

Lagrangesche Berechnung von Agglomeratstrukturen am Beispiel eines Sprühtrockners

Dissertation

zur Erlangung des
Doktorgrades der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

des
Zentrums für Ingenieurwissenschaften
Lehrstuhl Mechanische Verfahrenstechnik
der
Martin-Luther-Universität
Halle-Wittenberg

vorgelegt
von Herrn Sebastian Stübing
geb. am 01.03.1979 in Alfeld (Leine)

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. habil. M. Sommerfeld
Prof. Dr. rer.nat. A. Sadiki (TU Darmstadt)

Tag der öffentlichen Verteidigung: 23. Juni 2014

“It’s a long way to the top (if you wanna Rock `n` Roll)”

AC•DC

“Ausdauer wird früher oder später belohnt. Meistens später.“

Wilhelm Busch

Vorwort

Diese Arbeit entstand im Wesentlichen während meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl Mechanische Verfahrenstechnik der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg. Mein ganz besonderer Dank geht an meine ehemaligen Kollegen die für eine angenehme Arbeitsatmosphäre gesorgt haben. Vor allem ohne Mathias Dietzel, die gute Seele des Lehrstuhls, wären viele Dinge nicht möglich gewesen. Bei Martin Ernst bedanke ich mich dafür, dass er durch seine hingebungsvolle Arbeit den Linux Cluster immer verfügbar gehalten hat. Danke auch an Stefan Horender, der viele Fragen zum theoretischen Hintergrund der numerischen Strömungsmechanik ertragen musste und mir immer gute Antworten gegeben hat. Justus Lipowsky danke ich für die große Hilfe bei den vielen Problemen der Programmierung. Allen anderen, die ich nicht namentlich genannt habe, gebührt natürlich ebenso großer Dank. Für die Bereitstellung der Daten zur Simulation eines Sprühtrockners danke ich der Firma Niro A/S in Kopenhagen und insbesondere Herrn Dr. Thorvald Ullum ganz besonders.

Natürlich sei auch Prof. Sommerfeld gedankt, der es mir überhaupt erst ermöglichte, diese Arbeit anzufertigen. Herrn Prof. Sadiki danke ich für die freundliche Übernahme des Koreferats. Für die teilweise finanzielle Unterstützung bedanke ich mich bei der Deutschen Forschungsgesellschaft (DFG).

Die wahrscheinlich wichtigsten Personen, die zum Gelingen einer solchen Arbeit beitragen, sind meine Familie und Freunde, die mich immer unterstützt haben. Meinen Eltern danke ich dafür, dass sie mir eine gute Schulbildung ermöglichten, ohne die diese Arbeit nie hätte entstehen können. Meiner Freundin Christine kann ich für den Rest meines Lebens wahrscheinlich nie gebührend und ausreichend danken, für all die Entbehrungen und schlechte Laune die sie ertragen musste. Danke, dass du an mich geglaubt hast. Ich liebe dich!

Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit wird ein neuartiges Agglomerationsmodell zur Vorusberechnung von Struktureigenschaften sprühgetrockneter Pulver vorgestellt. Bei der Sprühtrocknung wird ein meist flüssiger Suspensionssprühnebel durch Verdampfen des Lösungsmittels in einen trockenen Zustand überführt. Anwendung findet die Sprühtrocknung neben anderen Industriezweigen vor allem in der Herstellung von Milchpulver. Ein wichtiger Aspekt bei der Produktion von sprühgetrockneten Pulvern ist eine gute Wiederlöslichkeit der Partikel. In diesem Zusammenhang stellt die Möglichkeit, bereits bei der Planung und vor Inbetriebnahme von Sprühtrocknern, die Produkteigenschaften der hergestellten Pulver vorzuberechnen zu können einen großen Vorteil dar. An diesem Punkt setzt das hier vorgestellte erweiterte Agglomerationsmodell an.

Im Rahmen des Euler-Lagrange-Ansatzes wurde ein Modell entwickelt, das es ermöglicht anhand der Lagevektoren der einzelnen Primärpartikel, die ein Agglomerat aufbauen, verschiedene Strukturparameter zu berechnen. Folgende Strukturparameter können mit Hilfe des im Folgenden vorgestellten Agglomerationsmodells berechnet werden:

- Porosität der Agglomerate,
- freie Oberfläche im Agglomerat,
- Agglomeratsphärizität,
- verschiedene Äquivalentdurchmesser,
 - Trägheitsradius
 - Durchmesser der volumenäquivalenten Kugel
 - Durchmesser der agglomeratumhüllenden Kugel und
- Fraktale Dimension.

Die Berechnung dieser Strukturparameter ermöglicht es, das entstandene Produkt bereits im Vorfeld zu charakterisieren und weiterer Eigenschaften daraus abzuleiten.

Anhand verschiedener ausgewählter Testfälle sind die unterschiedlichen Modellteile überprüft worden. Bei stochastischen Kollisionsmodellen wird zu jedem Partikel ein fiktiver möglicher Kollisionspartner generiert. Im Falle einer

Kollision wird der Impuls vom fiktiven auf das reale Partikel oder andersherum übertragen. Im Mittel gleicht sich der Impulsaustausch gerade so aus, dass die Gesamtenergie im System konstant bleibt. Diese Untersuchung wurde anhand eines granularen Mediums im Vakuum durchgeführt. In diesem Zusammenhang wurden auch die Kollisionsfrequenzen der einzelnen Partikelfraktionen analysiert.

Bei der Lagrangeschen Berechnung von Partikelflugbahnen werden die einzelnen Partikel als Punktpartikel angesehen. Das Modell bietet verschiedene Möglichkeiten, Agglomerate durch einen Äquivalentdurchmesser darzustellen. Die Verwendung der unterschiedlichen Äquivalentdurchmesser nimmt Einfluss auf das Dispersionsverhalten der betrachteten Partikel. Dieses wurde in einem vertikalen Windkanal in einem weiteren Testfall untersucht.

Für die Simulation eines Sprühtrockners und dabei vor allem für die Voraussage von Produkteigenschaften ist die Berücksichtigung der Partikelagglomeration essentiell. In diesem Zusammenhang wurden verschiedene Testfälle verwendet, bei denen sowohl die Agglomeration trockenerer Partikel mit und ohne Strukturberechnung als auch von viskosen Partikeln untersucht wurden. Auf diese Weise konnten neben der Auswirkung der Auftreffwahrscheinlichkeit auf die Kollisions- und Agglomerationsfrequenzen auch die Bildung neuer Partikelgrößenklassen in Folge der Agglomeration analysiert werden. Vor allem die entstandenen Agglomeratstrukturen von trockenen und unterschiedlich viskosen Partikeln wurden eingehend untersucht und bewertet.

Die Simulationen der verschiedenen Testfälle zeigen, dass das neuentwickelte Agglomerationsmodell plausible Ergebnisse liefert. Bei der Simulation eines industriellen Sprühtrockners im Pilotmaßstab wurde die Anwendbarkeit des Modells auf technische Anlagen unter Beweis gestellt. Mit Hilfe des hier vorgestellten Modells zur Berechnung von Agglomeratstrukturen ist eine Vorausberechnung von Produkteigenschaften möglich. Das Modell kann somit zukünftig einen Beitrag zur Verbesserung des Sprühtrocknungsprozesses leisten.

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	5
Kurzfassung.....	7
1 Einleitung	11
2 Theoretischer Hintergrund	19
2.1 Beschreibung der kontinuierlichen Phase.....	19
2.2 Beschreibung der dispersen Phase.....	30
2.2.1 Kräfte auf Partikel	32
2.2.2 Turbulente Dispersion von Partikeln.....	33
2.2.3 Partikel Kollisionen.....	39
2.2.4 Agglomeration trockener Partikel	45
2.2.5 Partikel Trocknung	46
2.2.6 Kollision viskoser Partikel	51
2.2.7 Kollision flüssiger Tropfen	58
3 Strukturmodellierung von Agglomeraten.....	59
3.1 Berechnung der Agglomeratporosität.....	63
3.2 Berechnung der freien Oberfläche eines Agglomerats.....	67
3.3 Berechnung der Agglomeratsphärizität	67
3.4 Berechnung des Trägheitsradius.....	68
3.5 Berechnung des volumenäquivalenten Kugeldurchmessers.....	69
3.6 Berechnung des umhüllenden Kugeldurchmessers	70
3.7 Berechnung der fraktalen Dimension	70
3.8 Zusammenfassung	73
4 Validierung der Modellteile anhand verschiedener Testfälle.....	75
4.1 Granulares Medium	75
4.2 Agglomeration trockener Partikel ohne Strukturberechnung	84
4.3 Einfluss des Äquivalentdurchmessers auf die Partikeldispersion	89

4.4	Modellierung von Agglomeratstrukturen trockener Partikel in einer homogenen isotropen Turbulenz	95
4.4.1	Monodisperses Partikelsystem	95
4.4.2	Polydisperses Partikelsystem.....	108
4.5	Modellierung von Agglomeratstrukturen viskoser Partikel in einer homogenen isotropen Turbulenz	118
5	Simulation der Agglomeration in einem Sprühtrockner im Pilotmaßstab	126
5.1	Geometrie und Randbedingungen.....	126
5.1.1	Geometrie und Betrieb des Sprühtrockners.....	126
5.1.2	Randbedingungen fluide Phase	128
5.1.3	Randbedingungen disperse Phase.....	129
5.1.4	Randbedingungen Trocknerwände	131
5.1.5	Auslassrandbedingung.....	131
5.2	Durchführung der Simulationen	132
5.3	Modellergebnisse und Diskussion	133
5.3.1	Ergebnisse der Fluidphase	133
5.3.2	Ergebnisse der dispersen Phase	135
5.4	Ausblick.....	146
6	Literaturverzeichnis	148

1 Einleitung

Zur Trocknung von Lösungen, Suspensionen oder Pasten werden innerhalb der Verfahrenstechnik verschiedene Technologien eingesetzt. Eine der weit verbreitetsten ist die Sprühtrocknung. Mittels einer geeigneten Zerstäubereinheit (Düsen, rotierende Scheiben) wird das zu trocknende flüssige Vorlagegut in einen Sprühnebel überführt. Werden die so gebildeten feinen Tröpfchen mit einem Heißgasstrom in Kontakt gebracht, bildet sich durch Verdampfen des Lösungsmittels ein trockenes Pulver. Das getrocknete Pulver wird im Anschluss meist mit Hilfe von Aerozyklonen oder Taschenfiltern vom Heißgasstrom abgetrennt. Abbildung 1.1 zeigt schematisch den Verfahrensschritt der Sprühtrocknung.

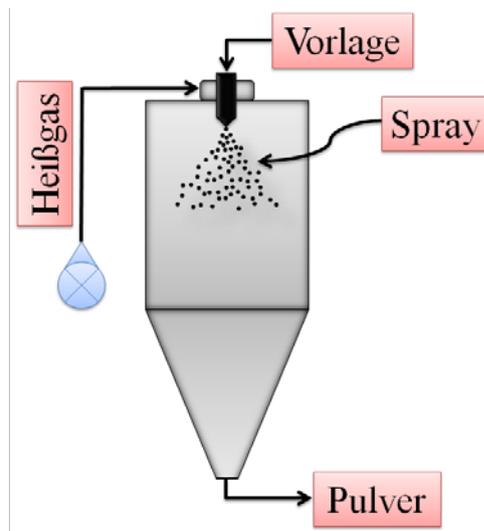


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung des Sprühtrocknungsprozesses.

Der Sprühtrocknungsprozess kann in fünf Stufen unterteilt werden (Masters 2004):

1. Spraybildung: Das zu trocknende Gut wird in einen Sprühnebel überführt. Die Tropfengrößenverteilung beeinflusst sowohl die Bewegung als auch die Trocknung der Partikel.

2. Tropfen-Heißgas-Kontakt: Tropfentrajektorien und Anfangsverdampfungsrate können durch die Gestaltung des Gaseinlasses oder die Lage des Zerstäubers beeinflusst werden.
3. Partikelbildung und -trocknung: In diesem Prozessschritt werden vor allem die Partikelform und -morphologie, sowie die Temperatur und Restfeuchte des Produkts beeinflusst.
4. Partikelsammlung: Hier erfolgt die Abtrennung des getrockneten Pulvers aus dem Gasstrom.
5. Pulvernachbehandlung: Eventuell sind weitere Prozessschritte zur Erfüllung der geforderten Produktqualität notwendig (weitere Trocknung, Agglomeration, Mahlen).

Sprühtrocknung ist ein Prozess, der seit etwa einem Jahrhundert (Gray 1914) Anwendung in der Lebensmittel-, Aroma- und Pharmaindustrie zur Herstellung von Milchpulver und anderen empfindlichen Produkten wie Hormon-, Protein- und Vitaminpräparaten sowie Aromen findet. Auch zur Verkapselung von ätherischen Ölen o.ä. können Sprühtrockner eingesetzt werden. Masters (1991) berichtet, dass die Sprühtrocknung in den letzten drei Jahrzehnten eine sehr hohe Kapazität in der industriellen Trocknung erreicht hat. Dieses Wachstum der Technologie begründet Masters (2004) vor allem darin, dass flüssige Ausgangsstoffe nicht nur direkt in trockene Pulver überführt werden, sondern dass während des Prozesses auch die Pulvereigenschaften kontrolliert werden können. Somit kann auf die Produktqualität direkt Einfluss genommen werden.

In den 1960er Jahren verbesserten laut Masters (2004) drei technologische Durchbrüche den Sprühtrocknungsprozess maßgeblich. Die Möglichkeit nicht-wässrige lösungsmittelhaltige Flüssigkeiten zu handhaben stellte eine große Verbesserung dar. Weiterhin ermöglichte die Entwicklung der Rotationszerstäubung abrasive Suspensionen bei hohen Durchflussraten zu trocknen. Als dritten Durchbruch in der Sprühtrocknung nennt Masters (2004) die Kombinationsmöglichkeit mit anderen Trocknungstechnologien, um einerseits schwierig zu trocknende Stoffe in einem einzigen Prozess zu verarbeiten und andererseits spezifische Eigenschaften des Produkts wie z.B. die Morphologie gezielt zu steuern (z.B. in Kombination mit einer im Bodenteil des Sprühtrockners integrierten Wirbelschicht).

Obwohl die Technologie der Sprühtrocknung in weiten Bereichen industrieller Prozesse verwendet wird, beruht die Konstruktion und der Betrieb weitgehend auf Erfahrungswerten und Testläufen. Dieses Vorgehen kostet viel Zeit und somit auch Geld. Obwohl für einen optimalen Betrieb jeder spezifischen Anlage viel Erfahrung und „Fingerspitzengefühl“ bei der Einstellung der Betriebsparameter benötigt wird, wird von jedem Sprühtrockner gefordert, eine möglichst

breite Produktpalette zu bedienen. In diesem Zusammenhang können Methoden der „Computational Fluid Dynamics (CFD)“ dabei helfen, Sprühtrockner bereits im Vorfeld durch Simulation der Strömung sowie der Partikelbildung und –bewegung auszulegen und zu optimieren.

Masters (2004) gibt einen Überblick über aktuelle Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zur Verbesserung des Sprühtrocknungsprozesses. Er nennt darin:

- die Reduzierung von Produktablagerungen,
- die Anpassung an variierende Pulverspezifikationen,
- die Kostenreduktion pro produzierte Masseneinheit und
- die Erfüllung von Sicherheits-, Umwelt- und Hygienestandards.

Um Produktablagerungen an Trocknerwänden zu minimieren müssen sowohl die Gasströmung als auch die Partikelbewegung bekannt sein. Da jedes Pulver möglicherweise ein anderes Trocknungsverhalten zeigt, ist auch die genaue Kenntnis der Trocknungscharakteristika der verschiedenen Produkte notwendig, um den Prozess besser zu verstehen und zu optimieren. Sollen in einem Sprühtrockner verschiedene Produkte erzeugt werden, sind entweder aufwendige Experimente notwendig, um die gewünschte Qualität zu erhalten, oder aber geeignete Modellierungsansätze. In diesem Zusammenhang können Computersimulationen einen wichtigen Beitrag leisten.

Eine wichtige Voraussetzung zur korrekten Modellierung des Sprühtrocknungsprozesses ist eine gute Simulation des Strömungsfelds. Die Einlassbedingungen des Heißgases bestimmen maßgeblich die Form der Strömung innerhalb der Trocknungskammer und somit auch die Flugbahnen der Partikel. Zwar werden die Trajektorien der Tropfen auch durch den Zerstäuber bestimmt, jedoch passen sich die Partikel, je nach Größe, mehr oder weniger schnell der Fluidströmung an. Eine akkurate Berechnung des Strömungsfelds in Sprühtrocknern stellt ein großes Problem dar (Langrish 2007). Das Strömungsregime ist meistens vollturbulent, so dass geeignete Turbulenzmodelle angewendet werden müssen. Reynolds-Spannungs-Modelle liefern oft sehr gute Ergebnisse, jedoch ist ihr numerischer Aufwand enorm. Die meisten Simulationen von Sprühtrocknern unterstellen oftmals einen stationären Strömungszustand. Es gibt aber Hinweise aus CFD-Berechnungen (Oakley *et al.* 1988, Southwell und Langrish 2000, Langrish und Fletcher 2001), dass sich unterhalb des Lufteinlasses ein präzedierender Wirbelkern ausbildet, der ähnlich dem in einer plötzlichen Expansions-Strömung (Guo *et al.* 1998) ist. Somit ist das Strömungsfeld als instationär anzusehen ist.

Livesley *et al.* (1992) kehren deshalb zur Verwendung des k - ϵ -Modells zurück, um Partikelgrößen und mittlere axiale Gas- und Partikelgeschwindigkeiten zu

berechnen. Sie fanden in ihren Untersuchungen gute Übereinstimmungen zwischen den Simulationen und experimentellen Daten. Trotz der Limitierungen des k - ϵ -Modells hinsichtlich der Turbulenzmodellierung in Sprühtrocknern stellt das Modell laut Livesley *et al.* (1992) in vielen Situationen einen guten Kompromiss zwischen Genauigkeit und rechnerischem Aufwand dar. Guo *et al.* (2001) haben Untersuchungen an einem vereinfachten Sprühtrocknermodell hinsichtlich der Voraussage der Regelmäßigkeit und Frequenz der Oszillationen des Wirbelkerns durchgeführt. Sie kamen zu der überraschenden Erkenntnis, dass das k - ϵ -Modell in diesem Zusammenhang bessere Ergebnisse lieferte als das differentielle Reynolds-Spannungs-Modell. Langrish (2007) fasst zusammen, dass sich die Limitierung des k - ϵ -Modells, die Größe oder das Abklingen von Wirbeln zu bestimmen, in praktischen Anwendungen nicht so stark bemerkbar macht. Trotzdem stellt er in seinem Artikel die Forderung nach weiterer Forschungsarbeit im Bereich Turbulenzmodellierung, um mit Hilfe von CFD Sprühtrockner exakter simulieren zu können.

Fletcher *et al.* (2006) führen Untersuchungen von Southwell und Langrish (2000) an, die ebenfalls ein stark instationäres Verhalten der Strömung in Sprühtrocknern ergaben. Auch in dieser Arbeit ist das k - ϵ -Modell in der Lage die Struktur der Fluidströmung gut genug abzubilden. Die Simulationen werden als „Very-Large-Eddy-Simulation (VLES)“ bezeichnet, wobei das k - ϵ -Modell als Kleinskalen-Modell (engl. subgrid scale model) fungiert. Die Form der Fluidströmung in Sprühtrocknern bestimmt das Ausmaß an Wanddepositionen und mögliche Schädigungen von Partikeln. Durch Rezirkulationszonen können bereits getrocknete Partikel wieder in heiße Regionen geraten und thermisch beschädigt werden. Klebrige oder noch flüssige Partikel können beispielsweise durch eine Aufwärtsströmung an die Decke befördert und dort abgelagert werden. Dies führt nicht nur zu einer Minimierung der Produktmenge, sondern auch zu einer Beeinflussung der Produktqualität. Durch den Heißgasstrom können an der Wand haftende Partikel verbrennen, herabfallen und somit die Qualität des getrockneten Pulvers herabsetzen. Weiterhin stellen Wanddepositionen ein Feuerrisiko dar und gefährden die Einhaltung von Hygienevorschriften (Langrish und Fletcher 2001). Stübing *et al.* (2007) und Langrish und Zbicinski (1994) haben CFD-Simulationen dazu genutzt, um die Einlassbedingungen des Heißgases zu optimieren und somit bestehende Wanddepositionen in einem Sprühtrockner deutlich zu minimieren. Eine Verbesserung der Strömungsverteilung wurde von Southwell *et al.* (1999 a) durch die Anwendung von CFD in einer Pilotanlage erreicht. Mit Hilfe der Simulationen konnten die Autoren verschiedene Einlasskonfigurationen analysieren, ohne teure Experimente bemühen zu müssen.

Im Bereich der Prozessintensivierung der Sprühtrocknung wurde CFD ebenfalls erfolgreich angewendet. Zbicinski *et al.* (1996) fanden heraus, dass durch

eine erhöhte Turbulenzintensität in der Einlassgasströmung die Partikel-trocknung bis zu 20% positiv beeinflusst werden kann. Southwell *et al.* (1999 b) machten aus, dass im Zerstäubernahbereich die Turbulenzintensität des Sprays dominierend gegenüber der Fluidströmung ist, allerdings auch schnell abklingt. Durch eine Erhöhung der Spray-induzierten Turbulenz ist laut der Autoren ebenfalls eine Verbesserung der Trocknung zu erreichen.

Oakley (1994) berichtet in seiner Arbeit über die Unterstützung von CFD beim „scale-up“ von Sprühtrocknern. Bei der Maßstabsübertragung von technischen Anlagen müssen einige Übertragungsvorschriften eingehalten werden. Dazu zählt die geometrische Ähnlichkeit (äußere Abmessungen des Trockners), ähnliche Gas-Einlassbedingungen, ähnliche Kammer-Reynolds-Zahl und vernachlässigbare Einflüsse von Gravitation und Auftrieb auf die Strömung (Oakley 1994). Allerdings ist eine echte Ähnlichkeit des Tropfenverhaltens nur schwer zu erreichen, weil das Verhalten der Tropfen in der Strömung mit der Partikel-Reynolds-Zahl skaliert und nicht mit der der Trockenkammer. Oakley nennt an dieser Stelle CFD als ein geeignetes Tool, um eine Maßstabsskalierung von Sprühtrocknern durchzuführen.

Während die Struktur der Fluidströmung die Grundlage des Sprühtrocknerverhaltens darstellt, spielen auch die Partikelbewegung und –trocknung eine große Rolle im Sprühtrocknungsprozess. Daher nimmt auch die Modellierung von Partikelflugbahn sowie Partikelkollision und –agglomeration einen wichtigen Platz bei der Berechnung des Gesamtprozesses ein. Momentan werden nahezu alle Simulationen von Sprühtrocknern mit dem Euler-Lagrange-Ansatz durchgeführt (Fletcher *et al.* 2006). Dabei wird die kontinuierliche Phase mit Hilfe von sogenannten RANS-Modellen gelöst (s. Kap. 2). Die Partikelphase wird im Lagrangeschen Ansatz durch das Fluidfeld verfolgt und die Partikelquellterme berechnet und so mit dem Fluidfeld gekoppelt. Das Lagrangesche Partikeltracking ist allgemein anerkannt und ideal für stationäre Strömungen geeignet. Durch häufiges Koppeln der Quell- und Senkenterme mit der Lösung des Strömungsgebiets werden konvergierte Lösungen erreicht. Die Anwendung auf transiente Strömungen stellen Fletcher *et al.* (2006) als schwierig zu implementieren dar. Ein möglicher Ansatz, transiente Strömungen mit dem Euler-Lagrange-Ansatz zu lösen, wird von Lipowsky (2013) vorgestellt.

In der Lagrangeschen Betrachtungsweise ist es möglich, jedes Partikel entlang seiner Trajektorie zu verfolgen und somit auch dessen Historie zu betrachten. Das ist vor allem im Hinblick auf die Trocknung von Partikeln notwendig. Die korrekte Modellierung der Partikel-trocknung stellt einen wesentlichen Schritt auf dem Weg zur Simulation industrieller Sprühtrockner dar. Birchal *et al.* (2006) haben zwei Modelle zur Berechnung eines Sprühtrockners angewendet und die Ergebnisse miteinander verglichen. Das erste Modell schließt ein Populations-Bilanz-Modell zur Beschreibung der dispersen Phase ein, während

das zweite Modell auf dem Euler-Lagrange-Ansatz beruht. Obwohl das erste Modell sehr gute Voraussagen für die Betriebsvariablen des Gesamtprozesses der Trocknung liefert, ist es laut Aussage der Autoren nicht dazu geeignet, Verbesserungsvorschläge hinsichtlich der Trocknergeometrie, der Wanddeposition oder der Pulvereigenschaften zu treffen. Dazu ist nach Birchal *et al.* (2006) der Euler-Lagrange-Ansatz besser geeignet. Durch die komplette Simulation der Partikelbewegungen durch den Trockner ist zu jedem Zeitpunkt der Zustand jedes einzelnen Partikels bekannt. Dadurch ist es möglich Regionen in denen Wanddepositionen und Agglomerationen von Partikeln stattfinden zu identifizieren. Jedoch stellen Birchal *et al.* (2006) klar, dass die Trocknung der Partikel durch das Modell 2 nicht so gut wiedergegeben wird, wie es das erste Modell tut. Deswegen stellen die Autoren die Forderung nach besseren Trocknungsmodellen auf, um in Zukunft den Sprühtrocknungsprozess noch besser mit Hilfe von Euler-Lagrange-Ansätzen zu simulieren.

Auch von Zbicinski und Li (2006) wird die Bildung der festen Partikel während des Kontakts zwischen Sprühnebel und Trocknungsgas in der Trockenkammer als wichtiger Punkt genannt. Bei der Simulation müssen nach Ansicht der Autoren für jede Größenklasse des zerstäubten Sprühnebels eigene Einlassbedingungen wie z.B. die Geschwindigkeits- und Sprühwinkelverteilung vorgegeben werden. Diese Vorgehensweise legt die Verwendung des Lagrange-schen-Ansatzes für die Betrachtung der dispersen Phase nahe. Nach Zbicinski und Li (2006) ist dennoch keine exakte Vorausberechnung des Trocknungsprozesses möglich. Einer der Haupteinflussfaktoren der Qualität von Sprühtrocknersimulationen ist ihrer Meinung nach die Bestimmung der Trocknungskinetik. Aus diesem Grund entwickelten sie eine Methode, realistische Verdampfungsraten für die Anwendung in CFD-Simulationen zu bestimmen. Die Idee von Zbicinski und Li besteht darin, in einem Labortrockner keine komplette Trocknungskurve aufzuzeichnen, sondern nur einige bestimmte Parameter der Trocknungskinetik. Mit Hilfe des kritischen Feuchtegehalts, der Sorptions-Desorptions-Isothermen sowie des Gleichgewichts-Flüssigkeitsgehalts konnten realistische Verdampfungsraten bestimmt werden. Die Autoren fanden heraus, dass besonders im Zerstäubernbereich ($<1\text{m}$) große Unterschiede zwischen dem von ihnen entwickelten und einem Standard-Modell für Wassertropfen besteht. In diesem Bereich liegt die größte Schrumpfung der Tropfen sowie die höchste Verdampfungsraten vor. Hohe Verdampfungsraten bewirken eine starke Veränderung der Partikelviskosität. Die Erhöhung der Partikelviskosität aufgrund der Lösungsmittelverdampfung wirkt sich besonders auf die Morphologie eventuell entstehender Agglomerate aus. Der Zusammenhang zwischen der Partikelviskosität und der Agglomeratstruktur wird in Kapitel 4.5 eingehend erläutert.

Zur Vorausberechnung der Pulvereigenschaften, die aus der Trocknung und Agglomeration der Partikel resultieren, ist die Betrachtung der dispersen Phase im Lagrangeschen Ansatz unerlässlich. Wie wichtig die Agglomeration, und somit deren Modellierung, für den Sprühtrocknungsprozess sein kann, zeigen Gianfrancesco *et al.* (2008). In der industriellen Herstellung von Instantprodukten wie Milch-, Suppen-, Saft- oder Kartoffelpulvern erfolgt nach der Sprühtrocknung oft ein weiterer Agglomerationsschritt. Dieser ist notwendig, um die Partikel zu vergrößern und so eine engere Größenverteilung zu erreichen und gleichzeitig die Fließfähigkeit des Pulvers zu erhöhen. Weiterhin soll auf diese Weise die Partikelstruktur (Porosität) dahingehend verändert werden, um gute Produkteigenschaften zu erhalten. Das Qualitätsmerkmal, das z.B. Milchpulver in erster Linie erfüllen muss, ist die Wiederlöslichkeit des Pulvers in Wasser. Diese Eigenschaft wird durch vier Grundmechanismen beeinflusst, die von Birchal *et al.* (2005) angegeben werden als:

- Fähigkeit des Pulvers, in die Wasseroberfläche einzutauchen,
- Benetzbarkeit,
- Dispergierbarkeit und
- Löslichkeit.

Diese Mechanismen sind eng mit der Schütt- und Agglomeratdichte, der Restfeuchte, Protein- und Fettgehalte, sowie der Form und Größenverteilung der Agglomerate verknüpft. Eine zusätzliche Agglomeration kann auch in-situ bei der Sprühtrocknung erfolgen. Dazu wird bereits getrocknetes Feingut in den Trockner zurückgeführt. Kollisionen zwischen dem Feingut und den trocknenden Partikeln führt dann zu einer erhöhten Agglomeration, wenn diese einen klebrigen Zustand erreicht haben. Regionen, in denen bevorzugt klebrige Partikel anzutreffen sind, wurden von Gianfrancesco *et al.* (2008) in einem Labortrockner im Zerstäubernbereich ($\sim 0,2$ m) identifiziert. Dazu wurde von den Autoren eine Methode zur in-situ Messung von Feuchtigkeit und Temperatur des Trocknungsgases entwickelt.

Neben der Modellierung der Tropfenverdampfung kommt der Simulation von Agglomerationsereignissen und daraus resultierender Partikelmorphologien eine große Bedeutung bei der Vorausberechnung von Produktqualitäten zu. Die zuvor genannten Arbeiten zeigen, dass der Euler-Lagrange-Ansatz geeignet ist, die Prozesse in Sprühtrocknern realistisch abzubilden. Mit Hilfe geeigneter Modelle können sowohl die Partikelbewegung und daraus resultierende Partikel-Partikel- oder Partikel-Wand-Kollisionen, als auch die Bildung trockener Partikel in Sprühtrocknern simuliert werden. Obwohl das Hauptziel der Sprühtrocknung in der Trocknung flüssiger Tropfen liegt und in diesem Zusammenhang noch viel Forschungsbedarf besteht, beschränkt sich die vorliegende Ar-

beit auf die Modellierung von Agglomeratstrukturen. Wie viele der genannten Literaturstellen zeigen, ist die Agglomeration ein wichtiger Prozess zur Einhaltung von Qualitätsanforderungen bei der Herstellung von getrockneten Pulvern. Das Ziel dieser Arbeit ist es, ein bestehendes Agglomerationsmodell (Blei 2006) wesentlich zu erweitern, so dass die Produkteigenschaften sprühgetrockneter Pulver mit Hilfe geeigneter Strukturparameter angegeben werden können. Zur Beschreibung von Agglomeratstrukturen werden folgende Parameter verwendet:

- Porosität,
- freie Oberfläche,
- Sphärizität,
- Trägheitsradius und die
- fraktale Dimension.

In den nächsten Kapiteln wird dieses weiterentwickelte Modell theoretisch (Kapitel 3) sowie anhand von Simulationsergebnissen (Kapitel 4 und 5) im Detail vorgestellt. Dabei werden die verschiedenen Modellteile in Kapitel 4 zunächst an unterschiedlichen Testfällen überprüft, bevor das Gesamtmodell zur Simulation eines industriellen Sprühtrockners in Kapitel 5 verwendet wird.

2 Theoretischer Hintergrund

2.1 Beschreibung der kontinuierlichen Phase

Um reale Strömungen zu untersuchen ist ein experimenteller Aufbau nicht immer möglich, so dass auf eine mathematische Beschreibung des Problems zurückgegriffen werden muss. Dabei werden mit Hilfe der physikalischen Gesetzmäßigkeiten der Strömungsmechanik, wie z.B. der Erhaltungssätze für Masse, Impuls und Energie, Modellgleichungen aufgestellt, um das zu untersuchende Strömungsfeld zu berechnen. In dem formulierten Modell müssen die Zahl der Unbekannten und die Zahl der Gleichungen übereinstimmen, um ein geschlossenes mathematisches System zu erhalten. Stehen zur Lösung des Modells nicht genügend Gleichungen zur Verfügung, muss ein geeigneter Schließungsansatz, d.h. zusätzliche Gleichungen zur Lösung gefunden werden. Dieses Problem tritt beispielsweise bei der Behandlung von turbulenten Strömungen auf und führt zur Formulierung verschiedener Turbulenzmodelle, die in einem späteren Absatz vorgestellt werden. Aufgrund der hohen Komplexität von technischen Strömungen können die Gleichungssysteme, mit denen die Strömung beschrieben wird, häufig nicht analytisch gelöst werden, so dass numerische Methoden zur Anwendung kommen. Die Erhaltungssätze, die das Strömungsfeld beschreiben, werden in einem infinitesimal kleinen Element formuliert. Mittels einer Diskretisierungsmethode wird aus der kontinuierlichen Beschreibung der Strömung in eine diskrete, für Computer handhabbare Beschreibung überführt. In der numerischen Mathematik stehen dafür verschiedene Methoden zur Verfügung, wobei die gebräuchlichsten die Finite-Differenzen-Methode (FDM), die Finite-Volumen-Methode (FVM) und die Finite-Elemente-Methode (FEM) gehören. Eine Beschreibung dieser Diskretisierungsmethoden ist in der Fachliteratur zu finden (z.B. Ferziger und Perić 2008).

In der hier vorliegenden Arbeit wird die Finite-Volumen-Methode verwendet. Bei dieser Methode werden die Differentialquotienten in den Grundgleichungen, auf die später noch eingegangen wird, in der Integralform gelöst. Dafür wird das Lösungsgebiet in eine endliche Anzahl nicht überlappender Kontrollvolumina unterteilt, wobei der Rechenknoten, an dem die Erhaltungsgleichungen gelöst werden, im Zellschwerpunkt liegt. Mit Hilfe einer Interpolation

werden die Werte an den Oberflächen aus denen im Zentrum des Kontrollvolumens berechnet.

Die zur Beschreibung von Strömungen verwendeten Gleichungen sollen möglichst wenig spezifische Informationen über die zu untersuchende Strömung enthalten, um für möglichst viele Strömungen zu gelten. Diese allgemeingültigen Gleichungen werden daher aus den volumenbezogenen Erhaltungsgleichungen von Masse, Impuls und Energie abgeleitet, und werden dann für das jeweilige Anwendungsgebiet, bspw. für turbulente, inkompressible oder Mehrphasen-Strömungen modifiziert. Fluidströmungen in technischen Anlagen können zum größten Teil als vollturbulent angesehen werden. Ferziger und Perić (2008) kennzeichnen turbulente Strömungen u.a. durch folgende Eigenschaften:

- Turbulente Strömungen sind instationär, dreidimensional und enthalten Wirbel.
- Die Turbulenz erhöht die Rate mit der die Erhaltungsgrößen vermischt werden (wird oft als turbulente Diffusion bezeichnet).
- Sie sind dissipativ, d.h. die Turbulenz bringt Fluidteilchen unterschiedlichen Impulses miteinander in Kontakt. Aufgrund der Viskosität (= Reibung) reduzieren sich die Geschwindigkeitsgradienten in der Strömung, wodurch kinetische Energie in innere Energie des Fluids umgewandelt wird.
- Turbulente Strömungen beinhalten kohärente Strukturen, die sich aufgrund einer Zufallskomponente jedoch in Größe, Stärke und dem Zeitintervall zwischen ihrem Auftreten voneinander unterscheiden.
- Turbulente Strömungen schwanken mit großer Bandbreite sowohl in der Längen- als auch in der Zeitskala.

Bei der numerischen Berechnung von turbulenten Strömungen können verschiedene Modelltypen verwendet werden. Die verbreitetsten und am häufigsten angewendeten Herangehensweisen sollen im Folgenden kurz anhand der Ausführungen von Ferziger und Perić (2008) erläutert werden.

Direkte numerische Simulation (DNS):

Bei der direkten numerischen Simulation werden die dreidimensionalen, instationären Navier-Stokes-Gleichungen für alle Bewegungen ohne Mittelung oder Approximation gelöst. Dabei muss das Lösungsgebiet mindestens so groß wie das physikalische Gebiet oder die größten zu untersuchenden turbulenten Wirbel sein. Damit wird sichergestellt, dass alle relevanten Strukturen der Turbulenz erfasst werden. Zur Abschätzung wird häufig das integrale Längenmaß L

der Turbulenz verwendet. Es stellt die Entfernung dar, über die die Geschwindigkeitsschwankungen korreliert bleiben. Das Rechengebiet muss dann ein Vielfaches des Integrallängenmaßes sein. Auf der untersten Wirbelebene wird die kinetische Energie der kleinsten Wirbel in innere Energie dissipiert. Um eine gültige Simulation zu erhalten, muss die Dissipation vollständig wiedergegeben werden. Die Gitterweite darf somit nicht größer als die kleinste Wirbelabmessung sein. Dieses Maß wird durch das Kolmogorov Längenmaß η bestimmt.

Die Durchführung von direkten numerischen Simulationen ist mit heutigen Rechnern bis zu Reynoldszahlen von etwa 1000 möglich. Damit erreicht die DNS den unteren Reynolds-Zahl-Bereich technisch interessanter Strömungen. Obwohl die DNS sehr detaillierte Informationen über turbulente Strömungen liefert, wird diese hauptsächlich als Forschungswerkzeug genutzt. Durch DNS können Experimente ersetzt werden, wobei diese Herangehensweise teilweise sogar informativer sein kann, da einige Größen (z.B. Korrelationen zwischen Druck- und Geschwindigkeitsschwankungen) messtechnisch derzeit noch nicht erfasst werden können. Auch zur Visualisierung von Strömungen, anhand derer kohärente Strukturen untersucht werden können, kann die direkte numerische Simulation gut eingesetzt werden.

Grobstruktur-Simulation (engl. large eddy simulation, LES)

Im Allgemeinen tragen großskalige Wirbel sehr viel mehr Energie als kleinskalige, welche dementsprechend nur wenig zum Transport beitragen. Daher kann es sinnvoll sein, bei der Simulation turbulenter Strömungen nur die großen Wirbel aufzulösen und den Bereich der kleinsten Strukturen mit Hilfe eines geeigneten Modells zu beschreiben (Abbildung 2.1). Der numerische Aufwand ist gegenüber der DNS zwar deutlich geringer, da nur für die großen Wirbel eine dreidimensionale, instationäre Berechnung erfolgt, jedoch insgesamt immer noch sehr hoch. Bei der LES wird das Strömungsfeld anhand geeigneter Methoden so gefiltert, dass nur das Geschwindigkeitsfeld der großen Wirbel übrig bleibt. Die kleineren Wirbel müssen durch ein sogenanntes Kleinskalen-Modell (engl. subgrid-scale-model) modelliert werden.

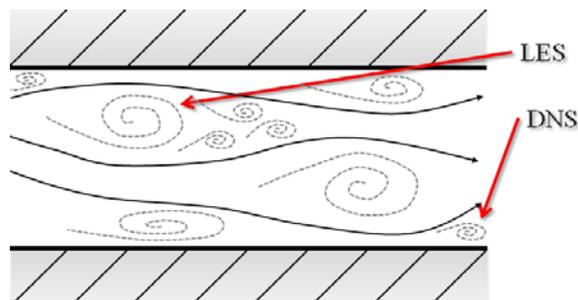


Abbildung 2.1: Wirbelstrukturen in einer turbulenten Fluidbewegung.

RANS-Gleichungen

Die Modellierung von turbulenten Strömungen mit Hilfe der Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (engl. Reynolds averaged Navier Stokes equations, RANS) wird für technische Strömungen am häufigsten angewendet. Der numerische Aufwand ist deutlich geringer als bei den vorangegangenen Verfahren, so dass auch Strömungen hoher Reynolds-Zahlen numerisch berechnet werden können. Hierbei wird die Reynolds-Zerlegung ausgenutzt, mit der sich jede Variable ϕ durch einen Mittelwert $\bar{\phi}$ und einen Schwankungswert ϕ' ausdrücken lässt (Gl. (2-1)).

$$\phi(x_i, t) = \bar{\phi}(x_i) + \phi'(x_i, t) \quad (2-1)$$

Diese Mittelung angewendet auf die Navier-Stokes-Gleichungen liefert ein System von Differentialgleichungen, das nicht geschlossen ist. Das bedeutet, es enthält mehr Unbekannte als Gleichungen, so dass ein geeigneter Schließungsansatz zur Lösung des Gleichungssystems gefunden werden muss. Diese Schließungsansätze werden als Turbulenzmodelle bezeichnet. Für einen genaueren Einblick in die Turbulenzmodellierung sei der Leser an die einschlägige Fachliteratur verwiesen (z.B. Pope 2000 oder Davidson 2004). Es werden zunächst die Navier-Stokes-Gleichungen hergeleitet und darauf im Anschluss die Reynolds-Mittelung angewendet.

