

# Trends in der Mehrphasensimulation

## Fortgeschrittene Ansätze zur Modellierung von Zerstäubung und Sprayausbreitung

Die Entwicklung neuer Hybridmodelle in der Mehrphasen-Strömungssimulation ermöglicht eine ganzheitliche Betrachtung von verfahrenstechnischen Prozessen. Damit können bei der Zerstäubung die Einflüsse der Düse und der gewählten Betriebsparameter auf die entstehende Partikelgröße und die späteren Sprayeigenschaften vorhergesagt und zur gezielten Prozessoptimierung genutzt werden. Dies ermöglicht eine geschlossene und damit wesentlich genauere Abbildung des Gesamtprozesses von der initialen Zerstäubung bis zur finalen Sprayausbreitung, die gerade für viele verfahrenstechnische Folgeprozesse eine hohe Bedeutung hat.

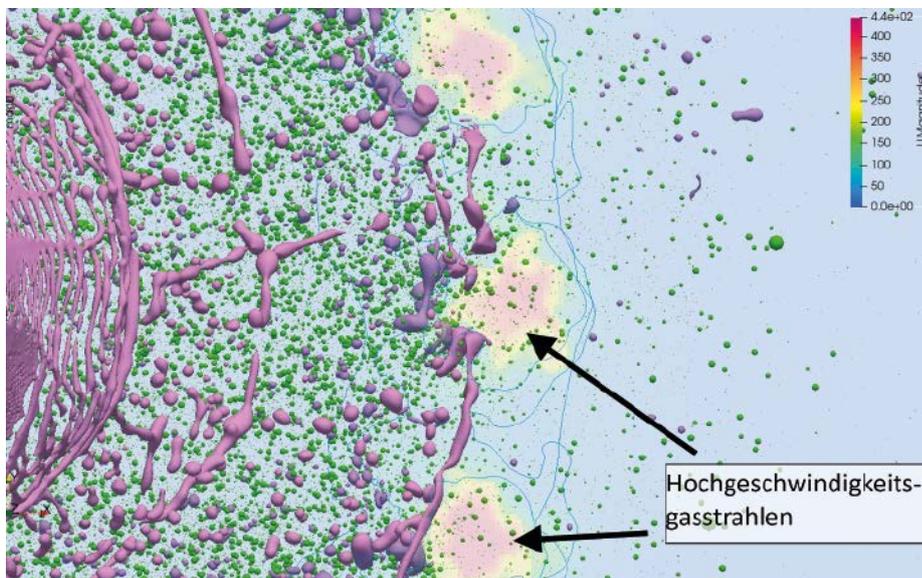


### Keywords

- Mehrphasenmodellierungen
- Strömungssimulation
- Partikelgrößen
- Prozessoptimierung

Strömungssimulationen (CFD) sind entscheidend in der Verfahrenstechnik, um dynamische Effekte von Flüssigkeiten und Gasen in Anlagen zu verstehen. Sie verbessern die Effizienz, Sicherheit und Nachhaltigkeit, indem sie verlustreiche Engpässe, störende Turbulenzen und ungleichmäßige Anströmungen identifizieren und Maßnahmen zu deren Minimierung ergreifen lassen. Dadurch werden Anlagen optimiert, Kosten eingespart und die Produktivität gesteigert.

Hierbei spielen insbesondere in der Verfahrenstechnik mehrphasige Systeme eine besonders wichtige Rolle. Typische Beispiele sind Blasensäulenreaktoren, Rührer mit freien Oberflächen, Wäscher mit Sprays, Filtrationsanwendungen, Zyklonabscheider und vieles mehr. In diesen Anwendungen sind mehrere Phasen gleichzeitig vorhanden, seien es Gas-Flüssigkeits-Strömungen, Feststoff-Flüssigkeits-Inter-



Zerfall von Ligamenten bei der Zweistoffzerstäubung.

aktionen oder sogar komplexe Mischungen. Je nach Anwendungsfall müssen in der Strömungssimulation unterschiedliche physikalische Effekte wie Phasenübergänge, Koaleszenz, Tropfenbildung und -zerstäubung oder Partikelablagerungen abgebildet werden.

