

MICHAŁ DYLAĞ*, JERZY ROSIŃSKI**

ANWENDUNG DER MOMENTENMETHODE ZUR SCHNELLEN ABSCHÄTZUNG DER SICH EINSTELLENDEN FLOCKENGRÖSSENVERTEILUNG

ZASTOSOWANIE METODY MOMENTÓW DO SZYBKIEGO OSZACOWANIA ROZKŁADÓW WIELKOŚCI POWSTAJĄCYCH FLOKUŁ

Zusammenfassung

In der Arbeit ist das Ergebnis der Vergleichsrechnungen zu der Anwendung der Momentenmethode und Überprüfung von zwei verschiedenen Verteilungen zur Rekonstruktion der Partikelgrößenverteilungen unter Zugrundelegung der Normalverteilung und der Gaudin-Melloy-Verteilung.

Schlüsselworte: Flockengrößenverteilung, Rekonstruktion der Partikelgrößenverteilungen, Normalverteilung, Gaudin-Melloy-Verteilung

Streszczenie

W artykule przedstawiono wyniki analizy porównawczej dotyczącej zastosowania metody momentów w dwóch wariantach opartych o wykorzystanie rozkładu normalnego oraz Gaudina-Melloya do rekonstrukcji tworzonych rozkładów wielkości cząstek.

Słowa kluczowe: rozkłady wielkości fokuł, rekonstrukcja rozkładów wielkości cząstek, rozkład normalny, rozkład Gaudina-Melloya

* Prof. dr hab. inż. Michał Dylağ, Instytut Zaawansowanych Technologii Wytwarzania – ISO.

** Dr inż. Jerzy Rosiński, Instytut Inżynierii Ciepłej i Procesowej, Wydział Mechaniczny, Politechnika Krakowska.

Formelzeichen

c_p	– Primärpartikelkonzentration [g/l]
m_{50}	– mittlere Masse [kg]
σ	– Standardabweichung [kg]
L_m	– Parameter der Gaudin-Melloy – Verteilung [kg]
m^*	– Parameter der Gaudin-Melloy – Verteilung
q_o	– Anzahldichteverteilung [kg ⁻¹]
μ	– Moment

1. Einleitung

Im Rahmen der schon publizierten Arbeiten [1, 2] wurde ein Simulationsmodell entwickelt und validiert, das es ermöglicht, Flockulationsreaktionen bei suspendierten Feststoffpartikeln in einem Strömungsfeld mit bekannten Zustandgrößen zu berechnen, um die sich einstellende Flockengrößenverteilung vorherzusagen.

Neben der Erstellung des populationsdynamischen Modells soll die so genannte Momentenmethode hinsichtlich ihrer Anwendung zum Zweck der Modellreduktion getestet werden. Zusätzliche Argumentation bringt eine Feststellung mit sich, dass eine geschlossene Transformation der Populationsbilanzen zur Momentengleichungen nicht möglich ist. Auch die vorgeschlagene und angewandte Art des Hybrid-Verfahrens erzwingt, dass während des Simulationsabläufe die ständige Rekonstruktion der Partikelgrößenverteilungen aus den Momenten gewährleistet werden soll [3].

2. Formulierung des problems

Der Erstellung des populationsdynamischen Modells zur Beschreibung der Flockung bietet die Möglichkeit, die so genannte Momentenmethode hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit zum Zweck der Modellreduktion zu testen. Momente sind Kenngrößen einer Verteilungsfunktion; so stellt z. B. der Mittelwert einer Verteilung deren erstes Moment dar. Formal wurden die Populationsbilanzen über eine Integraltransformation in die Momentengleichungen überführt.

Aufgrund der Komplexität der Modellgleichungen hat sich gezeigt, dass in diesen Fall eine geschlossene Transformation der Populationsgleichungen zu Momentengleichungen nicht möglich ist. Stattdessen wurde eine Art des Hybrid-Verfahrens angewandt, bei welchem ebenfalls nur noch die Momente der Partikelgrößenverteilungen von Primärpartikeln und Flocken als Unbekannte bestimmt werden, jedoch die kinetischen Ansätze der Partikelwechselwirkungen übernommen werden können ohne die explizite Durchführung der Integraltransformation. Damit ist diese Methode für die verschiedensten dispersen Stoffsysteme bei beliebigen Partikelwechselwirkungen anwendbar.

Wie bei den Populationsbilanzen handelt es sich jedoch bei diesen Gleichungen um Integro-Differenzialgleichungen. Der Vorteil im Vergleich zur Anwendung der eigentlichen Populationsgleichungen liegt in der wesentlich geringeren Anzahl der Unbekannten. Diese

Vorgehensweise erfordert während des Simulationsablaufes die ständige Rekonstruktion der Partikelgrößenverteilungen aus den Momenten.