Die Navier-Stokes-Gleichungen stellen die allgemeine Grundgleichungen für ein strömendes Fluid dar. Sie können aus einer Kräftebilanz an einem Kontrollvolumen (Abbildung 2.2) und unter Berücksichtigung der Oberflächen- sowie Volumenkräfte hergeleitet werden. Newtons zweites Axiom

$$\vec{F} = m \cdot \vec{a}, \quad (2-2)$$

mit F der Kraft, m der Masse und a der Beschleunigung, lautet für auf das Volumen V bezogene Kräfte

$$\vec{f} = \rho \cdot \vec{a}. \quad (2-3)$$

Darin gilt für die Dichte $\rho = \frac{m}{V}$ und für $\vec{f} = \frac{\vec{F}}{V}$. Die Beschleunigung \vec{a} entspricht darin der zweiten Ableitung des Ortes \vec{x} nach der Zeit t . Ein System kann prinzipiell in zwei verschiedenen Betrachtungsweisen beschrieben werden. In der *Formulierung nach Euler* werden die Variablen der zu lösenden Gleichungen an jeweils festen Positionen im Raum definiert. Sie sind somit Funktionen der räumlichen Koordinaten sowie der Zeit, z.B. die Geschwindigkeit $\vec{u} = \vec{u}(x, y, z, t)$. Jedes zu einem Ortsvektor zugehörige Kontrollvolu-

men ist ebenfalls ortsfest und wird durchströmt (Abbildung 2.3). Im Gegensatz zur *Formulierung nach Euler* ist die Beschreibung des Strömungsgebiets in der *Lagrangeschen Betrachtung* an ein Fluidelement gebunden, welches sich mit der Strömung mitbewegt und dabei selbst nicht durchströmt wird (Abbildung 2.3). Diese Betrachtungsweise ist vor allem für Strömungen interessant, in der Partikel mitbewegt werden. Die auf jedes Partikel wirkenden Kräfte können in Lagrangescher Formulierungswiese besonders gut dargestellt werden. In der Strömungsmechanik wird das Geschwindigkeitsfeld üblicherweise in Abhängigkeit der Ortskoordinaten beschrieben, da technische Anlagen beispielsweise ortsfest sind. Da das zweite Newtonsche Axiom allerdings nur auf feste Masselemente, also in Lagrangescher Betrachtungsweise, anwendbar ist, muss eine entsprechende Umrechnung in ein ortsfestes Koordinatensystem erfolgen.

Die Geschwindigkeit hängt in ortsfesten Koordinaten sowohl vom Ort als auch von der Zeit ab, wodurch bei der Ableitung nach der Zeit t

- die zeitliche Änderung der Geschwindigkeit des Teilchens am Ort r
- und die Änderung der Geschwindigkeit des Teilchens aufgrund der Bewegung des Teilchens von r nach $r + dr$ zu beachten ist.

Für die x -Richtung lautet die Beschleunigung $\frac{du_x}{dt}$ somit:

$$\begin{aligned} \frac{du_x}{dt} &= \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u_x}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \frac{dz}{dt} \\ &= \frac{\partial u}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{aligned} \quad (2-4)$$

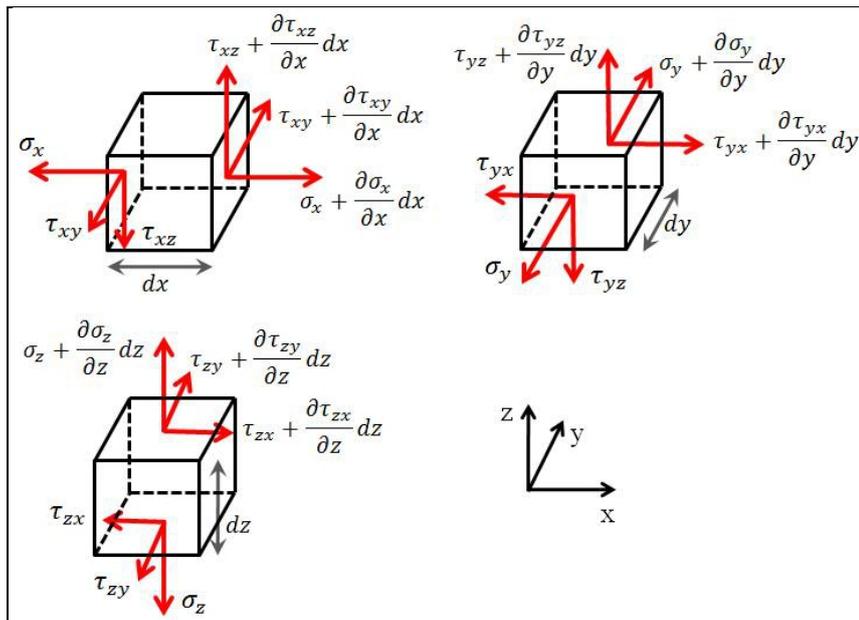
Hierin stehen (u_x, u_y, u_z) für die kartesischen Komponenten des Geschwindigkeitsvektors \vec{u} .

Werden alle drei Richtungen (analog zu Gl. (2-4)) berücksichtigt, ergibt sich also:

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \text{ grad}) \vec{u} \quad (2-5)$$

Die angreifenden Kräfte setzen sich aus der Gravitationskraft, der Druckkraft und der Reibungskraft zusammen. Abbildung 2.2 zeigt die an ein Volumenelement angreifenden Oberflächenkräfte (Normal- (σ) und Scherspannungen (τ)ⁱ).

ⁱ Die Normalspannungen wirken senkrecht zur Fläche und werden mit x, y, z für die Wirkrichtung indiziert. Die Schubspannungen wirken tangential zur Fläche und werden mit einem Dop-

Abbildung 2.2: Oberflächenkräfte auf ein Volumenelementⁱⁱ.

Es ergibt sich über das Volumenelement für die Oberflächenkräfte f in x -Richtung

$$\Delta f_x = \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} dx + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} dy + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} dz, \quad (2-6)$$

in y -Richtung

$$\Delta f_y = \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} dx + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} dy + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} dz, \quad (2-7)$$

und in z -Richtung

$$\Delta f_z = \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} dx + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial y} dy + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} dz. \quad (2-8)$$

pelindex beschrieben. Der erste Index gibt dabei die Richtung an, in die der Normaleneinheitsvektor der betrachteten Fläche zeigt, der zweite Index gibt die Richtung an, in die die Spannung wirkt.

ⁱⁱ Nach: F. Schaub, „Spezielle Kapitel der Strömungsmechanik“, Vorlesungsskript SS2006, Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik, Fachbereich Ingenieurwissenschaften, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.

Da der Spannungstensor symmetrisch ist, gilt $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, $\tau_{xz} = \tau_{zx}$ und $\tau_{yz} = \tau_{zy}$. Die auf das Volumenelement einwirkenden Druckkräfte f_p lauten in den drei Richtungen x , y und z :

$$\Delta f_{p,x} = -\frac{\partial p}{\partial x}, \quad \Delta f_{p,y} = -\frac{\partial p}{\partial y} \quad \text{und} \quad \Delta f_{p,z} = -\frac{\partial p}{\partial z} \quad (2-9)$$

Einsetzen von Gleichung (2-4) und den Gleichungen (2-6) bis (2-8) sowie Gleichung (2-9) in die Gleichung (2-3) unter Berücksichtigung der Gravitationskraft $\rho \cdot g$, ergibt für die Impulsbilanzⁱⁱⁱ

in x-Richtung

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} \right), \end{aligned} \quad (2-10)$$

in y-Richtung

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ = \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \left(\frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (2-11)$$

und in z-Richtung

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\ = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \left(\frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right). \end{aligned} \quad (2-12)$$

In diesen Gleichungen müssen noch die Schub- und Normalspannungen durch ein dreidimensionales Reibungsgesetz ersetzt werden. Für die Deformation eines inkompressiblen Newtonschen Fluidelements folgt für die Normalspannungen σ

ⁱⁱⁱ Hierin werden mit $(u, v, w) = (u_x, u_y, u_z)$ die kartesischen Geschwindigkeitskomponenten des Geschwindigkeitsvektors \vec{u} bezeichnet.

$$\sigma_x = 2\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad \sigma_y = 2\mu \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right), \quad \sigma_z = 2\mu \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right) \quad (2-13)$$

und für die Schubspannungen τ

$$\begin{aligned} \tau_{xy} = \tau_{yx} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), & \tau_{xz} = \tau_{zx} &= \mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right), \\ \tau_{yz} = \tau_{zy} &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right), \end{aligned} \quad (2-14)$$

wobei μ die dynamische Viskosität darstellt.

Diese Definitionen für die Schub- und Normalspannungen in die Gleichungen (2-10) bis (2-12) eingesetzt und die rechten Seiten umgeformt liefert

in x-Richtung

$$\begin{aligned} &\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ &= \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \\ &+ \mu \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right), \end{aligned} \quad (2-15)$$

in y-Richtung

$$\begin{aligned} &\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ &= \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \\ &+ \mu \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right), \end{aligned} \quad (2-16)$$

und in z-Richtung

$$\begin{aligned}
\rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\
= \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \\
+ \mu \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right).
\end{aligned} \tag{2-17}$$

Darin stehen g_x , g_y und g_z für die kartesischen Komponenten des Gravitationsvektors \vec{g} . Unter Berücksichtigung der Kontinuitätsgleichung^{iv} lassen sich die Gleichungen (2-15) bis (2-17) vereinfachen zu

$$\operatorname{div}(\vec{u}) = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \tag{2-18}$$

so dass sich schließlich die Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible Newtonsche Fluide ergeben:

in x-Richtung

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right), \tag{2-19}$$

in y-Richtung

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \tag{2-20}$$

und in z-Richtung

$$\rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right). \tag{2-21}$$

Wird nun in die hergeleiteten Gleichungen (2-19) bis (2-21) die Reynolds-Zerlegung aus Gleichung (2-1) eingesetzt und diese dann zeitlich gemittelt, lauten die zeitlich gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible Strömungen:

in x-Richtung

^{iv} Die Kontinuitätsgleichung lautet: $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u}) = 0$. Die lokale Änderung der Dichte ist gleich dem Nettomassenfluss durch die Oberfläche des betrachteten Kontrollvolumens.

$$\begin{aligned} \rho \cdot \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}^2}{\partial x} + \frac{\partial (\bar{u} \cdot \bar{v})}{\partial y} + \frac{\partial (\bar{u} \cdot \bar{w})}{\partial z} \right) = \\ \rho g_x - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{\sigma}_x}{\partial x} + \frac{\partial \bar{\tau}_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{\tau}_{zx}}{\partial z} - \rho \cdot \left(\frac{\partial \overline{u'^2}}{\partial x} + \frac{\partial (\overline{u' \cdot v'})}{\partial y} + \frac{\partial (\overline{u' \cdot w'})}{\partial z} \right), \end{aligned} \quad (2-22)$$

in *y*-Richtung

$$\begin{aligned} \rho \cdot \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{v} \cdot \bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}^2}{\partial y} + \frac{\partial (\bar{v} \cdot \bar{w})}{\partial z} \right) = \\ \rho g_y - \frac{\partial \bar{p}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{\tau}_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{\sigma}_y}{\partial y} + \frac{\partial \bar{\tau}_{zy}}{\partial z} - \rho \cdot \left(\frac{\partial (\overline{u' \cdot v'})}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'^2}}{\partial y} + \frac{\partial (\overline{v' \cdot w'})}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (2-23)$$

und in *z*-Richtung

$$\begin{aligned} \rho \cdot \left(\frac{\partial \bar{w}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{w} \cdot \bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial (\bar{w} \cdot \bar{v})}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}^2}{\partial z} \right) = \\ \rho g_z - \frac{\partial \bar{p}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{\tau}_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{\tau}_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{\sigma}_z}{\partial z} - \rho \cdot \left(\frac{\partial (\overline{w' \cdot u'})}{\partial x} + \frac{\partial (\overline{w' \cdot v'})}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w'^2}}{\partial z} \right). \end{aligned} \quad (2-24)$$

Die zusätzlichen Terme auf der rechten Seite, mit denen die Schwankungsbewegungen der Strömung (u' , v' und w') berücksichtigt werden, werden als Reynolds-Spannungstensor^v $\tau_{ij}^R = -\rho \overline{u'_i u'_j}$ (2-24a) bezeichnet. Bisher standen für die vier Unbekannten u , v , w und p insgesamt vier Gleichungen zu deren Lösung zu Verfügung. Dieser Reynolds-Spannungstensor ist bisher unbekannt und soll parametrisiert werden. Da der Reynolds-Spannungstensor symmetrisch ist, d.h. es gilt $\overline{u'_i u'_j} = \overline{u'_j u'_i}$, müssen nicht neun, sondern nur sechs Komponenten bestimmt werden. Um das jetzt unbestimmte Gleichungssystem zu lösen, muss ein geeigneter Schließungsansatz aufgestellt werden. In dieser Arbeit werden die Reynolds-Spannungen mit dem bekannten BOUSSINESQ-Ansatz modelliert als

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_T \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}, \quad (2-25)$$

wobei

^v Der Reynoldsspannungstensor lautet: $\tau_{ij}^R = -\rho \begin{bmatrix} \overline{u'u'} & \overline{u'v'} & \overline{u'w'} \\ \overline{v'u'} & \overline{v'v'} & \overline{v'w'} \\ \overline{w'u'} & \overline{w'v'} & \overline{w'w'} \end{bmatrix}$.

$$\mu_T = c_\mu \cdot \frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (2-26)$$

Darin stellt c_μ eine empirische Konstante^{vi}, k die turbulente kinetische Energie und ε die Dissipation der turbulenten kinetischen Energie dar.

Das Zwei-Gleichungs-k- ε -Modell ist das am häufigsten verwendete Turbulenzmodell. Die erste Gleichung beschreibt die turbulente kinetische Energie k der Strömung, die zweite deren Dissipationsrate ε . Aus den exakten Gleichungen für die Reynoldsspannungen lässt sich eine Transportgleichung für die Turbulenzenergie k herleiten:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_i \frac{\partial k}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[u_i' \left(\frac{u_j' u_j'}{2} + \frac{p'}{p} \right) \right] - \overline{u_i' u_j'} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \mu \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}, \quad (2-27)$$

wobei

$$k = \frac{1}{2} \cdot \overline{u_i' u_i'} \quad (2-28)$$

In Gleichung (2-27) stehen die Terme auf der linken Seite für die zeitliche Änderung sowie für den konvektiven Transport von k . Auf der rechten Seite beschreiben die Terme den diffusiven Transport, die Produktion und die Dissipation der Turbulenzenergie. Der Diffusions- und Dissipationsterm enthalten Korrelationen höherer Ordnung und müssen modelliert werden. Dafür wird für den Diffusionsterm angenommen, dass er vom Gradienten abhängt:

$$- \frac{\partial}{\partial x_i} \left[u_i' \left(\frac{u_j' u_j'}{2} + \frac{p'}{p} \right) \right] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right). \quad (2-29)$$

Für die Dissipationsrate ε kann ebenfalls eine Transportgleichung hergeleitet werden. Auch diese Gleichung beinhaltet Korrelationen höherer Ordnung die ebenfalls modelliert werden müssen. Allerdings ist der Grad der Modellierung deutlich höher als bei der k-Gleichung. Die Dissipationsrate ist definiert als:

$$\varepsilon = \mu \left(\frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \right) \quad (2-30)$$

^{vi} $c_\mu = 0,09$ (Ferziger und Perić 2008).

Wird die Gleichung für die Dissipationsrate (2-30) in die Gleichung für die turbulente kinetische Energie (2-27) eingesetzt, ergibt sich:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] = P_k - \varepsilon. \quad (2-31)$$

Und für die Dissipationsrate:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] = c_1 \frac{\varepsilon}{k} P_k - c_2 \frac{\varepsilon^2}{k}. \quad (2-32)$$

Darin gilt für den Produktionsterm P_k :

$$P_k = \mu_T \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}. \quad (2-33)$$

Die in den Gleichungen enthaltenen Modellkonstanten nehmen folgende Werte an:

$$\sigma_k = 1,0 \quad \sigma_\varepsilon = 1,3 \quad c_1 = 1,44 \quad c_2 = 1,92 \quad c_\mu = 0,09$$

2.2 Beschreibung der dispersen Phase

Wie bereits im vorangegangenen Abschnitt beschrieben wurde, wird in der vorliegenden Arbeit zur Simulation von partikelbeladenen Strömungen ein Ansatz gewählt, der die Eulersche und die Lagrangesche Betrachtungsweise miteinander kombiniert. Für die kontinuierliche Phase, also die Fluidströmung, wird der Eulersche Ansatz angewendet, während die disperse Phase, d.h. die Partikel, in der Lagrangeschen Betrachtungsweise behandelt wird. Hierbei werden einzelne Partikel betrachtet und ihr Bewegungsverhalten im zuvor berechneten Strömungsgebiet verfolgt. Während der Berechnung der Partikelflugbahnen werden zu jedem Zeitschritt die lokalen Partikeleigenschaften gespeichert. Nach der Berechnung einer ausreichend großen Anzahl an Partikeltrajektorien werden für jedes Kontrollvolumen die statistischen Mittelwerte der Partikeleigenschaften zur Charakterisierung der dispersen Phase bestimmt. Da der gebildete Mittelwert aus einer Ensemblemittelung hervorgeht, ist es in der Regel erforderlich einige tausend Partikelflugbahnen zu berechnen, um eine statistisch zuverlässige Lösung zu erhalten. Diese Form der Simulation von Fluidfeld und Partikelphase wird als Ein-Wege-Kopplung (engl. „one-way-coupling“) be-

zeichnet, da nur der Einfluss der Strömung auf die Partikel berücksichtigt wird. Die Partikelbewegung wird einerseits durch die lokalen Fluideigenschaften beeinflusst, hat ihrerseits allerdings auch Einfluss auf eben diese Fluidströmung. Die Rückwirkung der dispersen Phase auf die kontinuierliche Phase wird in Form von Partikelquell- und –senken-Termen ausgedrückt. Somit ergibt sich bei einer erneuten Berechnung des Fluidfelds unter Berücksichtigung der Partikelquell/senken-Terme eine geänderte Lösung. Dieses geänderte Fluidfeld beeinflusst wiederum die Bewegung der Partikel, so dass eine mehrmalige Kopplung zwischen Partikel- und Fluidphase berücksichtigt werden muss, um eine konvergente Lösung zu erhalten. Dieses Vorgehen wird als Zwei-Wege-Kopplung (engl. „two-way-coupling“) bezeichnet. Darin wird ebenso eine mögliche Verdampfung der Partikel, in dem Fall Tropfen, und die Auswirkungen auf das Fluidfeld mit in die Berechnung der Quell-/Senken-Terme einbezogen. In Abbildung 2.3 ist das Euler-Lagrange-Verfahren schematisch gezeigt.

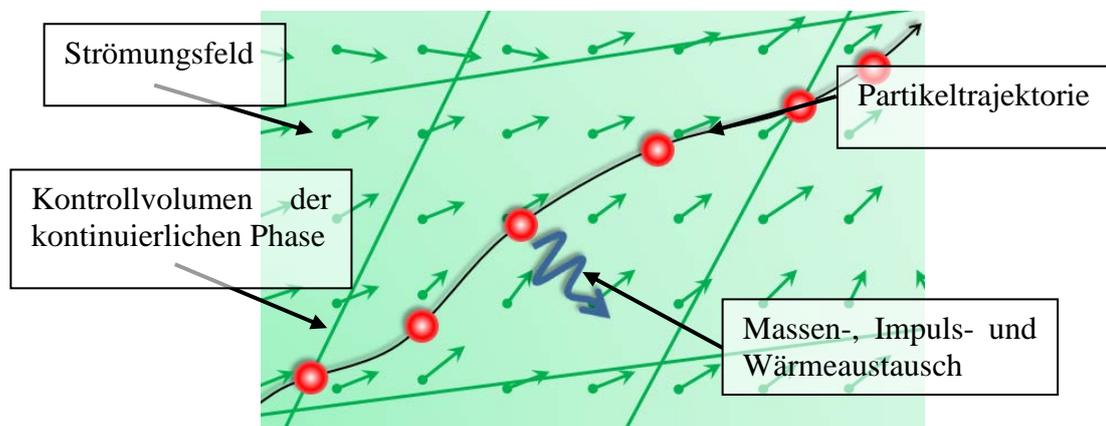


Abbildung 2.3: Kopplung zwischen disperser Partikelphase und kontinuierlicher Phase über Quell- und Senkenterme.

Werden bei der Berechnung der Partikelflugbahnen zusätzlich Kollisionen zwischen den Partikeln berücksichtigt und wiederum mit der Fluidfeldberechnung gekoppelt, spricht man von Vier-Wege-Kopplung (engl. „four-way-coupling“). Kollisionen zwischen Partikeln oder von Partikeln mit Wänden verändern natürlich auch die Bewegung der betrachteten Partikel selber, so dass diese fluiddynamische Wechselwirkung der Partikel auf die Partikelbewegung als „Drei-Wege-Kopplung“ bezeichnet werden kann. Bei der Berücksichtigung dieser Partikelquell- und –senkenterme bei der erneuten Fluidfeldberechnung spricht man schließlich von „Vier-Wege-Kopplung“, die sich somit zusammensetzt aus dem Einfluss:

1. der Fluidströmung auf die Partikelphase,
2. der Partikelphase auf das Fluid,
3. von Kollisionen auf die Partikelphase und

4. der durch Kollisionen geänderten Partikelbewegung auf das Fluidfeld zusammen.

Bei der Simulation des Sprühtrocknungsprozesses spielen neben der Strömung und der Partikelbewegung auch die Verdampfung und Partikel-Partikel- sowie Partikel-Wand-Kollisionen eine Rolle. Eine mögliche Agglomeration von Partikeln resultiert im Wesentlichen aus Kollisionen zwischen noch nicht vollständig getrockneten und somit klebrigen Partikeln. Nachfolgend werden daher die Modelle zur Beschreibung der erwähnten Mechanismen erläutert. Zunächst wird die Berechnung der Partikelbewegung, die auf der Wirkung der angreifenden Kräfte beruht, beschrieben. In den darauffolgenden Abschnitten wird auf Kollisionen und anschließend auf die Partikeltrocknung eingegangen.

2.2.1 Kräfte auf Partikel

Die Bewegung eines Partikels drückt sich in der Änderung seines Aufenthaltsortes in Abhängigkeit von der Zeit aus. Diese Änderung der lokalen Partikelkoordinaten ergibt sich aus einer translatorischen Bewegung und einer Rotationsbewegung. Sowohl Translation als auch Rotation werden durch die am Partikel angreifenden Kräfte verursacht. Für die Änderung der Koordinaten sowie Translation und Rotation gilt:

$$\text{Koordinatenänderung:} \quad \frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{u}_p \quad (2-34)$$

$$\text{Translation:} \quad m_p \frac{d\vec{u}_p}{dt} = \sum \vec{F}_i + \vec{F}_g \quad (2-35)$$

$$\text{Rotation:} \quad I_p \frac{d\vec{\omega}_p}{dt} = \sum \vec{T}_i \quad (2-36)$$

In der Bewegungsgleichung für die Rotation stellt I_p das Trägheitsmoment des Partikels und $\sum \vec{T}_i$ die Summe der am Partikel angreifenden Momente dar. Die translatorische Bewegungsgleichung ergibt sich aus der Kräftebilanz aller am Partikel angreifender Kräfte $\sum \vec{F}_i$. In den in der vorliegenden Arbeit durchgeführten Simulationen werden nur die Gravitations- und die Widerstandskraft berücksichtigt. Bei der Anwendung des Lagrangeschen Ansatzes zur Berechnung der dispersen Phase werden die Partikel als Punktpartikel betrachtet. Die Rotation der Partikel wird anhand Gleichung (2-36) berechnet und bei der Partikelkollision (s.Kap. 2.2.3) berücksichtigt. Soll demgegenüber die Rotation von Agglomeraten berücksichtigt werden, um beispielsweise den Stoßpartner für ein kollidierendes Primärpartikel innerhalb eines Agglomerats zu finden

(s.Kap. 3), müssen alle am Partikel angreifenden Momente bestimmt werden. Aufgrund des hohen numerischen Aufwands dafür, wird die Rotation von Agglomeraten in der vorliegenden Arbeit durch einen stochastischen Prozess abgebildet (s.Kap. 3).

Die Widerstandskraft setzt sich aus einem Reibungsanteil, der durch Reibung der Fluidmoleküle an der Partikeloberfläche entsteht, und dem Formwiderstand, der sich aus einer Druckverteilung über die Partikeloberfläche ergibt, zusammen. Der Widerstand wird durch Integration der Reibungs- und Druckkräfte über die Partikeloberfläche erhalten und kann wie folgt ausgedrückt werden:

$$F_D = \frac{3}{4} m_p \frac{\mu}{\rho_p d_p^2} c_D Re_p u_{rel} \quad (2-37)$$

Für den Stokes-Bereich kleiner Partikel-Reynolds-Zahlen ($Re_p < 0,5$) gilt für den Widerstandsbeiwert die einfache Form $c_D = 24 \cdot Re_p^{-1}$. Im Bereich höherer Reynolds-Zahlen (Übergangsbereich, beginnende Wirbelbildung) hat sich für die Korrelation des Widerstandsbeiwerts die Funktion von Schiller & Naumann (1933) durchgesetzt:

$$c_D = 24 \cdot Re_p^{-1} (1 + 0,15 \cdot Re_p^{0,687}) \quad (\text{für } 0,5 < Re_p < 2000) \quad (2-38)$$

Im sogenannten Newton-Bereich (turbulente Umströmung) für Reynolds-Zahlen im Bereich ($2000 < Re_p < 2 \cdot 10^5$) kann für den Widerstandsbeiwert ein konstanter Wert von $Re_p \approx 0,44$ angesetzt werden (Stieß 1995).

2.2.2 Turbulente Dispersion von Partikeln

Zur Berechnung der Partikelflugbahnen wird die momentane Fluidgeschwindigkeit am Partikelort benötigt. Da diese allerdings nicht direkt aus der Berechnung des Fluidfelds mit Hilfe eines Turbulenzmodells hervorgeht, muss sie anhand eines geeigneten Partikeldispersionsmodells bestimmt werden. Die dafür benötigten Daten des Fluidfelds stammen aus dem Turbulenzmodell und stehen in der vorliegenden Arbeit in Form der turbulenten kinetischen Energie k und der Dissipationsrate ε zur Verfügung. Auch bei identischem Startpunkt von Partikel und Fluidballen^{vii} verfolgen diese in der Regel unterschiedliche Trajektorien (s. Abbildung 2.4). Dieser Effekt liegt sowohl in der Trägheit des Partikels als auch in den einwirkenden Kräften begründet. Für die Partikeldisper-

^{vii} Als Fluidballen wird hier ein Kontrollvolumen der Fluidphase bezeichnet, das sich durch den Strömungsraum bewegt.

sion wird die Fluktuationsgeschwindigkeit des Fluids entlang der Partikelbahn benötigt. Bekannt ist allerdings nur die Fluktuationsgeschwindigkeit entlang der Fluidbahn, die unter Verwendung einer Lagrangeschen Korrelationsfunktion ermittelt wurde. Somit muss ein Zusammenhang zwischen der Fluktuationsgeschwindigkeit am Fluidort und der am Partikelort geknüpft werden. Dazu wird eine Eulersche Korrelationsfunktion herangezogen. Durch Verknüpfung dieser beiden Berechnungsschritte kann die Geschwindigkeitsänderung entlang der Partikelbahn erfolgen.

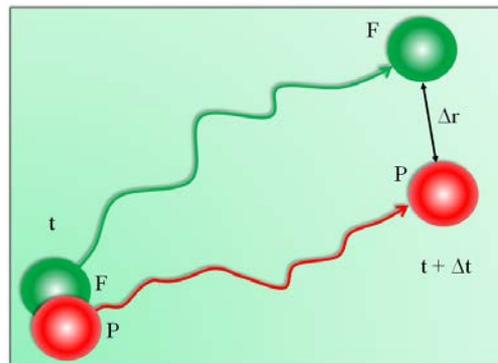


Abbildung 2.4: Unterschiedliche Bewegungsbahnen eines Partikels P (rot) und eines Fluidelements F (grün) innerhalb eines Zeitschritts.

In der hier vorgestellten Arbeit werden zur Bestimmung der aktuellen Fluktuationsgeschwindigkeit des Fluids am Partikelort verschiedene Dispersionsmodelle eingesetzt, die auf dem Langevin-Gleichungsmodell beruhen. Welches Modell verwendet wird, hängt von der jeweiligen Turbulenzstruktur ab. Bei einer isotropen Turbulenz kann ein einfaches Dispersionsmodell gewählt werden. Liegt eine mehr oder weniger stark ausgeprägte Anisotropie der Strömung vor, müssen die Richtungsinformationen bei der Modellierung der instantanen Fluidgeschwindigkeit am Partikelort berücksichtigt werden. In der Literatur sind diverse Modelle unterschiedlicher Komplexität zu finden. So haben Crowe *et al.* (1998) eine Übersicht über Partikeldispersionsmodelle zusammengestellt.

Isotropes Partikeldispersionsmodell (Isotropes Langevin Modell)

Grundlegend für alle Langevin-Gleichungsmodelle ist die Beschreibung der turbulenten Partikeldispersion durch den Markov-Prozess (Decker 2006). Darin geht ein System von einem Zustand in den nächsten über, wobei die Übergangswahrscheinlichkeit nur vom aktuellen Zustand abhängt. Nach Sommerfeld (1996) ergibt sich für die auf die Partikel wirkenden Geschwindigkeitsfluktuationen für den Zeitschritt Δt :

$$u_i|_P^t = R_{P,i}(\Delta t, \Delta r) \cdot u_i|_P^{t-1} + \sqrt{1 - R_{P,i}(\Delta t, \Delta r)^2} \cdot \sigma_{u_i} \cdot \xi_i \quad (2-39)$$

mit σ_{u_i} für die Standardabweichung der Fluidgeschwindigkeitskomponente u_i und ξ_i für eine Gauß-verteilte Zufallszahl mit dem Mittelwert null und der Standardabweichung eins. Die Korrelationsfunktion $R_{P,i}(\Delta t)$ setzt sich aus einer zeitlichen Lagrangeschen $R_L(\Delta t)$ und einer räumlichen Eulerschen $R_{E,i}(\Delta r)$ Korrelationsfunktion zusammen.

$$R_{P,i}(\Delta t, \Delta r) = R_L(\Delta t) \cdot R_{E,i}(\Delta r) \quad (2-40)$$

Nach Hinze (1975) kann für die Geschwindigkeitskorrelationsfunktion unter Annahme von homogener isotroper Turbulenz

$$R_L(\Delta t) = \exp\left(-\frac{\Delta t}{T_L}\right) \quad (2-41)$$

angesetzt werden. Darin stellt T_L das Lagrangesche integrale Zeitmaß der Turbulenz dar. Aus dem k- ε -Modell folgt für das Zeitmaß:

$$T_L = C_T \cdot \frac{2k}{3\varepsilon} \quad (2-42)$$

Sommerfeld (1996) fand in Untersuchungen für C_T einen Wert von 0,24. Die Lagrangesche Korrelationsfunktion (2-41) berücksichtigt die Korrelation zwischen zwei Zeitpunkten entlang der Bahn des Fluidteilchens. Ein Fluidteilchen erfährt während eines Zeitschritts allerdings eine andere Fluktuationgeschwindigkeit als ein Partikel, da sie sich auf unterschiedlichen Trajektorien befinden. Um diese räumliche Trennung zwischen Fluidelement und Partikel zu erfassen, wird eine Eulersche Korrelation eingesetzt. Unter Verwendung der longitudinalen und transversalen Korrelationskoeffizienten $f(\Delta r)$ und $g(\Delta r)$ (von Kármán und Horwarth 1938) lässt sich der Eulersche Korrelationsvektor darstellen als:

$$R_{E,i}(\Delta r) = (f(\Delta r) - g(\Delta r)) \frac{(\Delta r_i)^2}{(\Delta r)^2} + g(\Delta r) \quad (2-43)$$

Für den Fall lokal homogener isotroper Turbulenz lassen sich die longitudinalen und transversalen Korrelationskoeffizienten wie folgt annähern (Frankiel 1948 und Rotta 1972):

$$f(\Delta r) = \exp\left(-\frac{\Delta r}{L_E}\right) \quad (2-44)$$

$$g(\Delta r) = \left(1 - \frac{\Delta r}{2L_E}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta r}{L_E}\right) \quad (2-45)$$

Das Eulersche integrale Längenmaß L_E kann mit der Beziehung

$$L_E = c_L \cdot T_L \cdot \sigma_F \quad (2-46)$$

berechnet werden. Die Fluktuationsgeschwindigkeit des Fluids am Partikelort wird darin aus der turbulenten kinetischen Energie über die Beziehung $\sigma_F^2 = 2/3 \cdot k$ errechnet. Der Faktor c_L wird von Sommerfeld, Kohnen und Rürger (1993) angegeben mit $c_L = 3,0$.

Anisotropes Langevin Modell

Kann die Turbulenz nicht mehr als isotrop, d.h. als richtungsunabhängig angesehen werden, müssen komplexere Dispersionsmodelle verwendet werden. Durch die Berücksichtigung der Richtungsabhängigkeit der Fluidgeschwindigkeiten kann das im vorangegangenen Abschnitt beschriebene isotrope Langevin Modell erweitert werden. Nach Sommerfeld (1996) ergibt sich für die auf die Partikel wirkenden Geschwindigkeitsfluktuationen für den Zeitschritt Δt :

$$u_i|_p^t = R_{P,i}(\Delta t, \Delta r) \cdot u_i|_p^{t-1} + \sqrt{1 - R_{P,i}(\Delta t, \Delta r)^2} \cdot \sigma_{u_i} \cdot \xi_i \quad (2-47)$$

$$+ (1 - R_{P,i}(\Delta t, \Delta r)^2) \cdot T_{L,i} \cdot \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_j}$$

Die ersten beiden Terme auf der rechten Seite wurden im vorangegangenen Abschnitt bereits beschrieben. Der dritte Term stellt eine Driftkorrektur dar, die eine Driftbewegung der Teilchen aus Gebieten höherer Turbulenz in Gebiete niedriger Turbulenz vermeiden soll (Legg und Raupach 1982). Darin wird jetzt das integrale Lagrangesche Zeitmaß für die drei Koordinatenrichtungen bestimmt aus:

$$T_{L,i} = C_T \cdot \frac{\sigma_{u_i}^2}{\varepsilon} \quad (2-48)$$

Für die Geschwindigkeitskorrelationsfunktion gilt dann:

$$R_{L,i}(\Delta t) = \exp\left(-\frac{\Delta t}{T_{L,i}}\right) \quad (2-49)$$

Weiterhin steht $R_{P,i}$ für den effektiven Korrelationsvektor $R_{P,i} = R_{L,i} \cdot R_{E,i}$ (vgl. Sommerfeld 1996, Walklate 1987 und Gl. (2-40)). Allerdings wird nun das Eulersche integrale Längenmaß berechnet mit:

$$L_{E,i} = c_L \cdot T_{L,i} \cdot \sigma_{u_i} \quad (2-50)$$

Für den Fall einer anisotropen Turbulenz wird für die longitudinalen und transversalen Korrelationskoeffizienten $f_i(\Delta r)$ und $g_i(\Delta r)$ in den drei Raumrichtungen $i = x, y, z$ angenommen:

$$f_i(\Delta r) = \exp\left(-\frac{\Delta r}{L_{E,i}}\right) \quad (2-51)$$

$$g_i(\Delta r) = \left(1 - \frac{\Delta r}{2L_{E,i}}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta r}{L_{E,i}}\right) \quad (2-52)$$

Damit lässt sich dann der Eulersche Korrelationsvektor darstellen als:

$$R_{E,i}(\Delta r) = (f_i(\Delta r) - g_i(\Delta r)) \frac{(\Delta r_i)^2}{(\Delta r)^2} + g_i(\Delta r) \quad (2-53)$$

Für den effektiven Korrelationsvektor $R_{P,i}(\Delta t, \Delta r)$ folgt schließlich (vgl. Gl. (2-40)):

$$R_{P,i}(\Delta t, \Delta r) = R_{L,i}(\Delta t) \cdot R_{E,i}(\Delta r) \quad (2-54)$$

Dieses Modell wird später in Kapitel 5 für die Simulationen eines Sprühtrockners im Pilotmaßstab verwendet.

Anisotropes Particle Langevin Modell (Minier Modell)

Die folgenden Ausführungen zum Particle Langevin Model sind Lipowsky (2013) entnommen und sollen hier kurz wiedergegeben werden. Bei diesem Modell wurde eine Erweiterung des Simplified Langevin Modell (SLM), das von Pope (1994) vorgeschlagen wurde, hinsichtlich der Partikelphase vorgenommen. Die Erweiterungen wurden von Minier (1999) und Minier und

Peirano (2001) beschrieben und von Melheim, Horender und Sommerfeld (2005) in den in dieser Arbeit verwendeten Code implementiert.

Grundannahme dieses Modells ist wie bei den zuvor beschriebenen Modellen, dass die Partikeldispersion als Markov-Sequenz beschrieben werden kann. Somit lässt sich die Änderung der instantanen Fluidgeschwindigkeit berechnen als:

$$du'_i = -u'_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} dt + \frac{\partial R_{ij}}{\partial x_j} dt + (v'_j - u'_j) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} dt - \frac{1}{T_{L,i}} u'_i dt + \sqrt{\varepsilon \left(\left(C_0 + \frac{2}{3} \right) b_i \bar{k} / k - \frac{2}{3} \right)} dW_i(t) \quad (2-55)$$

wobei mit \bar{u}_i die mittlere Geschwindigkeit und R_{ij} der Reynolds-Spannungstensor bezeichnet werden. Letzterer wird in der vorliegenden Arbeit über die Wirbelviskosität ν_t (Boussinesq 1877) rekonstruiert (siehe Gl. (2-25):

$$R_{ij} = \overline{u'_i u'_j} = -\nu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad (2-56)$$

worin $\nu_t = \mu_t / \rho$. Weiterhin wird ein für jede Raumrichtung unabhängiges Lagrangesches Zeitmaß $T_{L,i}$ verwendet, das sich berechnet als

$$T_{L,i} = \frac{1}{\left(\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 \right) \frac{\varepsilon}{k} b_i} \quad (2-57)$$

wobei Pope (1985) $C_0 = 2,1$ angibt. Zur Unterscheidung der parallel und transversal zur Fluidströmungsrichtung verlaufenden Anteile der Partikelgeschwindigkeit schlägt Csanady (1963) folgende Faktoren b_i vor:

$$b_i = b_{\perp} + (b_{\parallel} - b_{\perp}) \frac{(v_i - \bar{u}_i)^2}{|\mathbf{v} - \bar{\mathbf{u}}|^2} \quad (2-58)$$

$$b_{\parallel} = \sqrt{1 + \beta_T^2 \frac{|\mathbf{v} - \bar{\mathbf{u}}|^2}{2/3 k}} \quad (2-59)$$

$$b_{\perp} = \sqrt{1 - 4\beta_T^2 \frac{|\mathbf{v} - \bar{\mathbf{u}}|^2}{2/3 k}} \quad (2-60)$$

darin bildet β das Verhältnis der Lagrangeschen und Eulerschen Zeitskalen $\beta_T = T_L/T_E$. Durch einen Wiener-Prozess $dW_i(t)$, dessen einzelnder Schritt als eine normalverteilte Zufallsvariable mit einem Erwartungswert von null und einer Varianz von dt beschrieben werden kann, wird der Berechnung ein Zufallselement beigelegt.

2.2.3 Partikel Kollisionen

Entsprechend der berechneten Partikeltrajektorien können Partikel miteinander kollidieren. Um diese Partikelkollisionen zu simulieren, wird das stochastische Kollisionsmodell von Sommerfeld (2001) verwendet. Im Gegensatz zu einem deterministischen Modell, das zu jedem Partikel in seiner Nachbarschaft nach einem möglichen Stoßpartner sucht, werden bei der stochastischen Modellierung fiktive Partikel-Partikel-Kollisionen betrachtet. Ein wesentlicher Vorteil der Modellierung besteht darin, mehrere reale Teilchen mit gleichen Eigenschaften zu repräsentativen Teilchen, sogenannten „parcels“, zusammenfassen zu können, sowie mit einem stationären Strömungsfeld zu rechnen. Dadurch wird eine Unabhängigkeit der zu berechnenden Trajektorien von der tatsächlich vorliegenden Konzentration erreicht.

Die stochastische Modellierung von Partikel-Partikel-Kollisionen besteht aus zwei Berechnungsschritten. Zunächst werden die Partikelflugbahnen ohne Berücksichtigung von Kollisionen berechnet. Dieser Schritt dient der Bestimmung der lokalen Partikeleigenschaften in jedem Kontrollvolumen. Aus diesen charakteristischen Mittelwerten der dispersen Phase werden anschließend die fiktiven Kollisionspartner erzeugt und die Kollisionswahrscheinlichkeiten zwischen realen und fiktiven Partikel berechnet. Wegen der Verwendung von statistischen Werten, die aus einer bereits vorliegenden (vorläufigen) Berechnung ermittelt werden, handelt es sich bei dieser Art der Modellierung um einen iterativen Prozess, so dass die Berechnung der Kollisionen mehrfach ausgeführt werden muss. Zu den im ersten Schritt berechneten Mittelwerten zählen die Anzahldichte, die Größenverteilung und die mittlere sowie die Schwankungsgeschwindigkeit der Partikel in Abhängigkeit von ihrer Größe. Aus dieser Statistik wird dann für jeden Zeitschritt bei der Berechnung der Partikeltrajektorie der realen Partikel A ein fiktiver Stoßpartner B generiert. Bei der Bestimmung der Partikelgeschwindigkeit des fiktiven Partikels wird die Geschwindigkeitskorrelation zwischen beiden Partikeln berücksichtigt. Der Grad der Korre-

lation hängt dabei stark vom Ansprechverhalten der Partikel auf die lokale Fluidgeschwindigkeit ab. Das Strömungsfolgevermögen der Partikel wird durch die Partikelrelaxationszeit τ_p und den turbulenten Eigenschaften der Strömung (beschreibbar z.B. durch das integrale turbulente Zeitmaß T_L) anhand der Stokes-Zahl $St = \tau_p \cdot T_L^{-1}$ charakterisiert. Während sehr kleine Partikel ($St \rightarrow 0$) den turbulenten Schwankungen der Strömung perfekt folgen können (vollständige Korrelation), werden große Partikel ($St \rightarrow \infty$) nicht durch die Strömung beeinflusst^{viii}. Bei praktischen Anwendungsfällen liegt normalerweise eine teilweise Korrelation zwischen diesen Grenzfällen vor.