### Volume-of-Fluid (VoF)- und Euler-Lagrange-Verfahren

In der Strömungssimulation werden verschiedene Mehrphasenmodelle eingesetzt, um komplexe Strömungsphänomene zu analysieren. Eines der am häufigsten verwendeten Modelle ist das Volume-of-Fluid (VoF)-Verfahren, bei dem die Grenzfläche zwischen Phasen wie Luft und Flüssigkeit verfolgt wird. Dieses Modell wird verwendet, um z.B. das Schwappen von Flüssigkeiten, Füllvorgänge oder den Zerfall von Flüssigkeitsstrahlen bei der Zerstäubung in Luft zu analysieren.

Das Euler-Lagrange-Verfahren hingegen betrachtet eine Phase als kontinuierliches Fluid und die andere Phase als dispergierte Partikelphase. Dieses Modell wird häufig in der Verfahrenstechnik eingesetzt, um die Bewegung und das Verhalten von Feststoffpartikeln in Flüssigkeiten oder Gasen zu untersuchen. Auch in der Spraymodellierung wird dieses Modell verwendet, wobei die Tropfen die diskrete Phase in der als kontinuierliche Phase modellierten Luft darstellen.

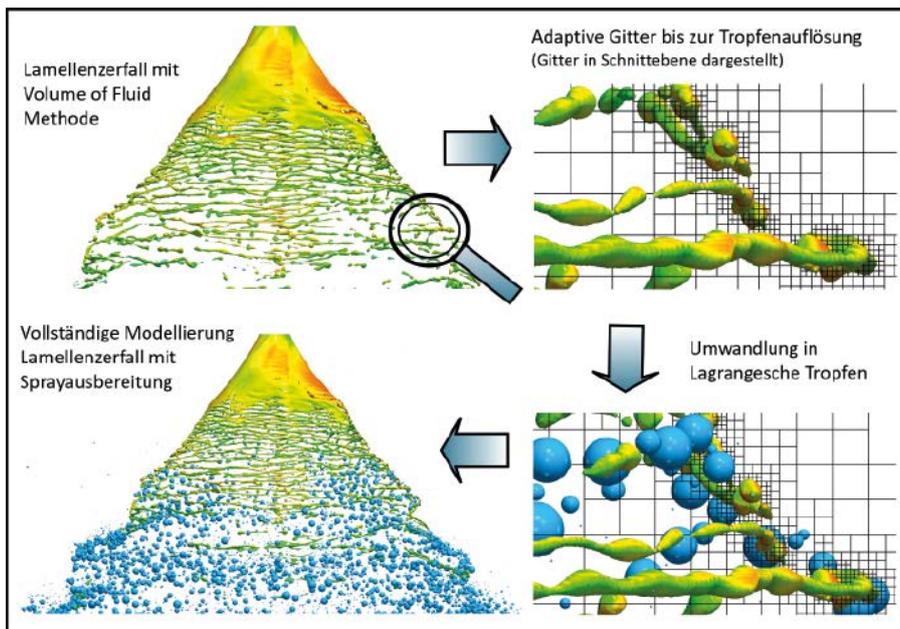
Die Anwendung der Modelle ist dadurch begrenzt, dass häufig nur lokale Phänomene innerhalb eines Gesamtprozesses modelliert

werden können. So wird bei der Zerstäubung der initiale Flüssigkeitszerfall aufgrund der dominierenden Grenzflächeneffekte üblicherweise mit einer Volume-of-Fluid-Methode modelliert, die aber für die spätere Spraymodellierung nicht verwendet werden kann, da zu viele Tropfen mit ihren Grenzflächen aufgelöst werden müssten. Um eine geschlossene Simulation vieler Prozesse zu erreichen, ist es daher notwendig, hybride Übergangsmodelle zu entwickeln, in denen eine Modellbetrachtung konsistent in andere überführt wird.

