tablet's center and edges. This mechanical characterization is functionalized and used as an input for the implementation of ECM. Therefore, calibration of loading and unloading stiffness as well as cohesive force is also performed.

Untersuchung der Fluidodynamik von zweiphasigen Strömungen in strukturierten Packungen mithilfe der CFD-Methoden

A. Olenberg, E.Y. Kenig

Universität Paderborn, Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik, Paderborn/Deutschland

Die CFD-Methode ist ein nützliches Tool, welches zur Auslegung und Optimierung von Trennapparaten und dem dazugehörigen Equipment genutzt werden kann. Dadurch können kostspielige Experimente reduziert und eine Vielzahl von Geometrieparametern untersucht werden. Insbesondere bei der Beschreibung von bewegten Phasengrenzflächen in diversen Strömungen (z.B. Filme, Rinnsale und Tropfen) ersetzen CFD-Simulationen zunehmend die experimentell aufwendigen Messmethoden.

In dieser Arbeit wurde die Fluidodynamik der flüssigen Phase in strukturierten Faltblattpackungen mit Hilfe von CFD-Simulationen untersucht. Die Simulationen wurden mit der kommerziellen Software Star-CCM+ durchgeführt, wobei die Volume-of-Fluid Methode zur Beschreibung der bewegten Phasengrenzfläche verwendet wurde. Die Simulationsgeometrie wurde sukzessiv weiterentwickelt. Es wurden zunächst zweidimensionale Filmströmungen auf geneigten Platten untersucht und schrittweise auf dreidimensionale Strömungen an repräsentativen Packungselementen erweitert. Das Flüssigkeitsprofil wurde für alle Simulationsgeometrien entsprechend der Nusselt'schen Wasserhauttheorie als gleichmäßig am Eintrittsrand vorgegeben.

Basierend auf den Simulationsergebnissen wurde der Einfluss der Flüssigkeitsbelastung auf den Hold-up und die Phasengrenzfläche bestimmt und anschließend ein Vergleich mit Literaturwerten durchgeführt. Es konnte eine qualitative Übereinstimmung mit Ergebnissen aus [1] aufgezeigt werden, vor allem im Hinblick auf die Bildung von Flüssigkeitszwickeln an den Kontaktpunkten der strukturierten Packungen.

In weiteren Simulationsstudien wurden die Grenzflächenspannung und der fest/flüssig Kontaktwinkel variiert. Dabei wurde vor allem die Änderung der Phasengrenzfläche in Abhängigkeit des Kontaktwinkels untersucht. Hier konnte simulativ gezeigt werden, dass sich bei kleineren Kontaktwinkeln größere Phasengrenzflächen bilden.

[1] Bradtmöller, C., Janzen, A., Crine, M., Toye, D., Kenig, E.Y., Scholl, S., Influence of viscosity on liquid flow inside structured packings, Ind. Eng. Chem. Res. 54: 2803-2815, 2015.

Untersuchung des Einflusses der Entlastungsbohrungen auf die Leistung einer Kreiselumwälzpumpe

Yujun Sha, Sergiy Antonyuk, Siegfried Ripperger

Technische Universität Kaiserslautern, Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik.

Kaiserslautern, Deutschland

Umwälzpumpen werden in der Regel verwendet, um Wasser bei hohen Temperaturen und Drücken in Systemen für Kraftwerkskessel zu pumpen. Wegen des Hochdrucks (> 100 bar) und den daraus resultierenden Axialkräften, ist das Abdichten der Pumpenwelle äußerst komplex. Da die axiale Belastung generell durch die Axiallager getragen wird, sind diese ein fragiler Teil der Pumpe. In einer einstufigen Kreiselpumpe kann der Ausgleich des Axialschubs durch Entlastungsbohrungen im Laufrad erreicht werden. Mit der nach innen gerichteten Strömung, die durch die Entlastungsbohrungen vom druckseitigen Radseitenraum ins Laufradströmungsgebiet fließt, wird ein Drehimpuls in den druckseitigen Radseitenraum eingebracht, der die örtliche Winkelgeschwindigkeit erhöht und damit den statischen Druck auf die druckseitigen Laufraddeckscheibe reduziert. In diesem Beitrag wurde der Einfluss der Entlastungsbohrungen auf die Pumpenleistung untersucht. Hierfür wurden 3D CFD-Simulationen für eine Kesselumwälzpumpe mit und ohne Entlastungsbohrungen im Laufrad durchgeführt. Die Simulationsergebnisse wurden mit den entsprechenden Messungen validiert. Durch die simulativen und experimentellen Untersuchungen konnte gezeigt werden, dass der Axialschub mit Hilfe von optimierten Entlastungsbohrungen, hinsichtlich Größe und Position, über zehn Prozent verringert werden kann (Abb. 1). Dabei ändern sich die Förderhöhe und der Wirkungsgrad der Pumpe nicht merklich (Abb. 1). Das Verhältnis der von Entlastungsbohrungen verursachten Leckage zum Förderstrom liegt je nach dem Förderstrom im Bereich von 1% bis 3%.