Analog zum Langevin-Gleichungsmodell für die turbulente Partikeldispersion kann die Geschwindigkeit des fiktiven Partikels anhand folgender Gleichung bestimmt werden (Sommerfeld 2001):

$$u'_{B,i} = R(St) \cdot u'_{A,i} + \sigma_{p,i}(1 - R(St)^2)^{0,5} \cdot \xi_i \quad (2-61)$$

Darin ist $\sigma_{p,i}$ die mittlere lokale Standardabweichung der Partikelgeschwindigkeit, die aus der vorangegangenen Berechnung ermittelt wurde. Die Schwankungsgeschwindigkeit $u'_{A,i}$ ergibt sich aus der Subtraktion des statistischen Mittelwerts dieser Teilchenart von der aktuellen Geschwindigkeit. Ferner steht ξ_i für eine Gauß-verteilte Zufallszahl mit dem Mittelwert null und der Standardabweichung eins. Somit setzt sich die Gleichung für die Schwankungsgeschwindigkeit aus einem korrelierten und einem stochastischen Term zusammen. Sommerfeld (2001) hat mit Hilfe von LES-Simulationen folgende Abhängigkeit der Korrelationsfunktion $R(St)$ von der Stokes-Zahl gefunden:

$$R(St) = \exp(-0,55 \cdot St^{0,4}) \quad (2-62)$$

Zusammen mit dem Durchmesser, der aus der lokalen Größenverteilung ermittelt wurde, und der Geschwindigkeit ist das fiktive Partikel nunmehr definiert. Ob sich allerdings eine Kollision zwischen realem und fiktivem Partikel ereignet muss anhand der Kollisionswahrscheinlichkeit abgeschätzt werden. Die Kollisionswahrscheinlichkeit P_{PPK} wurde aus der kinetischen Gastheorie hergeleitet und stellt sich gemäß Sommerfeld (2001) folgendermaßen dar:

$$P_{PPK} = f_{coll} \cdot \Delta t = \underbrace{\frac{\pi}{4}(d_{p,A} + d_{p,B})^2}_{\text{Kollisionszylinderfläche}} \cdot \underbrace{|\overline{u_{p,A}} - \overline{u_{p,B}}|}_{\text{Kollisionszylinderlänge}} \cdot \Delta t \cdot n_p \quad (2-63)$$

^{viii} Es liegt weder eine Korrelation zwischen Partikel und Fluid noch zwischen den Partikeln vor.

In diesem Zusammenhang kann ein Kollisionszylinder definiert werden, dessen Querschnittsfläche durch die Partikeldurchmesser und dessen Länge durch das Produkt aus Relativgeschwindigkeit u_{rel} und Zeitintervall Δt gegeben ist. In Gleichung (2-63) steht n_p weiterhin für die Partikelanzahldichte. In Abbildung 2.5 ist dieser Kollisionszylinder schematisch dargestellt. Der Zeitschritt Δt muss hinreichend groß sein, um eine statistische Betrachtung zu ermöglichen andererseits aber auch klein genug um Mehrfachkollisionen auszuschließen. Ob letztendlich eine Kollision zwischen den Partikeln stattfindet wird anhand einer Zufallszahl ζ im Intervall $[0,1]$ entschieden. Ist $\zeta < P_{\text{PPK}}$, so wird eine Kollision berechnet und alle weiteren Schritte werden ausgeführt, andernfalls werden diese einfach übersprungen.

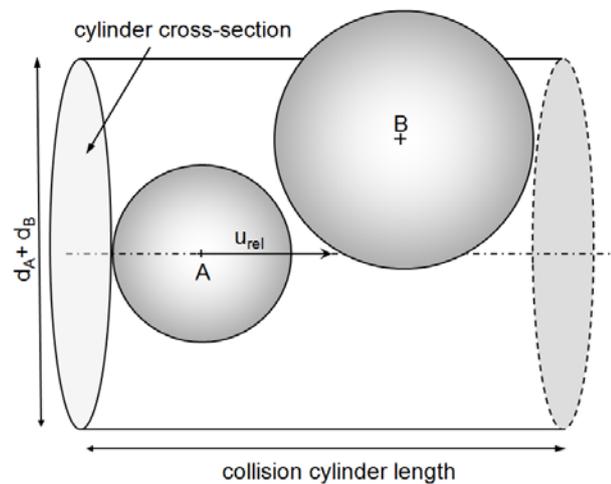


Abbildung 2.5: Kollisionszylinder zur Beschreibung einer binären Kollision zwischen einem realen und einem fiktiven Partikel.

Die Anzahl der aus der Kollisionswahrscheinlichkeit (Gl. (2-63)) vorausgerechneten Kollisionen kann durch einen Trägheitseffekt, der sogenannten Auftreffwahrscheinlichkeit, reduziert werden. Für den Fall eines kleinen Partikels, das mit einem größeren Partikel kollidiert, kann das kleinere Partikel teilweise einer Strömungstrajektorie um das größere Kollektorpartikel folgen. Schuch und Löffler (1978) geben für den Trägheitsparameter Ψ , der die Auftreffwahrscheinlichkeit beschreibt, an:

$$\Psi = \rho_p \cdot |\vec{u}_{p,1} - \vec{u}_{p,2}| \cdot d_p^2 \cdot (18 \cdot \mu \cdot d_K)^{-1} \quad (2-64)$$

Darin stehen d_p und ρ_p für den Durchmesser und die Dichte des kleinen Partikels und d_K für den Durchmesser des Kollektorpartikels. Unter Verwendung des Trägheitsparameters Ψ aus Gleichung (2-64) kann die Auftreffwahrscheinlichkeit für ein einzelnes Kollektorpartikel berechnet werden zu:

$$\eta_p = \left(\frac{\psi}{\psi + a} \right)^b \quad (2-65)$$

Gemäß Löffler (1988) gelten für die Reynolds-Zahl-abhängigen Parameter a und b im Bereich kleiner Reynolds-Zahlen ($Re < 1$) die Werte $a = 0,65$ und $b = 3,7$.

Damit es nun zu einer Kollision zwischen den beiden Partikeln A und B kommen kann, muss sich das fiktive Partikel innerhalb des beschriebenen Kollisionszylinders befinden. Da die genaue Position des fiktiven Partikels bislang noch unbekannt ist, muss zunächst der Kontaktpunkt der beiden Partikel bestimmt werden, bevor die eigentliche Kollision berechnet wird. Durch die Darstellung der Kollision mit Hilfe des Kollisionszylinders kann der Kollisionspunkt auf der Partikeloberfläche einfach durch die Lage des fiktiven Partikels innerhalb dieses Kollisionszylinders bestimmt werden. Dabei wird der Kollisionszylinder so definiert, dass dessen Mittelachse mit dem Vektor der Relativgeschwindigkeiten zusammenfällt. Die Position des fiktiven Partikels wird nun durch einen weiteren stochastischen Vorgang bestimmt. Die Lage des Mittelpunkts des fiktiven Partikels auf der Zylinderquerschnittsfläche mit dem Kreisdurchmesser von $(d_{p,A} + d_{p,B})$ wird mit der seitlichen Versetzung L , den Winkeln φ und ψ sowie zweier gleichverteilter Zufallszahlen aus dem Intervall $[-1,1]$ folgendermaßen berechnet (Sommerfeld 2001):

$$\begin{aligned} L &= (Y^2 + Z^2)^{0,5}, & \text{mit } L \leq 1, \\ \varphi &= \arctan(L) & \text{und} \\ \psi &= \arctan(Y \cdot Z^{-1}). \end{aligned} \quad (2-66)$$

Für die Berechnung der Geschwindigkeiten des realen Partikels nach dem Stoß wird das Koordinatensystem, in dem die Berechnung stattfindet, transformiert. Bei Sommerfeld (2001, S.132) wird die Koordinatentransformation wie folgt beschrieben:

1. „Transformation in ein Koordinatensystem, bei dem die Relativgeschwindigkeit zwischen beiden Partikeln mit der positiven Richtung der x' -Achse (x' - y' - z' -Koordinatensystem), also der Achse des Kollisionszylinders, übereinstimmt.“
2. „Transformation in ein Koordinatensystem, bei dem die Gerade zwischen den Mittelpunkten beider Partikel mit der x'' -Achse des x'' - y'' - z'' -Koordinatensystems übereinstimmt, um einen zentralen Stoß zu bekommen.“

Somit reduzieren sich die Beziehungen für die Geschwindigkeiten nach dem Stoß auf die eines zentralen Stoßes. Die Bestimmungsgleichungen für die Translations- (u , v und w) und Rotationsgeschwindigkeiten (ω_y , ω_z) nach dem Stoß lassen sich aus der Impulsbilanz herleiten (Sommerfeld 1996) und wie folgt angeben:

$$\begin{aligned} u_{p1}^* &= u_{p1} + J_x \cdot m_{p1}^{-1} \\ v_{p1}^* &= v_{p1} + J_y \cdot m_{p1}^{-1} \\ w_{p1}^* &= w_{p1} + J_z \cdot m_{p1}^{-1} \end{aligned} \quad (2-67)$$

$$\begin{aligned} \omega_{x,p1}^* &= \omega_{x,p1} \\ \omega_{y,p1}^* &= \omega_{y,p1} - 5 J_y \cdot (m_{p1} d_{p1})^{-1} \\ \omega_{z,p1}^* &= \omega_{z,p1} - 5 J_z \cdot (m_{p1} d_{p1})^{-1} \end{aligned} \quad (2-68)$$

Darin werden die Komponenten des Impulses mit J_x , J_y und J_z bezeichnet. Die Geschwindigkeitskomponenten nach dem Stoß sind mit * gekennzeichnet. Mit der Definition der Stoßzahl e

$$e = (u_{p1}^* - u_{p2}^*)(u_{p1} - u_{p2})^{-1} \quad (2-69)$$

und der Erhaltungsgleichung für den x-Impuls J_x

$$J_x = -m_{p2}(u_{p2}^* - u_{p2}) \quad (2-70)$$

kann schließlich für J_x der Ausdruck

$$J_x = -(1 + e) \cdot (u_{p1} - u_{p2}) \cdot \left((m_{p1} m_{p2}) (m_{p1} + m_{p2})^{-1} \right) \quad (2-71)$$

angegeben werden.

Binäre Kollisionen können laut Decker (2006) in drei verschiedene Kategorien eingeteilt werden:

- Im Kontaktpunkt gleiten die Partikel während der gesamten Kollision.
- Während der Kollision kommt es zum Übergang von Gleiten zu Rollen (Haften).

- Während des gesamten Kollisionsvorgangs liegt Haften vor.

Die Komponenten J_x , J_y und J_z sind sowohl von der Art des Stoßens als auch von der Relativgeschwindigkeit der Partikel im Kontaktpunkt abhängig. Letztere berechnet sich aus den Translations- und Rotationsgeschwindigkeiten vor dem Stoß.

$$u_R = (u_{Ry}^2 + u_{Rz}^2)^{0,5}$$

$$u_{Ry} = (v_{p1} - v_{p2}) + d_{p1}/2 \cdot \omega_{z,p1} + d_{p2}/2 \cdot \omega_{z,p2} \quad (2-72)$$

$$u_{Rz} = -d_{p1}/2 \cdot \omega_{z,p1} - d_{p2}/2 \cdot \omega_{z,p2}$$

Unter Vernachlässigung der zweiten Kollisions-Kategorie gilt für die Komponenten des Impulses J_y und J_z gemäß Sommerfeld (1996) mit dem Gleitreibungskoeffizienten μ_d für den Haftstoß:

$$J_y = -2/7 \cdot u_{Ry} \cdot (m_{p1} m_{p2}) (m_{p1} + m_{p2})^{-1}$$

$$J_z = -2/7 \cdot u_{Rz} \cdot (m_{p1} m_{p2}) (m_{p1} + m_{p2})^{-1} \quad (2-73)$$

und für den Gleitstoß:

$$J_y = -\mu_d \cdot u_{Ry}/u_R \cdot |J_x|$$

$$J_z = -\mu_d \cdot u_{Rz}/u_R \cdot |J_x| \quad (2-74)$$

In Abhängigkeit des Haftreibungskoeffizienten gilt für die Bedingung für einen Haftstoß unter Verwendung des Coulombschen Reibungsgesetz (Sommerfeld 1996):

$$|u_R| \leq 7/2 \cdot \mu_d \cdot (1 + e) \cdot |u_{p1} - u_{p2}| \quad (2-75)$$

Ho und Sommerfeld (2002) geben dann für die Geschwindigkeiten nach dem Stoß folgende Bestimmungsgleichungen unter Vernachlässigung der Rotationsgeschwindigkeit der Partikel an:

Normalkomponente:

$$u_{p1}^* = u_{p1} \cdot \left(1 - \frac{1 + e}{1 + m_{p1}/m_{p2}}\right) \quad (2-76)$$

Tranversalkomponente:

$$\text{Haftsto\ss} \quad v_{p1}^* = v_{p1} \cdot \left(1 - \frac{2/7}{1 + m_{p1}/m_{p2}} \right) \quad (2-77)$$

$$\text{Gleitsto\ss} \quad v_{p1}^* = v_{p1} \cdot \left(1 - \mu_d \cdot (1 + e) \cdot u_{p1} \cdot v_{p1}^{-1} \cdot \frac{1}{1 + m_{p1}/m_{p2}} \right) \quad (2-78)$$

Schlie\sslich werden die Geschwindigkeiten in das globale Koordinatensystem r\ucktransformiert. Es soll an dieser Stelle angemerkt auf die bereits in Kapitel 2.2.1 beschriebene Problematik bei der Ber\ucksichtigung der Agglomeratrotation hingewiesen werden.

2.2.4 Agglomeration trockener Partikel

Bei der Kollision zweier Partikel kann es zu einem Anhaften der Partikel aneinander kommen. Sie w\urden somit ein gemeinsames gr\o\sseres Partikel, ein Agglomerat bilden. Entscheidend f\ur das Entstehen von Agglomeraten sind ausreichend hohe Haftkr\afte, die gr\o\sser als die trennenden Kr\afte sein m\ussen. W\ahrend einer Kollision wird ein Teil der kinetischen Sto\ssenergie E_{kin} in Verformungsenergie oder durch Reibungsvorg\ange im Partikelinneren umgewandelt. Aus einer Energiebilanz (Gl. (2-79)) leitete Hiller (1981) eine kritische Geschwindigkeit her, unterhalb derer die Partikel aneinander haften.

$$E_{kin} = E_{kin}' + \Delta E_a + E_d \quad (2-79)$$

Darin stellt $\Delta E_a + E_d$ die durch Verformung und die van-der-Waals-Energie dissipierte Energie dar. Als Haftbedingung gilt, dass die kinetische Energie des Partikels nach dem Sto\ss E_{kin}' gleich Null ist. Als Haftkr\afte werden darin lediglich van-der-Waals-Kr\afte ber\ucksichtigt, so dass f\ur die kritische Geschwindigkeit v_{krit} gilt:

$$v_{krit} = \frac{1}{d_p} \frac{(1 - e)^{0,5}}{e^2} \frac{A}{\pi \cdot z_0 \cdot (6 \cdot p_{pl} \cdot \rho_p)^{0,5}} \quad (2-80)$$

Darin stehen e f\ur die Sto\sszahl und d_p und ρ_p f\ur den Partikeldurchmesser und dessen Dichte. Die Hamaker-Konstante wird mit $A = 5 \cdot 10^{-19} \text{J}$ angesetzt. Der

minimale Kontaktabstand wird als $z_0 = 4 \cdot 10^{-10} \text{m}$ und der Fließdruck, bei dem plastische Verformung auftritt, mit $p_{pl} = 5 \cdot 10^9 \text{Pa}$ ^{ix}.

Nach einem Agglomerationsvorgang liegt eine geänderte Partikelgröße des entstandenen Agglomerats vor. Bislang wird der neue Durchmesser unter der Annahme bestimmt, dass ein Agglomerat als volumenäquivalente Kugel anzusehen ist. Zwar wird dadurch der Erhalt der Masse sicher gestellt, jedoch geht die Information über die Agglomeratstruktur verloren. Erst mit dem in dieser Arbeit entwickelten Agglomerationsmodell, das im Kapitel 3 vorgestellt wird, kann die Morphologie der entstandenen Agglomerate berücksichtigt und geeignete Äquivalentdurchmesser bestimmt werden. Der volumenäquivalente Partikeldurchmesser d_{ves} beispielsweise berechnet sich dann zu

$$d_{ves} = (d_{p1}^3 + d_{p2}^3)^{1/3}. \quad (2-81)$$

Die Änderungen der Translationsgeschwindigkeitskomponenten der Agglomerate nach dem Stoß $u_{Agg,i}^*$ können anhand einer Impulsbilanz bestimmt werden.

$$u_{Agg,i}^* = \frac{m_{p1} \cdot u_{p1,i} + m_{p2} \cdot u_{p2,i}}{m_{p1} + m_{p2}} \quad (2-82)$$

Wegen der nach einem Agglomerationsvorgang veränderten Partikelgröße und -masse des Agglomerats muss zur Gewährleistung der Massenerhaltung die Anzahl der Partikel im Parcel n_{pip}^* nach der Agglomeration folgendermaßen korrigiert werden:

$$n_{pip}^* = n_{pip} \frac{m_{p1}}{m_{p1} + m_{p2}} \quad (2-83)$$

Detaillierte Ausführungen zur Massenbilanz sind bei Blei (2006) zu finden.

2.2.5 Partikel Trocknung

Zur Berücksichtigung von Massen- und Wärmeaustausch zwischen der kontinuierlichen und der dispersen Phase wird ein Trocknungsmodell benötigt. Zusätzlich hat die Lösungsmittelverdampfung einen erheblichen Einfluss auf die

^{ix} Dieser Wert gilt für Gläser. Für andere Materialien gelten andere Werte, z.B. für Kunststoffe zwischen 10^7 und 10^8Pa und für Stahl bei $5 \cdot 10^8 \text{Pa}$ (Hiller 1981).

Materialeigenschaften der Partikel. Ein durch Verdampfung ausgelöster schrumpfender Partikeldurchmesser beeinflusst sowohl das Bewegungsverhalten als auch die Kollisionswahrscheinlichkeit. Flüssigkeitstropfen zeigen ein deutlich anderes Verhalten und vor allem Ergebnis einer möglichen Kollision als z.B. klebrige oder vollständig getrocknete Partikel.

In der vorliegenden Arbeit wird das von Blei (2006) implementierte Trocknungsmodell verwendet. Dort wird die Verdampfung eines Flüssigkeitstropfens zu drei physikalischen Phänomenen zusammengefasst. Zunächst wird Wärme und Speziesmasse innerhalb des Tropfens transportiert. Über die Grenzfläche zwischen Tropfen und umgebenden Fluid findet ein Wärme- und Stoffaustausch statt, der anschließend durch einen Transport von Wärme und Masse durch die Grenzschicht gefolgt wird. Das von Blei (2006) implementierte Verdampfungsmodell basiert auf den Arbeiten von Straatsma *et al.* (1999) und Verdurmen *et al.* (2004) und wurde vom Modell von Sano und Keey (1982) abgeleitet. Es wurde speziell für die Berechnung von Suspensionen, wie sie beispielsweise zur Herstellung von diversen Milchpulvern verwendet werden, entwickelt, da zur Trocknung von Milch hauptsächlich Sprühtrockner eingesetzt werden. Es werden die folgenden Modellannahmen getroffen (Blei 2006):

- Die Trocknung der Suspension verhält sich wie die einer binären Mischung mit Wasser als Lösungsmittel.
- Innerhalb des Tropfens wird die Ficksche Diffusion mit Hilfe eines effektiven binären Diffusionskoeffizienten modelliert.
- Das Gesetz von Amagat für eine Flüssigkeit-Feststoff-Mischung wird angewendet.
- Steigt der Gleichgewichts-Dampfdruck innerhalb des Tropfens über den Umgebungsdruck, bildet sich eine Blase im Zentrum des Tropfens.
- Das Gesamtmodell beschreibt einen Zyklus eines Trocknung-Aufbläh-Trocknung Prozesses, sofern sich innerhalb des Tropfens keine Dampfblase bildet.
- Alle Phänomene im Tropfen werden als eindimensional angesehen und können deswegen in sphärischen Koordinaten beschrieben werden.

Blei (2006) beschreibt in seiner Arbeit, dass der Trocknungsprozess für seine Sprühnebelberechnungen durch die Massendiffusion und nicht durch die thermische Diffusion kontrolliert wird. Aus diesem Grund kann eine gleichmäßige aber zeitabhängige Temperaturverteilung im Tropfen angenommen werden.

Im Folgenden sollen die grundlegenden physikalischen Zusammenhänge und die Implementierung kurz dargestellt werden. Für eine genauere Abhandlung

der Tropfenverdampfung mit diesem Modell sei der Leser auf Blei (2006) verwiesen.

Die Triebkräfte der Tropfenverdampfung liegen in der Temperatur- und Konzentrationsdifferenz (ΔT bzw. Δc) zwischen Tropfenoberfläche und umgebenden Gas begründet.

$$\begin{aligned}\Delta T &= T_a^* - T_a^\infty, \\ \Delta c &= c_a^* - c_a^\infty\end{aligned}\quad (2-84)$$

Der Stoff- und Wärmetransport (\dot{m} bzw. \dot{Q}) über eine sphärische Oberfläche A kann nach Bird (1960) mit einem Übergangskoeffizienten (α , k) beschrieben werden als:

$$\dot{Q} = \alpha \cdot A \cdot \Delta T = \alpha \cdot \pi d^2 \cdot \Delta T \quad (2-85)$$

$$\dot{m} = k \cdot A \cdot \Delta c = k \cdot \pi d^2 \cdot \Delta c \quad (2-86)$$

Um die Übergangskoeffizienten für den Wärme- und Stofftransport (α , k) berechnen zu können, werden häufig dimensionslose Kennzahlen benutzt. Im verwendeten Modell werden die Ähnlichkeitskennzahlen mit dem Modell von Ranz und Marshall (1952) abgeschätzt.

$$\alpha = (Nu \cdot \alpha_{Gas}) \cdot d^{-1} = \lambda_{Gas} \cdot d^{-1} \cdot (2 + 0,58 \cdot Re^{0,5} \cdot Pr^{0,33}) \quad (2-87)$$

$$k = (Sh \cdot D_{Gas}) \cdot d^{-1} = D_{Gas} \cdot d^{-1} \cdot (2 + 0,58 \cdot Re^{0,5} \cdot Sc^{0,33}) \quad (2-88)$$

Die benötigte Dampfkonzentration c_a^* steht im thermodynamischen Gleichgewicht mit der Flüssigkeit an der nassen Tropfenoberfläche.

$$c_a^* = (p_a^* \cdot M_w) \cdot (R \cdot T_p)^{-1} \quad (2-89)$$

Die Konzentration im umgebenden Fluid wird ebenfalls über den Gleichgewichtszustand mit dem Dampfdruck der reinen Flüssigkeit berechnet. Der Partialdruck p_a^* wird über den Dampfdruck der reinen Flüssigkeit p_l und der Wasseraktivität a_w berechnet.

$$p_a^* = a_w \cdot p_l \quad (2-90)$$

Da die Wasseraktivität sehr stark stoffabhängig ist, muss sie über Sorptionsisothermen bestimmt werden. Für Milchprodukte geben Wijlhuizen *et al.* (1978) für die Wasseraktivität a_w den Zusammenhang

$$a_w = \exp\left(-3,106 \cdot \left(\frac{Y_w}{1 - Y_w}\right)^{-2,18}\right) \quad (2-91)$$

an. Darin bezeichnet Y_w den Feuchtigkeitsanteil im Pulver.

Sano und Keey (1982) geben für den Massenerhalt im Tropfen folgende Gleichung an:

$$\frac{\partial \rho_w}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \cdot \rho \cdot u_{w,r}) = 0 \quad (2-92)$$

Die Massenstromrate $j_{w,r}$ kann mit den binären Diffusionskoeffizienten D_{ws} von Wasser in einem binären Gemisch, dem Massenanteil des Wassers Y_w und der radialen Geschwindigkeit v_r („bulk velocity“) bestimmt werden.

$$j_{w,r} = \rho \cdot u_{w,r} = -\rho \cdot D_{ws} \frac{\partial Y_w}{\partial r} + \rho_w \cdot v_r \quad (2-93)$$

Werden die Gleichungen (2-92) und (2-93) miteinander kombiniert, ergibt sich die Gleichung für die eindimensionale Diffusion für einen sphärischen Tropfen:

$$\frac{\partial Y_w}{\partial t} + \frac{2 \cdot D_{ws}}{Y_w + \tilde{\rho}} \left(\frac{\partial Y_w}{\partial r}\right)^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot D_{ws} \frac{\partial Y_w}{\partial r}\right), \quad \text{mit } \tilde{\rho} = \frac{\rho_w}{\rho_s - \rho_w} \quad (2-94)$$

Für die CFD-Berechnung von Sprühtrocknern schlägt Crank (1967) für den instationären Diffusionsvorgang innerhalb des Tropfens folgende Gleichung vor:

$$\frac{\delta c}{\delta t} = \frac{1}{r^2} \frac{\delta}{\delta r} \left(r^2 \cdot D \cdot \frac{\delta c}{\delta r}\right) \quad (2-95)$$

Der darin verwendete Diffusionskoeffizient D kann nach Wijlhuizen *et al.* (1978) angegeben werden als:

$$D = \exp\left(-\frac{B + C \cdot Y_w}{1 + A \cdot Y_w}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H}{R} \left(\frac{1}{T(r)} - \frac{1}{303}\right)\right) \quad (2-96)$$

Für die numerische Implementierung in den hier verwendeten CFD-Code werden die Tropfen zunächst durch eine bestimmte Anzahl von Schalen diskretisiert. Auf diese Weise kann die Diffusion innerhalb des Tropfens berechnet werden. Zusätzlich wird der aktuelle Lagrangesche Zeitschritt falls nötig auf die Verdampfung angepasst. Den Algorithmus zur Simulation der Tropfenverdampfung beschreibt Blei (2006) auf den Seiten 136 und 137 seiner Arbeit folgendermaßen:

- Zunächst werden die Eigenschaften der Gasphase aus der Fluidfeldberechnung an den Partikelort interpoliert. Dies sind die Flüssigkeitsdampfkonzentration, die Gastemperatur, der absolute Umgebungsdruck und die instantane Relativgeschwindigkeit zwischen Partikel und Gas.
- Aus der Flüssigkeitskonzentration, dem Druck und der Gastemperatur werden weitere Materialeigenschaften der Gasphase (Gasdichte, dyn. Viskosität, Wärmeleitfähigkeit, Diffusionskoeffizient des Flüssigkeitsdampfes der Gasphase sowie spezifische Wärmekapazität von Gas und Dampf) berechnet.
- Darauf folgend werden für die aktuelle Situation die Nusselt- und die Schmidt-Zahl sowie der Partialdampfdruck des Lösungsmittels der Gas-Flüssigkeits-Mischung berechnet.
- Nun beginnt eine Berechnungsschleife, die solange ausgeführt wird, bis die Summe der kleineren Verdampfungszeitschritte gleich dem aktuellen Lagrangeschen Zeitschritt des eingefrorenen Fluidfelds ist. Eine Schleife setzt sich aus mehreren Schritten zusammen:
 - Berechnung der Partikel-Reynolds-Zahl aus dem letzten Wert für den Partikeldurchmesser.
 - Bestimmung der aktuellen Partikeleigenschaften für jede Schale (Dichte, Flüssigkeitskonzentration, Diffusionskoeffizient).
 - Stoffübergangskoeffizient k und Wasser-Aktivität a_w der äußeren Schale sowie der Sättigungsdampfdruck $p_{\text{sat},p}$ und der Partialdampfdruck an der Partikeloberfläche $p_{\text{partial},p}$ werden berechnet.
 - Anhand dieser Werte werden die Gleichgewichtsflüssigkeitskonzentration in der Gasphase c_a^* sowie die Flüssigkeitskonzentration der Gasphase im Fernfeld c_a^∞ berechnet. Daraus kann der aktuelle Flüssigkeitsstrom über die Phasengrenzfläche abgeschätzt werden.
 - Der Wärmeübergangskoeffizient, die Verdampfungswärme bei Partikeloberflächentemperatur und die ausgetauschte Wärmemenge zwischen Partikel und Gas werden errechnet.

- Nun wird der Massenfluss des Lösungsmittels zwischen den einzelnen Schalen i bestimmt:

$$\frac{dm_{\text{solvent},i}}{dt} = -4 \cdot \pi \cdot \left[\left(r_{i+1}^2 \cdot D_{i+1} \cdot \left(\frac{dc}{dr} \right)_{i+1} \right) - \left(r_i^2 \cdot D_i \cdot \left(\frac{dc}{dr} \right)_i \right) \right] \quad (2-97)$$

- Der Zeitschritt für die Verdampfung wird ermittelt.
- Die Konzentrationen und Massen jeder Partikelschale werden berechnet.
- Innerhalb des Partikels wird eine konstante Temperatur angenommen für die folgender Zusammenhang gilt:

$$T_{t+\Delta t} = \frac{h_{t+\Delta t}}{c_{p,ds} + c_{p,\text{solvent}} \cdot c_{\text{solvent}}} + 273,15K \quad (2-98)$$

- Schließlich wird der neue äußere Durchmesser jeder Schale d_i mit Hilfe der aktualisierten Materialdichte in jeder Schale i bestimmt:

$$\text{für die innerste Schale} \quad d_i = \left(\frac{6 \cdot m_i}{\pi \cdot \rho_i} \right)^{1/3} \quad (2-99)$$

$$\text{für alle anderen Schalen} \quad d_i = \left(\frac{6 \cdot m_i}{\pi \cdot \rho_i} + d_{i-1}^3 \right)^{1/3} \quad (2-100)$$

Am Ende der Berechnungsschleife werden die gemittelten Materialdichte sowie die dynamische Viskosität des Partikels berechnet. Diese Werte werden für das Agglomerationsmodell benötigt. Im folgenden Abschnitt dieses Kapitels wird die Kollision und Agglomeration von viskosen Partikeln erläutert. Da viskose Partikel, die noch nicht vollständig getrocknet sind, bei einer Kollision ineinander eindringen können, unterscheidet sich die Modellierung der Agglomeration von der trockener Partikel (vgl. Kap. 2.2.4).

2.2.6 Kollision viskoser Partikel

Die Lösungsmittelverdampfung während der Partikelrocknung resultiert in einer sich erhöhenden Viskosität der Partikel. Daraus ergibt sich wiederum ein geändertes Verhalten während einer Kollision. Ob und zwischen welchen Partikeln Kollisionen stattfinden wird durch das bereits vorgestellte stochastische Kollisionsmodell bestimmt. Ereignet sich eine Kollision zwischen zwei Partikeln von denen eines oder beide nicht vollständig getrocknet oder sogar flüssig

ist, ist ein Eindringen der Partikel ineinander möglich. Das Ergebnis dieser Kollision unterscheidet sich somit wesentlich von dem einer Kollision zwischen trockenen und somit festen Partikeln. Während trockene Partikel von einander abprallen oder aufgrund ausreichender Haftkräfte lose Agglomerate bilden, kann beispielsweise die Kollision zweier Tropfen zu einer Vereinigung beider Tropfen zu einem größeren (Koaleszenz) oder zum vollständigen Zerplatzen der Tropfen in viele kleinere Tropfen (engl. „splashing“) führen. Auch weitere Kollisionsresultate wie das Abprallen (engl. „bouncing“) oder ein teilweises Vereinigen der Tropfen mit anschließender Trennung mit oder ohne bilden von Satellitentropfen (engl. „stretching separation“) sind möglich. Eine genaue Beschreibung der Tropfenkollisionen sowohl numerischer als auch experimenteller Art findet sich z.B. bei Blei (2006) und Kuschel und Sommerfeld (2013).

Tropfenkollisionen spielen für die Bildung von Agglomeraten keine Rolle, so dass darauf nicht weiter eingegangen wird. Ein relevanterer Prozess bei der Erzeugung fester Agglomerate^x ist die Kollision hochviskoser Partikel. Die Eindringtiefe bestimmt dabei nicht nur die Stärke des Agglomerats sondern auch dessen strukturelle Eigenschaften wie die Porosität. Das hier verwendete Modell zur Berechnung der Partikelpenetration wurde von Blei (2006) entwickelt und in der vorliegenden Arbeit für die Beschreibung von Agglomeratstrukturen wesentlich erweitert. An dieser Stelle soll zunächst die Penetration viskoser Partikel kurz erläutert werden. Im anschließenden Kapitel wird die Charakterisierung von Agglomeratstrukturen anhand ausgewählter Strukturparameter eingehend beschrieben.

Bei der Penetration viskoser oder hochviskoser Partikel ineinander wird von einer Bewegung einer Kugel in einem viskosen Medium ausgegangen. Das Eindringen des Partikels wird dabei durch die Interaktion der beiden newtonschen Partikelfluide abgebremst. Die Penetration wird in einem sphärischen Koordinatensystem gelöst, dessen Ursprung im Zentrum des Partikels mit der niedrigeren Viskosität liegt. Dieses Partikel ist dabei in Ruhe, wohingegen sich das eindringende höher viskose Partikel mit der Relativgeschwindigkeit zwischen den beiden Partikeln bewegt. Während die Transformation der Partikelgeschwindigkeiten bei Blei (2006) in einer einzigen Gesamttransformationsmatrix durchgeführt werden konnte, muss dies in der vorliegenden Arbeit in zwei Schritten erfolgen. Bislang wurden die gebildeten Agglomerate als kugelförmiges Partikel betrachtet. Der Durchmesser dieses Partikels entsprach dem einer

^x Hier sind hohe Bindungskräfte gemeint, die in sehr haltbaren Agglomeraten resultieren und nicht der Trocknungszustand der einzelnen Partikel. Agglomerate, die lediglich durch van-der-Waals-Kräfte zusammengehalten werden, wie es bei der Kollision vollständig getrockneter Partikel auftreten kann, können bereits durch schwache Kräfte, beispielsweise durch eine weitere Kollision mit einem Partikel oder einer Wand, wieder zerstört werden.

volumenäquivalenten Kugel, die das Volumen jedes einzelnen Primärpartikels berücksichtigt. In der hier vorgestellten Arbeit wird die Agglomeratstruktur während einer Kollision nunmehr berücksichtigt. Wird ein Agglomerat als volumenäquivalente Kugel abgebildet, entspricht der stochastisch erzeugte Kollisionspunkt bereits dem Punkt, an dem sich die kollidierenden Partikel zu Beginn einer Penetration berühren. Berücksichtigt man allerdings die Struktur eines Agglomerats, das mit einem Primärpartikel kollidiert, muss zunächst dasjenige Partikel innerhalb des Agglomerats gefunden werden, mit dem eine Kollision stattfindet^{xi}. Dazu wird der Vektor der Relativgeschwindigkeit (du , dv , dw) zwischen den kollidierenden Partikeln in ein Koordinatensystem transformiert, in dem der Vektor der Relativgeschwindigkeit zwischen den kollidierenden Partikeln parallel zur x-Achse steht. Der Relativgeschwindigkeitsvektor wird mit der Matrix A in das neue Koordinatensystem transformiert und liest sich dann wie folgt:

$$\begin{pmatrix} du^* \\ dv^* \\ dw^* \end{pmatrix} = A \cdot \begin{pmatrix} du \\ dv \\ dw \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} \cos(\alpha 1) \cos(\alpha 2) & \sin(\alpha 1) \cos(\alpha 2) & \sin(\alpha 2) \\ -\sin(\alpha 1) & \cos(\alpha 1) & 0 \\ -\cos(\alpha 1) \sin(\alpha 2) & -\sin(\alpha 1) \sin(\alpha 2) & \cos(\alpha 2) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} du \\ dv \\ dw \end{pmatrix} \quad (2-101)$$

Sollte im gedrehten System $du' < 0$ sein, wird der Vektor u' um 180° gedreht, so dass der Vektor letztlich auf das ruhende niederviskose Partikel zu zeigt. Die darin benötigten Winkel lassen sich aus dem Relativgeschwindigkeitsvektor folgendermaßen ermitteln:

$$\alpha 1 = \text{atan2}(du, dv) \quad \alpha 2 = -\text{atan2}\left(dw, \sqrt{du^2 + dv^2}\right) \quad (2-102)$$

Anhand dieses ins neue Koordinatensystem gedrehten Geschwindigkeitsvektors wird der Kollisionspartner im Agglomerat bestimmt (s. Kap. 3). Wurde ein Kollisionspartner im Agglomerat gefunden, wird der Relativgeschwindigkeitsvektor u' mit den Winkeln φ und ϑ in ein sphärisches Koordinatensystem transformiert, so dass für den Geschwindigkeitsvektor gilt:

^{xi} Der Vorgang zur Detektion des entsprechenden Kollisionspartners innerhalb des Agglomerats wird in Kapitel 3 genauer erläutert. Für die weitere Erläuterung des Kollisionsprozesses zweier viskoser Partikel ist es ausreichend zu wissen, dass das heranfliegende Partikel mit einem entsprechenden Partikel im Agglomerat kollidiert.

$$\begin{pmatrix} du^{**} \\ dv^{**} \\ dw^{**} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi & \sin \vartheta \sin \varphi & \cos \vartheta \\ \cos \vartheta \cos \varphi & \cos \vartheta \sin \varphi & -\sin \vartheta \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} du^* \\ dv^* \\ dw^* \end{pmatrix}$$

$$\text{mit } \vartheta = \text{atan} \left(\frac{y}{x} \right) \quad \text{und} \quad \varphi = \begin{cases} \frac{\pi}{2} & , \text{für } z = 0 \\ \pi - \left| \frac{\text{atan} \left(\sqrt{x^2 + y^2} \right)}{z} \right| & , \text{für } z < 0 \\ \frac{\text{atan} \left(\sqrt{x^2 + y^2} \right)}{z} & , \text{für } z > 0 \end{cases} \quad (2-103)$$

Darin stellen x , y und z die Koordinaten des kollidierenden Partikels dar. Somit können die Geschwindigkeitskomponenten in radialer Richtung r und den tangentialen Richtungen φ und ϑ , sowie die Änderung des Abstands der beiden Partikelzentren x_P berechnet werden.

Bei der Bewegung eines sphärischen Partikels vom Radius r in einem Fluid der dynamischen Viskosität μ ist das Stokesche Reibungsgesetz gültig. Für die Stokesche Reibungskraft F_{St} gilt:

$$F_{St} = 6 \cdot \pi \cdot \mu \cdot r \cdot u_r. \quad (2-104)$$

In radialer Richtung wird die Bewegung des eindringenden Partikels durch die Stokesche Reibungskraft (Gl. (2-104)) abgebremst. Somit kann die Geschwindigkeitsabnahme des Partikels in radialer Richtung mit Hilfe des 2. Newtonschen Axioms (Gl. (2-2)) berechnet werden:

$$m \frac{du_r}{dt} = -6 \cdot \pi \cdot \mu \cdot r \cdot u_r. \quad (2-105)$$

Während des Eindringens des höher viskosen (Index „high“) in das niederviskose Partikel (Index „low“) ändert sich der in Gleichung (2-105) berücksichtigte Radius r . Wird für den Radius r der Durchmesser der Kontaktfläche zwischen den Partikeln (siehe Abbildung 2.6) eingesetzt, ergibt sich die Differentialgleichung der Partikelbewegung zu:

$$\frac{du_r}{u_r} = -3 \cdot \pi \cdot d_c \cdot \frac{\mu_{low}}{m_{high}} \cdot dt \quad (2-106)$$

Durch Integration der linken Seite von Gleichung (2-106) im Intervall $[u_{r,alt}, u_{r,neu}]$ und der rechten Seite im Intervall $[t_{alt}, t_{neu}]$ folgt für die neue Partikelgeschwindigkeit in radialer Richtung $u_{r,neu}$:

$$u_{r,neu} = u_{r,alt} \cdot \exp\left(-\frac{3 \cdot \pi \cdot \mu_{low} \cdot d_c}{m_{high}} \cdot \Delta t\right) \quad (2-107)$$

Der Kontaktflächendurchmesser d_c kann einfach aus der Bestimmung der Höhe in einem beliebigen Dreieck (Abbildung 2.6) berechnet werden zu:

$$d_c = 2 \cdot \sqrt{r_{high}^2 - \left(\frac{r_{high} + x_p + r_{low}}{2 \cdot x_p}\right)^2} \quad (2-108)$$

In den tangentialen Richtungen φ und ϑ wird das Eindringen des höher viskosen Partikels in das nieder viskose Partikel durch Scherkräfte abgebremst. Die Berechnung der Scherkräfte erfolgt unter der Annahme des „Zwei-Platten-Modells“, wie in Abbildung 2.7 gezeigt.

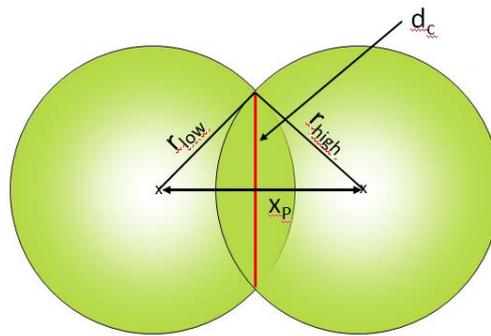


Abbildung 2.6: Berechnung des Kontaktflächendurchmessers bei der Penetration eines höher viskosen Partikels (rechts) in ein Partikel mit niedrigerer Viskosität (links).

Darin sind zwei Platten durch eine viskose Fluidschicht voneinander getrennt. Wird die obere Platte mit der Geschwindigkeit v_0 bewegt, verformt sich das Fluid zwischen den Platten und es ergibt sich eine Spannung τ . Um die obere Platte gegen diese Spannung zu verschieben wird die Scherkraft F_{Sh} , die sich aus der Scherspannung τ und der Fläche der bewegten Platte A_{Sh} ergibt, benötigt.

$$F_{Sh} = \tau \cdot A_{Sh} \quad (2-109)$$

Für Newtonsche Fluide kann die Scherspannung τ mit Gleichung (2-110) berechnet werden.

$$\tau = \mu \cdot \frac{du}{dy} \quad (2-110)$$

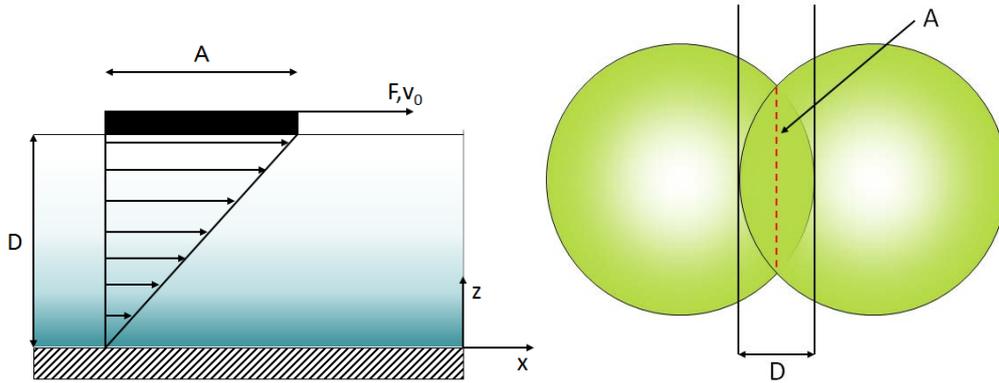


Abbildung 2.7: "Zwei-Platten-Modell" (links) übertragen auf zwei ineinander eindringende Partikel (rechts) zur Berechnung der Scherkräfte während der Penetration.