Hier ist gerade die Verfahrenstechnik ein wichtiges Anwendungsgebiet für ein Gesamtmodell aus Zerstäubung und Sprayausbreitung, da nach einer Zerstäubung die späteren Umwandlungsvorgänge im Spray letztendlich über den Gesamtprozess entscheiden. Beispiele für diese Anwendungen sind z.B. Wäscher, Verdunstungskühler, NOX-Reduktion durch SCR-Prozesse, Sprühtrockner, Luftbefeuchter oder die Pulverherstellung durch Verdüsung.

### Modellierung der Zerfallsbereiche

Die Zerstäubung von Flüssigkeiten erfolgt typischerweise in speziellen Düsen, bei der Einstoffzerstäubung z.B. in Druck- oder Dralldüsen, die eine hohe kinetische Energie in das zu zerstäubende Medium einbringen. Wird die Flüssigkeit dann in die Umgebung eingespritzt, zerwellt der Flüssigkeitsstrahl, es schnüren sich Ligamente ab, die in Tropfen zerfallen. Bei diesem initialen Zerfall, der durch viskose, turbu-



Übergangsmodellierung vom VoF zum Euler-Lagrange-Verfahren.

lente, Trägheits- und Oberflächenkräfte geprägt ist, muss das Wechselspiel der Kräfte an der Grenzfläche detailliert aufgelöst werden. Da in der Strömungssimulation die Ausbreitung der beiden Phasen auf einzelnen Zellen, dem numerischen Gitter, berechnet wird, ist es notwendig, dieses Gitter adaptiv an der Phasengrenzfläche zu verfeinern. Dies ist insbesondere für den Einfluss der Oberflächenspannung wichtig, da nur bei einer genauen Auflösung der Krümmung des Ligaments bzw. des sich einschnürenden Tropfens die Druckkräfte durch die Oberflächenspannung ausreichend genau abgebildet werden. Üblicherweise werden dazu die Zellen des Ausgangsgitters 6 bis 7-mal geteilt, was zu einer Verkleinerung der

charakteristischen Länge, z.B. eines aufzulösenden Tropfendurchmessers, um den Faktor 100 führt.

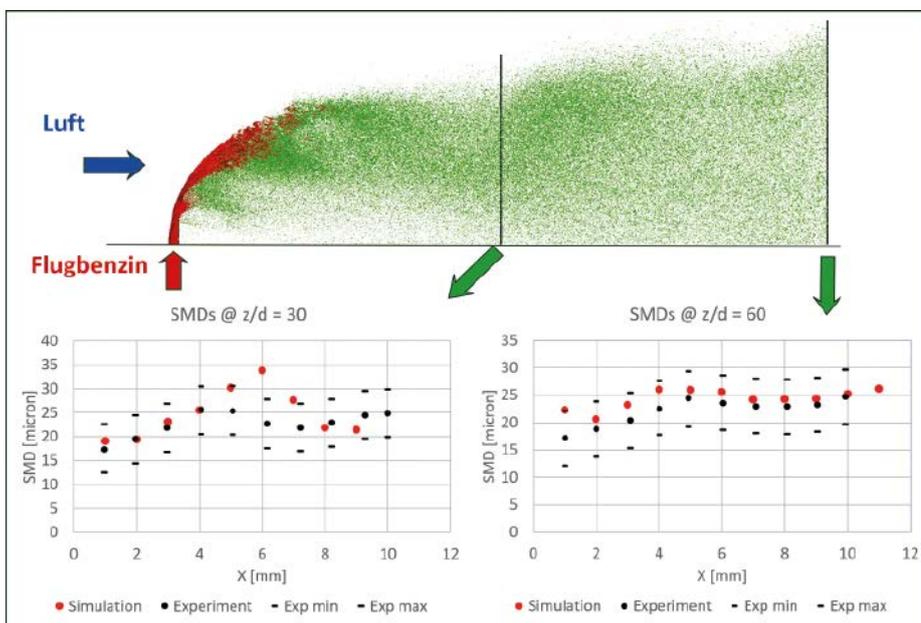
### Modell für den Übergang von VoF zu Lagrange-Partikeln