Hierzu hat sich die Methode der Rücktransformation [4] über vorgegebene Verteilungsfunktionen als praktikabel erwiesen [4]. Dabei werden beispielweise für eine Normalverteilung die relevanten Parameter der Verteilungsfunktion (Mittelwert, Standardabweichung, ...) aus den berechneten Momenten bestimmt, so dass die Verteilungsfunktion eindeutig definiert ist.

3. Einführende untersuchungen

Betrachtet man eine Funktion mit bekannter mittlerer Partikelmasse m_{50} und Standardabweichung σ , so ist die über die Gamma-Verteilung rekonstruierte Partikelgrößenverteilung mehr zu kleineren Partikeln hin verschoben als die über eine Normalverteilung berechnete Funktion. Für die Simulation des Flockungsvorgangs bedeutet dies Folgendes: führt man während der Simulation die Rücktransformation über eine Gamma-Verteilung durch, so laufen die Bruch- und Erosionsvorgänge scheinbar schneller ab als bei Zugrundelegung einer Normalverteilung [5].

Bei einer unvollständigen Darstellung der tatsächlichen Verteilungsdichtefunktion zwischen $m_{f,\max}$ und $m_{f,\min}$ erfolgt ein Anstieg der Partikelanzahlen an den Grenzen des betreffenden Partikelgrößenbereichs. Wird die Verteilung bei $m_{f,\max}$ abgeschnitten, so wird durch die fehlerbehaftete Rücktransformation eine größere Anzahl kleinerer Partikel dargestellt als tatsächlich vorhanden ist. Dieser Effekt führt zu einer formalen Erhöhung der Agglomerationskinetik, während die Bruch- und Erosionskinetiken gebremst werden.

Wird dagegen die Verteilungsfunktion im Bereich $m_{f,\max}$ unvollständig dargestellt, so wird eine geringere Anzahl kleiner Partikel berechnet als in der Realität vorliegt. In diesem Fall werden Erosions- und Bruchvorgänge scheinbar beschleunigt, während die Agglomeration an Geschwindigkeit verliert.

Als Folge der Diskussion, wurde festgelegt, dass die Rekonstruktion der Partikelgrößenverteilung unter Zugrundelegung der Normalverteilung nach Gl. (1) erfolgt.

$$q_o(m) = \frac{1}{\sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \exp \left[-\frac{(m - m_{50})^2}{2 \cdot \sigma^2} \right] \quad (1)$$

mit dem Mittelwert m_{50} und der Standardabweichung σ als Funktionsparameter.

Als zweite gewählte Möglichkeit wird die Gaudin-Melloy-Verteilung untersucht gemäß der Funktionsgleichung Gl. (2)

$$q_o(m) = \frac{m^*}{L_m} \cdot \left(1 - \frac{m}{L_m} \right)^{m^* - 1} \quad (2)$$

mit den Parametern

$$m^* = \frac{2 \cdot \sigma^2}{m_{50}^2 - \sigma^2} \quad (3)$$

$$L_m = m_{50} \cdot \frac{m_{50}^2 + \sigma^2}{m_{50}^2 - \sigma^2} \quad (4)$$

Der Mittelwert m_{50} und die Standardabweichung σ einer beliebigen Verteilungsdichtefunktion hängen direkt von den Momenten ab [5].

$$m_{50} = \frac{\mu_1}{\mu_0} \quad (5)$$

$$\sigma = \left[\frac{\mu_2}{\mu_0} - \left(\frac{\mu_1}{\mu_0} \right)^2 \right]^{0,5} \quad (6)$$

Damit sind zur Rekonstruktion der Partikelgrößenverteilung nur die drei Momente μ_0 , μ_1 , μ_2 erforderlich.

Zu beachten ist der Definitionsbereich der zugrunde liegenden Verteilungsfunktionen. Da die Normalverteilung im Bereich von $-\infty$ bis $+\infty$ definiert ist, können bei der Rekonstruktion theoretisch Partikel mit negativen Dispersitätsgrößen, z. B. mit negativen Massen berechnet werden. Die Normalverteilung kann also immer nur in Verbindung mit einer Kontrollfunktion zur Überprüfung der Lage der Verteilungsfunktion angewandt werden. Eine solche Kontrolle ist beispielsweise die Normierungsbedingung

$$\int_{m_{\min}}^{m_{\max}} q_o(m) dm = 1 \quad (7)$$

für die Verteilung der Partikel und der Flocken. Wird diese Bedingung erfüllt, so liegt die Verteilungsfunktion vollständig im positiven Bereich der Dispersitätsgröße. Dieses Problem tritt bei der Gaudin-Melloy-Verteilung nicht auf, bei der sich der Definitionsbereich von 0 bis $+\infty$ erstreckt.