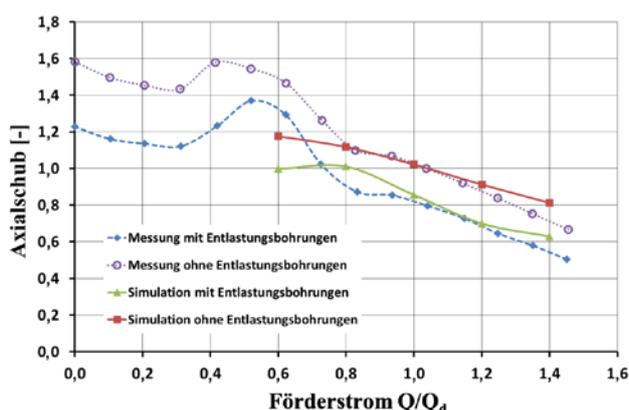


Abb. 1: Vergleich der simulativen und experimentellen Ergebnisse für den auftretenden Axialschub auf das Pumpenlaufrad mit und ohne Entlastungsbohrungen

Dynamische integrale Prozessmodellierung von Elektroabscheidern

Sören Sander, Stiftung Institut für Werkstofftechnik, Bremen/Deutschland;

*Udo Fritsching, Universität Bremen, Stiftung Institut für Werkstofftechnik,
Bremen/Deutschland;*

Bei der Aufreinigung von Abgasen aus industriellen Prozessen kennzeichnet der Restgehalt an partikulärem Material ein wichtiges Qualitätsmerkmal. Zur Intensivierung der Abscheidung kommen in vielen Anwendungen Elektroabscheider zum Einsatz, welche die Partikeltrennung von der Gasphase durch Aufbringen von elektrischen Feldkräften intensivieren. Partikelgrößenverteilungsabhängige Abscheidemodell wurden hierfür über die letzten Jahre entwickelt und verfeinert. Diesen Modellen liegen Annahmen und geometrische Vereinfachungen zu Grunde, weshalb hochauflösende CFD-Modelle in den letzten Jahren zunehmend in den Fokus der Forschung und Industrie gerückt sind. Dynamiken im Partikelschichtaufbau an den Abscheideelektroden und der Wiedereintritt von Partikeln in den Gasstrom sollen hierbei in die Simulationsmodelle eingeschlossen werden.

Die Wechselwirkungen zwischen dem elektrischen Feld, der kontinuierlichen Phase und den Partikeln werden in einem Euler-Lagrange Modell in OpenFOAM implementiert. Zur Modellvalidierung werden Testfälle aus der Literatur herangezogen. Außerdem erfolgt ein Vergleich von experimentell ermittelten Abscheidekurven mit den Simulationen und der Theorie. Die 2D-Simulation liefert vergleichbare Abscheideraten mit der Theorie. Im Bereich submikroner Partikeln wird im Experiment jedoch eine deutlich höhere Effizienz erreicht, da kleinere Partikeln agglomerieren und damit der Abscheidecharakteristik großer Partikeln folgen. Ein weiterer Aspekt betrifft die Schichtbildung in Abscheider und das Ablösen von Partikeln an der Wandoberfläche. Da die Schichtstruktur sich mit der Lauflänge des Abscheiders verändert, beeinflussen verschiedene Partikelgrößen und Stoffe den Abscheideort eines Partikels. So werden in erster Linie große Partikeln und Agglomerate wieder aus der Schicht gelöst, da diese geringere Bindungskräfte aufweisen.

