

# CFD Simulation und verbesserte Datenauswertung einer Extraktionskolonne vom Typ Kühni

Mark W. Hlawitschka <sup>#1</sup>, Fang Chen <sup>\*2</sup>, Hans-Jörg Bart <sup>#3</sup>, Hans Hagen <sup>\*4</sup>

<sup>#</sup>Chair of Separation Science and Technology, Gebäude 44, Raum 476, Gottlieb-Daimler Straße, 67663 Kaiserslautern

<sup>\*</sup>AG Computergrafik, Gebäude 36, Raum 22, Gottlieb-Daimler Straße, 67663 Kaiserslautern

<sup>1</sup>mark.hlawitschka@mv.uni-kl.de

<sup>2</sup>chen@informatik.uni-kl.de

<sup>3</sup>bart@mv.uni-kl.de

<sup>4</sup>hagen@informatik.uni-kl.de

**Zusammenfassung**— Computational Fluid Dynamic (CFD) Simulationen wurden gekoppelt mit dem One-Group Populationsbilanzmodell durchgeführt, um die Tropfengröße in einer Kühni Miniplant Extraktionskolonne zu bestimmen. Zur Strömungssimulation wurde aufgrund der geringeren Rechenzeit auf das Euler-Euler Modell zurückgegriffen, welches die Tropfen als interpenetrierende Phase behandelt. Die Tropfeninteraktion, wie Tropfenkoaleszenz und Tropfenteilung werden durch das Modell von Prince und Blanch [1] und von Martínez-Bazán et al. [2] beschrieben. Eine verbesserte Visualisierungstechnik wird angewendet, um mehrere Daten in einem Bild kombiniert zu visualisieren. Dies bildet die Basis für Visualisierungserweiterungen, wie z.B. der Visualisierung der Tropfenteilung.

## I. KOOPERATION

Die hier vorgestellten Ergebnisse stammen aus der Kooperation *Multiphysics, Modelling and feature based Visualization* mit Schwerpunkt Tropfenpopulationsdynamik. Die Kooperation besteht aus Forschern der AG Technomathematik sowie des ITWM, des Lehrstuhls für Thermische Verfahrenstechnik sowie der AG Computergrafik und HCI Gruppe der TU Kaiserslautern. Jede Gruppe, wie in Abb. 1 gezeigt, trägt zur Kooperation bei. Der Bereich der Mathematik ist auf die Modellentwicklung (Finite Pointset Method, FPM) sowie Modellbeurteilung spezialisiert. Die Verfahrenstechnik beschäftigt sich mit der Modellierung von Apparaten, u.a. gerührten Extraktionskolonnen, mit kommerziellen und Open-Source Software. Ebenso liefert diese experimentelle Daten zur Validierung. Die Ergebnisse der Simulationen dienen zur verbesserten Auslegung der Kolonnen und zur gegenseitigen Validierung der mathematischen Modelle sowie deren Parameter. Die erzeugten Simulationsdaten sind hauptsächlich Ensight formatierte Binärdaten. Die AG Computergrafik und HCI beschäftigt sich daher mit der Entwicklung verbesserter bzw. angepasster Visualisierungstools, die es ermöglichen, u.a. mehrere Parameter gleichzeitig sichtbar zu machen und den Auswerteprozess somit beträchtlich vereinfachen.

## II. MOTIVATION

Die Auslegung und Modellierung von flüssig-flüssig Extraktionskolonnen basiert noch immer auf vereinfachten Modellen, die nur teilweise die realen Geschehnisse wie Tropfenkoaleszenz und Tropfenteilung in der Kolonne abbilden. Das