4. Zielsetzung

Da bei der Rücktransformation über vorgegebene Verteilungsfunktionen die Wahl der Verteilungsfunktion zunächst willkürlich erfolgt, muss deren Einfluss auf das Ergebnis der rekonstruierten Verteilung ermittelt werden. Dazu wurden in einer Untersuchung verschiedene Partikelgrößenverteilungen vorgegeben, deren Momente berechnet und dann über vorgegebene Verteilungsfunktionen wieder rekonstruiert werden.

Nach der Durchführung der einführenden Untersuchungen wurde angenommen, dass die Rekonstruktion der Partikelgrößenverteilungen unter Zugrundelegung der Normalverteilung nach Gl. (1) und der Gaudin-Melloy-Verteilung nach Gl. (2) erfolgt.

5. Numerische formulierung und Lösung

Die numerische Lösung der Populationsbilanzen und Momentengleichungen erfolgte mit Hilfe der Methode der Finiten Volumen. Zur vollständigen Diskretisierung von Populationsgleichungen wurde neben der Ortsdiskretisierung die Diskretisierung der Eigenschaftskordinaten notwendig [6, 12].

5.1. Diskretisierung des Rührkesselreaktors

Betrachtet wurde ein Rührkesselreaktor mit 6-Blatt-Turbinenrührer mit vier Strombrechern. Dazu wird die Hälfte des Reaktorquerschnittes mit einem Rechengitter diskretisiert, welches sieben Bilanzelemente in axialer Richtung und fünf in radialer Richtung aufweist und damit wesentlich gröber ist, als das Rechengitter für die Strömungsberechnungen. Abb. 1 zeigt in der linken Hälfte den diskretisierten Reaktor, in den Abb. 2 und 3 das auf dem feinen Gitter berechnete [9] und gemessene [8] Strömungsfeld. Zusätzlich wurden die Ergebnisse der Strömungssimulationen [9] und LDE-Messungen [8] quantitativ verglichen.

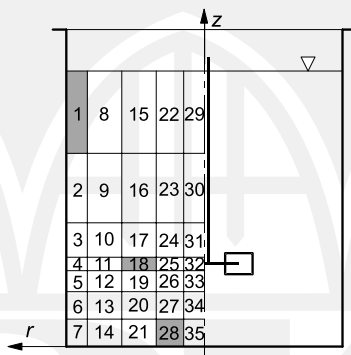


Abb. 1. Rührkesselreaktor mit diskreten Bilanzelementen zur Lösung der Populationsgleichungen
Rys. 1. Zbiornik reaktora z zaznaczeniem elementów bilansowych

Die Ergebnisse der detaillierten Strömungssimulationen wurden unter Berücksichtigung der turbulenten Dispersionsströme für die neu generierten Bilanzelemente interpoliert und zusammengefasst und in Form eines minimal notwendigen Datensatzes dargestellt, auf welchen das Simulationsprogramm mit den Populationsbilanzen zugreift. Dieser enthält:

- die Elementkoordinaten in radialer und axialer Richtung,
- die in ein Element tatsächlich eintretenden Volumenströme über die Grenzflächen in beiden Richtungen,
- die über das Element gemittelten Werte der turbulenten kinetischen Energie κ und der turbulenten Energiedissipation ϵ sowie,
- den Druck in jedem Bilanzelement.

Für ein Bilanzelement, wie es in Abb. 1 dargestellt ist, werden in radialer und axialer Richtung Ein- und Austrittsseiten definiert. Als Eintrittsseite wird bezüglich jeder Koordinate die Seite bezeichnet, die in positiver Koordinatenrichtung als erste durchstoßen wird.

Die konvektiven Terme in den Bilanzgleichungen werden mit Hilfe der über die Elementgrenzen fließenden Volumenströme formuliert. Für jedes Element wird aus der Summe der eintretenden Volumenströme, unter der Voraussetzung einer inkompressiblen Strömung, der aus Kontinuitätsgründen insgesamt austretende Volumenstrom berechnet. Die austretenden Flocken und Primärpartikeln entsprechen in ihrer Konzentration und Größenverteilung den Partikeln im Bilanzelement selbst. Diese Vorstellung entstammt dem sogenannten UPWIND-Schema vom Patankar, bei welchem jedes Bilanzelement als ein ideal durchmischter kleiner Rührkessel angenommen wird [10].