Numerische Optimierung eines mehrstufigen Rührkessels

Thomas Eppinger, CD-adapco, Nürnberg, Germany

Ashish Newale, Yuvraj Dewan, Ravindra Aglave, CD-adapco, Melville, USA

Ein- und mehrstufige Rührkessel wurden in den letzten Jahrzehnten ausführlich experimentell als auch numerisch untersucht. Dabei wurde festgestellt, dass auch kleine Änderungen der geometrischen Abmessungen, Einbauten oder die Lage der Dosierstellen zu deutlichen Abweichungen des Betriebsverhaltens führen können. CFD Simulationen stellen hier eine kostengünstige und schnelle Alternative zu aufwändigen experimentellen Untersuchungen dar. Um ein optimales Betriebsverhalten zu erzielen, kann meist auf Grund der Vielzahl an beeinflussenden Parameter nicht der gesamte Designspace innerhalb eines bestimmten Zeitrahmens untersucht werden, so dass ein geeignetes Optimierverfahren gewählt werden muss. In diesem Beitrag wird mit dem kommerziellen CFD-Programm STAR-CCM+ und Optimate+/HEEDS ein mehrstufiger Rührkessel geometrisch bezüglich Leistungseintrag und Mischzeit optimiert. Dabei werden sieben Designparameter wie Anzahl der Rührorgane und Stromstörer, Blattgeometrie und geometrischen Abmessungen variiert, was insgesamt mehr als 8 Millionen Varianten entspricht. Der hybride Optimierungsalgorithmus von Optimate+/HEEDS ermöglicht durch eine effiziente Verwendung lokaler und globaler Suchstrategien mit einigen wenigen Simulationen die Erstellung einer Paretofront, so dass je nach Anforderung das bestmögliche Design ausgewählt werden kann

Influence of hydrophobic/hydrophilic surfaces on gas/liquid membrane separation

K.M. Dyrda¹, K. Haas-Santo¹, R. Dittmeyer¹

*¹Karlsruher Institute für Technologie, Institut für Mikroverfahrenstechnik (IMVT),
Eggenstein-Leopodshafen, D*

Portable micro direct methanol fuel cells (DMFC) are of great interest as source for electricity for small electric devices. During the operation of the DMFC CO₂ is formed by the reaction of methanol and water at the anode side of the fuel cell generating a two phase flow. This two phase flow can reduce the performance of the DMFC by lining the anode surface with CO₂ bubbles decreasing the cell voltage. The non-used fuel will be recycled; therefore CO₂ gas has to be removed from the fuel cycle. The removal of the gas can be established by the use of a micro contactor using hydrophobic membranes as separation devices.

Here we studied the influence of membrane and wall surface properties on the gas/liquid two-phase flow pattern and the efficiency of the separation of CO₂ from a methanol/water mixture. A micro membrane contactor was designed and equipped with different commercially available hydrophobic membranes, while the surface properties of the micro channel walls were changed by hydrophilic coatings in two different settings: all three micro channel walls or just the top of the micro channel were coated, the fourth wall being the membrane.

The results show a clear influence of the membrane on the nature of the two-phase flow: the higher the membrane's contact angle, the more it tends to promote a continuous flow like transition or corner flows instead of a slug flow.

A pronounced influence of the hydrophilicity of the channel walls was observed during gas/liquid separation. Moreover, the experiments show not only that increasing the surface wettability increases the separation efficiency but also that it is possible to further improve the gas separation by using heterogeneous walls with the most hydrophilic surface opposite to the membrane. Figure 1 confirms that this arrangement results in increased separation compared to completely coated channel. This effect can be explained by a more favourable liquid distribution in the channel.

The results show that the surface properties, especially the contact angle, of the micro channel walls and membrane impacts the nature of gas/liquid two-phase flow and therefore the performance of a micro contactor.

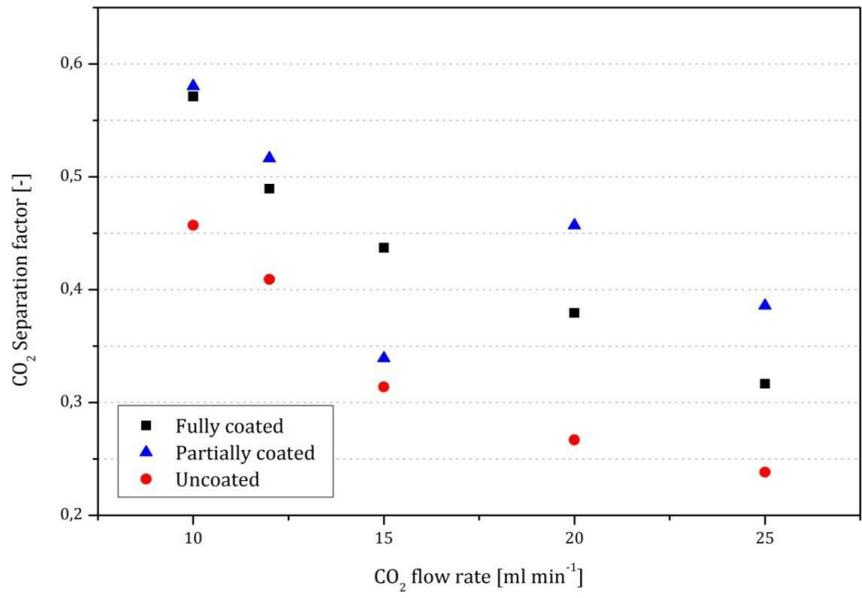


Figure 1: Comparison of the separation factor of CO₂ from methanol/water for uncoated, partially coated and fully coated micro channels.