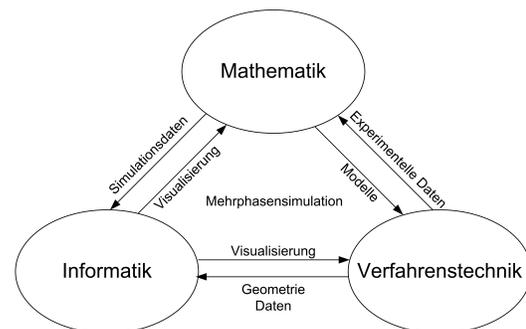


Abb. 1. Kooperation zwischen den Instituten

einfachste verwendete Modell ist das Stufenmodell, welches auf einer idealisierten Propfenströmung basiert. Dieses Modell berücksichtigt eine Änderung des Zustands in Strömungsrichtung, jedoch keine radiale Änderung senkrecht zu dieser. Bei Abweichungen von der idealen Propfenströmung wird daher auf das Backmixing oder Dispersionsmodell zurückgegriffen, welche die Abweichungen in radialer Richtung über einen einzelnen Parameter berücksichtigen. Kombiniert mit Tropfenpopulationsbilanzmodellen (TPBM) wird Koaleszenz und Teilung der Tropfen mit in Betracht gezogen und es ergibt sich eine gute Modellierungsbasis der Kolonne. Allerdings muss man hierbei auf Korrelationen zurückgreifen, die über große Datenpools zeitaufwändig verifiziert wurden. In den letzten Jahrzehnten ergab sich durch die steigende Rechenleistung eine detailliertere, geometrieunabhängige Auflösung des Strömungsproblems, meist auf Basis der Navier-Stokes-Gleichungen oder Euler-Gleichungen, die heute als Computational Fluid Dynamics (CFD) bezeichnet wird. So wurden auch in den letzten Jahren verstärkt in der Verfahrenstechnik fluiddynamische Simulationen von Extraktionskolonnen vom Typ Rotating Disc Contactor (RDC) sowie vom Typ Kühni, dargestellt in Abb. 2, durchgeführt. Die Simulation der RDC Kolonne kann dabei aufgrund der Rotationsymmetrie zweidimensional dargestellt werden, während eine Simulation der Kühni Kolonne dreidimensional bzw. dreidimensional rotationsymmetrisch erfolgen muss.

Einphasige Simulationen einer RDC Kolonne stammen u.a.

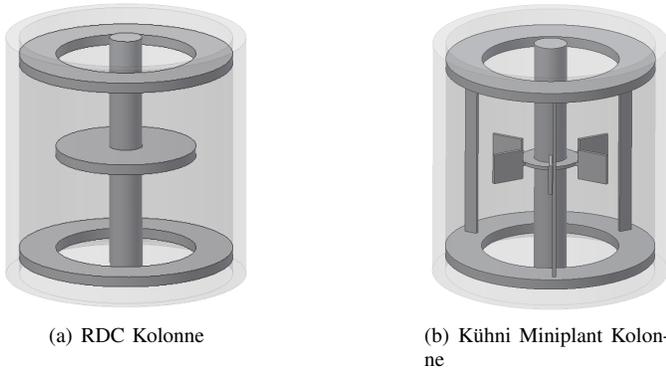


Abb. 2. Unterschiedliche Extraktionskolonnengeometrien

von Modes und Bart [3], wobei Rieger [4] die Zweiphasenströmung in einer RDC Kolonne simulierte. Haderer et al. [5] verwendete ein Euler-Euler Modell zur Simulation der Zweiphasenströmung in RDC Kolonnen. Kolb [6] untersuchte die Strömung in Kühni Kolonnen und validierte seine Ergebnisse mit einer Lasermesstechnik, der Particle Image Velocimetry. Wang und Mao [7] simulierten die Zweiphasenströmung in einem Kühni Miniplant Kompartiment unter Verwendung periodischer Randbedingungen in axialer Richtung. Vikhansky und Kraft [8] verwendeten Euler-Lagrange Modell zur Simulation der Zweiphasenströmung in einer RDC Kolonne gekoppelt mit der Monte-Carlo Methode zur Berücksichtigung von Koaleszenz und Zerfall. Drumm et al. [9] untersuchte die Zweiphasenströmung auf Basis des Euler-Euler Modells und koppelte dieses mit stochastischen Populationsmodellen. CFD Untersuchungen an Extraktionskolonnen vom Typ Kühni gekoppelt mit Populationsbilanzen sind in der Literatur neu und erfordern eine Anpassung der bestehenden Zerfalls- sowie Koaleszenzmodelle an experimentelle Ergebnisse. Eine effektive Datenauswertung ist dabei für den Anwender wichtig, wobei zur schnellen und benutzerfreundlichen Datenauswertung existieren jedoch keine entsprechende Tools. Kommerzielle Post-Processing Programme können jeweils eine fluide Eigenschaft darstellen, z.B. Phasenanteil, Geschwindigkeit oder Tropfengröße. Um aussagekräftige Informationen zu erhalten, benötigt es einer Überlagerung der Informationen z.B. der Tropfengröße und des Phasenanteils. Ebenso können Tropfen, die aufgrund des zu benötigten hohen Rechenaufwands nicht aufgelöst dargestellt werden, sondern nur als Datenpunkt in jeder einzelnen numerischen Zelle, nicht wirklichkeitsgetreu visualisiert werden. Zudem kann der zeitliche Verlauf der Tropfen nur durch Stromlinien dargestellt werden, wobei diese aufgrund der angenommen Randbedingung an allen Wänden und Einbauten enden und eine Darstellung nahezu unmöglich machen. In dieser Arbeit werden die vorangegangenen Arbeiten zum Thema Populationsbilanzen von den 2D-Modellen (RDC-Kolonne) auf einen 3D-Anwendungsfall (Kühni-Kolonne) transferiert. Ein besonderes Augenmerk wird hierbei auf eine verbesserte Auswertemöglichkeit gelegt.