Unter der Annahme, dass an der bewegten Platte die Scherspannung

$$\tau = \mu \cdot \frac{v_0}{D} \quad (2-111)$$

ist, wird die Scherkraft bestimmt zu:

$$F = \mu \cdot \frac{v_0}{D} \cdot A_{Sh} \quad (2-112)$$

Wird das „Zwei-Platten-Modell“ auf zwei ineinander eindringende Partikel übertragen (Abbildung 2.7) gelten folgende Zusammenhänge:

$$A_{Sh} = \frac{\pi}{4} \cdot d_c^2 \quad D = L_{pene} \quad v_0 = u_{\varphi,\vartheta} \quad (2-113)$$

Darin ist die Penetrationstiefe L_{pene} definiert als Summe der Partikelradien abzüglich der aktuellen radialen Position x_p des eindringenden Partikels im sphärischen Koordinatensystem.

$$L_{pene} = \frac{d_h + d_l}{2} - x_p \quad (2-114)$$

Analog zur Gleichung für die Bewegung in Stokescher Richtung gilt für die neue Geschwindigkeit des Partikels in Scherspannungsrichtung:

$$u_{\varphi,\vartheta,neu} = u_{\varphi,\vartheta,alt} \cdot \exp\left(-\frac{\mu_{low}}{m_{high}} \cdot \frac{\pi}{4} \cdot \frac{d_c^2}{L_{pene}} \cdot \Delta t\right) \quad (2-115)$$

In diesem iterativen Berechnungsprozess wird der Zeitschritt so gewählt, dass die Änderung der Abstände der Partikelmittelpunkte x_p nicht größer als 5%

und die Änderung des Betrags der Geschwindigkeit nicht größer als 1% ist. Die Berechnung der Partikelpenetration wird gestoppt, wenn dessen Geschwindigkeit unterhalb einer Minimalgeschwindigkeit liegt, das kleinere Partikel mit seinem Radius innerhalb des anderen Partikels steckt, oder wenn das eindringende höher viskose Partikel durch das nieder viskose Partikel hindurchgetreten ist.

Befindet sich das höher viskose Partikel nach Beendigung der Penetrationsberechnung innerhalb des zweiten Partikels, wird ein Agglomerat gebildet und die neue Struktur bestimmt (siehe Kapitel 3). Der Durchmesser des gebildeten Agglomerats wird entsprechend des verwendeten Äquivalentdurchmessers, durch den die gebildeten Agglomerate innerhalb des Lagrangeschen Ansatzes zur Berechnung der Partikelflugbahnen repräsentiert werden, berechnet. Die verschiedenen zur Verfügung stehenden Äquivalentdurchmesser werden in Kapitel 3 näher beschrieben. Steckt das kleinere der ineinander eindringenden Partikel mit seinem Radius im anderen Partikel, wird Koaleszenz angenommen und der Durchmesser des resultierenden Partikels ist gleich dem der volumengleichen Kugel (vgl. Gl. 2-81). Neben dem Durchmesser des neu gebildeten Agglomerats ändern sich auch dessen Stoffwerte. Ein Agglomerat kann sich aus mehreren Primärpartikeln zusammensetzen, wobei jedes Partikel die mittleren Stoffwerte des Gesamtglomerats besitzt. Im hier vorgestellten Agglomerationsmodell wird der Stoff- und Wärmeaustausch zwischen den einzelnen Primärpartikeln im Agglomerat derzeit nicht berücksichtigt, so dass diese Vereinfachung gewählt wurde. Für den Feststoffgehalt SC^{xii} sowie die Temperatur T des Agglomerats nach der Agglomeration/Koaleszenz gilt:

$$SC' = \frac{m_l \cdot SC_l + m_h \cdot SC_h}{m_l + m_h} \quad (2-116)$$

$$T' = \frac{m_l \cdot T_l + m_h \cdot T_h}{m_l + m_h} \quad (2-117)$$

Hierin stehen SC' und T' für die Stoffwerte des Agglomerats nach der Agglomeration/Koaleszenz sowie SC_l und T_l für die Stoffwerte des niedriger viskosen und SC_h und T_h für die des höher viskosen Partikels vor der Agglomeration/Koaleszenz. Die mittlere Dichte und Viskosität des Agglomerats werden mit Hilfe des zuvor berechneten Feststoffanteils und der Temperatur aus hinterlegten Gleichungen für verschiedene Milchpulverarten berechnet. Die Materialdaten wurden im Rahmen des EU-Projekts „Efficient control and design of agglomeration during spray drying“ (EDECAD) ermittelt und können bei

^{xii} Aus dem Englischen für „solid content“. Dieser ist definiert als Anteil der Feststoffmasse im Tropfen bezogen auf die Gesamtmasse des Tropfens.

Verdurmen *et al.* (2004) nachgelesen werden. Die Agglomeratmasse nach der Agglomeration ergibt sich durch Addition der Primärpartikelmasse zur Agglomeratmasse. Wegen der nach einem Agglomerationsvorgang veränderten Partikelgröße und -masse des Agglomerats wird, wie in Abschnitt 2.2.4 erläutert, die Anzahl der Partikel im Parcel n_{pip}^* nach der Agglomeration mit Gleichung (2-83) korrigiert, um die Massenerhaltung zu gewährleisten.

Die Geschwindigkeit des Partikels nach dem Stoß im Falle von Agglomeration oder Koaleszenz wird berechnet zu

$$u' = \frac{m_l \cdot u_l' + m_h \cdot u_h'}{m_l + m_h} \quad (2-118)$$

Im Falle der Trennung der Partikel nach dem Stoß, wird die Geschwindigkeit des realen Partikels unter Berücksichtigung der Dissipation der kinetischen Energie während der Penetration berechnet. Die Geschwindigkeiten werden dann in das globale Koordinatensystem zurücktransformiert.

2.2.7 Kollision flüssiger Tropfen

In den vorangegangenen Abschnitten 2.2.4 und 2.2.6 wurden die Mechanismen zur Berechnung von Kollisionen zwischen trockenen und viskosen Partikeln ausführlich erläutert. Bei der Sprühtrocknung liegen zu Beginn flüssige Tropfen vor, die ebenfalls miteinander kollidieren können. Da Kollisionen zwischen Tropfen allerdings nicht zu strukturierten Agglomeraten, sondern lediglich zur Bildung größerer Tropfen durch Koaleszenz führen, soll an dieser Stelle nur knapp auf die Berechnung von Tropfenkollisionen eingegangen werden.

Neben der dauerhaften Vereinigung zweier kollidierender Tropfen (Koaleszenz) zu einem größeren Tropfen, ist auch die nur zeitweise Koaleszenz mit anschließender Trennung der Tropfen möglich. Dabei können die Tropfen nach der Trennung wieder als zwei einzelne Tropfen vorliegen, oder es können zusätzlich kleinere Satellitentropfen entstehen. Weiterhin ist ein Abprallen der Tropfen ohne jegliches Eindringen ineinander denkbar. Das Modell basiert auf der Arbeit von Podvysotsky und Shraiber (1984) und wurde ausführlich von Blei (2006) beschrieben. In der vorliegenden Arbeit kann die Bildung von Satellitentropfen nicht abgebildet werden, so dass letztlich als Ergebnis einer Tropfenkollision hier nur die vollständige Trennung oder Koaleszenz der Tropfen betrachtet werden kann.

3 Strukturmodellierung von Agglomeraten

Das Modell zur Charakterisierung der Agglomeratstruktur von sprühgetrockneten Partikeln ist eine wesentliche Weiterentwicklung des im vorangegangenen Kapitels erläuterten Kollisions- und Agglomerationsmodells. Zur Berechnung von Partikelflugbahnen wird in Lagrangeschen Modellen von der Annahme ausgegangen, dass die zu betrachtenden Partikel als Massepunkte angesehen werden können. Somit wird ein entstandenes Agglomerat als Einzelpartikel betrachtet, dessen Durchmesser dem einer Kugel des selben Volumens sämtlicher Primärpartikel entspricht. Durch diesen Modellansatz gehen alle Informationen, die die Morphologie des betrachteten Agglomerats beschreiben, verloren. Um eine Strukturcharakterisierung von Agglomeraten durchführen zu können, muss die Lage jedes einzelnen Primärpartikels innerhalb des Agglomerats bekannt sein. Anhand dieser Information können verschiedene Strukturparameter berechnet werden.

Lipowsky und Sommerfeld (2008) entwickelten in diesem Zusammenhang eine spezielle Datenstruktur, die die einzelnen Primärpartikel als Elemente eines Datenbaums abspeichert. Jedes Element trägt spezifische Informationen über das entsprechende Primärpartikel, wie z.B. Partikeldurchmesser und Lage im Agglomerat. Zur Charakterisierung von Agglomeratstrukturen muss die Lage jedes einzelnen Primärpartikels, aus denen ein Agglomerat aufgebaut ist, bekannt sein. Die vorgestellte Datenstruktur dient dazu, die Lagevektoren der Primärpartikel abzuspeichern und für die Berechnung von Strukturparametern zur Verfügung zu stellen. Über die Lagevektoren ist der Ort aller Primärpartikel innerhalb des Agglomerats jederzeit bestimmbar. Das erste Primärpartikel fungiert dabei als Referenzpartikel, auf das sich die Lage jedes weiteren Primärpartikels bezieht (Abbildung 3.1 links). Mit Hilfe von Datenzeigern werden die einzelnen Elemente so zu einem Datenbaum zusammen gesetzt, dass die Elemente entsprechend der Kontaktstellen der Primärpartikel im Agglomerat miteinander verbunden sind (Abbildung 3.1 rechts).

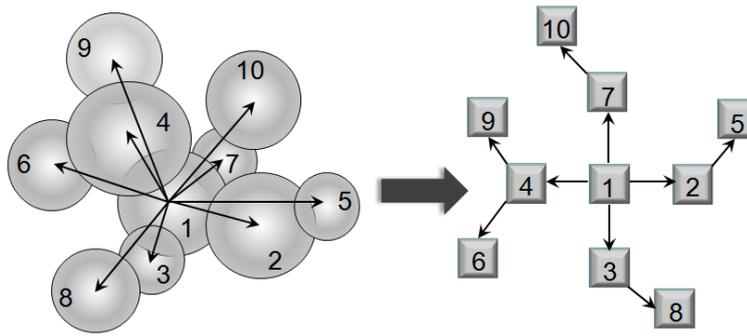


Abbildung 3.1: Lagevektoren der agglomeratbildenden Primärpartikel, zur Bestimmung des Partikelorts innerhalb eines Agglomerats als Grundlage für Strukturberechnungen (links) und die Umsetzung in eine baumstrukturierte Datenstruktur (rechts).

Wurden Agglomerate bislang als volumenäquivalente Kugel ohne jegliche innere Struktur angesehen, so ist es im hier vorgestellten erweiterten Agglomerationsmodell möglich, bei der Kollision eines Agglomerats mit einem Primärpartikel die Morphologie des Agglomerats zu berücksichtigen. Zur Berechnung der Partikelflugbahnen mit einem Lagrangeschen Ansatz ist die Annahme von Punktpartikeln ausreichend. Sollen jedoch Agglomerate simuliert werden, ist die Agglomeratstruktur entscheidend, sowohl für den Ausgang der Kollision als auch für die resultierende Morphologie.

Wird durch das stochastische Kollisionsmodell (Sommerfeld 1996) eine Kollision ermittelt, stößt das heranfliegende (fiktive) Partikel mit der volumengleichen Kugel, die das Agglomerat repräsentiert. Bei der Berücksichtigung von Agglomeratstrukturen muss nun das entsprechende Primärpartikel innerhalb des Agglomerats gefunden werden, mit dem das heranfliegende Partikel tatsächlich kollidiert. Bei der Kollision von Partikeln können diese in Rotation versetzt werden. Dabei ist die resultierende Rotationsgeschwindigkeit abhängig vom übertragenen Impuls, sowie vom Kollisionsort. Wird beispielsweise ein Agglomerat weit von seinem Massenschwerpunkt entfernt von einem Primärpartikel getroffen, kann sich aufgrund des großen Hebelarms eine hohe Rotationsgeschwindigkeit des Agglomerats ergeben. Auch durch die am Agglomerat angreifenden Fluidkräfte kann sich eine Rotation ergeben. Im Modell wird diese, sich aus den angreifenden Kräften und Partikelkollisionen ergebende tatsächliche Rotation bislang nicht berücksichtigt. Ereignen sich sehr viele Kollisionen zwischen Agglomeraten und Primärpartikeln, nehmen die Agglomerate hohe Rotationsgeschwindigkeiten an. Unter dieser Annahme kann dann die Agglomeratrotation durch eine stochastische Drehung des Agglomerats durch das Modell simuliert werden. Um die tatsächlichen Rotationsgeschwindigkeiten der Agglomerate abzubilden, müssen alle einwirkenden Kräfte sowie deren Verteilung über die Agglomeratoberfläche bekannt sein. Für eine Lagrange-sche Simulation sehr vieler Partikelflugbahnen wäre dieses allerdings ein viel zu hoher rechnerischer Aufwand, der schon in Richtung einer direkten numerischen Simulation (DNS) ginge.

Bevor nun der tatsächliche Stoßpartner innerhalb des Agglomerats ermittelt wird, wird das Agglomerat zufällig um seine drei Achsen gedreht. Dafür werden drei Zufallswinkel α_1 , α_2 , α_3 im Intervall $[0, 2\pi]$ generiert und anschließend die Drehungen nacheinander ausgeführt. Für die Drehungen um die Koordinatenachsen gelten folgende Drehmatritzen:

$$M_x(\alpha_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha_1 & -\sin \alpha_1 \\ 0 & \sin \alpha_1 & \cos \alpha_1 \end{pmatrix} \quad (3-1)$$

$$M_y(\alpha_2) = \begin{pmatrix} \cos \alpha_2 & 0 & \sin \alpha_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \alpha_2 & 0 & \cos \alpha_2 \end{pmatrix} \quad (3-2)$$

$$M_z(\alpha_3) = \begin{pmatrix} \cos \alpha_3 & -\sin \alpha_3 & 0 \\ \sin \alpha_3 & \cos \alpha_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3-3)$$

Zur Beschreibung einer möglichen Agglomeration eines stoßenden Partikels, wird nun im neu ausgerichteten Agglomerat dasjenige Primärpartikel gesucht, mit dem das fiktive Partikel kollidiert. Dafür wird zunächst vom Kollisionspunkt, der durch das Kollisionsmodell erzeugt wurde (vgl. Kap. 2.2.3), ausgegangen. Dieser befindet sich auf der Oberfläche der volumenäquivalenten Kugel, die das Agglomerat repräsentiert. Abbildung 3.2 veranschaulicht, dass dieser Punkt unter Umständen mitten im Agglomerat liegt.

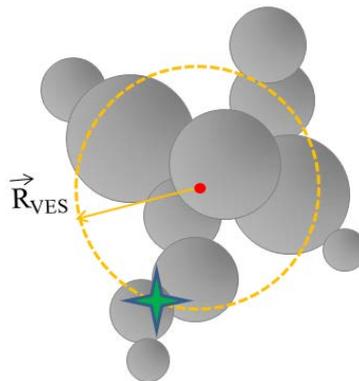


Abbildung 3.2: Auf der Oberfläche der volumenäquivalenten Kugel erzeugter Kollisionspunkt (grüner Stern).

Um nun den korrekten Stoßpartner im Agglomerat zu ermitteln, wird das fiktive Partikel entlang des Vektors der Relativgeschwindigkeit auf eine Position weit vom Agglomerat entfernt positioniert. Nun werden alle Primärpartikel innerhalb des Agglomerats, mit denen eine Kollision mit dem fiktiven Partikel möglich ist, lokalisiert. Die Kollision findet dann an dem Primärpartikel statt,

das den kürzesten Kollisionsabstand zum heranfliegenden fiktiven Partikel aufweist (siehe Abbildung 3.3). Handelt es sich bei den beiden Stoßpartnern um viskose Partikel, so dass ein Eindringen des fiktiven Partikels möglich ist, wird die Penetration entsprechend des im vorangegangenen Kapitels erläuterten Modells berechnet.

Aufgrund der Agglomeratmorphologie kann es jedoch sein, dass kein Primärpartikel als Kollisionspartner ermittelt werden konnte und das fiktive Partikel somit am Agglomerat vorbeifliegt. Dies ist besonders bei kettigen oder hochporösen Agglomeraten möglich. Abbildung 3.3 veranschaulicht diese Konstellation. Die zuvor durch das stochastische Kollisionsmodell berechnete Kollisionsfrequenz f_{coll} (Gl. (2-63)) wird somit auf die effektive Kollisionsfrequenz $f_{\text{coll,eff}}$ vermindert.

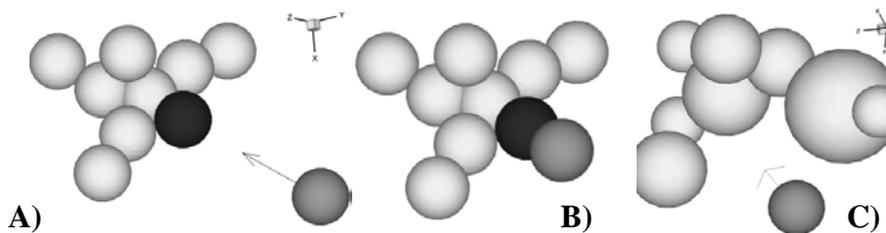


Abbildung 3.3: A) Primärpartikel (der Vektor zeigt die Relativgeschwindigkeit zwischen Partikel und Agglomerat) das mit einem Agglomerat kollidiert. Das schwarze Partikel wurde als Stoßpartner ermittelt. B) Agglomerat nach Anhaften des neuen Partikels (dunkel grau) am Kollisionspartner (schwarz). C) Primärpartikel (dunkel) fliegt durch die Agglomeratstruktur und führt keinen Stoß aus.

Wurde eine Agglomeration von trockenen oder viskosen Partikeln, die ineinander eindringen können, berechnet, wird das neu agglomerierte Primärpartikel an die entsprechende Position innerhalb des Agglomerats angehängt. Der bestehende Datenbaum wird somit um ein weiteres Element erweitert. Mit Hilfe dieser Datenstruktur können verschiedene Strukturparameter, die die Agglomeratmorphologie beschreiben, ermittelt werden:

- Porosität,
- Sphärizität,
- freie Oberfläche,
- verschiedene Äquivalentradien oder -durchmesser:
 - Trägheitsradius,
 - volumenäquivalenter Kugeldurchmesser,
 - Durchmesser der umhüllenden Kugel,
- fraktale Dimension.

Für das vorgestellte Agglomerationsmodell gelten folgende Einschränkungen:

- Es können nur newtonsche-Fluide bei der Berechnung von Partikelkollisionen betrachtet werden.
- Während des Penetrationsvorgangs von viskosen newtonschen Partikeln gilt die Formstabilität der Partikel.
- Die Agglomeratrotation kann nicht anhand der angreifenden Kräfte berechnet werden, sondern wird durch eine zufällige Drehung im Modell abgebildet.

3.1 Berechnung der Agglomeratporosität

Allgemein ist die Porosität definiert als das Verhältnis von Hohlraumvolumen zu Gesamtvolumen eines Systems und stellt somit ein Maß für die vorliegenden Hohlräume dar. Die Porosität nimmt Einfluss auf die Dichte eines Stoffes oder dessen Durchströmbarkeit mit einem Fluid. Um die Porosität von Agglomeraten bestimmen zu können, müssen die Grenzen der Partikelkontur bestimmt werden. Im vorliegenden Modell werden Agglomerate durch eine konvexe Hülle von ihrer Umgebung abgegrenzt, so dass das Volumen dieser Hülle das Gesamtvolumen der Agglomerate darstellt. Mit Hilfe des Feststoffvolumens der Primärpartikel im Agglomerat kann die Agglomeratporosität berechnet werden zu:

$$\varepsilon = \frac{V_{\text{Poren}}}{V_{\text{ges}}} = \frac{V_{\text{Hülle}} - V_P}{V_{\text{Hülle}}} = 1 - \frac{V_P}{V_{\text{Hülle}}} \quad (3-4)$$

Eine konvexe Hülle einer beliebigen Punktmenge ist ein Polygon, das die Punktmenge so umschließt, dass sowohl alle Punkte als auch alle Verbindungsstrecken zwischen den Punkten in dieser Menge enthalten sind. Anschaulich betrachtet wird die Punktmenge durch eine beliebige Zahl an Nägeln dargestellt, die teilweise in ein Brett genagelt werden. Legt man um die Nägel ein Gummiband, so stellt dieses den Rand der konvexen Hülle im zweidimensionalen Raum dar.

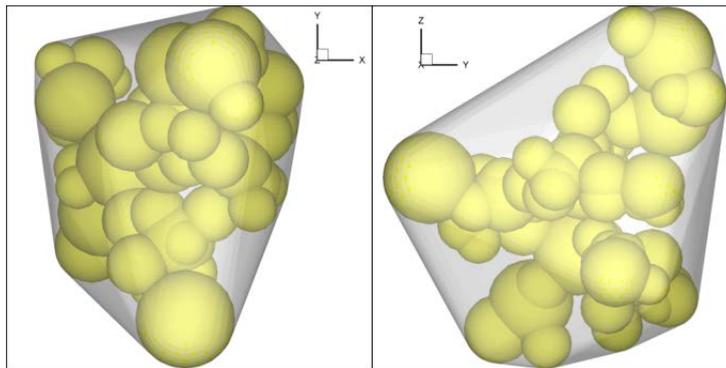


Abbildung 3.4: Konvexe Hülle um ein numerisch generiertes Agglomerat aus verschiedenen Ansichten.

Damit die konvexe Hülle eines Agglomerats (Abbildung 3.4) bestimmt werden kann, muss dessen Oberfläche durch eine beliebige Punktmenge dargestellt werden. Dazu werden die Oberflächen aller agglomeratbildenden Primärpartikel durch eine Anzahl äquidistant verteilter Punkte approximiert. Anschließend wird die konvexe Hülle dieser Punktmenge mit Hilfe eines inkrementellen Algorithmus (O'Rourke 2001) berechnet und das Volumen der Hülle für die Berechnung der Porosität bestimmt. Abbildung 3.6 veranschaulicht den Algorithmus zur Bestimmung der konvexen Hülle.

Zur Berechnung der Agglomeratporosität wird neben dem Gesamtvolumen, welches durch die konvexe Hülle gegeben ist, auch das Feststoffvolumen benötigt. Bei der Agglomeration von trockenen Partikeln kann das Feststoffvolumen einfach durch Summieren aller Primärpartikelvolumina errechnet werden. Setzen sich Agglomerate aus viskosen Partikeln zusammen, entstehen je nach Penetrationstiefe der einzelnen Primärpartikel unterschiedlich große Überlappungsvolumina. In der Realität würde sich vom eindringenden Partikel verdrängtes Material über die Oberfläche des anderen verteilen. Da diese Materialverdrängung durch das Modell^{xiii} nicht erfasst wird, entsteht im Überlappungsbereich der Partikel ein Gebiet doppelter Dichte. Deshalb muss bei der Berechnung des Feststoffvolumens dieses Überlappungsvolumen von einem der beiden Partikelvolumina abgezogen werden. Somit kann nicht einfach die Summe aller Primärpartikelvolumina zur Bestimmung des Feststoffvolumens gebildet werden. Zur Berechnung des Feststoffvolumens wird ein Agglomerat durch eine bestimmte Anzahl an Würfeln diskretisiert. Dazu wird zuerst der mittlere Durchmesser aller Primärpartikel im Agglomerat $\overline{d_p}$ bestimmt. Anschließend wird ein Würfel um das Agglomerat gelegt und dieser Würfel in $\overline{d_p}/10$ kleinere Würfel unterteilt. Nun werden alle Würfel die innerhalb oder außerhalb eines Primärpartikels liegen gesucht. Würfel, bei denen unklar ist, ob

^{xiii} Es wurde die Annahme der Formstabilität getroffen, d.h. während der Penetration behalten die Partikel ihre Kugelform.

sie innerhalb oder außerhalb liegen, werden erneut in kleinere Würfel unterteilt. Diese kleineren Würfel werden hinsichtlich ihrer Lage innerhalb oder außerhalb eines Primärpartikels überprüft. Unklare Würfel werden nicht erneut geteilt, sondern als „außerhalb“ gekennzeichnet. Abbildung 3.5 zeigt die Bestimmung des Feststoffvolumens für einen Kreis im 2D-Fall. In rot sind die unklaren Quadrate markiert, die für die Berechnung weiter in kleinere Quadrate unterteilt werden. Sie stellen gleichzeitig die Grenze zwischen klar innerhalb und außerhalb liegenden Quadrate dar. Das Volumen aller Würfel, die innerhalb eines Primärpartikels liegen, wird dann zum Feststoffvolumen summiert. Mit Gleichung (3-4) kann nunmehr die Agglomeratporosität berechnet werden.

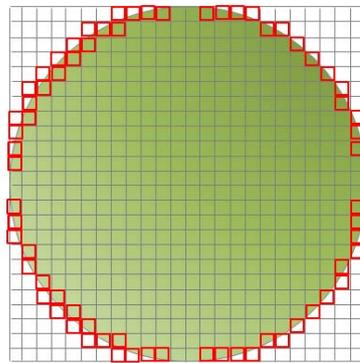


Abbildung 3.5: Berechnung des Feststoffvolumens eines Kreises. Die rot markierten Zellen stellen diejenigen dar, die weiter unterteilt werden.

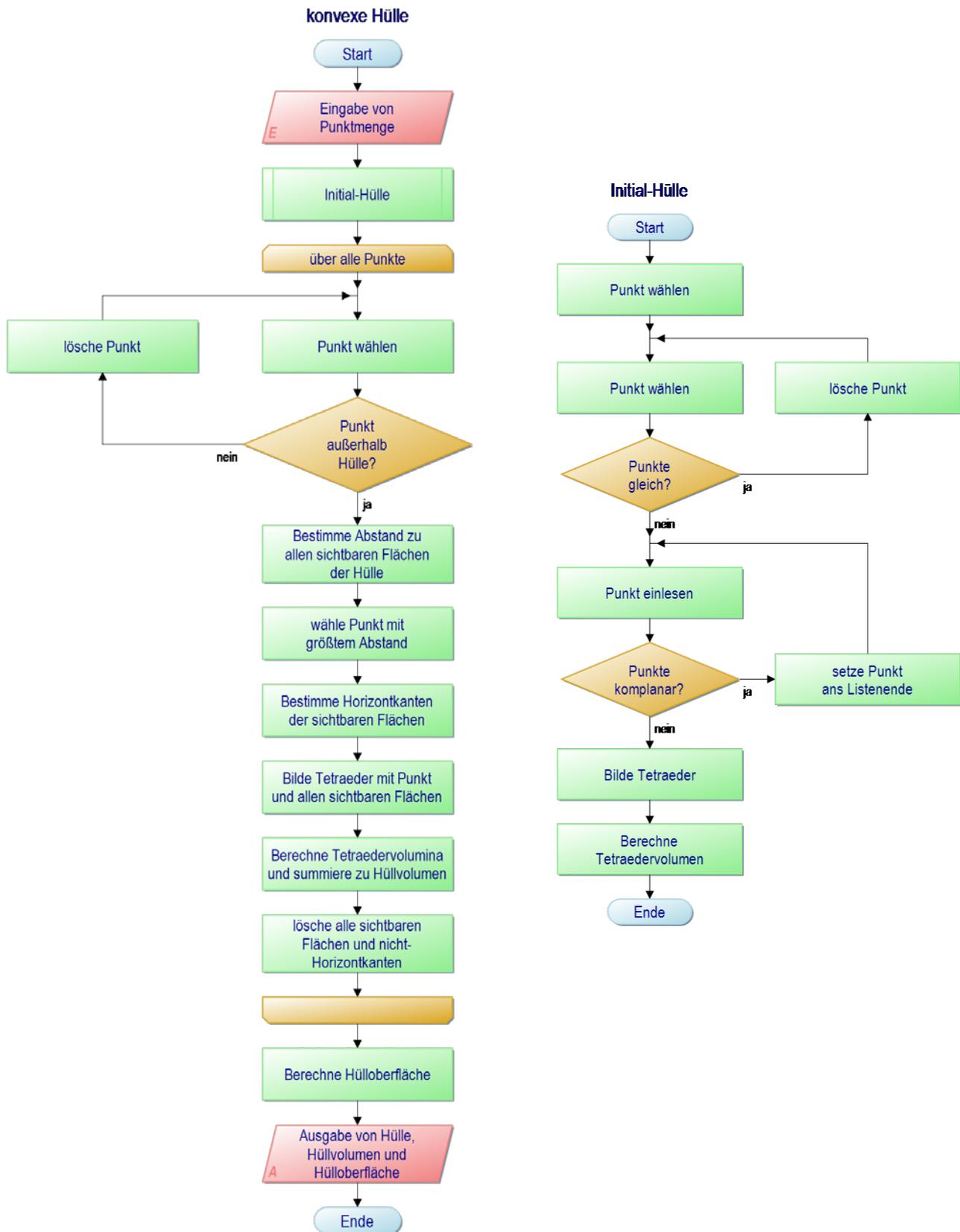


Abbildung 3.6: Algorithmus zur Berechnung der konvexen Hülle.

3.2 Berechnung der freien Oberfläche eines Agglomerats

Die Berechnung der freien Oberfläche A_O eines Agglomerats nutzt die bereits für die konvexe Hülle angelegte Diskretisierung der Primärpartikel (s. Kap. 3.1). Durch eine äquidistante Verteilung der Punkte über die gesamte Oberfläche eines Primärpartikels, ist die Anzahl der Punkte proportional zur Gesamtoberfläche. Bei der Penetration von viskosen Partikeln ineinander, verringert sich die freie Oberfläche jedes Partikels und einige Oberflächenpunkte liegen somit innerhalb des anderen Partikels. Ihre Anzahl ist ebenfalls proportional zur „verschwundenen“ Oberfläche. Werden diese Punkte, die innerhalb eines anderen Partikels liegen, gelöscht, ergibt sich eine Restpunktmenge auf der freien Partikeloberfläche. Das Verhältnis der initialen Punktmenge n_0 zur Restpunktmenge n_R ist somit gleich dem Verhältnis der ursprünglichen Gesamtoberfläche zur verbleibenden freien Oberfläche des Partikels. Summiert über alle Primärpartikel im Agglomerat ergibt sich die gesamte freie Oberfläche zu:

$$A_O = \sum_{i=1}^{n_P} \frac{n_{R_i}}{n_0} \cdot \pi \cdot d_P^2 \quad (3-5)$$

3.3 Berechnung der Agglomeratsphärizität

Ein weiterer Parameter zur Charakterisierung der äußeren Form eines Körpers ist die Sphärizität. Der Begriff der Sphärizität wurde 1935 von dem Geologen Hakon Wadell definiert (Wadell 1935). Die Sphärizität eines Körpers gibt an wie rund (sphärisch) dieser ist. Sie ist definiert als das Verhältnis der Oberfläche einer Kugel gleichen Volumens $A_{vol.äq.}$ zur Oberfläche eines Partikels A_O (Gl. (3-6)). Somit ist die Sphärizität ein Maß dafür, wie weit die Form eines Partikels von der einer idealen Kugel abweicht. Je geringer der Wert der Sphärizität ist, desto größer die Abweichung von der Kugelform. Die Definition der Sphärizität lautet für das Agglomerat:

$$\Psi = \frac{A_{vol.äq.}}{A_O} \quad (3-6)$$

Bestehen die zu untersuchenden Agglomerate aus trockenen Partikeln und es liegt keine Penetration vor, wird das Partikelvolumen aus der Summe der Einzelpartikelvolumina erhalten. Das Partikelvolumen eines Agglomerats setzt sich bei viskosen Partikeln aus dem Volumen aller Primärpartikel abzüglich des Volumens im Überlappungsbereich der Partikel zusammen. Die Berechnung des Feststoffvolumens erfolgt wie in Abschnitt 3.1 erläutert wurde. Aus dem Partikelvolumen wird die Oberfläche der volumengleichen Kugel berechnet zu:

$$A_{vol.äq.} = \pi \cdot \left(\frac{6 \cdot V_P}{\pi} \right)^{2/3} \quad (3-7)$$

Die Berechnung der Agglomeratoberfläche erfolgt gemäß des in Kapitel 3.2 erläuterten Verfahrens. Mit Gleichung (3-6) kann somit die Agglomeratsphärizität bestimmt werden.

Bei einer weiteren Möglichkeit die Sphärizität von Agglomeraten anzugeben wird von der konvexen Hülle ausgegangen. Dabei wird die Oberfläche der volumengleichen Kugel nicht mit Hilfe des Feststoffvolumens, sondern mit dem Volumen der konvexen Hülle gebildet. Ebenso wird statt der freien Oberfläche eines Agglomerats die Oberfläche der konvexen Hülle zur Berechnung der Sphärizität verwendet. Agglomerate werden bei dieser Berechnung der Sphärizität als kompakte Körper von der Form der konvexen Hülle betrachtet. Im ersten Fall wird die tatsächliche Agglomeratmorphologie berücksichtigt. Im Falle eines Agglomerats mit vergleichsweise großer Oberfläche sagt die Sphärizität nicht viel über die äußere Form aus. Vielmehr kennzeichnet dieser Parameter eine Art von Oberflächenvergrößerung.

3.4 Berechnung des Trägheitsradius

Häufig werden zur Charakterisierung von unregelmäßig geformten Partikeln verschiedene Äquivalentdurchmesser angegeben. Es werden sowohl geometrische als auch physikalische Eigenschaften zur Bestimmung von Äquivalentdurchmessern genutzt.

Der Trägheitsradius R_G ist ein Äquivalentdurchmesser, der die Massenverteilung innerhalb eines Körpers angibt. Berücksichtigt wird hierin der Abstand jedes Partikels zum Schwerpunkt des Agglomerats (Gl. (3-8)).

$$R_G = \sqrt{\frac{1}{n_p} \cdot \sum_{i=1}^{n_p} |\vec{r}_i - \vec{r}_s|} \quad (3-8)$$

Dabei steht n_p für die Anzahl der Primärpartikel, r_s für den Schwerpunkt des Agglomerats und r_i für die Lage des betrachteten Primärpartikels. Abbildung 3.7 zeigt die Berechnung des Trägheitsradius schematisch.

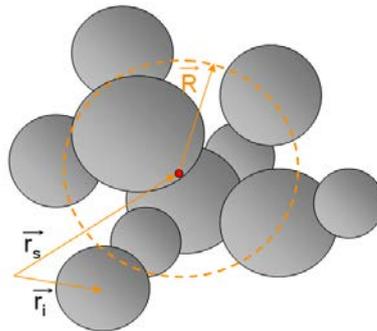


Abbildung 3.7: Berechnung des Trägheitsradius R eines Agglomerats in schematischer Darstellung.

3.5 Berechnung des volumenäquivalenten Kugeldurchmessers

Bei diesem Durchmesser handelt es sich um einen geometrischen Äquivalentdurchmesser. Er gibt den Durchmesser einer Kugel mit gleichem Volumen wie das betrachtete Partikel an. Für Agglomerate, die aus n_{pp} trockenen Partikeln mit dem Durchmesser d_p aufgebaut sind, lässt sich der volumenäquivalente Kugeldurchmesser d_{VES} (VES = volume equivalent sphere) leicht berechnen:

$$d_{VES} = \left(\sum_{i=1}^{n_{pp}} d_{p,i}^3 \right)^{1/3} \quad (3-9)$$

Werden neben trockenen auch viskose Partikel betrachtet, die bei einer Kollision ineinander eindringen können, wird der volumenäquivalente Kugeldurchmesser d_{VES} folgendermaßen berechnet. Zunächst wird das Feststoffvolumen des Agglomerats V_{FS} nach Kap. 3.1 bestimmt. Damit lässt sich dann der Durchmesser der volumengleichen Kugel berechnen zu:

$$d_{VES} = \left(\frac{\pi}{6} V_{FS} \right)^{1/3} \quad (3-10)$$

3.6 Berechnung des umhüllenden Kugeldurchmessers

Der Durchmesser der umhüllenden Kugel d_{BSPH} (BSPH = bounding sphere) ist wie der Trägheitsradius und der Durchmesser der volumengleichen Kugel ebenso ein geometrischer Äquivalentdurchmesser. Bei der Berechnung dieses Durchmessers wird zunächst der Schwerpunkt des Agglomerats berechnet (s. Kap. 3.4). Dann wird der größte Abstand eines Partikels zum Schwerpunkt bestimmt, der dann den Radius der umhüllenden Kugel R_{BSPH} darstellt (s. Abbildung 3.8).

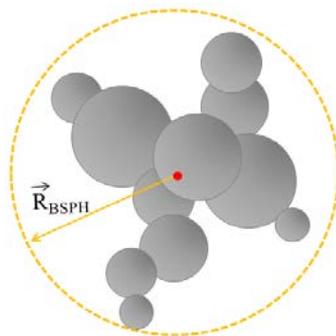


Abbildung 3.8: Radius der umhüllenden Kugel R_{BSPH} . Agglomeratschwerpunkt als roter Punkt eingezeichnet.

3.7 Berechnung der fraktalen Dimension

Im euklidischen Raum gibt die Dimension den Freiheitsgrad innerhalb dieses Raums an. Der Freiheitsgrad im 3-dimensionalen Raum ist drei, nämlich Länge, Breite und Höhe. Manchmal ist es allerdings nicht trivial die Dimension einer Struktur anzugeben. Eine der klassischen Strukturen, die Probleme bei der Angabe ihrer Dimension bereitet, ist die Küstenlinie eines Landes. Mit Hilfe eines Zirkels mit festem Maßstab kann die Länge durch Abschreiten der Küstenlinie auf einer Karte bestimmt werden. Durch Aufsummieren der einzelnen Polygonzüge kann die Länge ermittelt werden. Wird allerdings der Maßstab des Zirkels verringert, ergibt sich ein höherer Wert der abgemessenen Küstenlinie, da deren Struktur genauer abgebildet werden kann. Wird diese

Maßstabreduzierung viele Male wiederholt und wird in einem doppelt-logarithmischen Diagramm die gemessene Länge der Küstenlinie $\log(l)$ über dem Reziprokwert des Maßstabs $\log(1/\varepsilon)$ aufgetragen, so ergibt sich eine Gerade. Der Zusammenhang zwischen l und ε kann dann als Geradengleichung angegeben werden:

$$\log(l) = m \cdot \log\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) + b \quad (3-11)$$

Darin ist m die Steigung und b der Achsenabschnitt. Liegen die Punkte in einem doppelt-logarithmischen Diagramm auf einer Geraden, ist ein Potenzansatz zur Lösung naheliegend.

$$l = c \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^m, \quad (3-12)$$

wobei $c = 10^b$. Bei immer höheren Auflösung, also für $\varepsilon \rightarrow 0$, strebt $l \rightarrow \infty$. Das bedeutet, dass die Länge der Küstenlinie l für einen Maßstab der gegen Null strebt, auf einer Karte mit konstanter Auflösung gegen einen Grenzwert strebt. Daher wird für jeden Verfeinerungsschritt eine Karte mit einer höheren Auflösung benötigt. In diesem Beispiel erhält man für die Steigung einen Wert von $m = 0,36$ (Peitgen *et al.* 1992). Hier steht m für die Zirkel-Dimension der Küstenlinie.

Das vorgestellte Beispiel zeigt, dass Kurven mit nicht-ganzzahliger Dimension existieren. Kurven, Flächen oder Volumen mit nicht-ganzzahligen Dimensionen werden Fraktale genannt. Das Konzept von Fraktalen wurde von Mandelbrot (1987) in den 1980er Jahren eingeführt. Peitgen *et al.* (1992) stellen dar, dass es mehr als zehn verschiedene Definitionen von Dimension, wie topologische Dimension, Hausdorff Dimension, fraktale Dimension, Selbstähnlichkeits-Dimension oder Box-Dimension, gibt. Alle diese Definitionen sind für bestimmte Bereiche sinnvoll aber nicht notwendigerweise identisch. Nachfolgend sollen zwei Definitionen, die der Selbstähnlichkeits-Dimension und der Box-Dimension näher erläutert werden.

Peitgen und seine Koautoren beschreiben die Selbstähnlichkeits-Dimension folgendermaßen. Eine Struktur ist exakt selbstähnlich, wenn sie in eine beliebige Zahl kleinerer Teile zerlegt werden kann und jeder der kleineren Teile eine Kopie der gesamten Struktur ist. Alle kleineren Teile müssen dabei aus einer Ähnlichkeits-Transformation (z.B. Verkleinerung) hervorgehen. Abbildung 3.9 zeigt einen selbstähnlichen Würfel, der auf $1/3$ seiner Größe verkleinert wurde (Abbildung 3.9 rechts), so dass 27 dieser kleinen Würfel wieder den Würfel bilden. Die Anzahl der Teile a und der Skalierungsfaktor ε des Würfels sind über einen Potenzansatz miteinander verknüpft.

$$a = \frac{1}{\varepsilon^D} \quad (3-13)$$

Hierin stellt D die Selbstähnlichkeits-Dimension dar. Abbildung 3.9 zeigt, dass 27 Teile, die um den Faktor $1/3$ verkleinert wurden, wieder einen Würfel bilden. Die Selbstähnlichkeits-Dimension des Würfels ist somit:

$$D = \frac{\log(a)}{\log\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)} = 3 \quad (3-14)$$

In diesem speziellen Fall ist die Selbstähnlichkeits-Dimension gleich der topologischen Dimension des Würfels. Das Beispiel zeigt, dass nicht jede selbstähnliche Struktur ein Fraktal ist, da diese durch eine nicht-ganzzahlige Dimension definiert sind. Andererseits ist nicht jedes Fraktal selbstähnlich.