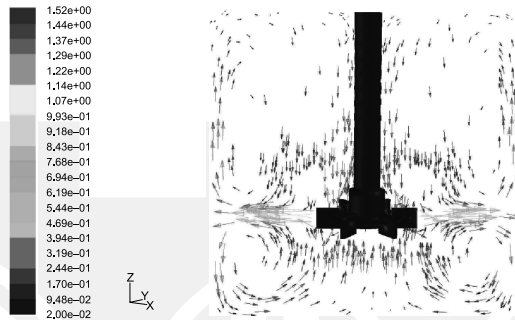


Abb. 2. Rührkessel – berechnetes Geschwindigkeitsfeld für $Re = 10^4$; der farbige Teil des Bildes beschreibt die berechnete Geschwindigkeitswerte (auch nach der Farbe erkennbar)

Rys. 2. Wyniki obliczeń symulacyjnych pola prędkości dla $Re = 10^4$

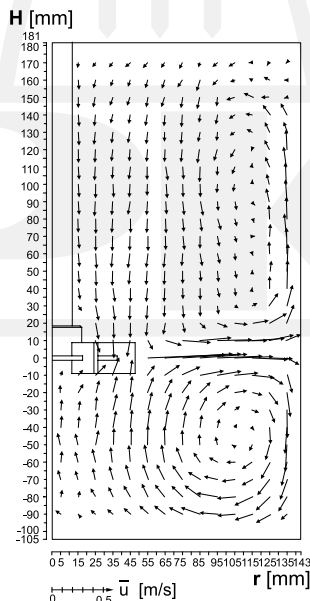


Abb. 3. Rührkessel – gemessenes Strömungsfeld für $Re = 10^4$

Rys. 3. Wyniki pomiarów pola przepływu dla $Re = 10^4$

5.2. Eigenschaftsdiskretisierung

Die Diskretisierung der Eigenschaftskordinate (Masse m) kann äquidistant oder nicht äquidistant erfolgen. Bei der Diskretisierung wird aber der Bereich kleiner Partikeln nur durch wenige Intervalle beschrieben. Gerade in diesem Größenbereich liegen jedoch zumindest zu Beginn des Flockungsprozesses die meisten Partikeln vor. Diese Tatsache erzwingt eine weitgehende Umformung der Populationsgleichungen von Primärpartikeln und Flocken sowie Voraussetzung, dass die Eigenschaftsintervalle (Größenklassen) bei beiden Partikelarten im gemeinsamen Größenbereich jeweils identisch sind. Zusätzlich, da es sich aufgrund der Struktur der Quell- und Senkenterme um Integro-Differentialgleichungen handelt, müssen weiterhin die Integrationen durch entsprechende algebraische Formulierungen ersetzt werden. Leitgedanke und Problemlösung sind in der Arbeit [9] ausführlich dargestellt.

6. Experimentelle untersuchungen

Zur Validierung der Simulationsergebnisse wurden experimentelle Untersuchungen zur Flockulation von Quarzpartikeln in einem Rührkesselreaktor durchgeführt. Die Untersuchung der entstehenden Flocken hinsichtlich ihrer Größenverteilung erfolgte mit einem rechnergestützten Bildanalysesystem.

6.1. Versuchsaufbau

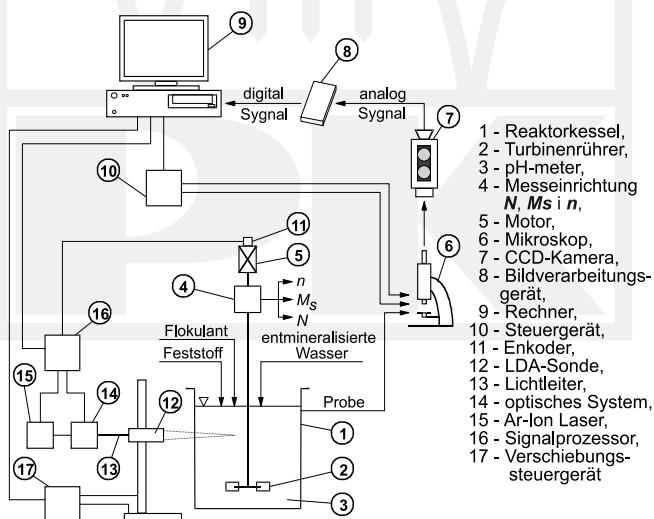


Abb. 4. Aufbau des Labor-Prüfstandes-Schema der Versuchsanlage

Rys. 4. Stanowisko badawcze

Dieses Verfahren ist bezüglich der Flockenbeanspruchung wesentlich schonender als beispielsweise eine Laserspektroskopische Untersuchung mit zusätzlichen Pump- und

Rühreinrichtungen zur Aufwirbelung der Flocken in der Suspension. Der Versuchsaufbau, die Versuchsdurchführung und die Auswertung sind nachfolgend beschrieben.