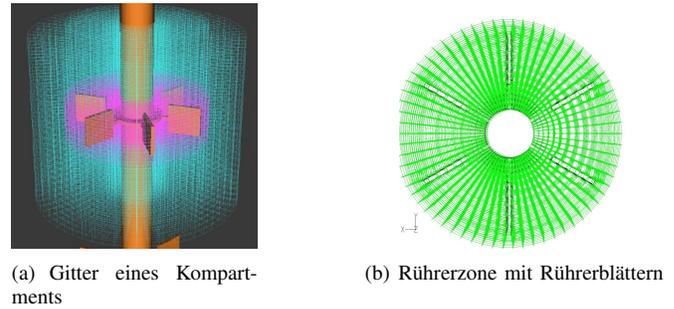


Abb. 3. Erstelltes Gitter

### III. METHODE

Die hier beschriebenen Methoden gliedern sich in drei Teile. Der erste Teil beschäftigt sich mit der numerischen Simulation. Der zweite Teil befasst sich mit den Populationsbilanzen und deren Implementierung. Der dritte Teil zeigt die Vorgehensweise bei der verbesserten Datenauswertung und Visualisierung der Simulationsergebnisse auf.

#### A. Methode der Simulation

Der Kühni Miniplant Extraktor hat einen Nenndurchmesser von 32 mm und einer Kompartimenthöhe von 28 mm und Strombrecher in Form von flachen Blechen sind in einem Winkel von  $120^\circ$  zueinander angeordnet. Ein Sechsstabtrührer ist in der Mitte jedes Kompartiments mit der Welle verbunden. In dieser Arbeit wurden sieben Kompartiments für die Simulation als Gitter mit dem Pre-Prozessor Gambit generiert. Für die CFD-Simulation mit dem kommerziellen CFD Tool FLUENT wurde das Gitter in zwei Regionen geteilt, eine statische und eine drehende Region, die den Rührer umgibt. Am Boden und am Kopf des Gitters wurde zusätzlich eine Zone für den Einlauf und den Auslauf definiert. Die Randbedingung am Boden wurde als Geschwindigkeitseinlass definiert, wobei der Auslass durch einen Austrittsdruck definiert wird. Als numerischer Rahmen wurde das Euler-Euler Modell verwendet, welches die beiden Phasen als interpenetrierende Kontinua behandelt. Ein Populationsbilanzmodell wurde mit der CFD über benutzerdefinierte Funktionen ("user defined functions", UDF) gekoppelt, um Koaleszenz- sowie Zerfallsereignisse zu berücksichtigen. Das verwendete flüssig-flüssig-System besteht aus Wasser und n-Butylacetat, wobei die organische Phase in Form von Tropfen am Boden und die kontinuierliche Phase (Wasser) am Kopf in die Kolonne fließt, wodurch eine Gegenströmung der beiden Phasen entsteht. Das für die Simulation erstellte Gitter besteht aus über 500 000 Zellen, welches als Ausschnitt in Abbildung 3 dargestellt ist.

Die Kolonnenwand sowie die Rührer, Welle und Strombrecher sind als *no-slip* Randbedingung definiert, d.h. dass die Geschwindigkeit der Fluide an der Wand gleich Null ist. Der *first-order implicit solver* wurde für die Zeitdiskretisierung verwendet, während für die Diskretisierung im Raum das *first order upwind scheme* verwendet wurde. Die Druck-Geschwindigkeitskopplung erfolgt über die Verwendung des Simple Algorithmus. Standard Relaxationsfaktoren wurden für

die Simulation verwendet. Im Folgenden werden die mathematischen Modelle des Zweiphasenmodells zusammengefasst.