Nach der Verfolgung der zusammenhängenden Phasen erfolgt die Umwandlung der abgelösten Tropfen in diskrete Lagrangesche Partikel. Dazu werden verschiedene Kriterien wie die Sphärizität oder die Größe der gebildeten Tropfen herangezogen. Jeder so identifizierte mit Flüssigkeit gefüllte Zellbereich wird in einen volumengleichen Tropfen umgewandelt und als diskretes Element weiter durch den Strömungsraum transportiert. Das Gitter um

einen umgewandelten Lagrangeschen Tropfen kann nun direkt vergrößert werden. Der weitere Transport erfolgt durch Kräftebilanzen an den einzelnen Tropfen, wobei auch Rückwirkungen auf die Gasphase berücksichtigt werden, wenn z.B. die Tropfengeschwindigkeit von der Gasgeschwindigkeit abweicht. Die Tropfen in der Lagrangeschen Spraymodellierung können nun weiter zerfallen (Sekundärzerfall), wenn z.B. eine kritische Weberzahl erreicht wird, die im Wesentlichen die Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gas darstellt.

Das Modell für den Übergang von VoF zu Lagrange-Partikeln wurde in die Open-Source-CFD-Toolbox OpenFOAM integriert, die bereits einen wesentlichen Teil der erforderlichen Lösungsverfahren wie VoF und Lagrangeschen Partikeltransport als Basis bereitstellt. Auch die erforderlichen Large-Eddy-Turbulenzmodelle sowie Methoden zur adaptiven Gitterverfeinerung liegen bereits in OpenFOAM vor. Das Übergangsmodell wurde im Rahmen eines mehrjährigen Kooperationsprojektes zur Entwicklung einer neuen Düsenteknologie für die Zerstäubung von Metallschmelzen entwickelt und mit Experimenten des Projektpartners Universität Bremen validiert.

### Partikelgrößen im Spray: Vergleich Simulation und Experiment.



### Vorhersagequalität und Anwendung

Die gute Vorhersagequalität eines solchen Simulationsmodells für die Zerstäubung und Sprayausbereitung zeigt auch der Vergleich mit dem in der Literatur häufig zitierten Kraftstoffeinspritz-Benchmark<sup>[1]</sup>. Dieser anspruchsvolle Benchmark zeichnet sich durch eine detaillierte und mehrfach reproduzierte experimentelle Datenbasis aus. Hierbei wird Flugbenzin über eine Düse in eine Querströmung mit Luft eingespritzt. Im Versuchsaufbau werden

neben der Strahlablenkung auch ortsaufgelöste Tropfengrößen in verschiedenen Abständen bestimmt. Die gemessenen Partikelgrößen in beiden Messebenen und unterschiedlicher Höhe stimmen sehr gut mit der Simulation überein. Die in der Simulation ermittelten Partikelgrößen liegen im Schwankungsbereich der experimentellen Daten.

Die CFD-Modellierung liefert eine detaillierte Auflösung der Vorgänge bei der Zerstäubung und bietet damit die Möglichkeit, diese Prozesse zu optimieren. Das Modell erlaubt nicht nur die Vorhersage der Partikelgröße und der Sprayausbreitung während der Zerstäubung, sondern schafft auch einen detaillierten Einblick in den Zerstäubungsprozess. Daraus sind gezielte Maßnahmen zur Optimierung ableitbar. Ein Beispiel zeigt die Zerstäubung mit Gasstrahlen zur Entwicklung einer neuen Düsenteknologie für die Metallpul-

verherstellung: Die Wechselwirkung der Ligamente mit den Gasstrahlen und die Tropfenbildung werden in der Simulation abgebildet. Die Abstände der Strahlen im Gasdüsenfeld können so optimiert werden, dass keine Ligamente das Düsenfeld durchdringen. Durch die geschlossene Simulation können die Auswirkungen von Änderungen der Düsengeometrie, den Betriebsbedingungen oder des Gasfeldes vorab analysiert und bis zur entstehenden Partikelgrößenverteilung im Pulver modelliert werden.

#### Quelle:

[1] Sekar J, Rao A, Pillutla S, Danis A, Hsieh S-Y. Liquid jet in cross flow modeling. In Proceedings of ASME turbo expo 2014: turbine technical conference and exposition. Düsseldorf, Germany; 2014.