Die Koagulation der Quarzpartikeln wurde in einem Rührkesselreaktor aus Plexiglas mit dem Durchmesser $\varnothing 300 \times 6$ und mit vier Strombrechern, welche jeweils um 90 Grad zueinander versetzt an der Reaktorwand angeordnet waren, untersucht. Die Strömung im Reaktor wurde durch einen 6-Blatt-Turbinenrührer mit einem Rührerdurchmesser $d_R = 1/3 D_R$. Die angebrachte Messeinrichtung erlaubt sowohl die Drehzahl des Rührers als auch die eingebrachte Leistung online zu messen.

Die Anordnung ist mit der Rührkesselkonfiguration identisch, für welche die Simulationen des Strömungsfeldes durchgeführt wurden, die den populationsdynamischen Rechnungen zugrunde liegen. Damit ist eine direkte Vergleichbarkeit (Ähnlichkeit) von Rechen- und Messergebnissen gewährleistet.

6.2. Versuchsdurchführung

Zur Durchführung der Flockung wurde ein handelsüblicher Quarzstaub verwendet. Dessen Größenverteilung wurde mit einem Laserbeugungsspektroskop (Fa. Fritsch) bestimmt und bei den Simulationsrechnungen entsprechend als vorgegebene Primärpartikelverteilung angenommen. Zur Durchführung der Koagulation wurde dieser Quarz zunächst dem Reaktor zugegeben, der mit vollentsalztem Wasser gefüllt war. Mit Hilfe des Rührers wurden die Quarzpartikeln ca. fünf Minuten dispergiert, sodass zu Beginn der Koagulation keine undefinierten Agglomerate vorlagen und eine gleichmäßige Verteilung der Quarzpartikeln in der Suspension sichergestellt war.

Anschließend wurden 40 g Calciumchlorid CaCl_2 und 40 g Natriumhydroxid NaOH in jeweils 2 l voll entsalztem Wasser gelöst, und die Lösungen wurden an zwei gegenüberliegenden Stellen an der Flüssigkeitsoberfläche nacheinander zugegeben. Danach wurde das entsalzte Wasser dem Behälter zugegeben, bis die Einfüllhöhe den Wert 288 mm erreicht hatte. Die notwendige Zeit bis zur vollständigen Vermischung der Salze mit der Suspension ließ sich aus Ähnlichkeitsgesetzen abschätzen und betrug einige Sekunden. Zusätzlich wurde die Grenze der Löslichkeit bestimmt und festgestellt, dass der Grenzwert nicht überschritten ist, sodass keine Fällungsflockung auftritt. Durch Chemikaliengabe stellt sich ein pH-Wert 12,1 ein. Durch hohe Dosierung des Koagulationsmittels ist die vorher getroffene Modellannahme einer Agglomerationseffektivität $\alpha' = 1$ gerechtfertigt. Sonst müsste zusätzlich ein Modell zur Bestimmung der Agglomerationseffektivität in das Simulationsprogramm implementiert werden. Dem Flockungsreaktor wurde bei laufendem Rührer eine Suspensionsprobe von ca. 7 μl entnommen.

6.3. Versuchsauswertung

Das Funktionsschema der Bildanalyse zur Bestimmung von Partikelgrößenverteilungen ist aus Abb. 4 abzulesen. Das im Mikroskop Olympus sichtbare Probenbild wird von einer am Phototubus des Mikroskops angebrachten CCD Kamera (Sony) mit 256 Graustufen aufgenommen und in entsprechende Analogsignale umgesetzt. Diese werden von einer Bildverarbeitungskarte im angeschlossenen PC in digitale Signale umgewandelt und von einem Bildverarbeitungsprogramm eingelesen. Zur Vereinfachung des Analyseablaufs und

zur besseren Reproduzierbarkeit der Messungen wurden ausgefeilte Bildauslesesysteme angewandt.

Um die teilweise porösen Flocken als jeweils einzelne Partikeln erfassen zu können, wird noch der Vorgang des „Schließens“ auf das binarisierte Bild angewandt. Dabei werden die Hohlräume innerhalb einer Flocke ausgefüllt, sodass einzelne Flocken eindeutig erkennbar sind und ausgewertet werden können. In Abb. 5 sind die unbearbeiteten Photos einer Flockenprobe zu sehen. Schließlich wird die Größenverteilung der Partikeln und Bezug in einem charakteristischer Durchmesser ermittelt.