1) *Zweiphasenmodell*: Das verwendete Zweiphasenmodell ist das Euler-Euler Modell, bei dem die jeweilige Phase  $i$  durch den Volumenanteil  $\alpha_i$  beschrieben wird. Die Kontinuitätsgleichung für die kontinuierliche Phase  $c$  ist durch

$$\frac{\partial(\alpha_i \rho_c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c \rho_c \vec{u}_c) = 0 \quad (1)$$

gegeben. In dieser Gleichung ist der Phasenanteil durch  $\alpha_c$ , die Dichte der kontinuierlichen Phase durch  $\rho_c$  und die Geschwindigkeit der Phase durch  $\vec{u}_c$  gekennzeichnet. Die Erhaltungsgleichung wird durch Gleichung 2 beschrieben.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_i \vec{u}_i \alpha_i) + \nabla \cdot (\rho_i \vec{u}_i \vec{u}_i \alpha_i) = & -\alpha_i \nabla p \\ & + \nabla \tau_i + \alpha_i \rho_i \vec{g} + F_{d,i} \end{aligned} \quad (2)$$

Hierbei ist der Druck durch  $p$  und der Stresstensor der Phase  $i$  durch  $\tau_i$  gekennzeichnet. Zusätzlich zu diesen Gleichungen muss für die Zweiphasenströmung die Erhaltung des Phasenanteils gewährleistet sein:

$$\alpha_c + \alpha_d = 1. \quad (3)$$

Die Phaseninteraktion wurde durch den Widerstandsterm berücksichtigt. Die Widerstandskraft wird durch Gleichung 4 beschrieben:

$$F_{d,i} = \frac{3\rho_c \alpha_c \alpha_d C_d |\vec{u}_d - \vec{u}_c| (u_{d,i} - u_{c,i})}{4d_d}, \quad (4)$$

wobei  $C_d$  über das Modell von Schiller-Naumann [10] berechnet wird.

### B. Populationsbilanzgleichung

Die Populationsbilanzgleichung wird generell in Termen der Anzahlkonzentration  $N$  ausgedrückt :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\rho_d N(V, t)] + \nabla_e \cdot [u \rho_d N(V, t)] \\ + \nabla_i \cdot [G \rho_d N(V, t)] = \rho_d S(V, t), \end{aligned} \quad (5)$$

wobei  $V$  das Tropfenvolumen und  $S(V, t)$  der Quellterm zur Berücksichtigung von Teilung und Koaleszenz durch die Interaktion der Tropfen ist. Der Wachstumsterm  $G$  wird bei Massentransferberechnungen benötigt und wird hier vernachlässigt. Der Quellterm besteht aus vier Termen, jeweils zwei für den Zerfall von Tropfen und zwei für die Koaleszenz der Tropfen. Die zwei Terme berücksichtigen jeweils die Entstehung neuer Tropfen mit einer bestimmten Größe und die damit einhergehende Auslöschung von Tropfen einer bestimmten Größe.

$$\begin{aligned} S(V, t) = B^C(V, t) - D^C(V, t) \\ + B^B(V, t) - D^B(V, t) \end{aligned} \quad (6)$$

Die Zerfalls- und Koaleszenzkernel sind Funktionen der Tropfengröße, systemtypische Parameter wie Viskosität und Oberflächenspannung sowie der turbulenten Energie. Die One

Primary One Secondary Particle Methode (OPOSPM), entwickelt von Attarakih et al. [11], ist ein Spezialfall der Sectional Quadrature Method of Moments (SQMOM), wobei hier nur ein primäres und ein sekundäres Partikel verwendet wird. Die primären Partikel stellen hierbei die Klassen dar, wobei bei der OPOSP Methode die Tropfenverteilung durch eine Tropfengröße in jeder Zelle ausgedrückt wird. Die sekundären Partikel können als Lagrange fluide Partikel verstanden werden, die Informationen über die Tropfenpopulation transportieren. Daher wird die Populationsverteilung durch ein einzelnes Partikel repräsentiert, welches eine Kugelform besitzt und deren Position (Größe) durch den mittleren Masseudurchmesser gegeben ist:

$$d_{30} = \sqrt[3]{\frac{\pi \alpha_d}{6 N_d}} = \sqrt[3]{\frac{m_3}{m_0}}, \quad (7)$$

wobei die totale Anzahl  $N$  und die Volumenkonzentration  $\alpha_d$  dem nullten Moment ( $m_0$ ) und dem dritten Moment ( $m_3$ ) der Distribution entsprechen. In der Literatur wird häufig der Sauter Durchmesser verwendet. Aufgrund des nicht vorhandenen zweiten Moments in der CFD erscheint die Verwendung des  $d_{30}$  zielführender für die Simulation. Durch die Verwendung des nullten Moments, d.h. der Anzahl der Tropfen ist das Modell mathematisch konsistent. Das dritte Moment wird für die Zweiphasenkopplung auf Eins normiert und führt zu:

$$d_{30} = \sqrt[3]{\frac{1}{m_0}} \quad (8)$$

Da das dritte Moment der Kontinuitätsgleichung der dispersen Phase entspricht (welche im CFD Solver vorhanden ist), muss nur das nullte Moment durch eine UDF beschrieben werden. Die Quellterme für Zerfall und Koaleszenz werden von jeder Zelle vom CFD Solver zurückgegeben. Der Quellterm für die Tropfenzerfall  $g(d_{30})$  Koaleszenz  $a(d_{30}, d_{30})$  ist wie folgt definiert:

$$S = (n_d(d_{30}) - 1) N_d - \frac{1}{2} a(d_{30}, d_{30}) N_d^2, \quad (9)$$

wobei  $n_d$  die Anzahl der Tochtertropfen,  $N_d$  die Anzahl der Partikel ist. Mehr Details über die Kopplung von CFD in Zusammenhang mit dem OPOSPM Modell und dem verwendeten Zweiphasenmodell sind in [9] gegeben. Die Koaleszenzrate  $a(d_{30}, d_{30})$  setzt sich aus der Koaleszenzeffizienz  $\lambda(d, d)$  und der Kollisionsrate  $h(d, d)$  zusammen und wird durch das Modell von Prince und Blanch [1] beschrieben:

$$\lambda(d_{30}, d_{30}) = \exp\left(-\frac{(d_{30}/4)^{5/6} \rho_c^{1/2} \epsilon^{1/3}}{4\sigma^{1/2}} \ln\left(\frac{h_0}{h_c}\right)\right) \quad (10)$$

$$h(d_{30}, d_{30}) = 0.089\pi(d_{30} + d_{30})^2 \epsilon^{1/3} (d_{30}^{2/3} + d_{30}^{2/3})^{1/2} \quad (11)$$

Hierbei ist  $\epsilon$  die Energiedissipation,  $\sigma$  die Grenzflächenspannung und  $h_0$  die Filmdicke und  $h_c$  die kritische Filmdicke, wobei das Verhältniss der Filmdicken nach Drumm et al. [12] auf  $10^4$  gesetzt wurde.

Zur Beschreibung des Tropfenzerfalls wird das Modell Martínez-Bazán et al. [2] verwendet:

$$g(d_{30}) = \frac{K \sqrt{\beta_0 (\epsilon d)^{2/3} - 12(\sigma/(\rho d))}}{d_{30}} \quad (12)$$

K ist eine Konstante, die vom ursprünglichen Wert von 0.25 auf einen Wert von 1 gesetzt wurde, um die anpassbaren Parameter zu reduzieren (Drumm et al. [12]).

Die Kenngröße  $\beta_0$  wurde in vorangegangenen Arbeiten angepasst.

Die Anzahl der Tochtertropfen wurde mit Hilfe einer Hochgeschwindigkeitskamera durch Einzeltropfenversuche in der Miniplant Kühni Kolonne (s. Abb. 4) bestimmt. Einzeltropfen wurden über eine Zweistoffdüse erzeugt, womit die Ablösezeit des Tropfens von der Kapillare sowie die Tropfengröße durch ein um die Kapillare strömendes Fluid beeinflusst werden kann. Der Abstand zwischen den erzeugten Tropfen wurde so groß gewählt, dass sich immer nur ein Tropfen im Kompartiment befand. Die entstehenden Tropfen bei einem Zerfallsprozess wurden anschließend über die Videoaufnahmen ausgewertet.

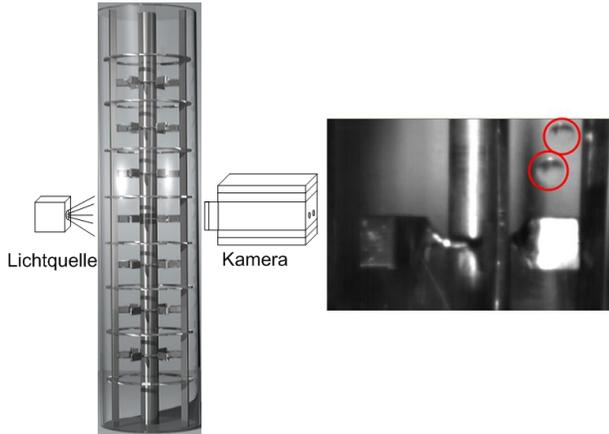


Abb. 4. Tropfenzerfallsbestimmung

### C. Visualisierung

Durch die Verwendung von modernen Visualisierungstools wird es dem Anwender bzw. dem Forscher ermöglicht, die Simulation besser zu analysieren. In einem ersten Schritt wurde dazu die Geometrie auf Basis der Simulationsdaten visualisiert und ist bereits in der Einleitung dargestellt. Dabei wurde auf eine möglichst detailgetreue Darstellung der metallenen Rührer und des Glasschusses Wert gelegt (vgl. Abb. 4).