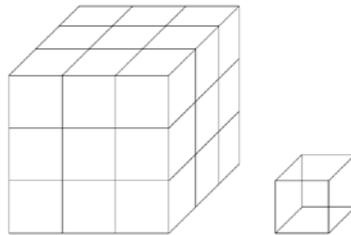


Abbildung 3.9: Selbstähnlicher Würfel gebildet aus 27 kleineren Würfeln, die um den Faktor $1/3$ runter skaliert wurden.

Natürliche Fraktale wie z.B. Agglomerate sind nicht notwendigerweise selbstähnlich. Trotzdem kann es nützlich sein, ihre fraktale Dimension anzugeben. Mit Hilfe der „Box-Counting-Methode“ kann eine spezielle Art der fraktalen Dimension, die Box-Dimension, von Agglomeraten bestimmt werden. Dazu wird eine Struktur mit einer bestimmten Anzahl von Quadraten (2D) oder Würfeln (3D) einer spezifischen Kantenlänge überdeckt (Abbildung 3.10). Alle nicht leeren Quadrate bzw. Würfel n , die einen Teil des Agglomerats beinhalten, werden gezählt und gegen die Auflösung (Kantenlänge) ε in einem doppelt-logarithmischen Diagramm aufgetragen, wobei die Gitterauflösung sukzessive verkleinert wird. Für verschiedene Gitterweiten liegen die Punkte im $\log(N)$ - $\log(1/\varepsilon)$ -Diagramm auf einer Geraden, deren Steigung die Box-Dimension der Struktur angibt (Liebovitch 1989).

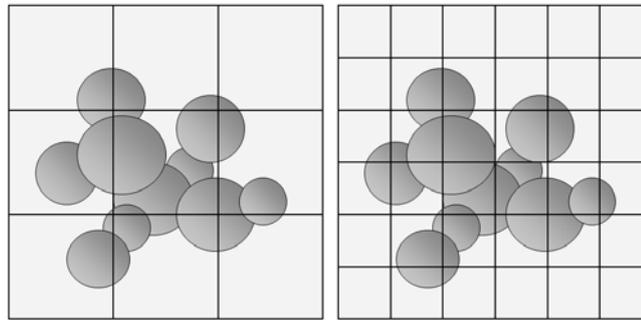


Abbildung 3.10: Bestimmung der fraktalen Dimension eines Agglomerats mittels Box-Counting-Methode (links: grobes, rechts: feines Gitter).

Peitgen *et al.* (1992) geben an, dass die Selbstähnlichkeits-Dimension nicht mit der Box-Dimension korrespondieren muss. Während die Box-Dimension in der Ebene nie über 2 ansteigt, kann die Selbstähnlichkeits-Dimension Werte größer als 2 annehmen. Aus diesem Grund geben Peitgen *et al.* (1992) an, dass Überlappungen in Strukturen von der Box-Dimension nicht korrekt wiedergegeben werden. Trotzdem findet die Box-Counting-Methode weit verbreitete Anwendung, da sie zur automatischen Bestimmung der fraktalen Dimension besonders leicht zu implementieren ist. Buczkowski *et al.* (1998) stellen heraus, dass die Box-Dimension keinen absoluten Wert darstellt. Vielmehr ist sie von verschiedenen Faktoren wie der Wahl der Kantenlänge ε des Initialgitters sowie des Bereichs, in dem das Gitter verfeinert wird, abhängig. Daher sollten diese Parameter angegeben werden, um reproduzierbare Ergebnisse zu erzielen. In der vorliegenden Arbeit liegt die Kantenlänge des Initialgitters gleich der halben Kantenlänge des Agglomerat umgebenden Würfels. Die Verfeinerung wird bis zu einer Kantenlänge der Würfel, die dem mittleren Primärpartikeldurchmessers im Agglomerat entspricht, durchgeführt.

3.8 Zusammenfassung

Anhand des in dieser Arbeit vorgestellten Lagrangeschen Agglomerations-Modells können verschiedene Parameter zur Beschreibung von Agglomeratstrukturen bestimmt werden. Dies sind neben Porosität, Sphärizität und freier Oberfläche auch verschiedene Äquivalentradien oder -durchmesser sowie die fraktale Dimension. Da es sich um einen Modellansatz handelt, müssen bestimmte Annahmen und Vereinfachungen zur Simulation von Agglomeratstrukturen getroffen werden.

Es können bislang nur newtonsche-Fluide bei der Berechnung von Penetrationsvorgängen als Folge von Partikelkollisionen betrachtet werden. Gerade im

Zusammenhang mit der Betrachtung von sprühgetrocknetem Milchpulver, das aufgrund seiner komplexen Zusammensetzung aus Fetten, Eiweißen und Zuckern nicht-newtonschen Charakter aufweist, ist dies eine starke Vereinfachung. Eine weitere Vereinfachung während des Penetrationsvorgangs von viskosen newtonschen Partikeln ist die Annahme der Formstabilität der Partikel. Das bedeutet, dass während des Eindringens eines höher viskosen Partikels in ein nieder viskoses beide Partikel ihre sphärische Partikelform beibehalten. Während eines realen Penetrationsvorgangs dürfte dies sicherlich nicht zu beobachten sein, da sich aufgrund des Impulses während des Stoßes beide Partikel verformen werden. Auch während der nachfolgenden Penetration des höher viskosen Partikels dürfte diese Masse des nieder viskosen vor sich herschieben. In diesem Zusammenhang sind experimentelle Untersuchungen notwendig, um das Verhalten newtonscher und nicht-newtonscher hochviskoser Partikel bei der Agglomeratbildung besser beschreiben zu können.

Durch die Ausbildung von Strukturen bei der Partikelagglomeration können Agglomerate sowohl durch angreifende fluidmechanische Kräfte als auch durch Kollisionen von anderen Partikeln in Rotation versetzt werden. Um die Rotationsgeschwindigkeit der gebildeten Agglomerate berechnen zu können, müssen folglich alle auf das Agglomerat einwirkenden Kräfte berechnet werden. Da dies einen sehr großen numerischen Aufwand bedeuten würde, wird die Rotation der Agglomerate in dieser Arbeit durch einen Zufallsprozess bestimmt. Dazu wird ein Agglomerat vor einem erneuten Anhaften eines weiteren Primärpartikels durch eine zufällige Drehung im Raum neu ausgerichtet. Insbesondere bei sehr vielen Kollisionen mit Agglomeraten, wodurch sich hohe Rotationsgeschwindigkeiten und ständige Neuorientierung im Raum ergeben, scheint diese Annahme gerechtfertigt zu sein.

In den nachfolgenden Kapiteln soll das vorgestellte Agglomerationsmodell sowohl in verschiedenen Testfällen als auch in einer technischen Anlage auf Plausibilität getestet werden.

4 Validierung der Modellteile anhand verschiedener Testfälle

Für die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen mit dem Euler-Lagrange-Verfahren wurden die bereits bestehenden Programmpakete FASTEST (Schäfer 2010) und Lag3D (Sommerfeld 2010) verwendet. Die für das in Abschnitt 3 vorgestellte Modell zur Beschreibung von Agglomeratstrukturen notwendigen Änderungen wurden im Rahmen dieser Arbeit in das Programm Lag3D integriert.

4.1 Granulares Medium

In diesem Abschnitt soll das verwendete stochastische Kollisionsmodell von Sommerfeld (2001) in einem einfachen Testfall verwendet und die korrekte Implementierung des Modells überprüft werden. Eine Grundvoraussetzung für das Entstehen von Agglomeraten ist die Kollision zwischen zwei Partikeln. Sind die Haftkräfte zwischen den Partikeln während des Stoßes größer als die Trennkräfte, können die miteinander kollidierenden Partikel aneinander haften bleiben und somit Agglomerate bilden. In dem hier vorgestellten Testfall wurde unter Vernachlässigung der Gravitation sowie aller anderen äußeren Kräfte die Partikelbewegung im Vakuum nur durch Partikel-Partikel Stöße beeinflusst. Mit Hilfe dieses einfachen Testfalls konnten somit verschiedene Aspekte des Kollisionsmodells, wie die Generierung fiktiver Stoßpartner oder der Energieerhalt im System, überprüft werden. Mögliche Beeinflussungen des Systems durch eine fehlerhafte Berechnung einer Fluidströmung und eine daraus resultierende fehlerbehaftete Partikeldispersion wurden durch die Simulation der Partikelstöße im Vakuum ausgeschlossen. Der verwendete Testfall setzt sich folgendermaßen zusammen:

In einen rechteckigen Würfel der Kantenlänge 0,2 m, an dessen Rändern periodische^{xiv} Randbedingungen gelten, wurde ein Partikelsystem mit monodisperser Größenverteilung von 650 μm injiziert. Da im untersuchten Testfall durch das Rechengitter keine Strömungsgradienten aufgelöst werden, kann das Rechenggebiet theoretisch durch eine einzige Zelle abgebildet werden. Jedoch benötigt der Löser mindestens zwei Zellen in jeder Richtung, so dass 2^3 Zellen verwendet wurden. Der Volumenanteil der Partikel der Dichte $\rho = 117,5 \text{ kg/m}^3$ im Würfel betrug $1,2 \cdot 10^{-2}$, so dass insgesamt eine Masse von $m = 1.222 \cdot 10^{-2} \text{ kg}$ im Rechenggebiet vorhanden war. Bei der Injektion von 10^4 Parcels hatten alle Partikel eine mittlere Geschwindigkeit von $\bar{u} = \bar{v} = \bar{w} = 0,0 \text{ m/s}$ und eine Schwankungsgeschwindigkeit von $u' = v' = w' = 0,29 \text{ m/s}$.

Stößt ein Partikel mit einem fiktiven Kollisionspartner zusammen, kann sich die Geschwindigkeit des realen Partikels ändern. Besitzt das reale Partikel eine höhere Geschwindigkeit als das fiktive, überträgt es einen Teil seines Impulses dem Stoßpartner. Nach dem Stoß ist die Geschwindigkeit des realen Partikels vom Betrag her geringer als vor dem Stoß. Andersrum empfängt das reale Partikel, das eine geringere Geschwindigkeit besitzt als sein Stoßpartner, einen Teil des Impulses des fiktiven Partikels. Dementsprechend ist der Geschwindigkeitsbetrag des realen Partikels nach der Kollision höher. Über das Gesamtsystem gemittelt, sollten bei korrekter Implementierung beide Fälle des Impulsübertrags gleich oft vorkommen. Da bei einer ideal elastischen Kollision keine Energie in Verformung umgewandelt wird, bleibt die Gesamtenergie des Systems somit konstant. Aus den Schwankungsgeschwindigkeiten bei der Injektion, die in alle drei Raumrichtungen^{xv} gleich groß sind, kann die kinetische Energie des Gesamtsystems mit Gleichung (4-1) zu $E_{\text{kin,in}} = 1,542 \cdot 10^{-3} \text{ J}$ berechnet werden.

$$E_{\text{kin,in}} = \frac{m}{2} (u'^2 + v'^2 + w'^2) = \frac{3}{2} m \cdot u'^2 \quad (4-1)$$

Nach jedem Zeitschritt wird die Energie des Gesamtsystems mit Hilfe der instantanen Partikelgeschwindigkeiten^{xvi} berechnet. Jedes Parcel besteht aus einer bestimmten Anzahl von realen Partikeln n_{pip} , so dass die kinetischen Ener-

^{xiv} Periodische Randbedingung bedeutet, dass ein Partikel, das das Rechenggebiet an einer Seite verlässt, mit den selben Eigenschaften (Geschwindigkeit etc.) an der gegenüberliegenden Seite wieder in das Gebiet eintritt. Auf diese Weise kann ein unendlich großes Rechenggebiet simuliert werden.

^{xv} isotropes System

^{xvi} Momentangeschwindigkeit

gien der einzelnen Parcels und der darin enthaltenen Partikel summiert wird (Gl. (4-2)).

$$E_{kin,in} = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} n_{pip,i} (u_i^2 + v_i^2 + w_i^2) \quad (4-2)$$

Abbildung 4.1 zeigt den zeitlichen Verlauf der kinetischen Energie von 10^4 Parcels im Rechengebiet. In rot dargestellt ist die kinetische Energie der Partikel bei der Injektion. Aufgrund der Partikel-Partikel-Kollisionen schwankt die kinetische Energie des Systems mit etwa $\pm 4,6\%$ um den Wert der injizierten Energie, so dass die Energieerhaltung gegeben ist. Die Annahme, dass ein positiver und negativer Impulsübertrag auf die realen Partikel im Mittel gleich oft vorkommt, ist demnach gerechtfertigt.

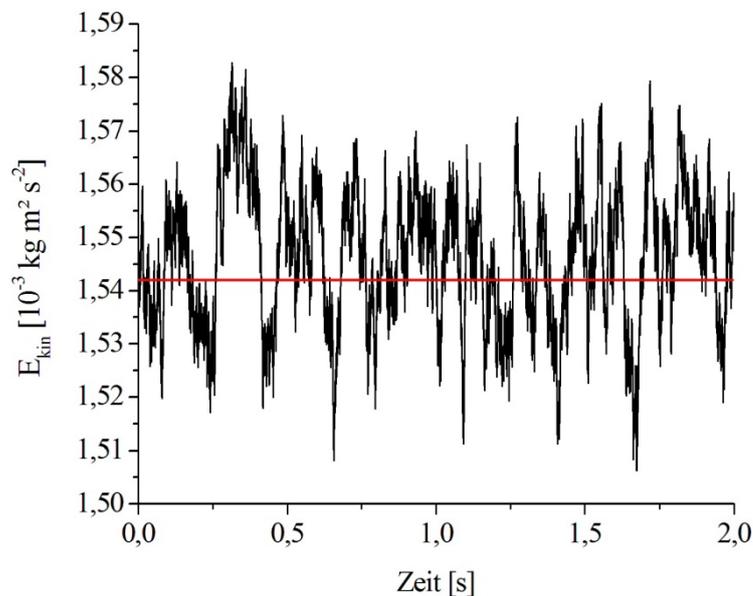


Abbildung 4.1: Zeitlicher Verlauf der kinetischen Energie von 10^4 Parcels im Rechengebiet um den Wert der initialen kinetischen Energie (rot).

Für die Berechnung von Partikel-Partikel-Stößen^{xvii} müssen die Eigenschaften aller Partikel in der jeweiligen Zelle bekannt sein. Die Eigenschaften der fiktiven Kollisionspartner werden aus diesen lokalen Verteilungen gesampled. Jedes reale Partikel, das sich durch eine Zelle bewegt, wird für die Erstellung der lokalen Statistik berücksichtigt. Somit wird die Gesamtstatistik in jeder Zelle des Rechengebiets umso genauer, je größer die Anzahl der betrachteten Parcels ist und je länger die Parcels durch das Rechengebiet verfolgt werden (Sampling-Zeit). Um den Einfluss sowohl von der Parcelanzahl als auch der Samp-

^{xvii} Bei Verwendung des stochastischen Kollisionsmodells von Sommerfeld (2001).

ling-Zeit auf die Eigenschaftsverteilung der fiktiven Partikel zu untersuchen wurden verschiedene Simulationen mit dem bereits vorgestellten monodispersen Partikelsystem durchgeführt. Während der Rechnungen wurde zunächst die Anzahl der betrachteten Parcels, deren Spuren jeweils 2s lang verfolgt wurden, von 10^2 auf 10^3 und schließlich auf 10^4 erhöht. Die Verteilung der Geschwindigkeiten der fiktiven Partikel sollte dementsprechende mit der Gaußverteilung der injizierten realen Partikel^{xviii} übereinstimmen.

In Abbildung 4.2 bis Abbildung 4.4 sind die Geschwindigkeitsverteilungen pro Zelle gezeigt. Durch eine Erhöhung der Parcelanzahl kann die Geschwindigkeitsverteilung der realen Partikel, die hier durch eine Gaußverteilung angegeben ist, immer besser abgebildet werden. Abbildung 4.2 zeigt, dass die Statistik der Geschwindigkeitsverteilung, aus denen die fiktiven Partikel erzeugt werden, durch die geringe Anzahl von 10^2 Parcels nicht wiedergegeben werden kann. Wird die Zahl der verfolgten Parcels auf 10^3 erhöht, gleicht sich die Geschwindigkeitsverteilung hinreichend gut der Gaußverteilung der realen Partikel an (Abbildung 4.3). Bei 10^4 Parcels stimmt die in jeder Zelle gespeicherte Statistik der Partikelgeschwindigkeiten nahezu perfekt mit der der realen Partikel überein. Für eine gute Statistik der Eigenschaftsverteilungen der realen Partikel sollte demnach eine möglichst große Anzahl an Parcels in Simulationen verwendet werden. Natürlich steigt mit der Zahl der betrachteten Parcels auch der Rechenaufwand, so dass ein Kompromiss zwischen guter Statistik und Rechenzeit gefunden werden muss.

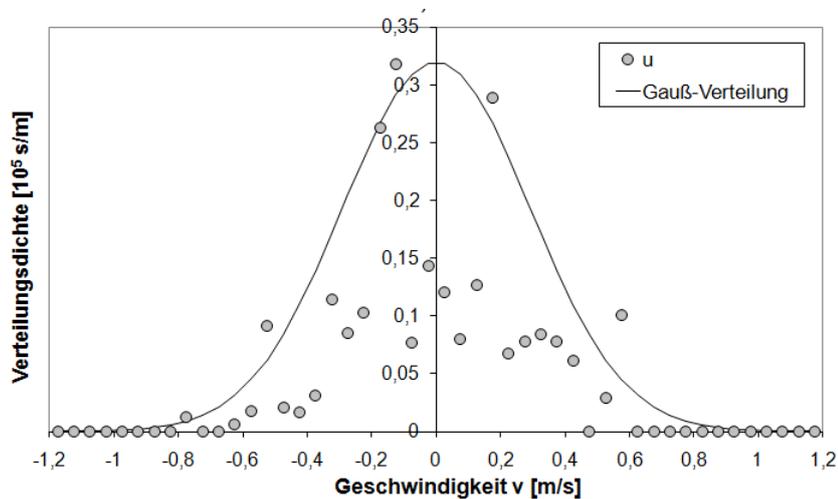


Abbildung 4.2: Geschwindigkeitsverteilung pro Zelle von 10^2 Parcels, die 2s durch das Rechengebiet verfolgt wurden.

^{xviii} Mittelwert 0,0 m/s, Standardabweichung 0,29 m/s

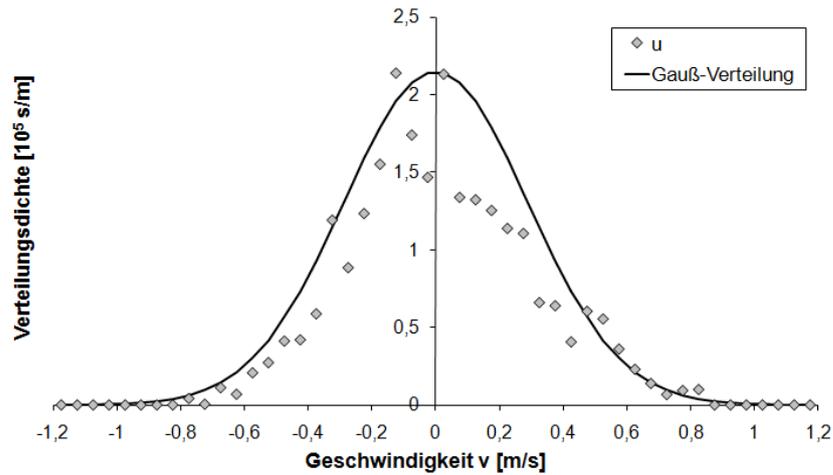


Abbildung 4.3: Geschwindigkeitsverteilung pro Zelle von 10^3 Parcels, die 2s durch das Rechengebiet verfolgt wurden.

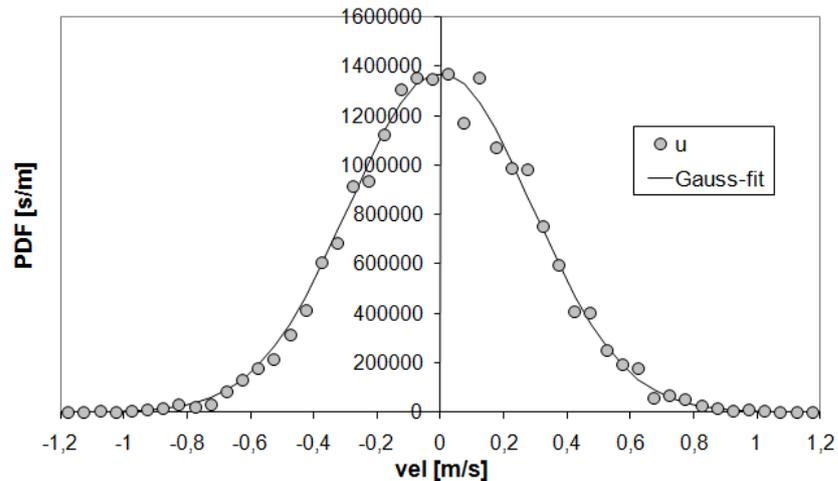


Abbildung 4.4: Geschwindigkeitsverteilung pro Zelle von 10^4 Parcels, die 2s durch das Rechengebiet verfolgt wurden.

In realitätsnahen Simulationen wird normalerweise ein Fluid berücksichtigt, dass eine gewisse Hauptströmungsrichtung aufweist. Für die Erstellung der Statistik zur Kollisionsberechnung ist meist nur eine geringere Anzahl aller Zellen aus dem gesamten Rechengebiet interessant. Wenn die Bereiche des Rechengitters bekannt sind, in denen sich mit hoher Wahrscheinlichkeit Partikel aufhalten werden, kann die Anzahl der benötigten Parcels für eine gute Statistik in etwa abgeschätzt werden. Wird ein Parcel mehr als einmal in jeder Zelle zur Bildung der Statistik herangezogen, wird diese ebenfalls besser. Im vorliegenden Testfall, in dem es keine bevorzugte Richtung der Partikelbewegung gibt, tragen die Parcels mit längerer Sampling-Zeit häufiger zur Verbesserung der Statistik bei. In Abbildung 4.3, Abbildung 4.5 und Abbildung 4.6 ist der Einfluss der Sampling-Zeit auf die Statistik gezeigt. Je länger die betrachteten 10^3 Parcels durch das Rechengebiet verfolgt werden, desto häufiger befinden sie sich in jeder Zelle und werden häufiger in der Statistik ausgewertet.

Damit wird die Gesamtstatistik in jeder Zelle genauer und bildet die Verteilung der realen Partikelgeschwindigkeiten besser ab.

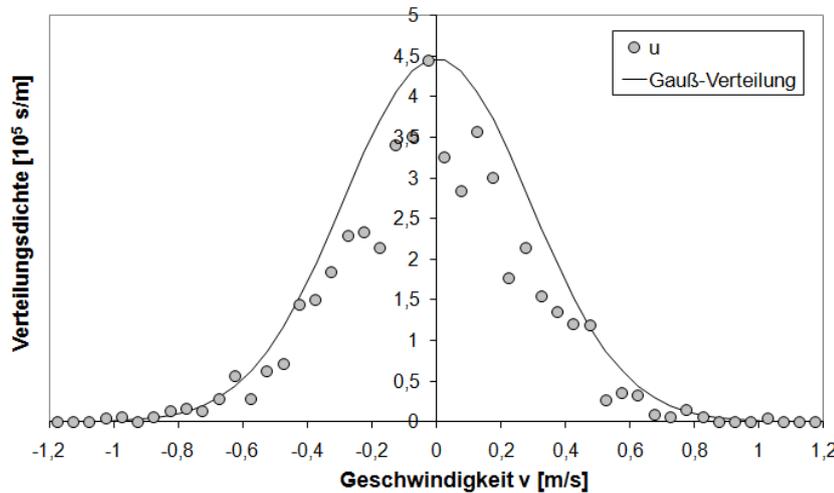


Abbildung 4.5: Geschwindigkeitsverteilung pro Zelle von 1000 Parcels, die 4s durch das Rechengebiet verfolgt wurden.

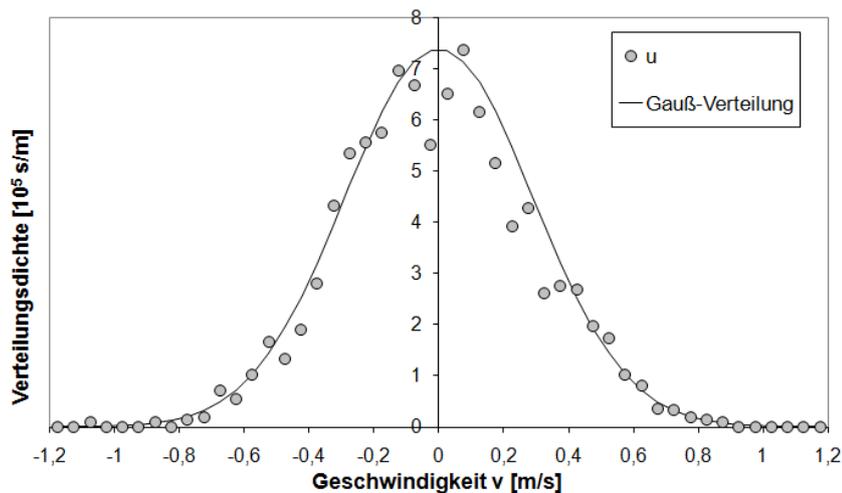


Abbildung 4.6: Geschwindigkeitsverteilung pro Zelle von 1000 Parcels, die 8s durch das Rechengebiet verfolgt wurden.

In einem weiteren Testfall^{xix} wurde ein binäres Gemisch aus Partikeln in den Würfel eingegeben. Beide Partikelfraktion hatten eine Größe von $650\ \mu\text{m}$ und unterscheiden sich lediglich in ihrer Dichte von $\rho_A = 117,5\ \text{kg/m}^3$ der Fraktion A und $\rho_B = 235\ \text{kg/m}^3$ der Fraktion B. Die Simulationen wurden ebenfalls im Vakuum durchgeführt, um den Testfall möglichst einfach zu gestalten und einen Einfluss einer Fluidströmung auszuschließen. Weiterhin wurde die Agglo-

^{xix} Dieser Testfall wurde von Sommerfeld (2001) dazu verwendet, das von ihm entwickelte stochastische Kollisionsmodell zu validieren. Hier dient er dazu, die Implementierung des Modells zu überprüfen.

meration der Partikel ausgeschlossen und lediglich das Kollisionsverhalten untersucht.

Interpartikuläre Kollisionen in einem binären System veranschaulichen das unterschiedliche Kollisionsverhalten der einzelnen Fraktionen. Der während der Kollision übertragene Impuls hängt neben der Geschwindigkeit auch von der Masse des stoßenden Partikels ab. Bei Partikeln gleicher Größe ist der Impulsübertrag von Partikeln mit höherer Dichte und somit höherer Masse an leichtere Partikel größer als im umgekehrten Fall. Folglich unterscheiden sich die Geschwindigkeitsänderungen während des Stoßes von schweren und leichten Partikeln. Daraus resultiert eine höhere turbulente kinetische Energie der leichteren Partikelfraktion und eine niedrigere turbulente kinetische Energie der schwereren Fraktion gegenüber der injizierten Energie. Beide Fraktionen wurden erneut mit einer mittleren Geschwindigkeit von 0,0 m/s und einer Schwingungsgeschwindigkeit von 0,29 m/s in den Würfel zugegeben. Insgesamt wurden 10^3 Parcels für 3s durch das Rechengebiet verfolgt. Während der ersten Iteration wurde die Statistik in jeder Zelle für die Generierung der fiktiven Kollisionspartner bestimmt. Im zweiten Durchlauf wurden die Kollisionen zwischen den Partikeln berücksichtigt und der Zustand der Partikel am Ende der Simulationszeit gespeichert. In der nächsten Iteration wurden die Partikel mit der Geschwindigkeit aus der vorangegangenen Rechnung in die Domäne injiziert, so dass sich das System einem Gleichgewichtszustand annäherte. Die Simulationen wurden nach 10 Iterationen gestoppt und das System in diesem Zustand ausgewertet.

In dem vorgestellten Testfall wurde der Einfluss des Volumenanteils einer Partikelfraktion auf das Gesamtsystem untersucht, wobei der Volumenanteil der leichten Fraktion konstant bei $\alpha_A = 1,3 \cdot 10^{-2}$ gehalten wurde. Der Volumenanteil der Partikelfraktion B wurde zwischen $\alpha_B = 6,5 \cdot 10^{-4}$ und $4,0 \cdot 10^{-2}$ variiert. Es wurden nur ideal elastische Kollisionen berücksichtigt. Solange die Volumen- und damit auch die Anzahlkonzentration der Fraktion A größer als die der Fraktion B ist, ist die Kollisionsfrequenz von Stößen der Partikelfraktion A untereinander wesentlich höher als zwischen allen anderen Partikelkombinationen. Abbildung 4.7 zeigt die Zusammensetzung des Systems bei höherer Anzahlkonzentration der Fraktion A. Darin sind die Partikel der Fraktion A grau markiert und die der Fraktion B rot. Ein Partikel B (rot) sieht in seiner Umgebung mehr Partikel A als andere Partikel B, so dass die Kollisionsfrequenz f_{BA} von Stößen B-A höher ist, als die Frequenz f_{BB} der Partikel B untereinander. Andererseits sieht ein Partikel A (grau) wesentlich mehr Partikel A in seiner Nachbarschaft als Partikel B (rot) und kollidiert häufiger mit Partikeln derselben Fraktion, somit ist die Kollisionsfrequenz f_{AA} höher als f_{AB} . Der limitierende Faktor der Partikel-Partikel-Kollisionen ist die Fraktion B, solange dessen Volumenanteil geringer ist als der der Fraktion A. Ist der Volumenanteil beider Fraktionen gleich groß, treten alle möglichen Kollisionsarten gleich oft auf und

die Kollisionsfrequenzen f_{AA} , f_{AB} , f_{BB} und f_{BA} sind ebenfalls gleich groß. Wird der Volumenanteil der Fraktion größer als der von Fraktion A, werden die Kollisionen durch die Partikel A limitiert und die Kollisionsfrequenz der Partikel B untereinander ist am höchsten.

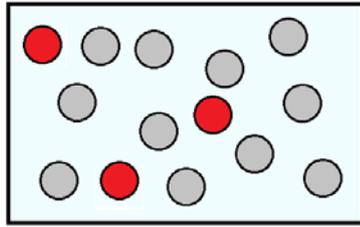


Abbildung 4.7: Abschätzung der zu erwartenden Kollisionsfrequenzen zwischen einem Partikel A (grau) und einem Partikel der Fraktion B (rot).

In Abbildung 4.8 und Abbildung 4.9 sind die Ergebnisse der Simulationen im Vergleich zu Ergebnissen von Sommerfeld (2001) und Gourdel *et al.* (1998) gezeigt. Kollisionen zwischen Partikeln der Fraktion A sind vom Volumenanteil der Partikel B unbeeinflusst, so dass die Kollisionsrate mit steigendem Volumenanteil α_B etwa konstant bleibt. Da der Volumenanteil im Gesamtsystem ansteigt, werden beide Partikelfraktionen aufgrund höherer Kollisionsanzahlen stärker „durchgeschüttelt“. Dadurch steigt die Kollisionswahrscheinlichkeit der Partikelfraktionen an, was sich in einem leichten Anstieg der Kollisionsfrequenz f_{AA} der Partikel A bemerkbar macht (Abbildung 4.8).

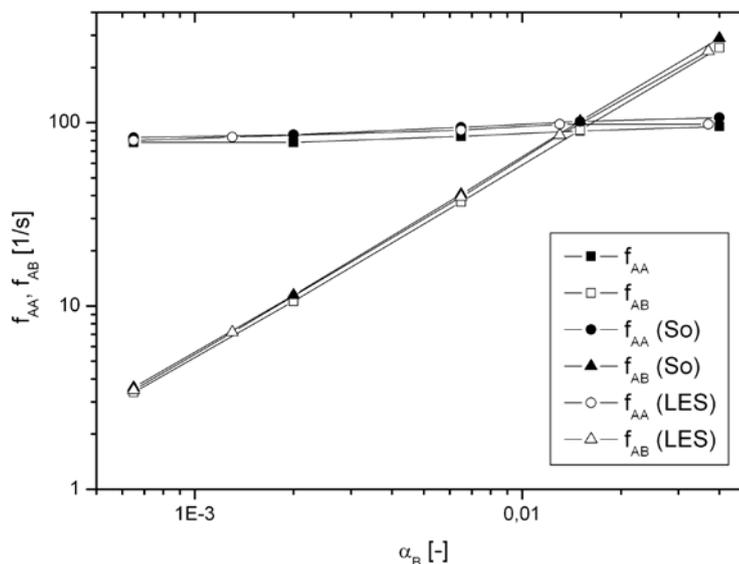


Abbildung 4.8: Kollisionsfrequenzen zwischen Fraktion A und beiden Fraktionen A und B im Vergleich mit LES Daten (Gourdel *et al.* (1998)) und Daten von Sommerfeld (2001) (So).

Mit steigendem Volumenanteil der Partikelfraktion B steigt die Kollisionsfrequenz f_{AB} zwischen Partikeln A und B an, da somit die Anzahl der Partikel B im System ansteigt. Sind etwa gleich viele Partikel A wie B im Rechengebiet

vorhanden, ereignen sich etwa gleich viele Kollisionen A-A wie A-B, was sich in Abbildung 4.8 ablesen lässt. Bei höherem Volumenanteil B „sehen“ die Partikel A mehr Partikel B als A und die Kollisionsfrequenz f_{AB} ist höher als f_{AA} . Die erwarteten Kollisionsfrequenzen werden durch das implementierte Modell richtig abgebildet (Abbildung 4.8), so dass ein Vergleich mit Simulationen von Sommerfeld (2001) sehr gute Übereinstimmungen zeigt. In Abbildung 4.8 bis Abbildung 4.10 werden neben den Ergebnissen von Sommerfeld auch Simulationsergebnisse von Gourdel *et al.* (1998) gezeigt. Dort wurde ein Überlappungsalgorithmus zur Kollisionsdetektion von Partikelpaaren (Hopkins und Louge 1991) verwendet und auf denselben Testfall angewandt. Ein Vergleich mit den Ergebnissen von Gourdel *et al.* liefert ebenso sehr gute Übereinstimmungen.

Da die Konzentration der Fraktion A konstant ist, nimmt die Kollisionsfrequenz f_{BA} nur leicht, aufgrund einer mit steigendem Volumenanteil α_B zunehmenden Schwankungsintensität zu (Abbildung 4.9). Mit steigender Konzentration von Fraktion B nimmt auch die Kollisionsfrequenz der Fraktion B wie erwartet linear zu. Der Vergleich mit den Ergebnissen von Sommerfeld (2001) und Gourdel *et al.* (1998) zeigt wiederum sehr gute Übereinstimmungen mit den Simulationen.

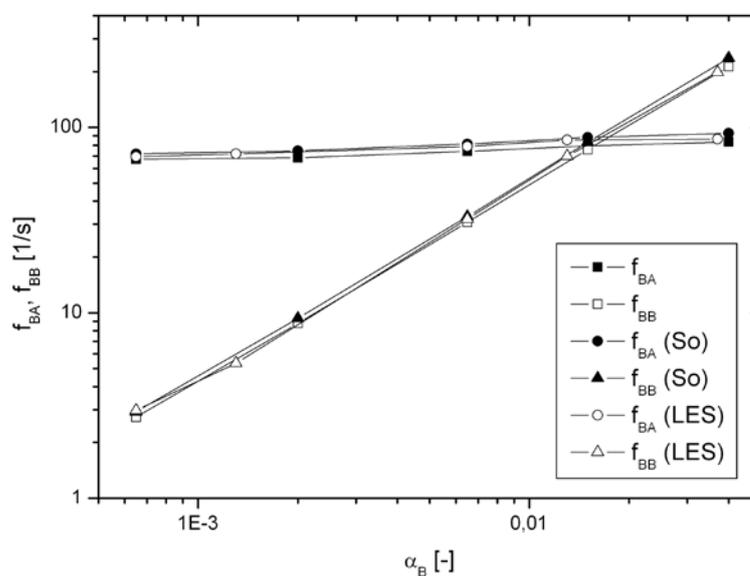


Abbildung 4.9: Kollisionsfrequenzen zwischen Fraktion B und beiden Fraktionen B und A im Vergleich mit LES Daten (Gourdel *et al.* (1998)) und Daten von Sommerfeld (2001) (So).

Während der Kollisionen werden vor allem die Partikel der Fraktion A stark „durchgeschüttelt“ und die kinetische Energie nimmt zu. Die schwereren Partikel B werden durch Kollisionen weniger stark beeinflusst, so dass der Anstieg der kinetischen Energie mit steigendem Volumenanteil α_B nicht so stark ausfällt. Die kinetische Energie der Partikelfraktionen berechnet sich mit Gleichung (4-1), wenn für die Geschwindigkeitskomponenten jeweils die Werte der

Schwankungsgeschwindigkeiten der Partikel eingesetzt werden. In Abbildung 4.10 ist der Verlauf der kinetischen Energie der Partikelfluktuationsgeschwindigkeiten der Simulationen im Vergleich mit Sommerfeld (2001) und Gourdel *et al.* (1998) gezeigt. Die Übereinstimmungen sind außer bei hohen Konzentrationen von Fraktion B sehr gut. Der Anstieg der Partikelfluktuationsgeschwindigkeiten durch höhere Volumenanteile der Partikel B erklärt den leichten Anstieg der Kollisionsfrequenzen f_{AA} und f_{BA} , auf den bereits eingegangen wurde.

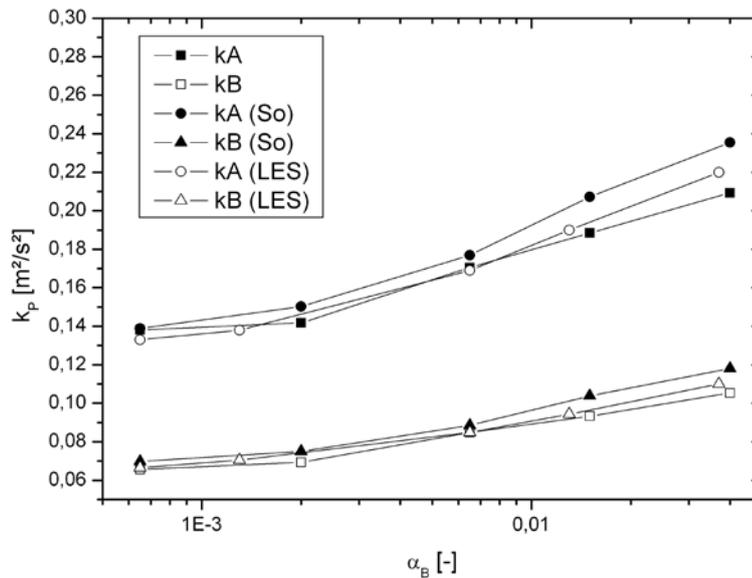


Abbildung 4.10: Kinetische Energie der Partikelfluktuationsgeschwindigkeiten der Fraktionen A und B im Vergleich mit LES Daten (Gourdel *et al.* (1998)) und Daten von Sommerfeld (2001) (So).

4.2 Agglomeration trockener Partikel ohne Strukturbe- rechnung

Kapitel 4.1 zeigt, dass verschiedene Partikelfraktionen ein unterschiedliches Kollisionsverhalten aufweisen. Aus Gleichung (2-63) folgt, dass mit steigender Partikelgröße die Kollisionswahrscheinlichkeit der jeweiligen Partikelfraktion ansteigt. Nachdem die Agglomeration in Kapitel 4.1 vernachlässigt wurde, fand diese in einem nächsten Schritt Berücksichtigung und somit auch eine Änderung der Größenverteilung. Bei diesen Agglomerationsvorgängen wurde die

Bildung von Agglomeratstrukturen zunächst nicht betrachtet und die entstandenen Agglomerate als volumenäquivalente Kugeln behandelt^{xx}.

Um das implementierte Kollisions- und Agglomerationsmodell zu testen, wurde ein Testfall benutzt, der an Ho und Sommerfeld (2002) angelehnt ist. Der im vorangegangenen Abschnitt vorgestellten Würfel enthielt hierfür eine homogene isotrope Turbulenz. Die Eigenschaften der hier verwendeten Turbulenz und Partikel sind in Tabelle 4-1 zusammengefasst.

Tabelle 4-1: Eigenschaften der Turbulenz und Partikelphase.

Eigenschaft	Wert	Eigenschaft	Wert
Turbulente kinetische Energie k	$0.06 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$	Partikelmaterialdichte	$1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$
Turbulente Dissipationsrate ε	$10 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-3}$	Partikel Volumenanteil	$\alpha_A = 10^{-5}$ $\alpha_B = 10^{-3}$
Turbulentes integrales Zeitmaß T_L	$9.6 \cdot 10^{-4} \text{ s}$	Hamaker-Konstante A	$5.0 \cdot 10^{-19} \text{ J}$
Lagrangesches Längenmaß L_E	$5.76 \cdot 10^{-4} \text{ m}$	Stoßzahl e	0.6
Partikel Relaxationszeit τ_p	$1.2 \cdot 10^{-5} \text{ s} - 1.2 \cdot 10^{-3} \text{ s}$	Reibungskoeffizient μ_f	0.4
Stokes-Zahl St	0.0125 – 1.25	Grenzdruck p_{pl}	$5.0 \cdot 10^9 \text{ Pa}$
Partikeldurchmesser	2 – 20 μm	Kontaktabstand	$4.0 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

Da außer der Widerstandskraft sowohl die Gravitation als auch andere zusätzliche Kräfte bei diesem Testfall vernachlässigt wurden, wurde die Bewegung der Partikel nur durch die Turbulenz sowie Partikel-Partikel-Kollisionen beeinflusst. In der Bewegungsgleichung (2-35) wird daher nur der Strömungswiderstand (2-37) berücksichtigt. Kapitel 2.2.3 beschreibt die Auftreffwahrscheinlichkeit η_p , die ein mögliches Vorbeifliegen eines kleinen Partikels entlang einer Grenztrajektorie um ein größeres Kollektorpartikel abschätzt (vgl. Gl. (2-65)). Aus den Gleichungen (2-64) und (2-65) folgt, dass sich besonders bei stark unterschiedlichen Partikelgrößen die Auftreffwahrscheinlichkeit bemerkbar macht. Um deren Einfluss sowohl auf die Kollisions- sowie die Agglomerationsrate zu untersuchen, ist ein binäres Partikelgemisch simuliert worden. Der Durchmesser der Partikelfraktion A variierte zwischen 2 μm und 20 μm , während Fraktion B eine feste Größe von 20 μm hatte. Die Simulation

^{xx} Die Strukturentstehung von Agglomeraten wird in Kap. 4.4 und Kap. 4.5 in akademischen Testfällen, sowie in Kap. 5 am Beispiel eines Sprühtrockners untersucht.

nen wurden sowohl mit als auch ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit durchgeführt.