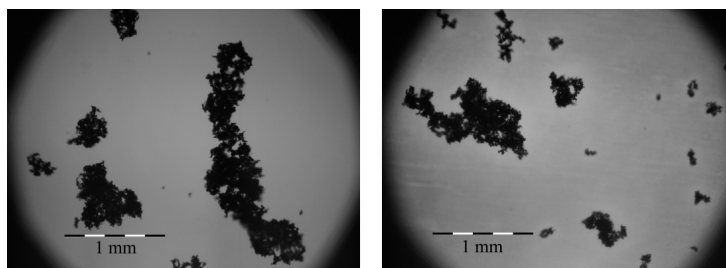


Abb. 5. Unbearbeitete Photographien einer Flockenprobe
Rys. 5. Nieprzetworzone zdjęcia próbek pobranych do analizy

7. Auswertung und diskussion der Ergebnisse

Nachfolgend werden Ergebnisse berechneter Flockengrößenverteilungen im Rührkesselreaktor für beide betrachteten Reynoldszahlen $Re = 10^4$ und $Re = 2,2 \cdot 10^4$ im Vergleich mit Ergebnissen der Finite-Volumen-Methode besprochen und diskutiert.

Die Partikelgrößenverteilungen werden als massenbezogene Durchgangssummenwerte in Abhängigkeit eines kugeläquivalenten Partikeldurchmesser aufgefangen, wobei die Nummerierung der Bilanzelemente sich auf die in Abb. 1 dargestellte Reaktordiskretisierung bezieht.

In Abb. 6 sind die berechneten gemittelten Flockengrößenverteilungen bei einer Primärpartikelkonzentration $c_p = 1,0 \text{ g/l}$ bei der Reynoldszahl $Re = 10^4$ dargestellt. Die durchgezogene Linie zeigt das mit dem Finite-Volumen-Verfahren ermittelte Ergebnis, die strichpunktierte Linie das Ergebnis bei Anwendung der Momentenmethode mit einer Rücktransformation über die Normalverteilung. Der Rührreaktor wurde als ortsdiskret angenommen.

Zuerkennen ist die deutliche Abweichung in den ermittelten Flockengrößenverteilungen. Auch die mit dem Finiten-Volumen-Verfahren bestimmten unterschiedlichen Flockengrößenverteilungen in den einzelnen Bilanzelementen können mit der Momentenmethode nicht wiedergegeben werden. Lediglich die auf beide Arten berechneten mittleren Flockendurchmesser d_{50} zur Charakterisierung der mittleren Flockengröße werden in guter Übereinstimmung wiedergegeben.

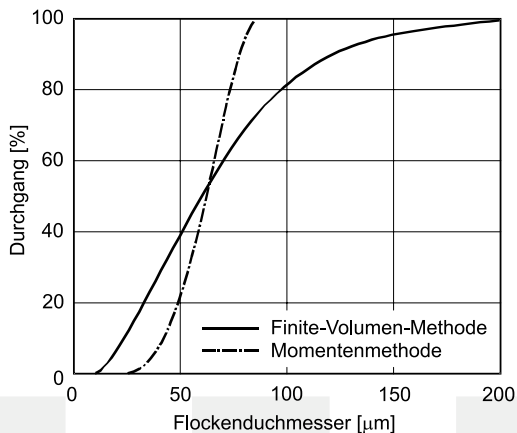


Abb. 6. Vergleich der über den Reaktor gemittelten stationären Flockengrößenverteilung bei Rechnung mit der Finite-Volumen-Methode und mit der Momentenmethode. Primärpartikelkonzentration $c_p = 1 \text{ g/l}$, Reynoldszahl $Re = 10^4$, Rücktransformation über Normalverteilung

Rys. 6. Porównanie uśrednionych po objętości reaktora stacjonarnych rozkładów wielkości flokul obliczonych metodą skończonych objętości oraz metodą momentów

Wird für diesen Berechnungsfall dagegen die Rücktransformation über die Gaudin-Melloy-Verteilung durchgeführt, ergibt sich ein anderes Ergebnis, welches in Abb. 7 dargestellt ist.

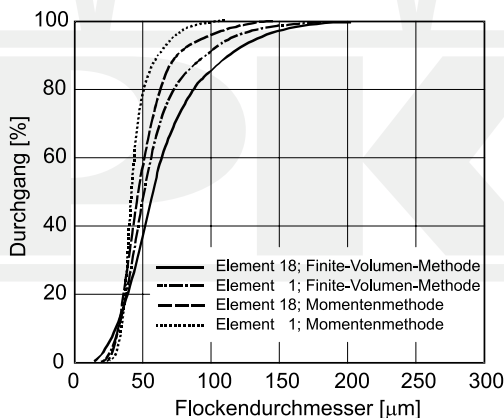


Abb. 7. Vergleich der stationären Flockengrößenverteilungen in den Elementen 1 und 18 bei Rechnung mit der Finite-Volumen-Methode und mit Momentenmethode. Primärpartikelkonzentration $c_p = 1 \text{ g/l}$, Reynoldszahl $Re = 10^4$, Rücktransformation über die Gaudin-Melloy-Verteilung

Rys. 7. Porównanie stacjonarnych rozkładów wielkości flokul w elementach bilansowych 1 i 18 uzyskanych za pomocą metody skończonych objętości i metody momentów

Offensichtlich kann mit der Momentenmethode in Verbindung mit Gaudin-Melloy-Verteilung ein breiter Verlauf einer Verteilungsfunktion berechnet werden. Hier wird nicht nur der Mittelwert, sondern der gesamte Verlauf der Partikelgrößenverteilung im Vergleich zur Rechnung mit der Finite-Volumen-Methode wiedergegeben. Auch die sich einstellenden lokalen Unterschiede in der Flockenverteilung werden bei der Anwendung der Gaudin-Melloy-Verteilung noch erfasst.