Die Tropfengröße und damit auch die Anzahl der Tropfen stellt eine kritische Größe in der Kolonne dar. Da diese durch das benutzte Modell als Mittelwerte im Gitter berechnet werden, repräsentieren diese eine Wahrscheinlichkeit. Die Schwierigkeit bei der Visualisierung der Tropfen in der Kolonne ist die Bestimmung der Tropfenposition und der Tropfengröße. Stochastische Modellierung ist daher einer der möglichen Wege, um die Position der visualisierten Partikel zu bestimmen. Für jeden Zeitschritt kann eine Anzahl von N Tropfen mit einem Durchmesser von d in einer Zelle

durch eine homogene Verteilungsfunktion für die Tropfenmitte  $[p_x, p_y, p_z]$  dargestellt werden:

$$p(x) \begin{cases} \frac{1}{x_{Zellmax.} - x_{Zellmin.}}, & \text{wenn } x_{Zellmin.} \leq x \leq x_{Zellmax.} \\ 0 & \text{ansonsten.} \end{cases}$$

Adäquate Formeln gelten für die Komponenten  $p_y, p_z$ . Die Anzahl der Tropfen N kann durch folgende Gleichung beschrieben werden:

$$\sum N \times V_{\text{jeder Tropfen}} = \alpha \times V_{\text{Zellenvolumen}},$$

wobei  $\alpha$  den Phasenanteil der dispersen Phase darstellt und durch die Simulationsdaten zur Verfügung gestellt wird.

Neben der Tropfenvisualisierung soll durch eine Kombination der CFD mit der Tropfenvisualisierung die Verfolgung einzelner Tropfen sowie durch Erweiterungen die Visualisierung des Tropfenzerfalls und der Tropfenkoaleszenz ermöglicht werden. Hierzu erfolgte in einem ersten Schritt die Visualisierung des Vektorfeldes in der Auswertesoftware und um diese um Partikelbahnen zu erweitern. Die Partikelbahnen zeigen den Weg der Tropfen durch die Kolonne über die Zeit. Der Start einer solchen Partikelbahn wird durch den Einlass der Kolonne definiert und endet am Auslass einer Kolonne bzw. durch einen Zerfall des Tropfens. Die mathematische Beschreibung der Tropfen erfolgt durch:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \vec{p}(x, y, z) = \vec{v}(p, t) \\ \vec{p}(t_0) = \vec{p}_0 \end{cases}$$

Die Partikelbahnen der Tropfen können für eine kontinuierliche Visualisierung der Tropfenverteilung verwendet werden. Überschneidungen zweier Bahnen können als Indikator einer Tropfenkoaleszenz verwendet werden.

## IV. ERGEBNISSE UND DISKUSSION

In vorangegangenen Forschungsarbeiten wurde der Zerfallskern aus dem Modell an die Ergebnisse von Steinmetz et al. [13] angepasst. Die Tochtertropfenanzahl ergab sich aus den Einzeltropfenexperimenten. Es wurden im Mittel 4 Tochtertropfen festgestellt. Durch die Kopplung von CFD mit PBM wurde eine Aussage über die Tropfengröße ermöglicht. Die simulierte Tropfengröße mit dem gekoppelten CFD-PBM Tool ist in Abb. 5 für die gesamte Kolonne sowie vergrößert für ein einzelnes Kompartiment dargestellt. Die Tropfen koaleszieren unterhalb der Statoren und werden durch den Energieeintrag des Rührers zerteilt. Die Tropfengröße im Bereich des Rührers bei 2,6 mm und sinkt aufgrund der steigenden Turbulenz auf 2,4 mm direkt an der Rührerspitze ab. Durch Koaleszenz steigt die Tropfengröße auf 3,1 mm unterhalb der Statoren wieder an.