#### Die Autoren



**Dr. Ulrich Heck,**  
Geschäftsführer,  
DHCAE Tools



**Martin Becker,**  
Softwareentwickler,  
DHCAE Tools

Wiley Online Library



**DHCAE Tools GmbH, Krefeld**

Tel.: +49 2151 9490 - 201

info@dhcae-tools.de · www.dhcae-tools.de

## Testanlage für Materialtransport und -verarbeitung



Automated Handling Solutions (AHS) und Advanced Material Processing (AMP) eröffnen eine neue Testanlage in Mitteldeutschland, die ganz Europa bedienen soll. AHS vereint die Materialtransportsysteme von Spiroflow und Cablevey Conveyors und AMP die Materialverarbeitungssysteme von Kason Corporation und Marion Process Solutions.

Das 1000 m<sup>2</sup> große Gelände befindet sich in günstiger Lage in der Nähe des Frankfurter Flughafens. Anwender können hier die gesamte Produktpalette aller vier Geschäftsbereiche erleben, darunter das T6- und das T3-Bulk-Bag-Entleergerät, den 3- und den 4-Zoll-AMC-Förderer, ein komplettes Sortiment an flexiblen Schneckenförderern, Low-Profile-Bulk-Bag-Füllern, CTE-Füllern und Smart 4-Behältern. Vor Ort befinden sich zudem der 6-Zoll-Cablevey-Förderer mit Wash-Down-Clean-in-Place, der M1 Centri-Sifter, Mehrdecksiebe, das 24-Zoll-Vibro-Bed-Trocknungssystem, Wirbelschichttrockner, Vibroscreen und Klumpenbrecher sowie M0-Mischer. Das Testzentrum umfasst außerdem ein Ersatzteil- und Servicezentrum sowie ein Pulverlabor, in dem Kundenmaterialien vor der Durchführung von Massentests bewertet werden können. Hier können Materialeigenschaften, wie Schüttdichte, Feuchtigkeitsgehalt und Schüttwinkel, ermittelt werden, um die Fließfähigkeit des Materials zu bestimmen. Der Standort ist mit einer Vollstaubabsaugung ausgestattet.

<https://amp-ahs.com>

## Kleine Helfer mit großer Wirkung

Wolftechnik stellt neue Filterbeutel-Ein- und Ausbauhilfen der Reihe WTBF-EABH aus Edelstahl vor, mit der sich Vliesfilterbeutel sauber und einfach ein- und ausbauen lassen. Durch den ringförmigen Kopf wird der Filterbeutel schon beim Einsetzen schonend aufgeweitet und legt sich beim Einströmen der Flüssigkeit sicher am Druckaufnahmekorb an. Beim Filterwechsel dienen die angeschweißten Widerhaken als Ausbauhilfe. Der verblockte Filterbeutel kann so berührungslos aus dem Beutelfiltergehäuse herausgezogen werden. Die leichte und handliche Einbau-/Ausbauhilfe ist leicht zu reinigen und eignet sich für alle gängigen Filterbeutel aus Polypropylen (PP) oder Polyethylen (PE) sowie für Filterbeutel mit Kunststoff-Abdichtkragen oder eingnähtem Metallring – auch bei Fabrikaten anderer Hersteller. Neu ist auch die leichte, robuste Kerzenfilter-Ausbauhilfe WTKF-ABH aus Edelstahl, mit der sich Filterelemente in Kerzenfiltergehäusen sicher und sauber entfernen lassen. Sie eignet sich für alle gängigen Filterelemente unabhängig von der Adapterausführung oder dem Hersteller. Nach dem Wechsel der Filterkerzen lässt sich die Zange ohne großen Aufwand reinigen.



[www.wolftechnik.de](http://www.wolftechnik.de)

**CITplus**  
IN SIGHT



Registrieren Sie sich hier:  
[www.chemanager-online.com/citplus/newsletter](http://www.chemanager-online.com/citplus/newsletter)

**WILEY-VCH**