Der hier erwähnte Vorteil der Wiedergabe einer breiteren Verteilungsfunktion wirkt sich jedoch nachteilig auf Untersuchungen bei geringeren Primärpartikelkonzentrationen aus. Wird bei den untersuchten Primärpartikelkonzentrationen von 0,25 g/l und 0,5 g/l Feststoff die Rücktransformation ebenfalls über die Gaudin-Melloy-Verteilung durchgeführt, so werden weder der Medianwert der Verteilung noch die Verteilung selbst zufriedenstellend rekonstruiert. In diesem Fall geringerer Primärpartikelkonzentrationen kann über die Rücktransformation mit Hilfe der Normalverteilung zwar nicht die Verteilung in ihrer Breite, aber wenigstens der sich einstellende mittlere Flockendurchmesser näherungsweise wiedergegeben werden.

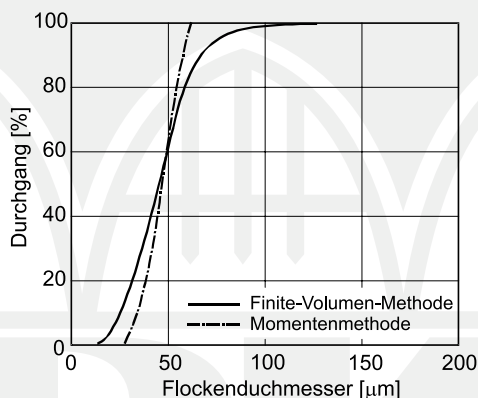


Abb. 8. Vergleich der über den Reaktor gemittelten stationären Flockengrößenverteilung bei Rechnung mit der Finite-Volumen-Methode und mit der Momentenmethode. Primärpartikelkonzentration $c_p = 0,5$ g/l, Reynoldszahl $Re = 104$, Rücktransformation über Normalverteilung

Rys. 8. Porównanie uśrednionych po objętości reaktora stacjonarnych rozkładów wielkości flokul obliczonych metodą skończonych objętości oraz metodą momentów

Das Ergebnis für eine Primärpartikelkonzentration von 0,5 g/l bei der Verwendung der Normalverteilung zur Rücktransformation ist in Abb. 8 gezeigt.

Eine weitere Untersuchung gilt wieder der Annahme eines ideal durchmischten Flockungsreaktors bei der Anwendung der Momentenmethode.

In Abb. 9 ist der Vergleich der auf Basis einer Normalverteilung rekonstruierten Verteilungsfunktion zwischen dem diskret berechneten und dem als ideal durchmischten angenommenen Reaktor dargestellt.

Dieses Ergebnis zeigt dieselben großen Abweichungen bei der berechneten Flockungsgrößenverteilung wie die Rechnung bei der Methode der Finite-Volumen. Die

Annahme eines ideal durchmischten Reaktors führt zu einer Flockengrößenverteilung, welche bei viel zu hohen Werten der Flockengröße liegt, so dass auch der mittlere Flockendurchmesser d_{50} falsch wiedergegeben wird.

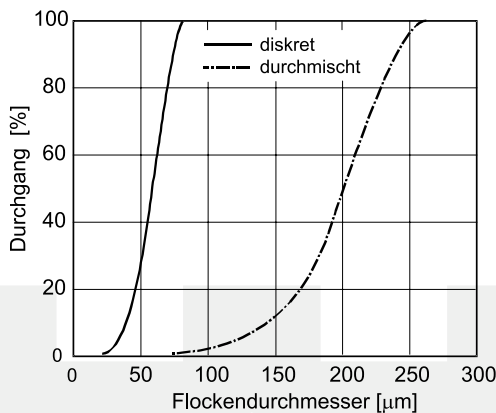


Abb. 9. Vergleich der über den Reaktor gemittelten stationären Flockengrößenverteilung bei einem als ortsdiskret und einem als ideal durchmischten betrachteten Reaktor für eine Berechnung mit der Momentenmethode. Primärpartikelkonzentration $c_p = 1 \text{ g/l}$, Reynoldszahl $Re = 10^4$, Rücktransformation über Normalverteilung

Rys. 9. Porównanie uśrednionych stacjonarnych rozkładów wielkości flokuł obliczonych dla elementów bilansowych oraz warunków idealnego przemieszania metodą momentów

Die bei Reynoldszahl von $Re = 2,2 \cdot 10^4$ berechnete Verläufe der Durchgangssummen der Flocken wurden mit der Momentenmethode alle um den Faktor zwei bezüglich der mittleren Partikelgröße d_{50} zu groß bestimmt. Eine Ursache sind die tatsächlich vorliegenden, sehr engen Partikelgrößenverteilungen, welche durch die Momentendarstellung auf Basis der vorgegebenen Verteilungsfunktionen nicht mehr korrekt wiedergegeben werden können.