Aus Gleichung (2-63) folgt, dass die Kollisionswahrscheinlichkeit proportional zur Partikelgröße sowie zur Partikelanzahl ist. Zwar steigt die Kollisionswahrscheinlichkeit mit steigendem Partikeldurchmesser der Fraktion A an, jedoch nimmt gleichzeitig die Partikelanzahl bei konstantem Volumenanteil α_A stark ab. Der Einfluss der Partikelanzahl auf die Kollisionswahrscheinlichkeit ist größer als die Durchmesserergrößerung. Dies spiegelt sich in der sinkenden Kollisionsfrequenz bei steigender Partikelgröße A in Abbildung 4.11 wider. Da die Partikelkollision die Voraussetzung einer möglichen Agglomeration ist, muss die Agglomerationsfrequenz mit der Kollisionsfrequenz sinken. Ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit können alle Kollisionen, die durch das Modell detektiert wurden, zur Agglomeration führen. Das Kriterium für Agglomeration ist die kritische Geschwindigkeit Gl. (2-80), die umgekehrt proportional zur Partikelgröße ist. Folglich nimmt auch die Agglomerationsfrequenz mit steigendem Partikeldurchmesser der Fraktion A ab (Abbildung 4.11).

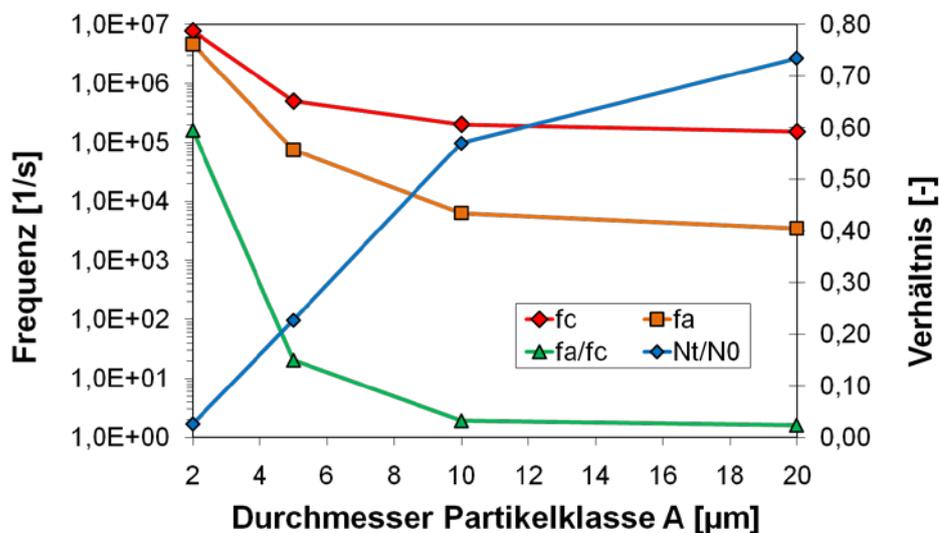


Abbildung 4.11: Binäre Partikelkollisionen zwischen den Fraktionen A und B ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit in Abhängigkeit der Partikelgröße der Fraktion A (Kollisionsfrequenz f_c , Agglomerationsfrequenz f_a , Agglomerationseffizienz f_a/f_c und relative Partikelanzahl N_t/N_0).

Wird das Verhältnis zwischen der Agglomerationsfrequenz f_a und der Kollisionsfrequenz f_c gebildet, kann eine Agglomerationseffizienz f_a/f_c definiert werden. Führt jede Partikelkollision ebenso zu einer Agglomeration der Partikel, so ist die Agglomerationseffizienz gleich eins. Als unterer Grenzwert der Agglomerationseffizienz kann Null angegeben werden, wenn keine Kollision zu einer Agglomeration führt. Der Einfluss des ansteigenden Partikeldurchmessers der Fraktion A auf die Agglomerationseffizienz ist größer als auf die Frequenzen der Kollision und Agglomeration. Dies ist sowohl der Abhängigkeit der

Kollisions- als auch der Agglomerationswahrscheinlichkeit von der Partikelgröße geschuldet. Während die Agglomerationsrate ansteigt, nimmt die Gesamtzahl der Partikel im Rechengebiet ab, da Partikel Agglomerate formen. Da die Kollisionswahrscheinlichkeit auch proportional zur Anzahldichte der Partikel ist, führt die fortschreitende Agglomeration der Partikel zu einer Abnahme der Kollisionsfrequenz f_c und somit ebenso zu einer Reduzierung der Agglomerationshäufigkeit. Daraus lässt sich der größere Gradient im Verlauf der Agglomerationsfrequenz f_a erklären, was wiederum zu einer starken Abnahme der Agglomerationseffizienz f_a/f_c führt (s. Abbildung 4.11).

Das Einführen der Auftreffwahrscheinlichkeit in die Simulationen führt zu einer sehr viel niedrigeren Kollisionsfrequenz f_c und damit auch Agglomerationsfrequenz f_a (Abbildung 4.12). Bei stark unterschiedlichen Partikeldurchmessern, ist der größte Einfluss der Auftreffwahrscheinlichkeit auf die Kollisionsfrequenz zu beobachten. Kleine Partikel können dem Fluid entlang einer sog. Grenztrajektorie um das Kollektorpartikel folgen, so dass keine Kollision vorkommt. Partikel mit höher Trägheit werden nicht durch das Fluid um das Kollektorpartikel getragen, so dass es zu einer Kollision kommt. Abbildung 4.12 zeigt die Kollisionsfrequenz über dem Partikeldurchmesser der Fraktion A.

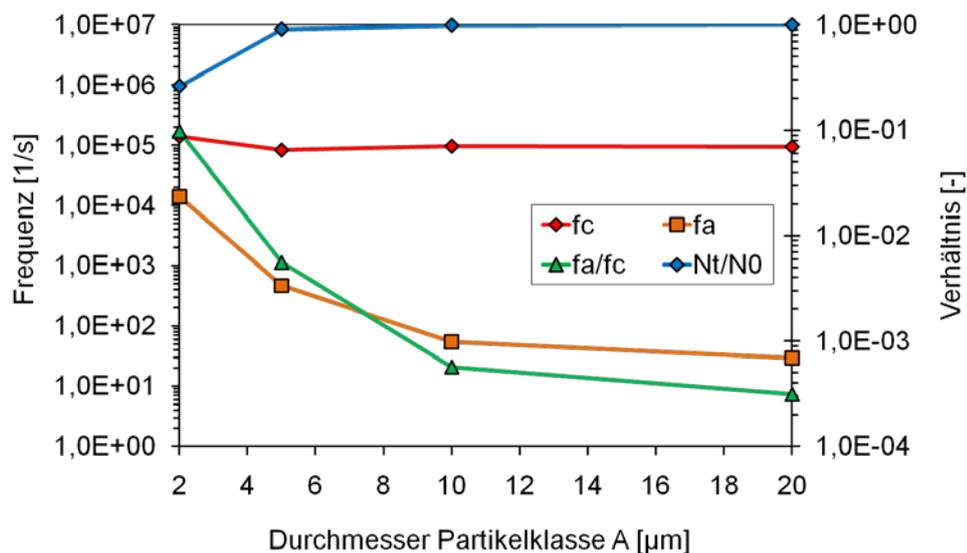


Abbildung 4.12: Binäre Partikelkollisionen zwischen den Fraktionen A und B mit Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit in Abhängigkeit der Partikelgröße der Fraktion A (Kollisionsfrequenz f_c , Agglomerationsfrequenz f_a , Agglomerationseffizienz f_a/f_c und relative Partikelanzahl N_t/N_0).

Zunächst nimmt die Kollisionsfrequenz f_c ab, steigt jedoch mit steigendem Durchmesser der Partikelfraktion A wieder leicht an und bleibt für 10 µm und 20 µm konstant. Dies liegt im schwindenden Einfluss der Auftreffwahrscheinlichkeit mit Angleichung der Partikeldurchmesser begründet. Schließlich liegt der Wert für die Kollisionsfrequenz für gleich große Partikel etwas niedriger

als bei der Simulation ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit (vgl. Abbildung 4.11). Die Auftreffwahrscheinlichkeit wirkt sich jedoch nicht nur auf die Kollisionsfrequenz, sondern auch auf die Agglomerationsfrequenz aus. Der für die Berechnung der Auftreffwahrscheinlichkeit verwendete Trägheitsparameter Ψ (Gl. (2-64)) ist proportional zur Relativgeschwindigkeit der Partikel. Das heißt, die Auftreffwahrscheinlichkeit ist um so niedriger, je geringer die Relativgeschwindigkeit ist. Die Anzahl der resultierenden Kollisionen, und somit die Kollisionsfrequenz, ist proportional zur Auftreffwahrscheinlichkeit. Für das Eintreten einer Agglomeration zwischen trockenen Partikeln ist die kritische Geschwindigkeit v_{krit} (Gl. (2-80)) und die Relativgeschwindigkeit der stoßenden Partikel von Bedeutung. Wenn die Relativgeschwindigkeit niedriger als die kritische Geschwindigkeit ist, bleiben die Partikel aneinander haften. Die Agglomerationswahrscheinlichkeit ist somit umgekehrt proportional zur Relativgeschwindigkeit. Zwischen Partikeln mit niedriger Relativgeschwindigkeit ist allerdings die Auftreffwahrscheinlichkeit gering, so dass die Agglomerationsfrequenz auch niedrig ist (s. Abbildung 4.12).

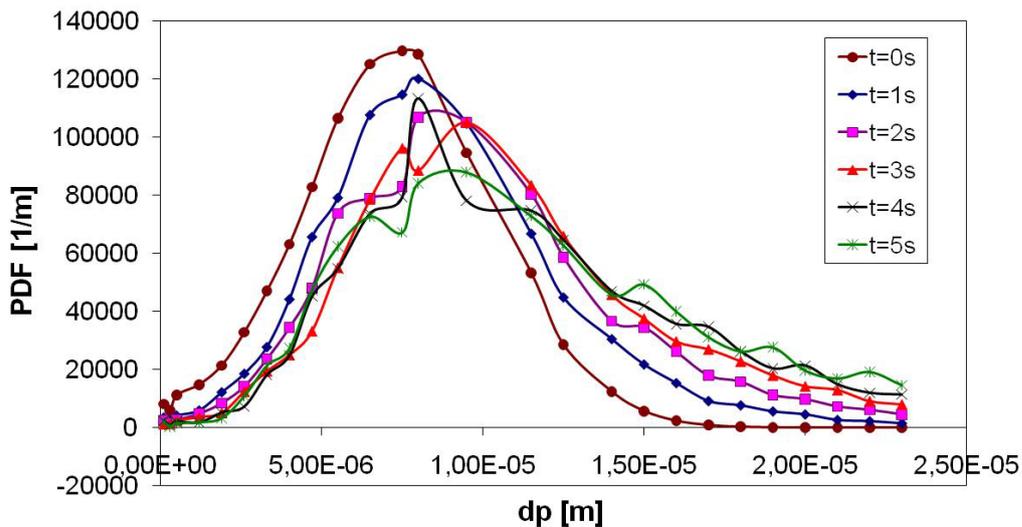


Abbildung 4.13: Änderung der Partikelgrößenverteilung über der Simulationszeit aufgrund von Agglomeration. Der injizierte Volumenanteil der Partikel betrug $\alpha = 10^{-3}$.

Anschließend wurde der Effekt der Agglomeration auf die Partikelgrößenverteilung untersucht, indem eine logarithmisch normalverteilte Größenverteilung in das Rechenggebiet eingegeben wurde. Zunächst wurde keine Strukturbildung der entstehenden Agglomerate in den Simulationen berücksichtigt. Bedingt durch die Agglomeration, veränderte sich die anfänglich injizierte Größenverteilung während einer Simulation kontinuierlich. Aufgrund der Agglomeration entstehen neue Größenklassen und die Verteilung wird mit der Zeit breiter. Abbildung 4.13 zeigt die Partikelgrößenverteilung bei verschiedenen Simulationszeiten. Die zum Zeitpunkt $t = 0$ s injizierte monomodale Größenverteilung wird zunächst breiter und zeigt ab $t = 3$ s zunehmend weitere Maxima. Diese

Multimodalität resultiert aus der Anlagerung verschiedener Partikel diskreter Größenklassen. In der Simulation werden Agglomerate als Partikel mit dem Durchmesser einer volumengleichen Kugel behandelt. Dadurch entstehen weitere diskrete Partikelgrößenklassen, was sich aus Abbildung 4.13 ablesen lässt.

4.3 Einfluss des Äquivalentdurchmessers auf die Partikeldispersion

In turbulenten Strömungen erfolgt der Partikeltransport nicht nur durch Konvektion, sondern auch durch Turbulenzwirbel, wodurch Partikel auch quer zur Strömungsrichtung transportiert werden können. Man spricht dabei von turbulenter Dispersion. Zur Überprüfung der Leistungsfähigkeit von Dispersionsmodellen werden weithin die experimentellen Ergebnisse von Snyder und Lumley (1971) verwendet. In dieser Studie wurde die Dispersion von Partikeln aus einer Punktquelle in einer Gitterturbulenz untersucht. Darin wurde ein Windkanal mit quadratischer Grundfläche von 200 x 200 mm simuliert, der von einer vertikal aufwärts gerichteten Luftströmung mit einer mittleren Geschwindigkeit von $U = 6,55 \text{ m/s}$ durchströmt wurde. Abbildung 4.14 zeigt die Messstrecke des Experiments von Snyder und Lumley schematisch.

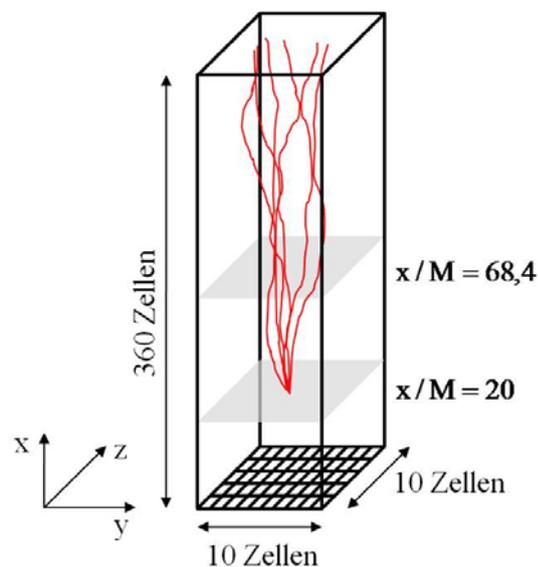


Abbildung 4.14: Messstrecke des Windkanals im Experiment von Snyder und Lumley (1971) und die Diskretisierung in der Simulation (10x10x360 Zellen).

Messungen von Snyder und Lumley an diesem Windkanal ergaben, dass die Fluktuationsgeschwindigkeiten in Strömungsrichtung x (u' -Komponente) und

in den lateralen Richtungen y und z (v' -Komponente)^{xxi} entlang des Windkanals mit Hilfe folgender Korrelationen berechnet werden können:

$$\frac{U^2}{u'^2} = 42,4 \cdot \left(\frac{x}{M} - 16,0\right), \quad \frac{U^2}{v'^2} = 39,4 \cdot \left(\frac{x}{M} - 12,0\right) \quad (4-3)$$

Hierin steht M für die Gitterweite von 25,4 mm. Die turbulente kinetische Energie k kann aus:

$$k = \frac{1}{2} \sqrt{u'^2 + 2 v'^2} \quad (4-4)$$

bestimmt werden. Für die Dissipation ε der turbulenten kinetischen Energie gilt:

$$\varepsilon = -\frac{U}{2} \frac{dk^2}{dx} \quad (4-5)$$

Zusammen mit Gleichung (4-3) und (4-4) ergibt sich aus Gleichung (4-5) die Dissipation ε zu:

$$\varepsilon = \frac{U^3}{2M} \left(\frac{1}{42,4 \left(\frac{x}{M} - 16,0\right)^2} + \frac{2}{39,4 \left(\frac{x}{M} - 12,0\right)^2} \right) \quad (4-6)$$

Anhand dieser Gleichungen für die turbulente kinetische Energie k (Gl. (4-4)) und die Dissipation ε (Gl. (4-6)) lässt sich das Experiment in einer Simulation nachbilden. Dazu wird ein Rechengebiet erstellt, das den vertikalen Windkanal durch 10x10x360 Zellen abbildet (s. Abbildung 4.14). Mit Hilfe dieses Simulationsaufbaus können verschiedene Dispersionsmodelle zur Berechnung von Partikelflugbahnen getestet werden. Dafür wird das Strömungsfeld innerhalb des Windkanals durch die Angabe von k und ε vorgegeben. Jede Zelle des Rechengitters wird mit den aus Gleichung (4-4) und (4-6) berechneten Werten belegt. Für die Berechnung der Partikelflugbahnen wird die, für das betrachtete Partikel sichtbare, instantane Fluidgeschwindigkeit mit dem verwendeten Dispersionsmodell berechnet.

^{xxi} Es wird von einer isotropen Strömung in den lateralen Richtungen y und z ausgegangen, so dass $v' = w'$ angenommen wird.

Zur Überprüfung der korrekten Vorbelegung des Strömungsfeldes wird das Abklingen der Turbulenz entlang des Windkanals in der Simulation mit Werten aus dem Experiment von Snyder und Lumley (1971) verglichen. Aus Abbildung 4.15 geht hervor, dass die Zellen im Rechengebiet entsprechend der Messungen korrekt vorbelegt wurden.

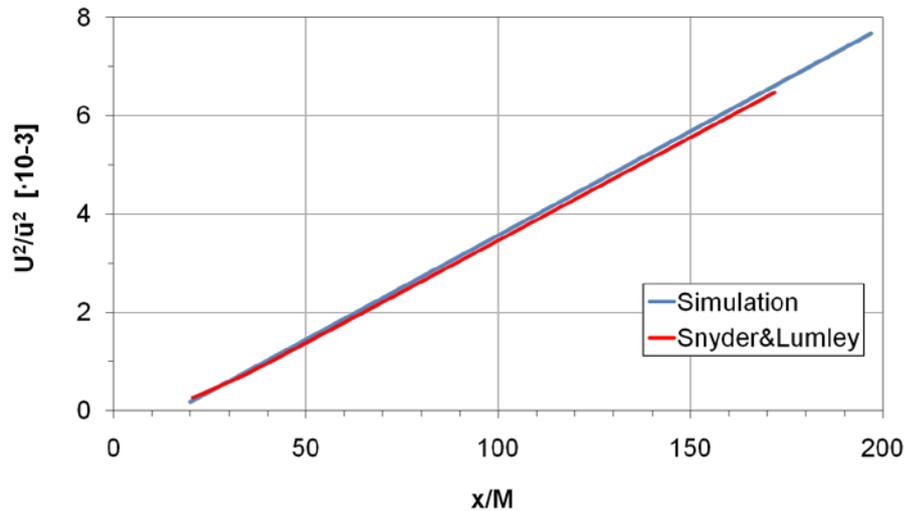


Abbildung 4.15: Abklingen der Turbulenz U^2/\bar{u}^2 des vorgegebenen Strömungsfeldes in Abhängigkeit der stromabwärtsgerichteten Position x/M .

Im Experiment werden die Partikel bei der dimensionslosen Position $x/M = 20$ über ein dünnes Rohr mit der lokalen Strömungsgeschwindigkeit in den Kanal zugegeben. Die Eigenschaften der verwendeten Partikel sind in Tabelle 4-2 zusammengefasst.

Tabelle 4-2: Eigenschaften der verwendeten Partikel im Experiment von Snyder und Lumley (1971)

Partikel	Durchmesser [μm]	Dichte [g/cm^3]	Stokessche Relaxationszeit [ms]
Maispollen	87,0	1,0	20,0

Die Partikeldispersion wurde als mittlere quadratische Verschiebung beginnend bei $x/M = 68,4$ an verschiedenen Positionen stromabwärts gemessen und als Funktion der Dispersionszeit dargestellt (Abbildung 4.16).

In den Simulationen wurden die Partikel ebenfalls bei $x/M = 20$ mit einer mittleren Geschwindigkeit der Hauptströmungskomponente von $U = 6,55$ m/s in das Rechengebiet zugegeben. Die drei Komponenten der Fluktuationsgeschwindigkeiten wurden aus einer Normalverteilung mit einer Standardabweichung von $\sigma_u = \sigma_v = \sigma_w = 0.5$ m/s erzeugt. Entsprechend der Messungen wurden die mittlere quadratische Verschiebung sowie die gemittelte Dispersionszeit bei der Referenzposition $x/M = 68,5$ beginnend bestimmt.

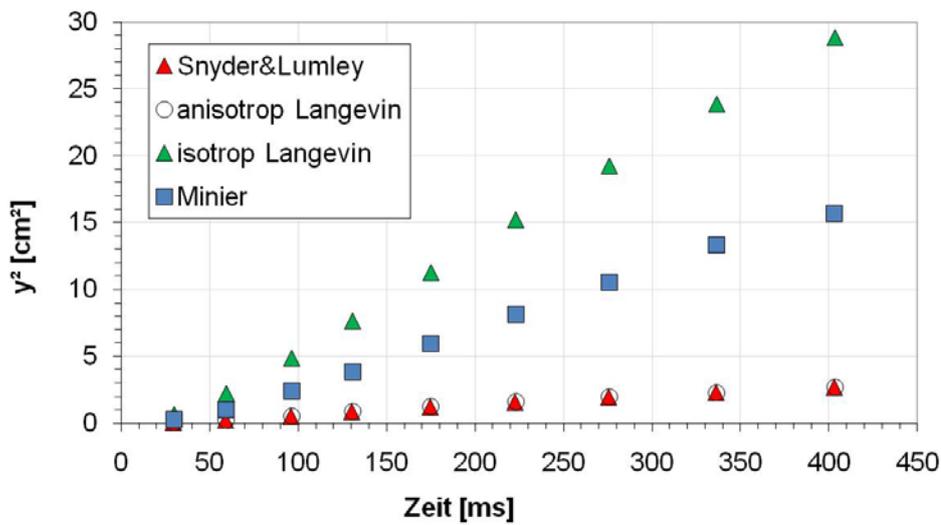


Abbildung 4.16: Dispersion von Maispollen in einer Gitterturbulenz berechnet mit verschiedenen Dispersionsmodellen (anisotropes Langevin-Modell, isotropes Langevin-Modell und Modell von Minier) im Vergleich mit experimentellen Daten von Snyder und Lumley (1971) (vgl. Kap. 2.2.2).

Es wurden mehrere Simulationen unter Verwendung verschiedener Dispersionsmodelle^{xxii} durchgeführt. In den Simulationen wurden nur der Strömungswiderstand und die Gravitation als angreifende Kräfte berücksichtigt. Insgesamt wurden jeweils 10^3 Parcels bei $x/M = 20$ in das Rechengebiet zugegeben. Wie aus Abbildung 4.16 hervorgeht, zeigten das Modell von Minier sowie das isotrope Langevin-Modell deutliche Abweichungen von den Messwerten. In den beiden Modellen wird für die Berechnung der instantanen Fluidgeschwindigkeit am Partikelort von einer isotropen Strömung ausgegangen. Im Experiment ist jedoch klar eine Hauptströmungsrichtung zu erkennen, so dass die Annahme einer Isotropie nicht korrekt ist. Demgegenüber bildet das anisotrope Langevin-Modell, welches in den folgenden Kapiteln und insbesondere für die Simulation eines industriellen Sprühtrockners (Kap. 5) verwendet wird, das Experiment perfekt ab.

Bei der Simulation von Partikelflugbahnen mit dem Lagrangeschen Punktpartikel-Ansatz, müssen Agglomerate durch einen geeigneten Äquivalentdurchmesser abgebildet werden. Im vorangegangenen Kapitel wurden verschiedene Möglichkeiten vorgestellt, Agglomerate mittels eines Äquivalentdurchmessers zu beschreiben. In wieweit die Wahl des Äquivalentdurchmessers das Verhalten von Agglomeraten in turbulenten Strömungen beeinflusst, soll im folgenden Testfall gezeigt werden. In verschiedenen Simulationen wurden die Durchmesser der injizierten Punktpartikel variiert. Die Durchmesser stellten verschiedene Äquivalentdurchmesser eines künstlich erzeugten Agglomerats dar.

^{xxii} Die Modelle sind im Kapitel 2.2.2 beschrieben und sollen hier nicht weiter erläutert werden.

Das Agglomerat wurde künstlich erzeugt und dessen Struktur durch das neuartige Modell (s. Kap. 3) analysiert. Abbildung 4.17 zeigt das verwendete Agglomerat bestehend aus 100 Primärpartikeln der Dichte 1000 kg/m^3 in zwei verschiedenen Ansichten. Das Agglomerat weist eine Porosität von 0,807 auf. Als charakteristische Äquivalentdurchmesser des Agglomerats können der volumenäquivalente Durchmesser $d_{\text{VES}} = 23 \text{ }\mu\text{m}$, der Trägheitsdurchmesser $d_G = 30 \text{ }\mu\text{m}$ und der hüllvolumenäquivalente Durchmesser^{xxiii} $d_{\text{Hüll-VES}} = 40 \text{ }\mu\text{m}$ angegeben werden.

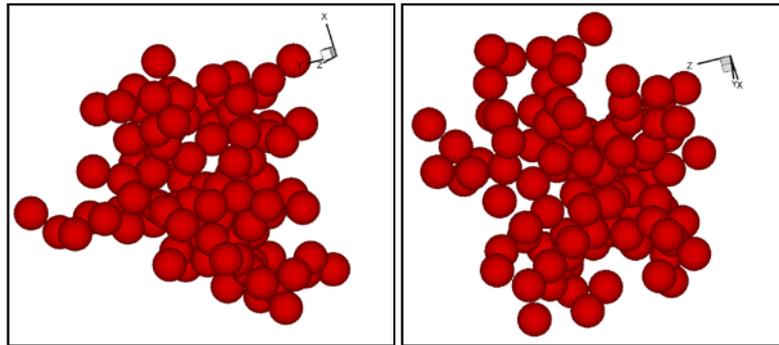


Abbildung 4.17: In der Dispersionsstudie verwendetes Agglomerat aus unterschiedlichen Ansichten (Anzahl der Primärpartikel: 100, Porosität: 0,807, volumenäquivalenter Durchmesser: $d_{\text{VES}} = 23 \text{ }\mu\text{m}$, Trägheitsdurchmesser $d_G = 30 \text{ }\mu\text{m}$, hüllvolumenäquivalenter Durchmesser $d_{\text{Hüll-VES}} = 40 \text{ }\mu\text{m}$, Dichte der Primärpartikel: $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$).

Aus Abbildung 4.18 wird offensichtlich, dass die untersuchten Partikeldurchmesser (d_{VES} , d_G und $d_{\text{Hüll-VES}}$) zu einer unterschiedlichen Partikeldispersion führen. Die Abweichung zwischen Volumenäquivalent- und Hüllvolumenäquivalentdurchmesser beträgt etwa 14 %.

^{xxiii} Dieser Durchmesser berechnet sich aus dem Volumen der konvexen Hülle, die das Agglomerat umschließt.

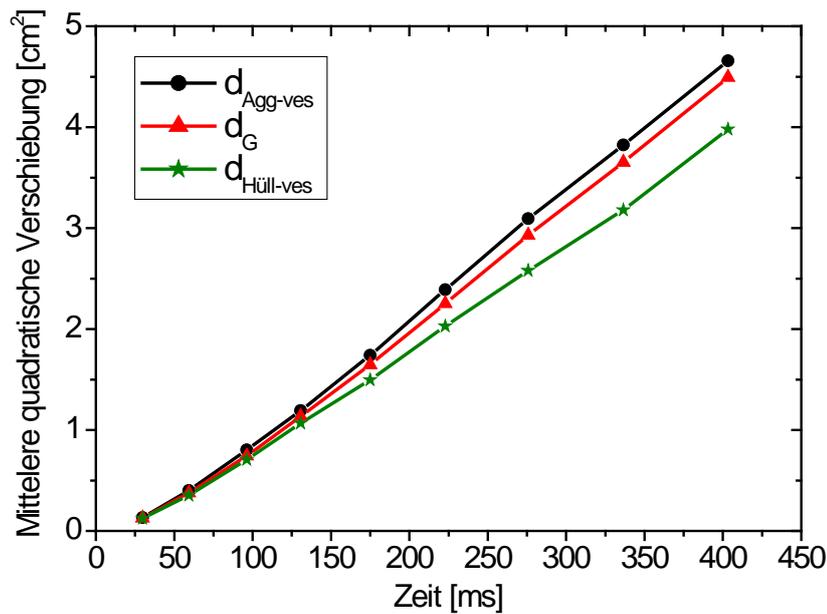


Abbildung 4.18: Mittlere quadratische Verschiebung (Partikeldispersion) als Funktion der Zeit von Partikeln unterschiedlichen Äquivalentdurchmessers.

Um die Dispersion von Agglomeraten in turbulenten Strömungen korrekt vorhersagen zu können, ist es erforderlich, einen geeigneten Äquivalentdurchmesser zu finden. Aus Untersuchungen von Stübing *et al.* (2011) geht hervor, dass der Durchmesser der projizierten Querschnittsfläche der konvexen Hülle sehr gut geeignet ist, ein Agglomerat als Punktpartikel zu charakterisieren. Dieser Äquivalentdurchmesser kann in der vorliegenden Arbeit nicht bestimmt werden, da die Rotation von Agglomeraten aufgrund angreifender fluiddynamischer Kräfte nicht berücksichtigt wird. Um die angeströmte Fläche eines Agglomerats zu bestimmen, muss dessen Orientierung in der Strömung bekannt sein. In dieser Arbeit wird die Orientierung von Agglomeraten durch einen Zufallsprozess während eines Kollisionsereignisses bestimmt (s. Kap. 3). Um aber den Durchmesser der angeströmten Querschnittsfläche der konvexen Hülle eines Agglomerats für die Dispersion zu berücksichtigen, muss die Orientierung zu jedem Zeitschritt bei der Berechnung der Partikelflugbahn bekannt sein. Dies wäre ein zu großer rechnerischer Aufwand, um industriell relevante Strömungen, in denen sehr viele Partikel dispergiert sind, in einem überschaubaren Zeitrahmen zu simulieren. Daher wird in der vorliegenden Arbeit der Trägheitsdurchmesser als Äquivalentdurchmesser verwendet. Anhand des für die hier vorgestellten Simulationen zu Grunde liegenden Experiments, können Agglomerate mit definierten Struktureigenschaften experimentell untersucht werden. Auf Grundlage dieser so geschaffenen Datenbasis, kann in weiteren Simulationen der verwendete Äquivalentdurchmesser überprüft werden.

4.4 Modellierung von Agglomeratstrukturen trockener Partikel in einer homogenen isotropen Turbulenz

4.4.1 Monodisperses Partikelsystem

Die zuvor vorgestellten Untersuchungen zur Validierung der implementierten Teilmodelle zeigen sehr gute Ergebnisse, so dass nunmehr das neu entwickelte Strukturmodell auf Plausibilität getestet werden soll. Dazu wurde zunächst das Verhalten vollständig getrockneter Partikel in einem Würfel mit einer homogenen isotropen Turbulenz simuliert. Die entstehenden Agglomerate wurden dann hinsichtlich ihrer Morphologie untersucht. Tabelle 4-3 zeigt die Eigenschaften der verwendeten Turbulenz sowie der Partikelphase.

Tabelle 4-3: Eigenschaften der homogenen isotropen Turbulenz und der Partikelphase

Eigenschaft	Wert
Turbulente kinetische Energie k	$0,06 \text{ m}^2/\text{s}^2$
Turbulente Dissipationsrate ϵ	$10 \text{ m}^2/\text{s}^3$
Turbulentes integrales Zeitmaß T_L	$9,6 \cdot 10^{-4} \text{ s}$
Lagrangesches Längenmaß L_E	$5,76 \cdot 10^{-4} \text{ m}$
Primärpartikeldurchmesser	$12 \text{ }\mu\text{m}$
Partikel Materialdichte	$1000 \text{ kg}/\text{m}^3$
Partikel Relaxationszeit τ_p	$7,62 \cdot 10^{-5} \text{ s}$
Stokes-Zahl St	0,46
Partikel Volumenanteil α	0,001
Hamaker Konstante A	$5,0 \cdot 10^{-19} \text{ J}$
Stoßzahl e	0,6
Reibungskoeffizient μ_f	0,4
Grenzdruck p_{pl}	$5,0 \cdot 10^9 \text{ Pa}$
Kontaktabstand	$4,0 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

Um Agglomerate mit Hilfe des Lagrangeschen Punktpartikelansatzes berechnen zu können, müssen sie durch einen geeigneten Äquivalentdurchmesser charakterisiert werden. Simulationen mit verschiedenen Äquivalentdurchmessern (vgl. Kap. 4.3) haben einen deutlichen Einfluss auf das Dispersionsverhalten der Partikel gezeigt. Aus dem Volumen aller agglomeratbildenden Primärpartikel kann der Durchmesser einer Kugel gleichen Volumens gebildet und das Agglomerat beschrieben werden. Auch die Repräsentation eines Agglomerats durch seine umhüllende Kugel ist denkbar. Beide Äquivalentdurchmesser können vom Durchmesser eines Agglomerats abweichen. Während der umhüllende Kugeldurchmesser einen relativ größeren Durchmesser darstellt, ist der Durchmesser der volumenäquivalenten Kugel geringer. Desweiteren können beide Äquivalentdurchmesser nicht die Agglomeratstruktur berücksichtigen, so

dass es keinen Unterschied macht, ob das Agglomerat kettig oder kompakt sphärisch ist.

Desweiteren wurde im vorangegangenen Kapitel als Äquivalentdurchmesser der Durchmesser einer Kugel mit gleichem Volumen wie die konvexe Hülle um das Agglomerat vorgestellt. Bei diesem Äquivalentdurchmesser wird zwar die Struktur eines Agglomerats berücksichtigt, jedoch können auch hier kettige und kompakte Agglomerate nicht gut unterschieden werden. Bei gleicher Primärpartikelanzahl kann der Hüllvolumenäquivalentdurchmesser eines Agglomerats bei dem die Primärpartikel in einer einzelnen Kette angeordnet sind, genauso groß sein wie bei einem Agglomerat, dessen Primärpartikel kugelig um ein Zentralpartikel angeordnet sind. Besteht ein Agglomerat beispielsweise aus sternförmig angeordneten Primärpartikeln, schließt die konvexe Hülle viel „Luft“ ein, so dass der resultierende Hüllvolumenäquivalentdurchmesser sehr groß ist.

Um den Einfluss der Wahl des Äquivalentdurchmessers auf die Agglomeratbildung zu untersuchen, wurden Simulationen mit dem volumenäquivalenten Kugeldurchmesser (VES), dem umhüllenden Kugeldurchmesser (BSPH) und dem Trägheitsdurchmesser (GYR)^{xxiv} durchgeführt. Simuliert wurden jeweils monodisperse Partikel mit einem Durchmesser von 12 µm. Die Partikel wurden mit der lokalen Fluidgeschwindigkeit homogen verteilt in das Rechengebiet injiziert, insgesamt für 5 s im Rechengebiet verfolgt und schließlich die Strukturen der gebildeten Agglomerate analysiert. Bei der Berechnung der Partikelkollisionen wurde der Einfluss der Auftreffwahrscheinlichkeit (Gl. (2-65)) auf die Kollisionsraten sowie die resultierenden Agglomeratstrukturen untersucht und die Ergebnisse mit Simulationen ohne Auftreffwahrscheinlichkeit verglichen. Bei den Simulationen wurden neben der Widerstandskraft keine zusätzlichen Kräfte auf die Partikel berücksichtigt. Nachfolgend werden die Ergebnisse der Simulationen an ausgewählten Parametern gezeigt.

Innerhalb des hier verwendeten stochastischen Kollisionsmodells wird die Kollisionswahrscheinlichkeit u.a. anhand der Partikeldurchmesser berechnet (vgl. Gl. (2-63)). Die Zahl der so vorausberechneten Kollisionen ist umso höher, je größer der Partikeldurchmesser ist. Werden Agglomerate mit verschiedenen Äquivalentdurchmessern betrachtet, hängt die Kollisionswahrscheinlichkeit somit auch vom gewählten Durchmesser ab. Von den verwendeten Äquivalentdurchmessern (VES, GYR und BSPH) berücksichtigt nur der Trägheitsdurchmesser die Agglomeratstruktur und kann in Abhängigkeit der Agglomeratmorphologie unterschiedliche Werte annehmen. Besteht ein Agglomerat beispielsweise aus zehn gleich großen Primärpartikeln, ist der Trägheitsdurchmes-

^{xxiv} Die hier verwendeten Abkürzungen für die unterschiedlichen Äquivalentdurchmesser stammen aus den englischen Bezeichnungen: VES = volume equivalent sphere; BSPH = bounding sphere; GYR = gyration.

ser klein, wenn die Partikel innerhalb des Agglomerats kugelig angeordnet sind. Bilden die Primärpartikel jedoch eine Kette ist der Trägheitsradius größer, da sich die Masse innerhalb des Agglomerats bis weit nach außen verteilt. Der Trägheitsradius bewegt sich in Abhängigkeit der Agglomeratstrukturen zwischen den beiden anderen Äquivalentdurchmessern. Da der Durchmesser der umhüllenden Kugel den größten Wert der hier untersuchten Äquivalentdurchmessern darstellt, ist die zu erwartende Anzahl an Kollisionen somit am höchsten. Abbildung 4.19 zeigt die Anzahl an vorausberechneten Kollisionen für die verschiedenen Äquivalentdurchmesser (in Tabelle 4-4 sind die Zahlenwerte aufgelistet).

Tabelle 4-4: Kollisionsanzahl ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit.

	VES	GYR	BSPH
Missed	1341088	4482735	11041780
Kollision	2987860	3186677	2131669
Agglomeration	447526	489524	222921

Wie erwartet ist die Zahl der berechneten Kollisionen für den Durchmesser der umhüllenden Kugel (BSPH) am größten und für den volumenäquivalenten Kugeldurchmesser (VES) am kleinsten. Die Zahl der berechneten Kollisionen für den Trägheitsdurchmesser liegt näher am Fall VES, da sich der Trägheitsdurchmesser nicht so stark vom VES-Durchmesser unterscheidet, wie vom Durchmesser der BSPH. Die in Abbildung 4.19 gezeigte Anzahl der Kollisionen steht für die tatsächlich ausgeführten Kollisionen, während die Zahl für „missed“ die Anzahl an verpassten Kollisionen angibt.

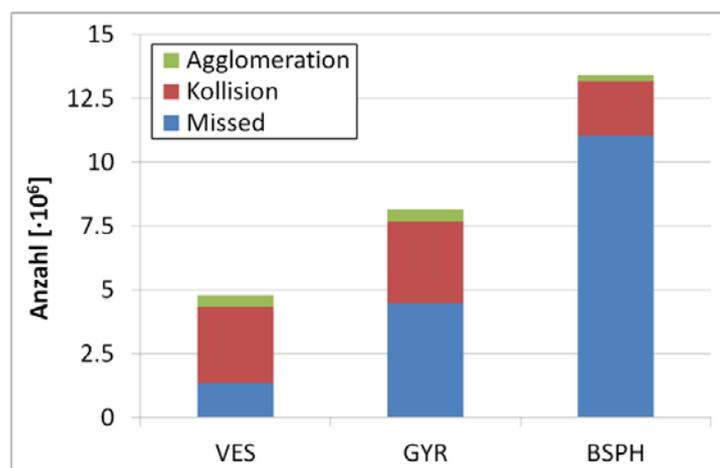


Abbildung 4.19: Kollisionszahlen trockener Partikel nach 5s Simulationszeit charakterisiert durch unterschiedliche Äquivalentdurchmesser ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit.

Nicht alle der vorausberechneten Kollisionen werden auch tatsächlich ausgeführt. Das Strukturmodell berücksichtigt bei einer vorausberechneten Kollision den Aufbau des Agglomerats. Wie bereits in Kap. 3 erläutert, kann ein heran-

fliegendes Partikel aufgrund der Morphologie an den Primärpartikeln vorbeifliegen, so dass keine Kollision ausgeführt wird. Dieser Fall wird als „missed“ bezeichnet und ist in Abbildung 4.19 eingetragen. Der Anteil an verpassten Treffern („missed“) ist für den Fall des umhüllenden Kugeldurchmessers mit etwa 84% am höchsten. Beim Trägheitsdurchmesser liegt dieser Anteil bei 58% und beim Durchmesser der volumengleichen Kugel bei 31%. Die Summe aus „Kollision“ und „missed“ gibt die Zahl der vom stochastischen Kollisionsmodell vorausberechneten Kollisionen an. Der Wert für „Agglomeration“ gibt die Zahl der tatsächlich stattgefundenen Kollisionen an, die zu einem Anhaften der stossenden Partikeln geführt hat.

Bei Verwendung der umhüllenden Kugel als Äquivalentdurchmesser für ein Agglomerat ist der leere Raum sehr groß. Betrachtet man ein sehr kettiges Agglomerat (Abbildung 4.20 grün) wird sofort klar, dass viele der durch das stochastische Kollisionsmodell bestimmten Auftreffpunkte auf der Oberfläche der umhüllenden Kugel zu keiner Kollision führen können, weil kein Primärpartikel vom stoßenden Partikel getroffen werden kann. Je kleiner der berücksichtigte Äquivalentdurchmesser ist, desto geringer ist auch der leere Raum innerhalb dieses Äquivalentpartikels. Im Falle des Trägheitsdurchmessers oder der volumenäquivalenten Kugel kann es sogar sein, dass Primärpartikel über die Grenze dieses Äquivalentdurchmessers hinausragen. Abbildung 4.20 zeigt typische Agglomerate aus den Simulationen für die verschiedenen Äquivalentdurchmesser. Es ist deutlich eine Verschiebung von sehr kompakten (VES) hin zu eher kettigen Agglomeraten (BSPH) zu erkennen. Dies ist eine Folge aus der Berücksichtigung der Agglomeratstruktur während eines Stoßes, nachdem durch das stochastische Kollisionsmodell ein Auftreffpunkt für das stoßende Partikel bestimmt wurde. Für die BSPH-Agglomerate ist die Möglichkeit, ein Partikel innerhalb der äquivalenten Kugel zu treffen geringer als für den Fall der VES-Agglomerate.