Durch eine erweiterte Visualisierung wird eine Kombination des Tropfendurchmessers mit dem Phasenanteil erzielt, womit Aussagen über die Tropfenverteilung im dreidimensionalen Raum durch eine einzelne Abbildung, die den real sichtbaren Verhältnissen entspricht, getroffen werden können. Dies ist in Abb. 6 dargestellt. Die Tropfen treten durch den unteren

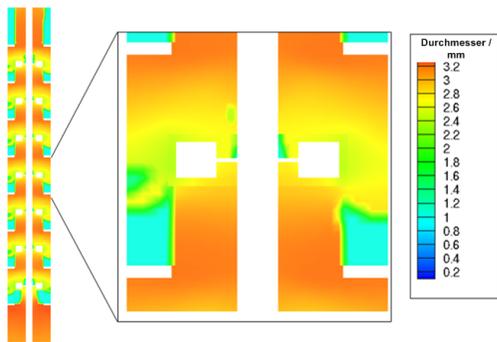


Abb. 5. Tropfengrößenverteilung dargestellt als Schnitt durch die Kolonne

Statorring in das Kompartiment ein. Im unteren Bereich des Kompartiments sind die Tropfen auf die Mitte des Kompartiments hin konzentriert, während sie im oberen Teil durch die Rührerwirkung verteilt werden. Das Vektorfeld ist in Abb. 7 gezeigt, wobei zur Übersichtlichkeit die Anzahl der Vektoren reduziert wurde.

Die Visualisierung bietet die Möglichkeit der Filterung von Daten, z.B. extrem großer bzw. kleiner Tropfen und wird durch die Visualisierung der Zerfallswahrscheinlichkeit sowie der Koaleszenzwahrscheinlichkeit ergänzt.

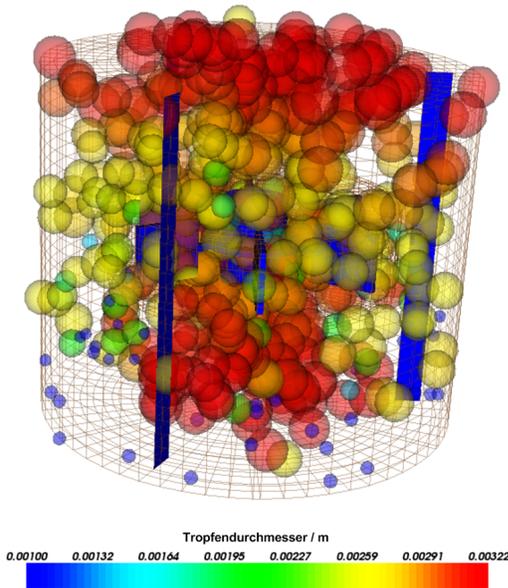


Abb. 6. Darstellung der Tropfen sowie der Tropfengrößenverteilung

## V. ZUSAMMENFASSUNG

Die Simulationen der sich im Gegenstrom befindlichen Zweiphasenströmung für die Miniplant Extraktionskolonne vom Typ Kühni wurde mit dem CFD solver (FLUENT) gekoppelt mit Populationsbilanzmodellen durchgeführt. Hierfür wurde ein Eingruppenmodell, das One Primary One Secondary Particle Modell, für die Zweibegekoppelung verwendet. Zur Berücksichtigung von Koaleszenz und Zerfall der Tropfen

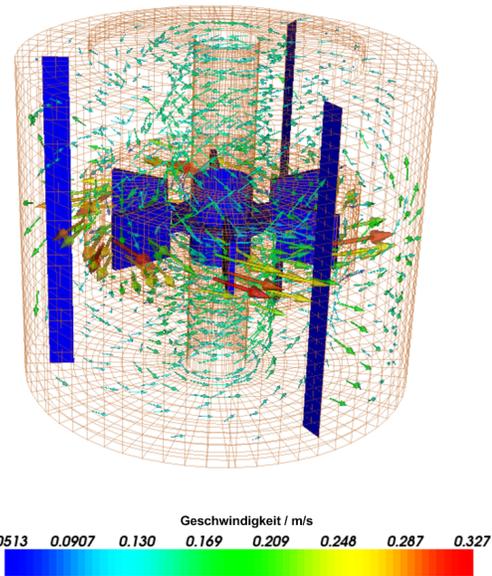


Abb. 7. Vektorfeld der kontinuierlichen Phase im Kompartiment

wurde ein kombiniertes Modell, bestehend aus dem Zerfallskern von Martínez-Bazán [2] und dem Koaleszenzkern von Prince und Blanch [1] verwendet. Durch gemittelte Daten auf Basis stochastischer Modelle erfolgte eine Visualisierung der Tropfen, womit erstmals zwei Parameter, der Phasenanteil und die Tropfengröße kombiniert in einer Abbildung dargestellt werden können.