8. Schlussbemerkungen

Die Simulationsrechnungen unter Anwendung der Momentenmethode zeigten, dass mit diesem Verfahren die tatsächlichen Flockengrößenverteilungen näherungsweise bestimmt werden können. Für die Genauigkeit des Rechenmodells auf Basis der Momentenmethode spielt von allem die Wahl der Verteilungsfunktion, die der Rekonstruktion der Flockengrößenverteilung zugrunde liegt, eine wichtige Rolle.

Bei der Anwendung einer Normalverteilung erfolgt die Bestimmung des mittleren Flockendurchmessers mit guter Genauigkeit. Dagegen kann unter Verwendung der Gaudin-Melloy-Verteilung auch der tatsächliche Verlauf der Flockengrößenverteilung rekonstruiert werden, wobei die lokalen Unterschiede in der Flockengrößenverteilung aufgelöst werden.

Prinzipiell ist festzuhalten, dass die Anwendung der Momentenmethode eine schnelle Abschätzung der sich einstellenden Flockengrößenverteilung erlaubt, die Rechenzeit liegt

um etwa einen Faktor fünf niedriger als bei der Finite-Volumen-Methode für die expliziten Populationsbilanzen.

Die Momentenmethode versagt jedoch bei niedrigen Feststoffkonzentrationen und/oder hohen Reynoldszahlen.

Zusammenfassend ist als Fazit der Anwendung der Momentenmethode festzuhalten, dass die Gaudin-Melloy-Verteilung dann eingesetzt werden kann, wenn eine relativ breite Partikelgrößenverteilung vorliegt, auch die lokalen Unterschiede in der Flockengrößenverteilung lassen sich hiermit beschreiben.

Bei engeren Verteilungen liefert die Rücktransformation über die Gaudin-Melloy-Verteilung schlechtere Ergebnisse. Somit ist zu erwarten, dass bei der Untersuchung von Flockulationsprozessen und den sich dabei bildenden breiteren Flockengrößenverteilungen das Rechenmodell der Momentenmethode gute Resultate liefert.

This study was conducted within the research grant No 0264/B/H03/2011/40 funded by the National Science Centre.

Literatur

- [1] Dylağ M., Rosiński J., Kamiński J., *Modellbildung von Partikelwechselwirkungen bei Dispersen Stoffsystem – Grundlagen der Flockung*, Czasopismo Techniczne, 5-M/2008, Wydawnictwo PK, Kraków 2008, 89-96.
- [2] Dylağ M., Rosiński J., Kamiński J., *Erstellung von Modellgleichungen zur Beschreibung von Partikelwechselwirkungen bei Flockungsprozessen*, Czasopismo Techniczne, 9-M/2008, Wydawnictwo PK, Kraków 2008, 3-18.
- [3] Dylağ M., Rosiński J., Kamiński J., *Anwendung des mittleren geschwindigkeitsgradienten auf die modellierung von flockungsprozessen*, in Wozny G., Hady Ł.: *Process Engineering and Chemical Plant Design 2011*, Universitätverlag der TU Berlin, Berlin 2011.
- [4] Szatko W., Rosiński J., Kamiński J., Dylağ M., Wozny G., *Über die sogenannte Momentenmethode hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit zum zweck der Modellreduktion von erstellten Populationsbilanzen*, Materiały konferencyjne IX Międzynarodowej Konferencji Naukowej „Teoretyczne i Eksperymentalne Podstawy Budowy Aparatury”, Iwanowo, Federacja Rosyjska 2010, 204-214.
- [5] Randolph A.D., Larsen M.A., *Theory of Particulate Processes*, Academic Press Inc., San Diego 1988.
- [6] Jaworski Z., *Numeryczna mechanika płynów w inżynierii chemicznej i procesowej*, Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Warszawa 2005.
- [7] Wójtowicz R., *Inż. i Ap. Chem.*, **4**, (2010), 92-93.
- [8] Talaga J., Wójtowicz R., *Inż. i Ap. Chem.*, **4**, (2010), 80-81.
- [9] Patankar S.V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemispheres Publishing Corporation, New York 1980.