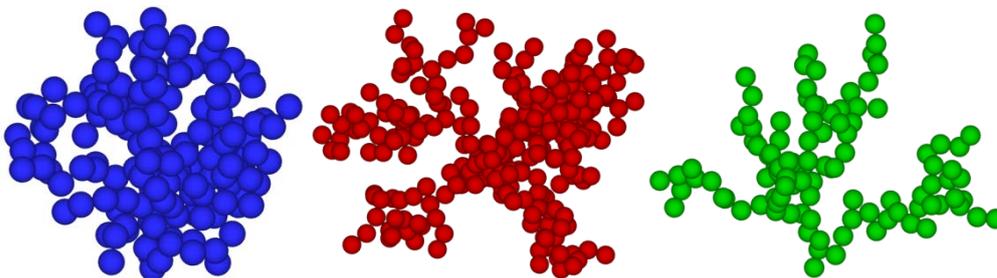


Abbildung 4.20: Agglomerate aus den Simulationen ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit bei Verwendung unterschiedlicher Äquivalentdurchmesser. Blau: VES ($n_{pp} = 157$; $\varepsilon = 0,85$; $R_G = 44,3 \mu\text{m}$; $D_f = 2,29$). Rot: GYR ($n_{pp} = 266$; $\varepsilon = 0,91$; $R_G = 68,8 \mu\text{m}$; $D_f = 2,1$). Grün: BSPH ($n_{pp} = 107$; $\varepsilon = 0,93$; $R_G = 116,1 \mu\text{m}$; $D_f = 1,82$).

Ein weiterer Punkt, der durch die Wahl des Äquivalentdurchmessers beeinflusst wird, ist neben der Partikelflugbahn (vgl. Kap. 4.3) auch die Höhe der berechneten Kollisionswahrscheinlichkeit. Wie aus Gleichung (2-63) hervor-

geht, ist die Kollisionswahrscheinlichkeit umso höher, je größer der Durchmesser des Kollisionszylinders ist (Abbildung 2.5). Dieser wird gebildet durch die Radien der beiden Stoßpartner. Im vorliegenden Fall ist der Radius der Primärpartikel konstant bei $12\ \mu\text{m}$. Der Radius der Agglomerate, die den zweiten Kollisionspartner darstellen können, wächst mit der Zahl der agglomeratbildenden Primärpartikel an. Der Radius der umhüllenden Kugel ist dabei immer größer als der der volumenäquivalenten Kugel oder der Trägheitsradius. Somit ist auch die berechnete Kollisionswahrscheinlichkeit der Agglomerate, die durch die umhüllende Kugel abgebildet werden, am höchsten. Als Resultat daraus ist die Kollisionsrate ebenso am größten für die umhüllende Kugel. Abbildung 4.19 zeigt, dass die Zahl der tatsächlich stattgefundenen Kollisionen bei der umhüllenden Kugel am niedrigsten ist. Für den Trägheitsdurchmesser und den Durchmesser der volumenäquivalenten Kugel ist die Zahl der Kollisionen und die Zahl der Agglomerationen etwa gleich, wobei die Anzahl beim Trägheitsdurchmesser etwas größer ist. Dass nicht jede Kollision von trockenen Partikeln in einer Agglomeration enden muss, wird aus Gleichung (2-80) ersichtlich. Nur wenn die Relativgeschwindigkeit während der Kollision unter einem Grenzwert u_{krit} liegt, reichen die Haftkräfte (van-der-Waals-Kräfte) aus, um die Partikel aneinander zu halten.

Abbildung 4.21 zeigt die Verteilung der Primärpartikelzahl aus denen die erzeugten Agglomerate aufgebaut sind. Für den Trägheitsdurchmesser und die volumenäquivalente Kugel ist die Verteilung etwa gleich, während die Primärpartikelzahl der umhüllenden Kugel deutlich geringer ist.

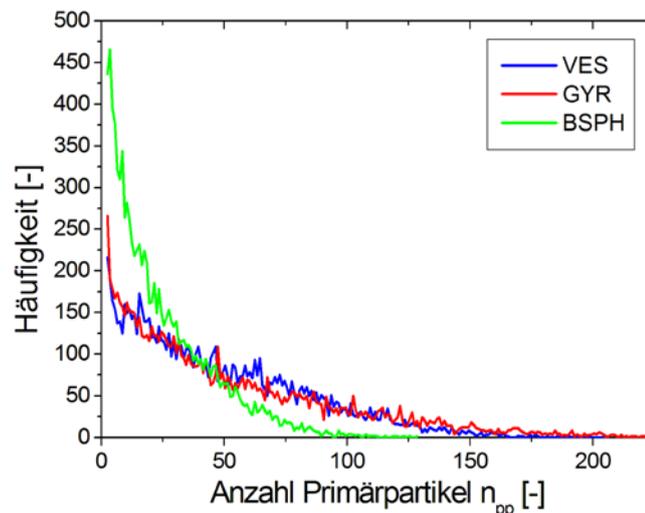


Abbildung 4.21: Anzahl der Primärpartikel im Agglomerat bei Verwendung unterschiedlicher Äquivalentdurchmesser ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit.

Aus Abbildung 4.20 geht hervor, dass die Agglomeratporosität für die volumenäquivalente Kugel am niedrigsten und für die umhüllende Kugel am höchsten ist. Dieser Zusammenhang zwischen Agglomeratporosität und verwendete

tem Äquivalentdurchmesser geht aus Abbildung 4.22 nur teilweise hervor. Wie vermutet ist die Porosität von Agglomeraten, die als Kugel vom Trägheitsdurchmesser (GYR) behandelt werden, größer als die der volumenäquivalenten Kugel (VES). Obwohl die Porosität der umhüllenden Kugel (BSPH) noch höher als die des Trägheitsdurchmessers (GYR) sein sollte, ist diese in Abbildung 4.22 gerade mal so hoch, wie die der volumenäquivalenten Kugel.

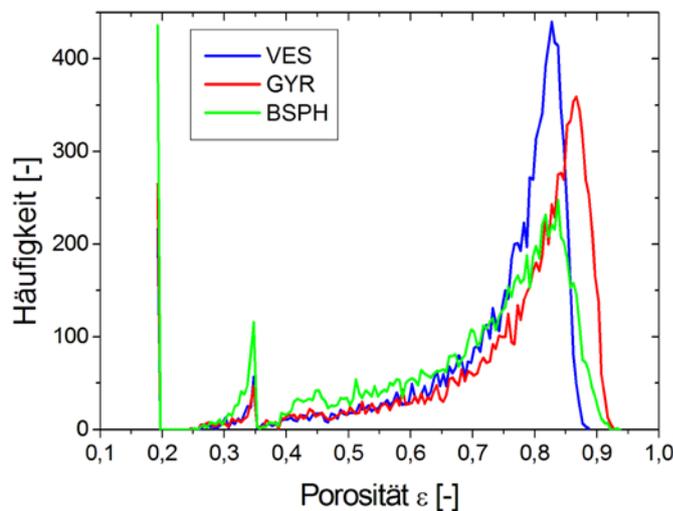


Abbildung 4.22: Verteilung der Agglomeratporositäten bei Verwendung unterschiedlicher Äquivalentdurchmesser ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit.

Dies lässt sich aus der niedrigeren Anzahl an agglomeratbildenden Primärpartikeln erklären. Bei Agglomeraten von trockenen Partikeln, bei denen die einzelnen Primärpartikel nicht, oder nur sehr wenig ineinander eindringen können, hängt die Porosität auch stark von der Anzahl der Primärpartikel ab. Abbildung 4.23 zeigt, dass die Porosität von Agglomeraten die aus trockenen monodispersen Partikeln aufgebaut sind, mit der Zahl der Primärpartikel im Agglomerat ansteigt. Gegenüber dem Einfluss der Agglomeratstruktur, also kugelig kompakt oder kettig, auf die resultierende Porosität ist der Einfluss der Primärpartikelzahl allerdings weniger stark. Aus der Steigung der Graphen in Abbildung 4.23 ist der Einfluss der Agglomeratstruktur zu erkennen. Je flacher die Kurve ist, desto größer ist der Einfluss der Morphologie der Agglomerate auf die Porosität. Bei sehr steilen Kurven hängt die Porosität im wesentlichen von der Zahl der Primärpartikel im Agglomerat ab. Bis etwa 25 Primärpartikel steigt die Kurve für alle Äquivalentdurchmesser sehr stark an und nähert sich dann asymptotisch einem Grenzwert. Für die VES-Agglomerate liegt der Grenzwert niedriger als für GYR- und BSPH-Agglomeraten. Somit ist die Vermutung, dass die BSPH-Agglomerate aufgrund ihrer Struktur die höchste Porosität aufweisen bestätigt worden.

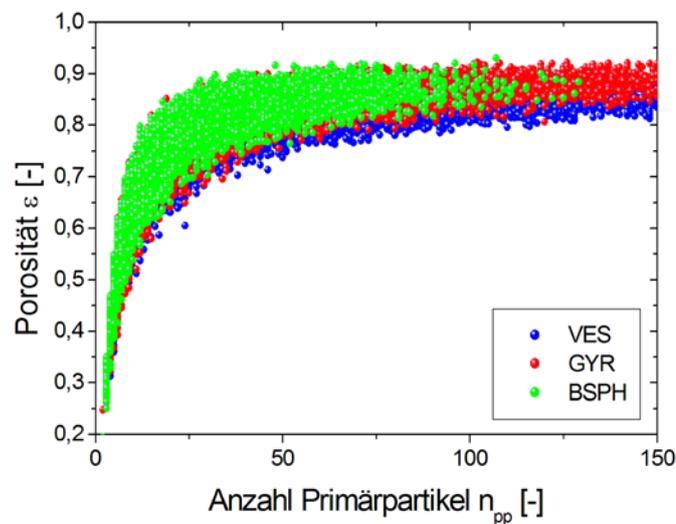


Abbildung 4.23: Abhängigkeit der Agglomeratporosität von der Anzahl der Primärpartikel im Agglomerat für verschiedene Äquivalentdurchmesser nach 5s Simulationszeit.

Die Struktur von Agglomeraten hat einen Einfluss auf deren Trägheitsdurchmesser. Da der Trägheitsdurchmesser die Verteilung der Masse innerhalb eines Agglomerats wider spiegelt (vgl. Gl. (3-8)), zeigen äußerst kompakte Agglomerate (VES) geringere Werte als aus vielen kettigen Armen bestehende Agglomerate (BSPH). Abbildung 4.24 zeigt, dass Agglomerate, die als umhüllende Kugel betrachtet werden, wesentlich größere Trägheitsradien aufweisen als die durch den Trägheitsdurchmesser (GYR) oder den Durchmesser der volumenäquivalenten Kugel (VES) betrachtet werden. Agglomerate, die durch den Durchmesser der umhüllenden Kugel dargestellt werden, beinhalten einen hohen Leerraumanteil. Dies hat zum einen Einfluss auf die effektive Kollisionsrate und zum anderen auf die Agglomeratstruktur. Es wurde bereits gezeigt (Abbildung 4.19), dass der Anteil der verpassten Kollisionen („missed“) für BSPH-Agglomerate sehr hoch ist. Agglomerationen von Partikeln finden sehr häufig an den äußeren Armen dieser Agglomerate statt, so dass die Struktur zunehmend kettiger (oder sternförmiger) wird. Dies zeigt sich deutlich am Trägheitsradius in Abbildung 4.24, der für den Äquivalentdurchmesser der umhüllenden Kugel (BSPH) am größten ist.

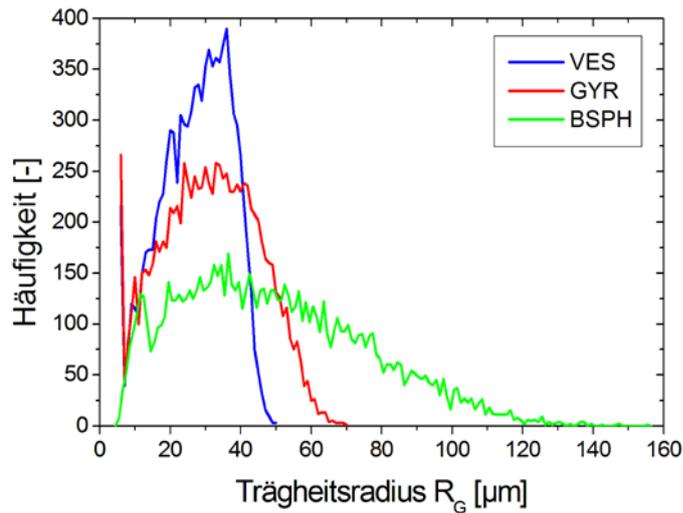


Abbildung 4.24: Verteilung der Trägheitsradien der gebildeten Agglomerate bei Verwendung unterschiedlicher Äquivalentdurchmesser ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit.

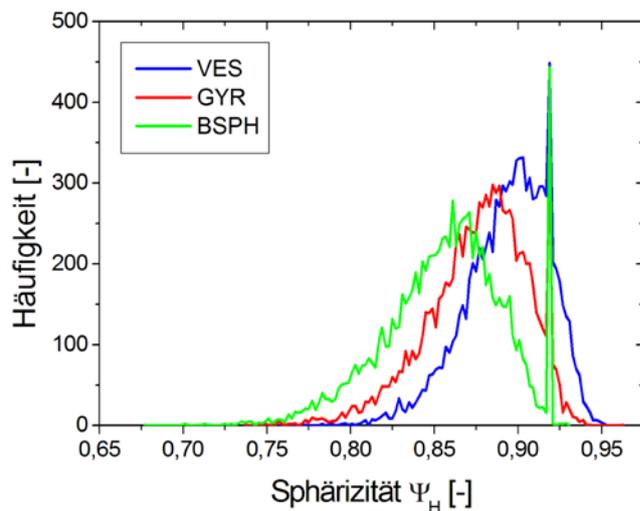


Abbildung 4.25: Verteilung der Agglomeratsphärizität berechnet mit der konvexen Hülle bei Verwendung unterschiedlicher Äquivalentdurchmesser ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit.

Auch an weiteren Strukturparametern zeigt sich, dass VES-Agglomerate von kompakterem Aufbau sind, als GYR- und BSPH-Agglomerate. Die Sphärizität gibt die Abweichung eines Partikels von der Kugelform wieder. Sie ist 1 für eine Kugel und um so kleiner, je länglicher ein Partikel ist. Wird die Sphärizität Ψ_H anhand der konvexen Hülle berechnet, die jedes Agglomerat umgibt, werden die Agglomerate als Vollkörper ohne Porosität betrachtet. Somit wird die äußere Form der Partikel wiedergegeben. Für VES-Agglomerate ist das Maximum der Verteilung der Sphärizität Ψ_H bei etwa 0,91 am höchsten und das von BSPH-Agglomeraten mit 0,86 am niedrigsten (Abbildung 4.25). Dies lässt wiederum auf die sehr kompakte Form von VES- und die eher kettige Struktur von BSPH-Agglomeraten schließen. Die GYR-Agglomerate liegen

mit einer Sphärizität Ψ_H von etwa 0,88 zwischen den VES- und BSPH-Agglomeraten.

Ein weiterer Parameter zur Charakterisierung von komplexen Strukturen stellt die fraktale Dimension D_f dar. Für sehr kompakte kugelige Strukturen ergeben sich Werte für die fraktale Dimension, die zwischen reinen Flächen ($D_f = 2$) und Kugeln ($D_f = 3$) liegen. Je kettiger ein Agglomerat wird, desto niedrigere Werte ergeben sich für dessen fraktale Dimension. In der Literatur (Brasil *et al.* 2001, Bushell *et al.* 2002, Schmid *et al.* 2006, Shen *et al.* 2008) finden sich typische Werte für die fraktale Dimension von sehr kettigen Agglomeraten von $D_f = 1,7$ und für kompakt sphärische Agglomerate von $D_f = 2,4$. In den hier untersuchten Simulationen ergeben sich für die VES-Agglomerate eine fraktale Dimension von $D_f = 2,2$, für GYR-Agglomerate von $D_f = 2,1$ und für BSPH-Agglomerate von $D_f = 2,0$ (Abbildung 4.26). Die Werte zeigen, dass die VES-Agglomerate kompakter als GYR- und BSPH-Agglomerate sind. Dies konnte auch in den zuvor erläuterten Strukturparametern (Abbildung 4.20 bis Abbildung 4.25) gezeigt werden.

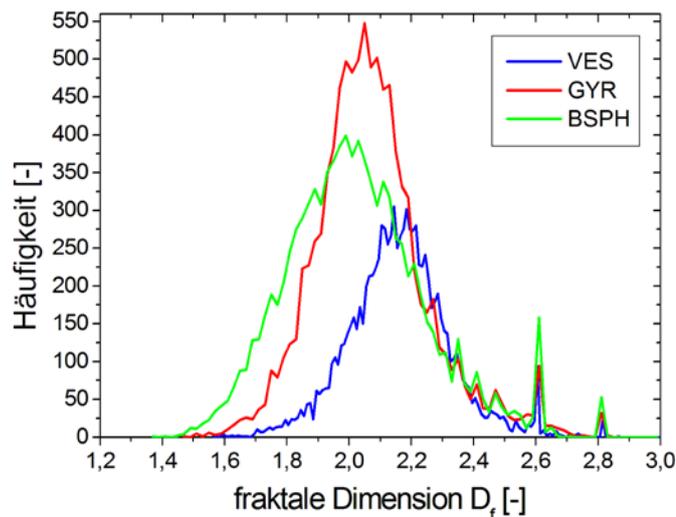


Abbildung 4.26: Verteilung der fraktalen Dimension D_f der gebildeten Agglomerate bei Verwendung unterschiedlicher Äquivalentdurchmesser ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit.

Pulver, die z.B. in der Lebensmittelindustrie wieder gelöst werden sollen, sollten eine hohe benetzbare Oberfläche aufweisen, um hohe Lösungsgeschwindigkeiten zu erreichen. Bei trockenen Partikeln, die bei einer Kollision nicht ineinander eindringen und die aufgrund von van-der-Waals-Kräften im Wesentlichen im Punktkontakt miteinander verbunden sind, hängt die freie Oberfläche hauptsächlich von der Zahl der Primärpartikel im Agglomerat ab. Die hier untersuchten Agglomerate bestehen für die VES- und GYR-Agglomerate etwa aus gleich vielen Primärpartikeln. Die Zahl der Partikel, die BSPH-Agglomerate bilden, ist dagegen wesentlich geringer, so dass die Verteilung der

freien Agglomeratoberflächen ein Maximum bei niedrigeren Werten als der VES- und GYR-Agglomerate aufweist. Abbildung 4.27 bestätigt diese Überlegung. Aussagen über die Agglomeratstrukturen lassen sich hier für die verschiedenen Agglomerate jedoch anhand der freien Oberflächen nicht treffen. Dafür können die zuvor beschriebenen Strukturparameter Porosität, Trägheitsradius, Sphärizität und fraktale Dimension ergänzend verwendet werden.

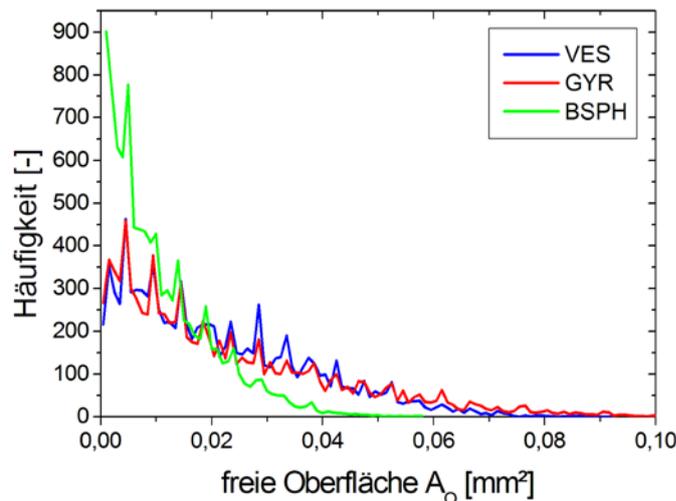


Abbildung 4.27: Verteilung der freien Oberfläche der gebildeten Agglomerate bei Verwendung unterschiedlicher Äquivalentdurchmesser ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit.

Wenn bei der Simulation von Partikel-Partikel-Kollisionen die in Kap. 2.2.3 eingeführte Auftreffwahrscheinlichkeit η_{ppc} berücksichtigt wird, ist mit deutlich niedrigeren Kollisionsraten zu rechnen. Besonders bei stark unterschiedlichen Partikeldurchmessern wirkt sich die Auftreffwahrscheinlichkeit (Gl. (2-64)) auf die Kollisionen aus. Mit fortschreitender Agglomeration ist folglich mit einem wachsenden Einfluss der Auftreffwahrscheinlichkeit zu rechnen. In den vorangegangenen Simulationen wurde gezeigt, dass die Kollisionsrate für ein BSPH-Agglomerat am höchsten ist, da es sich dabei um den größten Äquivalentdurchmesser handelt. Auf diese Partikel sollte sich die Auftreffwahrscheinlichkeit den vorangegangenen Überlegungen zu Folge am stärksten auswirken.

Tabelle 4-5: Kollisionsanzahl mit Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit.

	VES	GYR	BSPH
Missed	153088	346787	785130
Kollision	1182466	1041601	751483
Agglomeration	122115	96626	34158

Aus Abbildung 4.28 und Tabelle 4-5 geht hervor, dass sich die Kollisionsraten für die verschiedenen Äquivalentdurchmesser angleichen. Die Gesamtzahl der durch das stochastische Kollisionsmodell berechnete Kollisionen sinkt auf ca.

11% gegenüber dem Fall BSPH-Agglomerate ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit. Die Rate der tatsächlich durchgeführten Kollisionen wird durch die bereits erläuterten Struktureffekte weiter reduziert. Als Folge bestehen die erzeugten Agglomerate für alle Äquivalentdurchmesser aus wesentlich weniger Primärpartikeln gegenüber dem Fall ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit, wie Abbildung 4.29 zeigt. Die Auswirkung der Auftreffwahrscheinlichkeit und der Struktureffekte ist für die BSPH Agglomerate am größten, so dass die Anzahl der Primärpartikel hier am niedrigsten ist.

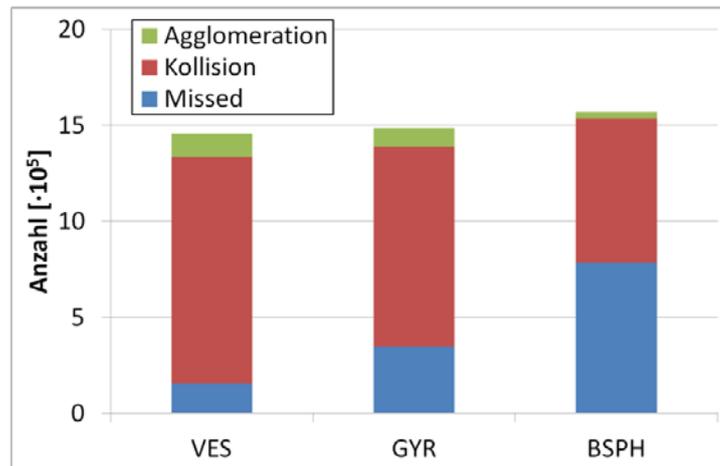


Abbildung 4.28: Kollisionszahlen trockener Partikel nach 5s Simulationszeit charakterisiert durch unterschiedliche Äquivalentdurchmesser mit Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit.

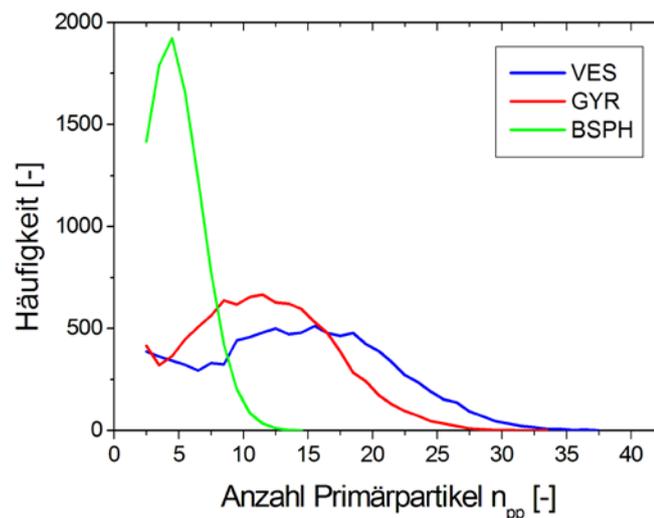


Abbildung 4.29: Anzahl der Primärpartikel im Agglomerat bei Verwendung unterschiedlicher Äquivalentdurchmesser mit Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit.

Abbildung 4.30 zeigt typische Agglomerate, die in den Simulationen erzeugt wurden. Strukturelle Unterschiede zwischen den eher kompakten VES-Agglomeraten und den eher kettigen BSPH-Agglomeraten sind zwar noch zu erken-

nen, jedoch aufgrund der wesentlich niedrigeren Anzahl Primärpartikel nicht mehr so deutlich. Die niedrige Anzahl an Primärpartikeln, aus denen die Agglomerate aufgebaut sind, haben auch Auswirkungen auf die berechneten Strukturparameter. Das Maximum in der Verteilung der Agglomeratporositäten sinkt von Werten über $\varepsilon = 0,8$ (Abbildung 4.22) auf etwa $\varepsilon = 0,7$ für die VES- und GYR- und sogar auf nur $\varepsilon = 0,5$ für die BSPH-Agglomerate (Abbildung 4.31). Der sehr ausgeprägte Ausschlag bei knapp $\varepsilon = 0,2$ für alle drei Äquivalentdurchmesser steht für Agglomerate, die aus lediglich zwei Primärpartikeln aufgebaut werden. Auf diesen Zusammenhang wird in Kapitel 4.4.2 noch detaillierter eingegangen.

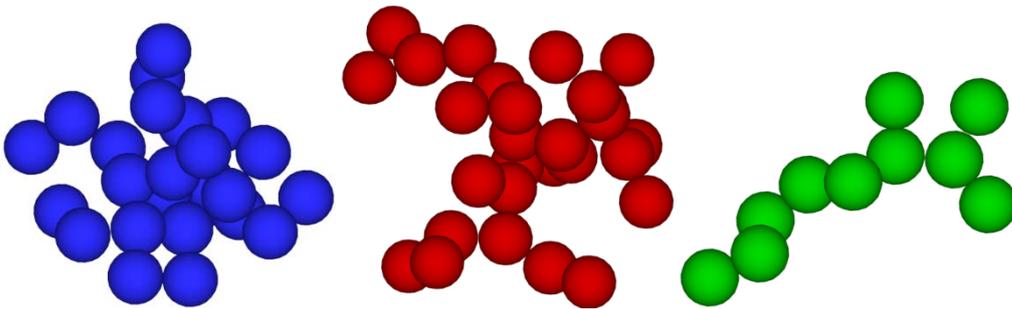


Abbildung 4.30: Agglomerate aus den Simulationen mit Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit bei Verwendung unterschiedlicher Äquivalentdurchmesser. Blau: VES ($n_{pp} = 26$; $\varepsilon = 0,70$; $R_G = 21,5 \mu\text{m}$; $D_f = 2,5$). Rot: GYR ($n_{pp} = 28$; $\varepsilon = 0,76$; $R_G = 25,8 \mu\text{m}$; $D_f = 2,1$). Grün: BSPH ($n_{pp} = 10$; $\varepsilon = 0,67$; $R_G = 24,2 \mu\text{m}$; $D_f = 1,8$).

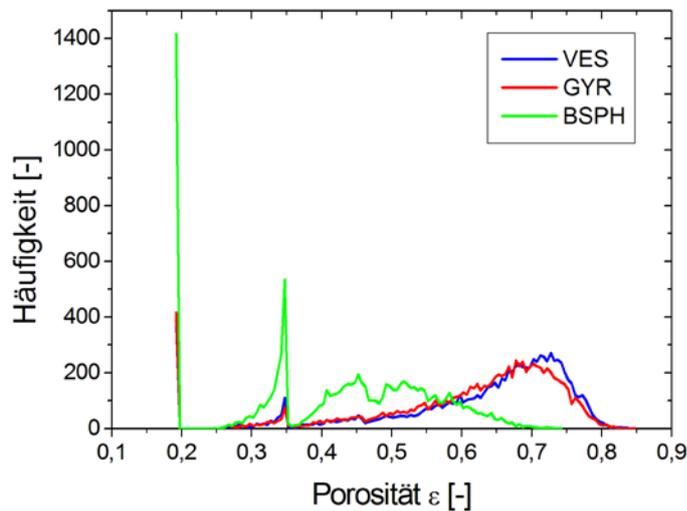


Abbildung 4.31: Verteilung der Agglomeratporositäten bei Verwendung unterschiedlicher Äquivalentdurchmesser mit Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit.

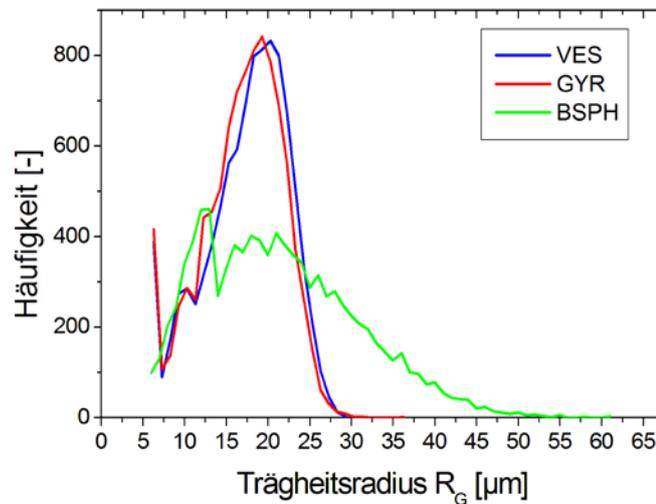


Abbildung 4.32: Verteilung der Trägheitsradien der gebildeten Agglomerate bei Verwendung unterschiedlicher Äquivalentdurchmesser mit Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit.

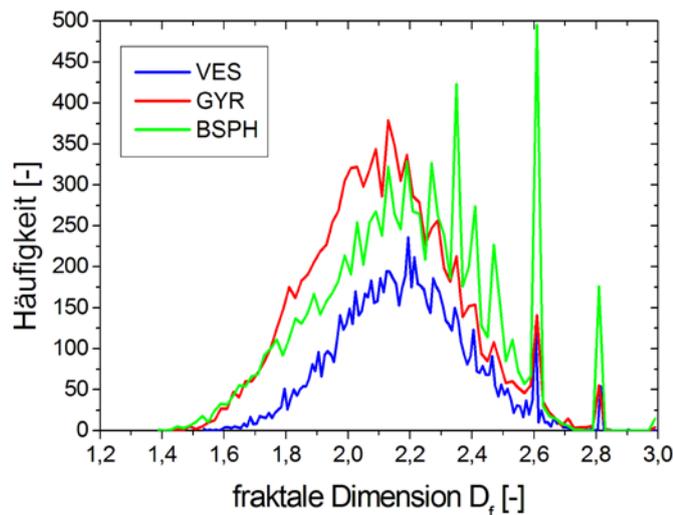


Abbildung 4.33: Verteilung der fraktalen Dimension D_f der gebildeten Agglomerate bei Verwendung unterschiedlicher Äquivalentdurchmesser mit Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit.

Aufgrund der etwas höheren Primärpartikelanzahl der VES-Agglomerate liegt das Maximum der Porosität ε leicht höher als das der GYR-Agglomerate. Die Simulationen ohne Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit zeigen jedoch, dass die GYR-Agglomerate aufgrund ihrer Struktur eine höhere Porosität besitzen als VES-Agglomerate. Auch andere Strukturparameter wie der Trägheitsradius R_G (Abbildung 4.32) zeigen die Unterschiede zwischen den Agglomeraten, die durch verschiedene Äquivalentdurchmesser betrachtet werden, kaum noch. Bei kleinen Agglomeraten, die nur aus wenigen Primärpartikeln bestehen, unterscheiden sich die berechneten Strukturparameter kaum, so dass

nur bei relativ großen Agglomeraten mit eindeutigen Unterscheidungsmerkmalen zu rechnen ist.

4.4.2 Polydisperses Partikelsystem

In den vorangegangenen Simulationen wurde das neuartige Strukturmodell an einem monodispersen Partikelsystem getestet. Da Partikelsysteme in technischen Anlagen immer eine gewisse Größenverteilung aufweisen, wird das Modell in diesem Abschnitt an einer Partikelgrößenverteilung untersucht. Das betrachtete System bestand aus trockenen Partikeln der Dichte 1000 kg/m^3 und Partikeldurchmessern, die im Intervall zwischen $2 \mu\text{m}$ und $20 \mu\text{m}$ logarithmisch^{xxv} verteilt waren. In den Simulationen wurde die Auftreffwahrscheinlichkeit berücksichtigt und entstandene Agglomerate durch den Trägheitsdurchmesser (GYR) charakterisiert. Das Anwachsen der Agglomerate wurde anhand verschiedener Simulationen untersucht, wobei jede Berechnung für eine bestimmte Zeit in einem konstanten Strömungsfeld durchgeführt wurde. Die Agglomerate sind in Abständen von 1 s bis zu einer Gesamtsimulationszeit von 5 s analysiert worden. Während einer Simulation entstanden aufgrund Partikel-Partikel-Kollisionen Agglomerate, die die anfängliche Partikelgrößenverteilung mit der Zeit veränderten. Je länger sich die Partikel in der Berechnungsdomäne fortbewegten, desto größere Agglomerate entstanden und desto breiter wurde die Partikelgrößenverteilung. Abbildung 4.34 zeigt die Veränderung der initialen Partikelgrößenverteilung in Abhängigkeit von der Simulationszeit. Die relativ enge Verteilung der Partikelgrößen zu Beginn einer Simulation (grau gestrichelt) wurde über die Zeit immer breiter. Die Zahl der Primärpartikel, die ein Agglomerat aufbauen, nahm mit der Zeit immer weiter zu, so dass sich nicht nur die Agglomeratgröße sondern auch die Agglomerateigenschaften änderten.

^{xxv} Meridianwert $12 \mu\text{m}$.

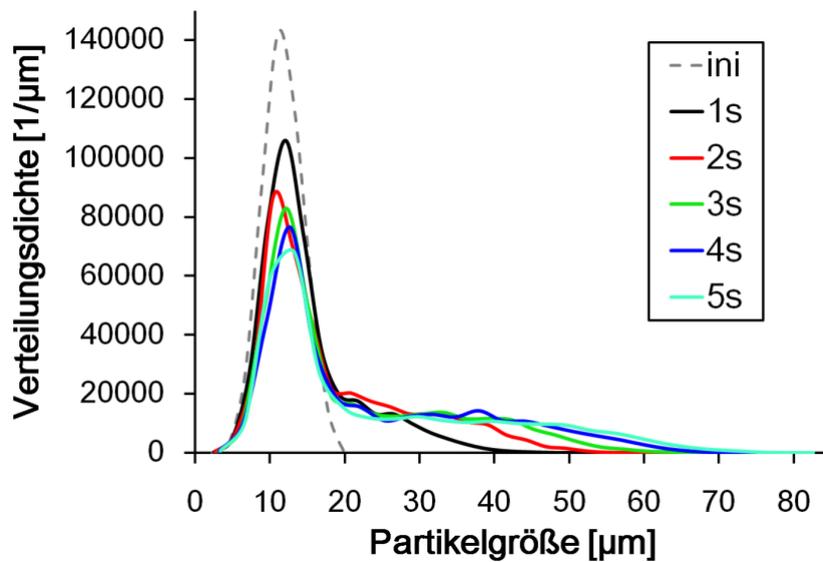


Abbildung 4.34: Partikelgrößenverteilung in Abhängigkeit der Simulationszeit.

Zu allen Zeitschritten bestanden die Mehrzahl der Agglomerate aus lediglich zwei Primärpartikeln (Abbildung 4.35). Jedoch zeigt sich, dass die Agglomerate nach einer Sekunde Simulationszeit bis zu 15 Primärpartikeln aufwiesen, während nach 5 s bereits bis zu 60 Primärpartikeln beobachtet wurden.

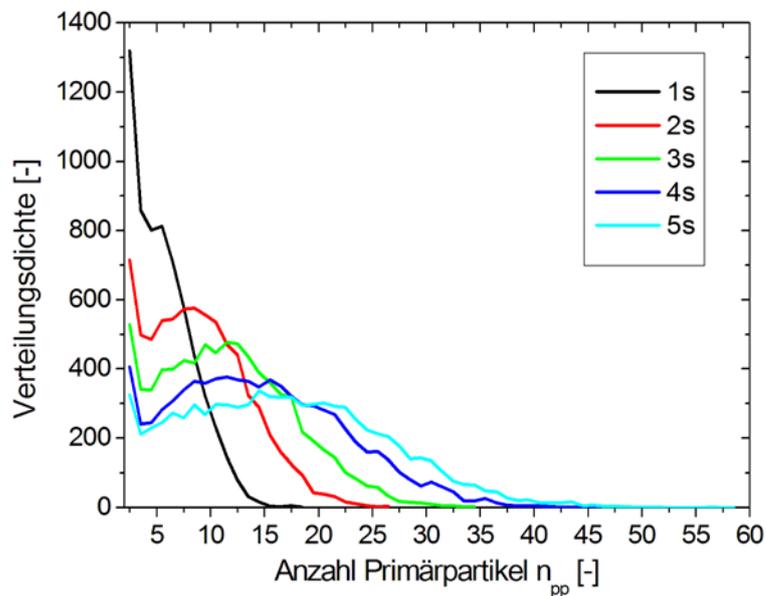


Abbildung 4.35: Änderung der Primärpartikelanzahl, aus denen die Agglomerate aufgebaut sind, mit fortschreitender Simulationszeit.

Mit ansteigender Partikelgröße nimmt nach Gl. (2-63) auch die Kollisionswahrscheinlichkeit zu. Beim Vorhandensein kleinerer Partikel, die entlang einer Grenztrajektorie um ein größeres Kollektorpartikel herumfliegen können, steigt allerdings auch der Einfluss der Auftreffwahrscheinlichkeit Gl. (2-64) an. Abbildung 4.36 zeigt, dass die Kollisionsfrequenz eines Parcels im Laufe der

Zeit aufgrund der zunehmenden Partikelgrößen im System (vgl. Abbildung 4.34) ansteigt. Wird die Agglomeratstruktur bei der Kollisionsbestimmung berücksichtigt, ergibt sich die effektive Kollisionsfrequenz $f_{\text{ppc,eff}}$. Diese nimmt mit fortschreitender Simulationszeit ab. Die entstandenen Agglomerate wachsen mit der Zeit an (Abbildung 4.35), so dass Primärpartikel aufgrund der Agglomeratstruktur nicht zwangsläufig mit einem Partikel innerhalb des Agglomerats, das durch den Trägheitsdurchmesser dargestellt wird, kollidieren muss.

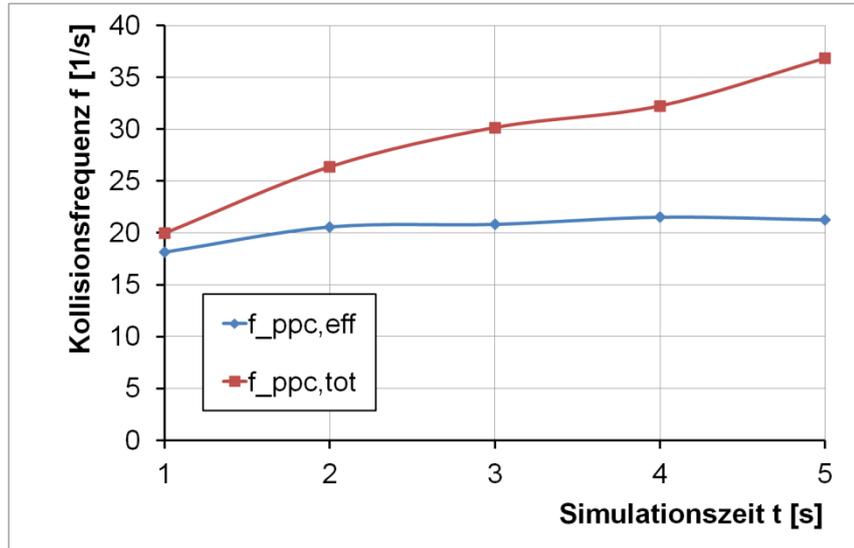


Abbildung 4.36: Kollisionsfrequenzen eines polydispersen Partikelsystems pro Parcel in Abhängigkeit von der Simulationszeit ($f_{\text{ppc,tot}}$ = Frequenz aller berechneten Kollisionen, $f_{\text{ppc,eff}}$ = Frequenz der effektiv ausgeführten Kollisionen).

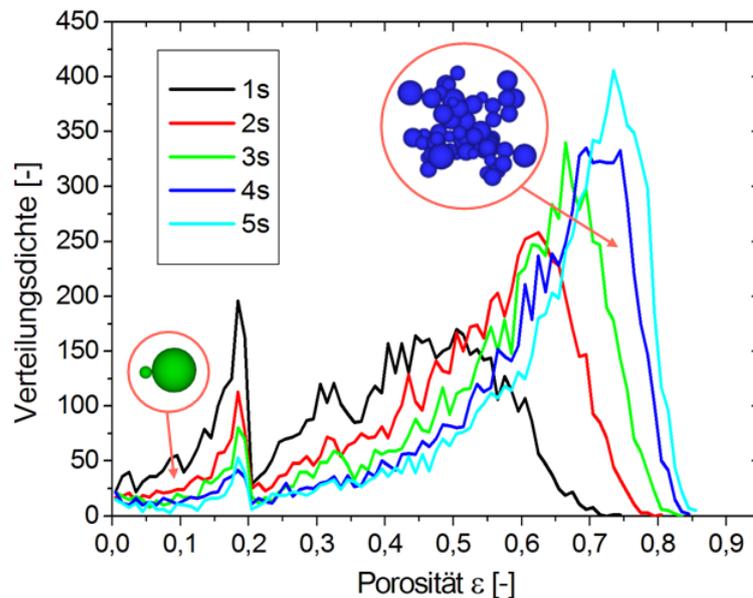


Abbildung 4.37: Verteilung der Agglomeratporositäten nach unterschiedlichen Simulationszeiten.