## VI. AUSBLICK

Das bestehende CFD Modell wird durch weitere Koaleszenz- und Teilungskern erweitert werden, um eine umfangreiche Basis für verschiedene Stoffeigenschaften sicherzustellen. Eine Implementierung von Massentransfer wird zunächst anhand des zweidimensional rotationssymmetrischen Modells der RDC Kolonne erfolgen und mit Literaturdaten sowie eigenen Messungen validiert werden. Eine Übertragung der Ergebnisse auf unterschiedliche Kolonnengrößen sowie ist in naher Zukunft geplant. Die Visualisierung wird durch die Möglichkeit zur Erstellung von Animationen bewegter Tropfen erweitert werden. 3D Partikelbahnen können durch eine Standard-Integrationsmethode eingebunden werden. Die Implementierung von Tropfenkollisionen und Tropfenteilungen in die Visualisierungsumgebung erfordern zusätzliche Modellierung sowie Implementierungen. Topologische Analysen der transienten Tropfengrößenverteilung sind dazu mit dem Morse-Smale Komplex sowie mit Reeb Graphs geplant.

## DANKSAGUNG

This work was financially supported by the State Research Centre of Mathematical and Computational Modelling and the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG), Bonn.

## LITERATUR

- [1] M. J. Prince and H. W. Blanch, "Bubble Coalescence and Break-up in Air-Sparged Bubble Columns," *AIChE J.*, vol. 36, no. 10, pp. 1485–1499, 1990.
- [2] C. Martínez-Bazán, J. L. Monatenes, and J. C. Lasheras, "On the Breakup of an Air Bubble injected into a Fully Developed Turbulent Flow. Part I. Breakup frequency," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 401, pp. 157–182, 1999.
- [3] G. Modes and H.-J. Bart, "CFD Simulation of Nonideal Dispersed Phase Flow in Stirred Extraction Columns," *Chem. Eng. Technol.*, vol. 24, no. 12, pp. 1242–1245, 2001.
- [4] R. Rieger, C. Weiss, G. Wigley, H. J. Bart, and R. Marr, "Investigating the Process of Liquid-Liquid Extraction by means of Computational Fluid Dynamics," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 20, no. 12, pp. 1467 – 1475, 1996.
- [5] T. Haderer, R. Marr, S. Martens, and M. Siebenhofer, "Bestimmung auslegungsrelevanter hydrodynamischer Kenngrößen einer RDC-Extraktionskolonne mit CFD," *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 77, no. 8, pp. 1055–1055, 2005.
- [6] P. Kolb, "Hydrodynamik und Stoffaustausch in einem gerührten Miniplantextraktor der Bauart Kühni," Dissertation, TU Kaiserslautern, Germany, 2005.
- [7] F. Wang and Z.-S. Mao, "Numerical and Experimental Investigation of Liquid-Liquid Two-Phase Flow in Stirred Tanks," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 44, no. 15, pp. 5776–5787, 2005.
- [8] A. Vikhansky and M. Kraft, "Modelling of a RDC using a combined CFD-population balance approach," *Chemical Engineering Science*, vol. 59, no. 13, pp. 2597 – 2606, 2004.
- [9] C. Drumm, M. Attarakih, M. W. Hlawitschka, and H.-J. Bart, "One-Group Reduced Population Balance Model for CFD Simulation of a Pilot-Plant Extraction Column," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 49, no. 7, pp. 3442–3451, 2010.
- [10] L. Schiller and Z. Naumann, "Über die grundlegenden Berechnungen bei der Schwerkraftaufbereitung." *Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieure*, vol. 77, p. 143, 1935.
- [11] M. M. Attarakih, M. Jaradat, C. Drumm, H.-J. Bart, S. Tiwari, V. K. Sharma, J. Kuhnert, and A. Klar, "Solution of the Population Balance Equation using the One Primary and One Secondary Particle Method (OPOSPM)," *Proc. ESCAPE, Cracow, Poland, June 14-17.*, vol. 19, 2009.
- [12] C. Drumm, M. M. Attarakih, and H.-J. Bart, "Coupling of CFD with DPBM for an RDC extractor," *Chemical Engineering Science*, vol. 64, pp. 721–732, 2009.
- [13] T. Steinmetz, *Tropfenpopulationsbilanzgestütztes Auslegungsverfahren zur Skalierung einer gerührten Miniplant-Extraktionskolonne.* Fortschr.-Ber. VDI, Reihe 3, Nr. 885, Düsseldorf: VDI Verlag, 2007.