Die Verschiebung in Richtung größerer Agglomerate macht sich neben den Kollisionsfrequenzen auch in der Porosität der Agglomerate bemerkbar (Abbildung 4.37). Da trockene Partikel nicht ineinander eindringen können, sind die Partikel durch Punktkontakt miteinander verbunden, was eine schnelle Zunahme der Porosität begünstigt. Abbildung 4.37 zeigt zwei Beispielagglomerate aus den Simulationen, die die Porositätszahlen verdeutlichen sollen. Das grüne Agglomerat besteht aus zwei Primärpartikeln, die in ihrer jeweiligen Größe stark voneinander abweichen. Die Porosität wird mit Hilfe der konvexen Hülle, welche das Agglomerat umschließt, berechnet, was in dem gezeigten Beispiel (grünes Agglomerat) zu einem Wert von ca. 10 % führt. Analytisch lässt sich leicht die Porosität zweier gleich großer Partikel, die miteinander in Punktkontakt stehen, zu 18 % bestimmen. Der in Abbildung 4.37 zu erkennende Ausschlag bei etwa 0,2 lässt darauf schließen, dass das System aus vielen Agglomeraten besteht, die aus zwei ungefähr gleich großen Primärpartikeln aufgebaut sind. Diese Überlegung deckt sich auch mit der Verteilung der Primärpartikelanzahl aus Abbildung 4.35. Mit zunehmender Anzahl an Primärpartikeln nimmt nicht nur Größe der Agglomerate, die durch den Trägheitsradius charakterisiert ist zu, sondern auch die Porosität (s. Abbildung 4.37). Dabei hat vor allem die Agglomeratstruktur einen sehr viel größeren Einfluss als die Anzahl der Primärpartikel. Das in Abbildung 4.37 gezeigte Agglomerat (blau), setzt sich aus circa 50 Primärpartikeln zusammen und weist eine Porosität von etwa 0,8 auf. Dieser sehr hohe Wert lässt sich anhand der Morphologie des Agglomerats erklären. Es sind deutlich aus dem Agglomerat herausragende „Arme“ zu erkennen. Zwar ist das Agglomerat in sich als eher sphärisch anzusehen, jedoch bewirken diese Äste eine große Erhöhung der Porosität. Um-

schließt man das abgebildete Agglomerat mit einer konvexen Hülle, besteht ein Großteil dieses eingeschlossenen Volumens aus leerem Raum. Somit ergibt sich ein sehr hoher Wert für die Porosität des Agglomerats von etwa 0,8.

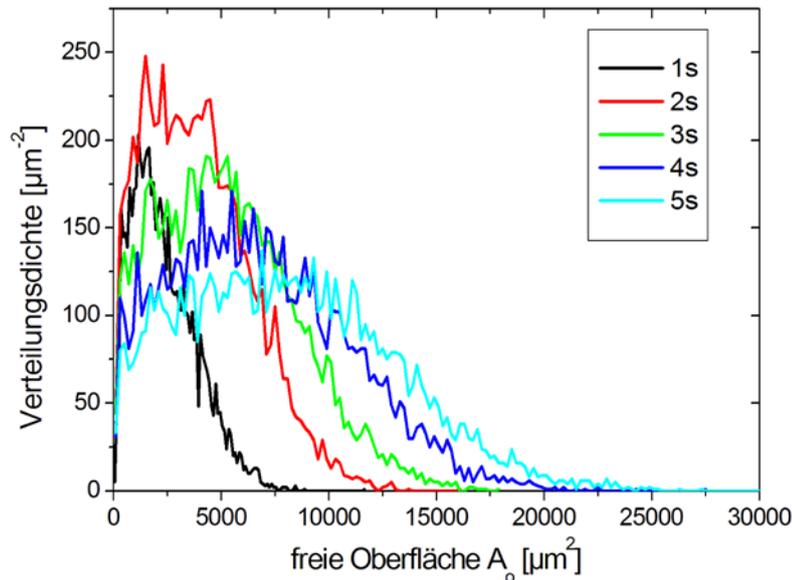


Abbildung 4.38: Freie Agglomeratoberfläche in Abhängigkeit von der Simulationszeit.

Neben der Porosität nimmt auch die freie Oberfläche eines Agglomerats mit steigender Primärpartikelzahl zu (Abbildung 4.38). In Systemen trockener Partikel ist die freie Oberfläche direkt proportional zur Primärpartikelanzahl, da diese miteinander in Punktkontakt stehen und somit nur die Kontaktfläche von der Primärpartikeloberfläche abgezogen werden muss.^{xxvi} Abbildung 4.39 zeigt, dass die freie Oberfläche der Agglomerate proportional zur Anzahl der Primärpartikel ansteigt. Die Datenpunkte der einzelnen Agglomerate liegen wegen des Vorliegens einer Partikelgrößenverteilung nicht exakt auf einer Geraden, da dies nur bei einem monodispersen Partikelsystem möglich ist. Dennoch ist die Proportionalität zwischen Agglomeratoberfläche und Primärpartikelanzahl deutlich zu erkennen.

^{xxvi} Können Partikel aufgrund ihrer niedrigen Viskosität ineinander eindringen, ist die freie Oberfläche des jeweiligen Agglomerats auch von der Penetrationstiefe der einzelnen Primärpartikel abhängig (vgl. Kap. 4.5).

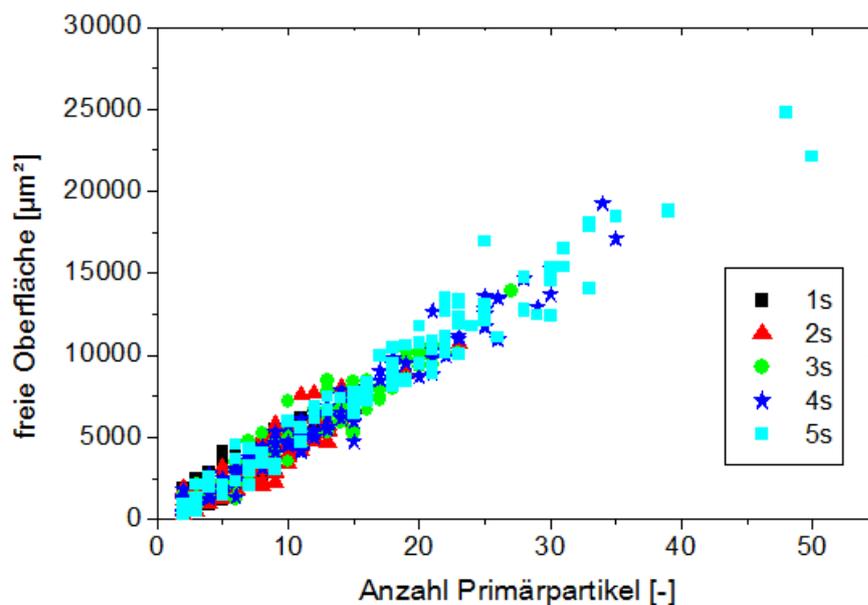


Abbildung 4.39: Abhängigkeit der freien Agglomeratoberfläche von der Anzahl der Primärpartikel für unterschiedliche Simulationszeiten.

Zur Beschreibung der äußeren Form von Partikeln dienen oft Formfaktoren, die das Abweichen von einer idealen Kugelform beschreiben. Häufig wird die Sphärizität nach Wadell (1935) verwendet um eine Kornform zu beschreiben. Sie ist eine Verhältniszahl zweier Oberflächen, die die Oberfläche der volumengleichen Kugel ins Verhältnis setzt zur tatsächlichen Oberfläche des Partikels Gl. (3-6). Für eine Kugel ist die Sphärizität eins, für jede andere Kornform ist sie kleiner als eins. In dieser Arbeit wird die Sphärizität von Agglomeraten auf verschiedene Arten berechnet. Zum Einen wird das Agglomerat durch seine konvexe Hülle beschrieben und dessen Eigenschaften zur Berechnung der Sphärizität herangezogen. Das bedeutet, dass die Oberfläche einer Kugel, die das selbe Volumen besitzt wie die konvexe Hülle, ins Verhältnis gesetzt wird zur Oberfläche eben dieser konvexen Hülle. Somit wird das Agglomerat durch die konvexe Hülle als kompaktes Partikel beschrieben.

Eine weitere Möglichkeit, die Sphärizität von Agglomeraten zu berechnen, ist das Volumen aller agglomeratbildenden Primärpartikel^{xxvii} zu verwenden und damit die Oberfläche der volumengleichen Kugel zu bestimmen. Diese Ober-

^{xxvii} Liegt eine Penetration von viskosen Partikeln ineinander vor, wird das Überlappungsvolumen nur einfach berücksichtigt, d.h. sind zwei Partikel ineinander eingedrungen, wird das Volumen im Überlappungsbereich eines Partikels vernachlässigt. In Realität würde eine Verdrängung von Partikelmaterial stattfinden und das verdrängte Material über die Oberfläche eines Partikels verteilt werden, jedoch kann dieser Vorgang mit dem derzeit vorliegenden Modell nicht abgebildet werden. Das verdrängte Volumen von hochviskosen Partikeln ist allerdings auch sehr gering, da die Partikel nur wenig ineinander penetrieren, so dass der Fehler vernachlässigt gering ist.

fläche wird dann ins Verhältnis zur freien Oberfläche des Agglomerats gesetzt und ergibt somit die Sphärizität des Agglomerats.

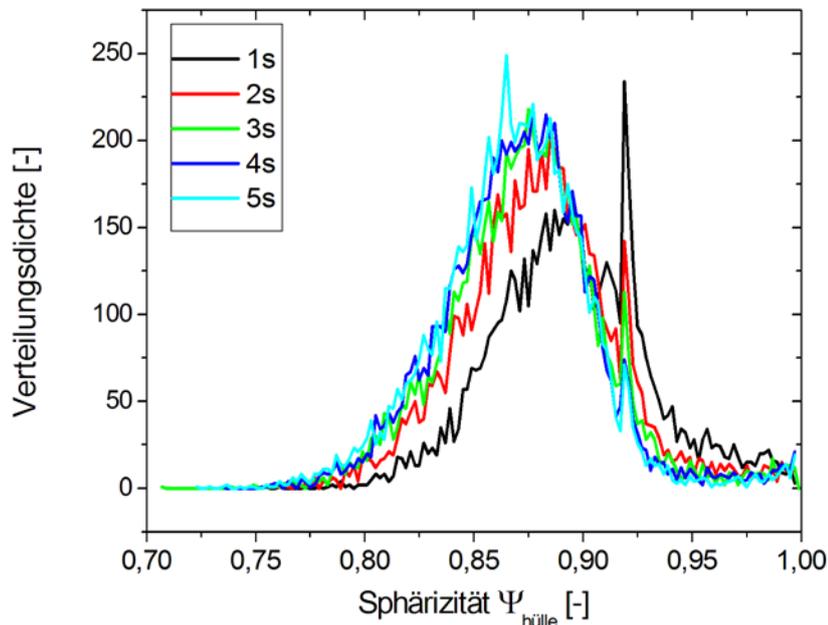


Abbildung 4.40: Agglomeratsphärizität für verschiedene Simulationszeiten berechnet aus dem Volumen sowie der Oberfläche der konvexen Hülle jedes Agglomerats.

Abbildung 4.40 zeigt die Verteilungsdichte der analysierten Agglomeratsphärizitäten für verschiedene Zeitpunkte. Die Sphärizität wurde hierin aus der konvexen Hülle bestimmt. Es sind zwei deutliche Ausschläge in den Graphen zu erkennen. Ein sehr enger Peak liegt bei einer Sphärizität von etwa 0,93 und ein wesentlich breiterer bei etwa 0,87. Das Maximum bei 0,93 findet sich auch in den Simulationen eines monodispersen Partikelsystems wieder (vgl. Kap. 4.4.1) und lässt auf sehr stark sphärische Agglomerate schließen. Ein polydisperses System zeigt eine breitere Verteilung der Sphärizität mit einem Maximum bei etwa 0,87. Dies lässt zunächst darauf schließen, dass die entstandenen Agglomerate immer mehr von der idealen Kugelform abweichen. Tabelle 4-6 zeigt analytisch ermittelte Sphärizitätswerte für verschiedene Körper. Dort ist für einen idealen Zylinder ein Wert von 0,87 angegeben, der in den durchgeführten Simulationen wieder zu finden ist. Nun kann darauf geschlossen werden, dass es sich bei den erzeugten Agglomeraten um eher längliche Partikelformen handelt. Es wurde gezeigt, dass viele Agglomerate aus lediglich zwei Primärpartikeln bestehen (Abbildung 4.35). Die konvexe Hülle um solche Agglomerate ähnelt vor allem bei gleich großen Partikeln in ihrer Form der eines Zylinders. Somit lässt sich der Wert der Sphärizität von 0,87 erklären. Betrachtet man nun die Sphärizitäten eines Acht- sowie eines Zwölfecks stellt sich heraus, dass der Wert kleiner bzw. größer als 0,87 liegt. Daher kann es sich bei den simulierten Agglomeraten ebenso um Körper handeln, die einem Zehneck gleichen. Diese unterschiedliche Interpretationsweise zeigt, dass die Sphärizität

nicht als alleiniger Wert zur Charakterisierung von Agglomeratstrukturen verwendet werden kann. Dennoch ist sie ein wichtiger Wert, um ein Pulver zu beschreiben.

Tabelle 4-6: Sphärizitäten ausgewählter geometrischer Körper (Quelle: Wikipedia vom 10.12.2011).

Geometrie		Sphärizität
Achteck		0,846
Zwölfeck		0,910
Idealer Zylinder		0,874

Während die Verteilungen der Agglomeratsphärizitäten bezogen auf die konvexe Hülle in einem engen Bereich liegen, zeigen sich über die Simulationszeit deutliche Veränderungen in der Lage des Verteilungsmaximums, wenn die Sphärizität anhand der Primärpartikel berechnet wird. Abbildung 4.41 zeigt eine deutliche Verschiebung in Richtung niedrigerer Werte mit ansteigender Simulationszeit. Je länger sich die Partikel im Rechengebiet befinden, desto größere Agglomerate können anwachsen. Die sehr viel niedrigeren Werte im Vergleich zu Abbildung 4.40 lässt vermuten, dass die entstehenden Agglomerate immer länglicher in ihrer Form werden. Wird die Sphärizität mit Hilfe des Volumens aller Primärpartikel sowie deren Oberfläche berechnet, nimmt mit steigender Primärpartikelanzahl die Oberfläche stärker zu als das Volumen. Somit stellt die Sphärizität hier ein Maß für die spezifische Oberfläche der Agglomerate dar. Wird die Sphärizität über der Anzahl der Primärpartikel aufgetragen (Abbildung 4.42) zeigt sich, dass der Wert der Sphärizität mit steigender Partikelzahl sehr stark abnimmt und gegen einen Grenzwert strebt. Eine Aussage über die Morphologie der Agglomerate anhand dieses Strukturparameters zu treffen ist daher nur eingeschränkt möglich.

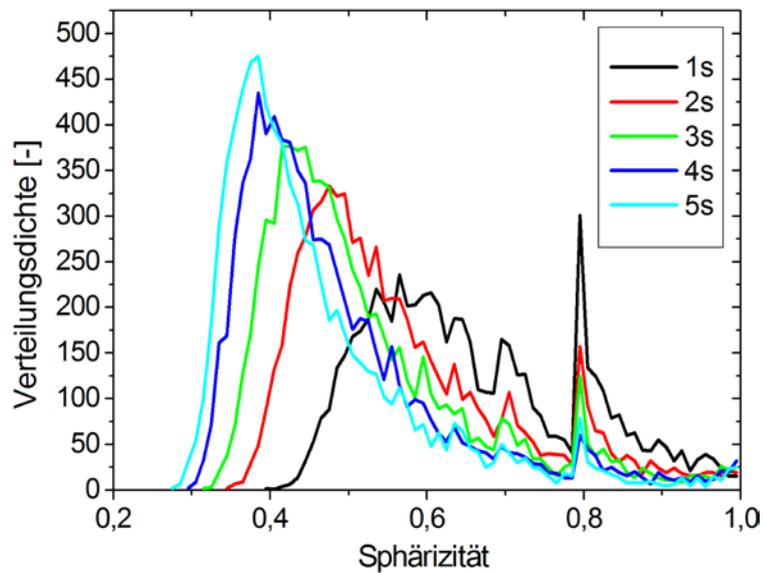


Abbildung 4.41: Agglomeratsphärizität für verschiedene Simulationszeiten berechnet aus dem Volumen sowie der Oberfläche der agglomeratbildenden Primärpartikel.

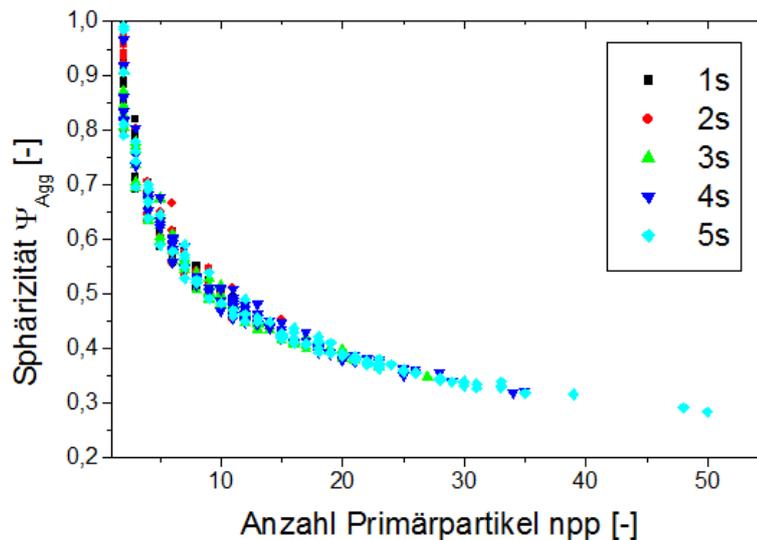


Abbildung 4.42: Abhängigkeit der Sphärizität berechnet aus der Oberfläche und dem Volumen der Primärpartikel von der Anzahl der Primärpartikel.

In Kapitel 3.7 wurde die Berechnung der fraktalen Dimension mit Hilfe der „box counting“-Methode vorgestellt. Buczkowski *et al.* (1998) erwähnen in diesem Zusammenhang, dass das Ergebnis dieser Methode von der Wahl bestimmter Eigenschaften abhängt. Sie weisen darauf hin, dass die Box-Dimension D_f keinen absoluten Wert darstellt, weswegen Parameter wie die Wahl der Anfangskantenlänge ε der Würfel und der Bereich in dem die Kantenlängen der Würfel aufgelöst werden, angegeben werden sollten, um reproduzierbare Ergebnisse zu erzielen. Aus diesem Grund stellt die fraktale Dimension eine schwache Beschreibung der Agglomeratstruktur dar. Viele Autoren (Brasil *et*

al. 2001, Bushell *et al.* 2002, Schmid *et al.* 2006, Shen *et al.* 2008) geben einige typische Werte der fraktalen Dimension für eher kettige ($D_f = 1,7 - 1,9$) und kompakte Agglomerate ($D_f = 2,1 - 2,75$) an. Abbildung 4.43 zeigt die fraktale Dimensionen der im vorgestellten Testfall erzeugten Agglomerate.

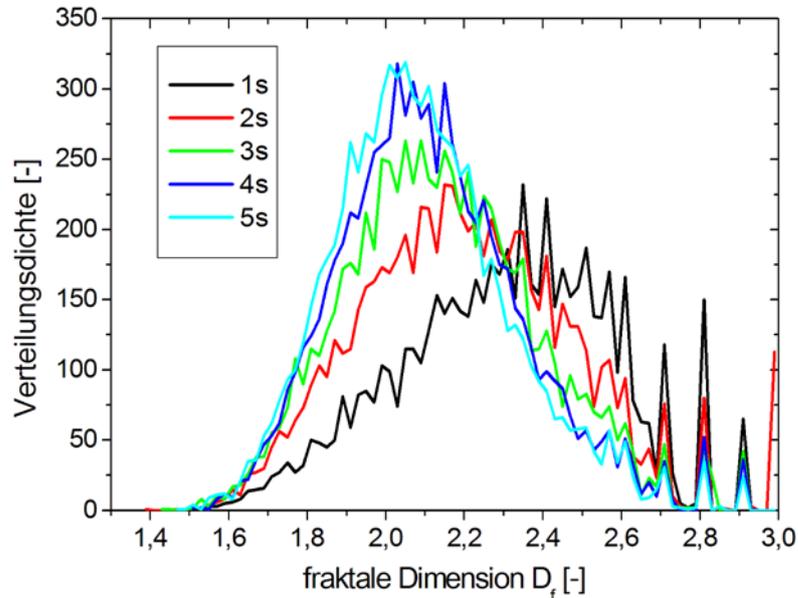


Abbildung 4.43: Verteilung der fraktalen Dimension für Agglomerate nach verschiedenen Agglomerationszeiten.

Es fällt auf, dass sich mit fortschreitender Simulationszeit eine Verschiebung des Maximums sowie eine Abnahme der Breite der Verteilung ergibt. Dies ist der Schwierigkeit geschuldet, die fraktale Dimension kleiner und aus wenigen Primärpartikeln bestehender Agglomerate mit der „box-counting“-Methode zu berechnen. Um die Box-Dimension zu bestimmen, wird die Steigung von $\log(N)-\log(1/\varepsilon)$ mit Hilfe einer linearen Regression aller Punkte berechnet. Die Genauigkeit der Regression steigt mit der Anzahl der Stützstellen und abnehmender Varianz an. Jedoch ist die Zahl der Verfeinerungsschritte der Auflösung bei der Analyse von Agglomeraten, die nur aus wenigen Primärpartikeln aufgebaut sind, gering. Dementsprechend ist das $\log(N)-\log(1/\varepsilon)$ -Diagramm aus einer geringen Anzahl an Stützstellen aufgebaut und die Genauigkeit der Berechnung der Steigung ist niedrig. Agglomerate, die aus weniger als ein paar Hundert Primärpartikeln aufgebaut sind, sind im eigentlichen Sinn keine Fraktale, so dass die fraktale Theorie strenggenommen nicht gilt. Daraus ergeben sich Fehler bei der Bestimmung der fraktalen Dimension von quasi-fraktalen Agglomeraten. Trotzdem zeigt sich in Abbildung 4.44, dass mit zunehmender Zahl von Primärpartikeln die fraktale Dimension gegen einen Wert von etwa 2,1 läuft, was der Angabe in der Literatur für kompakt sphärische Agglomerate entspricht.

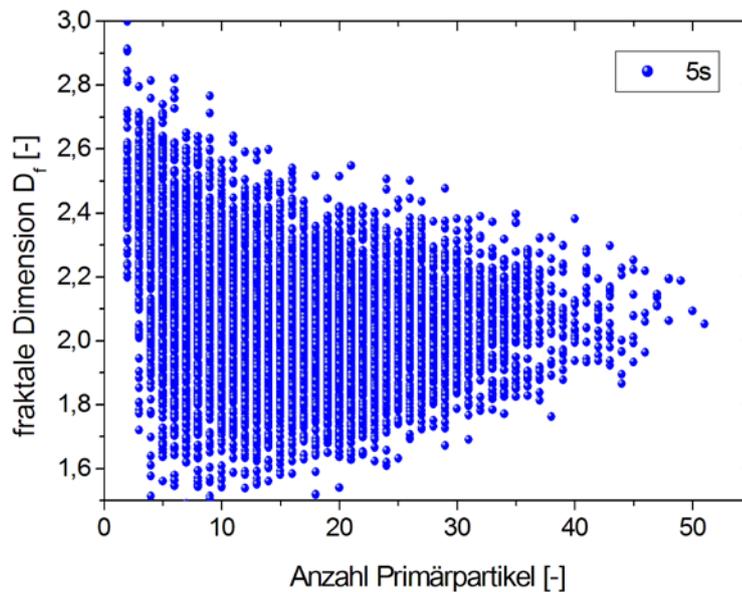


Abbildung 4.44: Abhängigkeit der berechneten fraktalen Dimension D_f von der Anzahl der Primärpartikel n_{pp} .

4.5 Modellierung von Agglomeratstrukturen viskoser Partikel in einer homogenen isotropen Turbulenz

In den vorangegangenen Kapiteln wurde gezeigt, dass das erweiterte Agglomerationsmodell gute Ergebnisse bei der Simulation von trockenen Partikelsystemen liefert. In einem nächsten Schritt soll nun die Anwendbarkeit auf Partikel unterschiedlicher Viskosität, wie sie in Sprühtrocknern auftreten, geprüft werden. Dazu wurden in den aus den vorangegangenen Abschnitten bekannten Würfeln, Partikel mit Viskositäten zwischen 0,1 und 10 Pa·s eingeführt. Auf diese Weise wurde der Sprühtrocknungsprozess vereinfacht dargestellt und verschiedene Trocknungszustände der Partikel abgebildet. Die hier vorgestellten Simulationen wurden in einer homogenen isotropen Turbulenz, mit den in Tabelle 4-7 gezeigten Eigenschaften, durchgeführt. Es wurden Partikel mit einer monodispersen Größenverteilung von 12 μm und einer Dichte von 1000 kg/m^3 mit der lokalen Fluidgeschwindigkeit homogen verteilt ins Rechenggebiet injiziert. Im ersten Simulationsdurchlauf wurde ohne Partikelkollisionen gerechnet, um die dafür notwendigen Partikeleigenschaften in jeder Zelle zu berechnen. Während des zweiten Durchlaufs konnten die Partikel miteinander kollidieren und agglomerieren. Am Ende der Simulation, nach 1 s Rechendauer, wurden die entstanden Agglomerate hinsichtlich ihrer Struktur ausgewertet.

Tabelle 4-7: Eigenschaften der homogenen isotropen Turbulenz.

	Wert	Einheit
turbulente kinetische Energie k	0,887	m^2/s^2
Dissipationsrate ε	6,17	m^2/s^3
integrales turbulentes Zeitmaß T_L^{xxviii}	43	ms

Als Äquivalentdurchmesser der Agglomerate wurde hier der Trägheitsradius gewählt und die Auftreffwahrscheinlichkeit (vgl. Gl. (2-65)) berücksichtigt. Abbildung 4.45 zeigt typische Agglomerate unterschiedlicher Viskosität, die in den Simulationen erzeugt wurden.

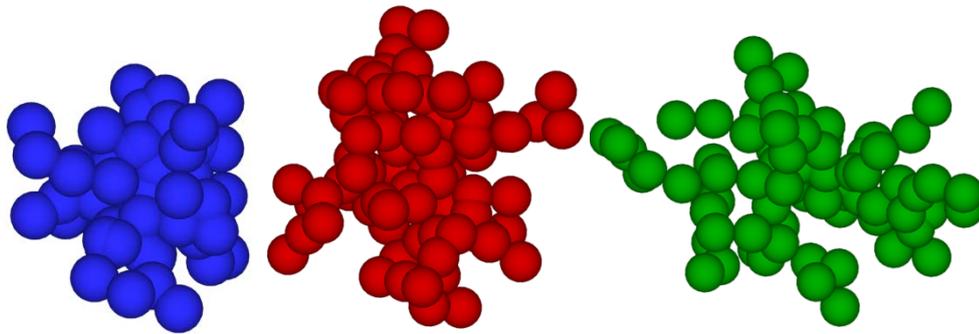


Abbildung 4.45: In einer homogenen isotropen Turbulenz erzeugte Agglomerate unterschiedlicher Viskosität (blau: 0,1 Pa·s; rot: 1,0 Pa·s; grün: 10,0 Pa·s).

Es ist deutlich der Einfluss der Partikelviskosität auf die Agglomeratstruktur zu erkennen. Kollisionen niedrig viskoser Partikel führen zu hohen Penetrationstiefen, die bis in einer vollständigen Koaleszenz der Kollisionspartner resultieren können^{xxix}. Dadurch entstehen sehr kompakte Agglomerate, da die Primärpartikel sehr weit ineinander eingedrungen sind und ihre Partikelzentren sehr nah bei einander liegen. Abbildung 4.45 zeigt in blau ein Beispiel für ein Agglomerat niedrig viskoser Partikel das von wesentlich kompakterer Struktur ist, als Agglomerate bei höheren Viskositäten (Abbildung 4.45: rotes und grünes Agglomerat). Abbildung 4.46 zeigt die Verteilung der berechneten Penetrationstiefen für die verschiedenen Partikelviskositäten. Während Partikel mit einer hohen Viskosität von 5,0 Pa·s und 10,0 Pa·s eine sehr enge Verteilung um ein Maximum von 5 % relativer Eindringtiefe zeigen, steigt die relative Penetrationstiefe von Partikeln mit niedrigen Viskositäten deutlich an, so dass diese eine wesentlich breitere Verteilung aufweisen. Die relative Penetrationstiefe setzt die Eindringtiefe des höher viskosen Partikels in das niedriger viskose

^{xxviii} Das integrale turbulente Zeitmaß wird nach Sommerfeld (1996) berechnet zu: $T_L = 0.3 \frac{k}{\varepsilon}$.

^{xxix} Koaleszenz wird dann angenommen, wenn das eindringende Partikel zu 50% seines Durchmessers in das andere Partikel eingedrungen ist.

Partikel ins Verhältnis zum Durchmesser des eindringenden höher viskosen Partikels. Im vorliegenden Fall wird die Partikelviskosität aus einer sehr engen Verteilung um den angegebenen Wert berechnet, so dass minimale Unterschiede zwischen den Partikelviskositäten möglich sind.

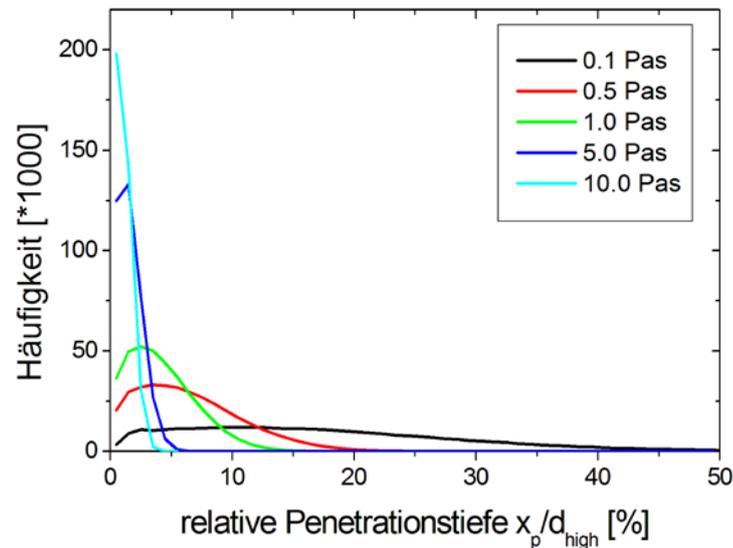


Abbildung 4.46: Relative Penetrationstiefe in Abhängigkeit der Partikelviskosität.

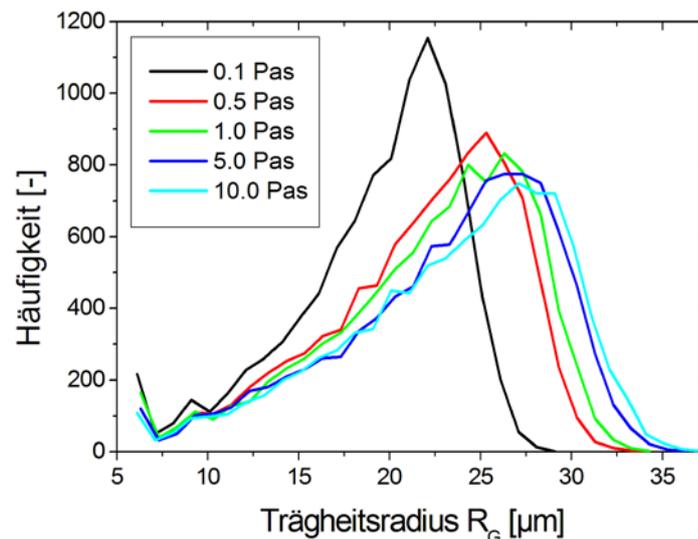


Abbildung 4.47: Trägheitsradius numerisch erzeugter Agglomerate in Abhängigkeit der Partikelviskosität.

Abbildung 4.47 zeigt die Verteilung des Trägheitsradius der erzeugten Agglomerate in Abhängigkeit der Partikelviskosität.

Es ist deutlich zu erkennen, dass Partikel mit einer niedrigen Viskosität von 0,1 Pa·s aufgrund der hohen Penetrationstiefen einen sehr viel kleineren Äquivalentdurchmesser besitzen, als Agglomerate höherer Viskosität. Die Verteilung des Trägheitsradius gleicht sich mit steigender Viskosität immer weiter an. Bereits aus Abbildung 4.46 wird ersichtlich, dass sich die Penetrationstie-

fen bei Partikelviskositäten ab 5,0 Pa·s kaum noch unterscheiden. Somit ist mit relativ ähnlich strukturierten Agglomeraten hoher Partikelviskositäten zu rechnen.

In den vorangegangenen Abschnitten wurde gezeigt, dass das Kollisionsverhalten der Agglomerate vom Äquivalentdurchmesser abhängt (s. Gl. (2-64) und (2-65)). Große Partikel kollidieren demnach sehr viel häufiger als kleine Partikel. Die Anzahl der agglomeratbildenden Primärpartikel hängt folglich von der Zahl der Kollisionen und damit ebenso vom Äquivalentdurchmesser der Agglomerate ab. Abbildung 4.48 zeigt die Verteilung der Primärpartikelanzahl innerhalb eines Agglomerats in Abhängigkeit der Partikelviskosität, wobei die Anzahl der Primärpartikel mit der Viskosität steigt. Die Unterschiede zwischen 1 Pa·s und 10 Pa·s sind jedoch gering.

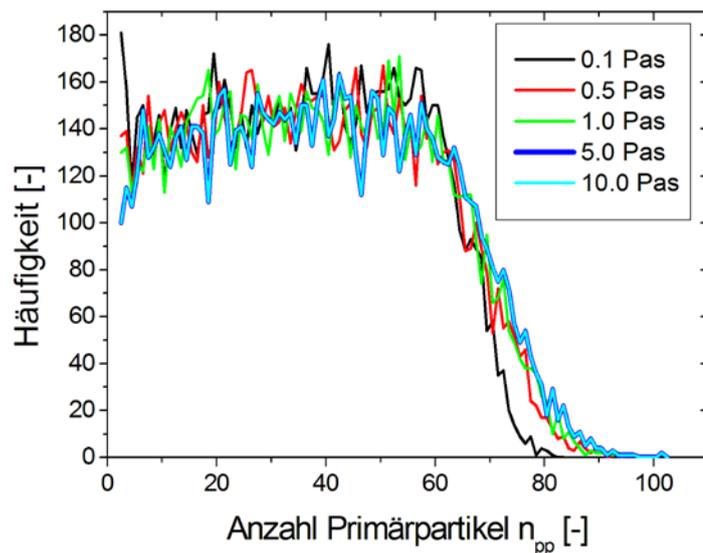


Abbildung 4.48: Anzahl der Primärpartikel, aus denen ein Agglomerat aufgebaut ist, in Abhängigkeit der Viskosität.

Ein weiterer Strukturparameter, der durch die Partikelviskosität beeinflusst wird, ist die Porosität. Bei der Agglomeration von trockenen Partikeln (s. Kap. 4.4.1) ist die Agglomeratporosität im Wesentlichen abhängig von der Primärpartikelzahl im Agglomerat. Da viskose Partikel aufgrund einer möglichen Penetration nicht mehr in einem Punktkontakt miteinander verbunden sind, ist die Agglomeratporosität folglich neben der Primärpartikelanzahl auch von der Penetrationstiefe der Primärpartikel abhängig. Abbildung 4.48 zeigt, dass die Primärpartikelanzahl in den unterschiedlich viskosen Agglomeraten bis ungefähr 60 Primärpartikel etwa gleich ist. Bei trockenen Agglomeraten wäre bei etwa gleich großen Agglomeraten somit mit einer nahezu identischen Porositätsverteilung zu rechnen. Aus Abbildung 4.49 ist die Abhängigkeit der Agglomeratporosität von der Viskosität der Primärpartikel zu sehen. Die Porosität ist direkt proportional zur Primärpartikelviskosität. Bei sehr hohen Viskositäten von

5,0 Pa·s und 10,0 Pa·s gleicht die Verteilung der Agglomeratporosität etwa der trockener Partikel (vgl. Abbildung 4.22 und Abbildung 4.23).

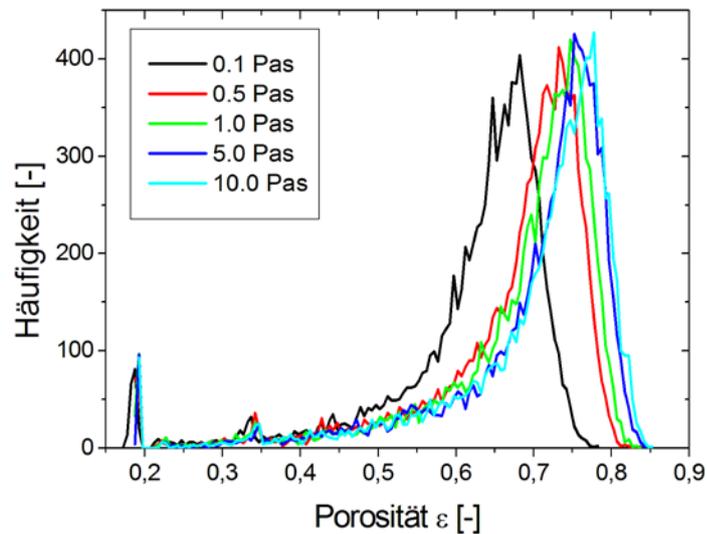


Abbildung 4.49: Verteilungsdichte der Agglomeratporosität bei unterschiedlichen Partikelviskositäten.

Die Berechnung der Agglomeratsphärizität kann, wie bereits in den vorangegangenen Kapiteln gezeigt wurde, auf verschiedene Weise erfolgen. Zunächst wird die Sphärizität aus der konvexen Hülle der Agglomerate bestimmt. Dabei wird die äußere Form der einzelnen Agglomerate bewertet, so dass die Viskosität und somit die Eindringtiefe der Primärpartikel keine Rolle spielt. Aus Abbildung 4.50 wird ersichtlich, dass die auf Basis der konvexen Hülle berechneten Sphärizitäten der erzeugten Agglomerate von der Partikelviskosität unabhängig sind. Ein Vergleich mit Abbildung 4.25 zeigt, dass die Agglomeratsphärizitäten bei etwa gleichen Werten liegen. Daraus geht hervor, dass die Wahl des Äquivalentdurchmessers einen größeren Einfluss auf die Sphärizität der konvexen Hülle ausübt, als unterschiedliche Partikelviskositäten.

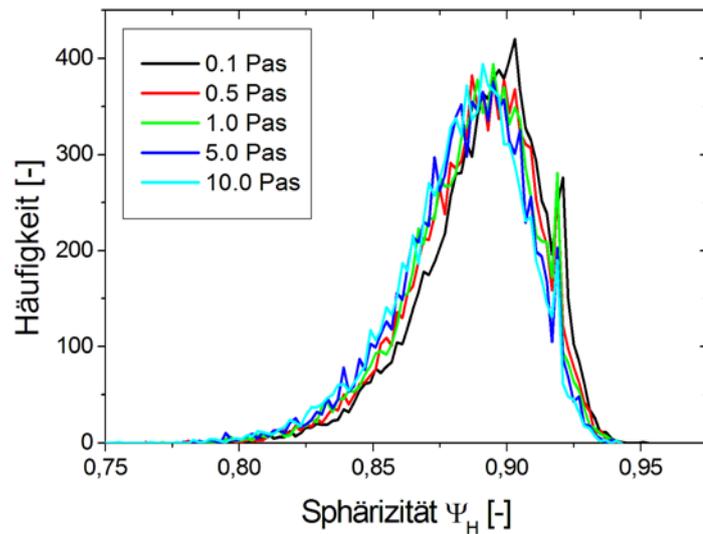


Abbildung 4.50: Verteilungsdichte der Agglomeratsphärizität Ψ_H , berechnet anhand der konvexen Hülle, bei unterschiedlichen Partikelviskositäten.

Wird die Sphärizität der Agglomerate anhand der Primärpartikel berechnet, zeigt sich eine Abhängigkeit der Viskosität. In Abbildung 4.51 ist eine Verschiebung der berechneten Sphärizität zu niedrigen Werten bei steigender Partikelviskosität zu erkennen.

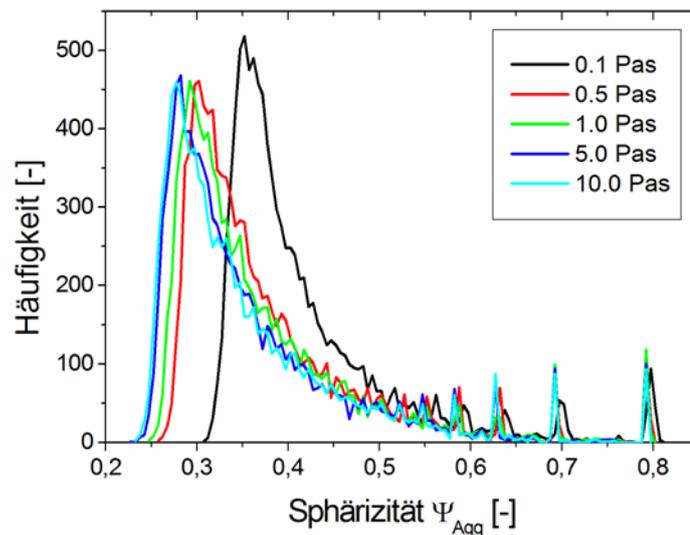


Abbildung 4.51: Verteilungsdichte der Agglomeratsphärizität Ψ_{Agg} , berechnet anhand der Primärpartikel, bei unterschiedlichen Partikelviskositäten.

Diese Verschiebung lässt sich folgendermaßen erklären. Aus Gleichung (3-6) folgt, dass die Sphärizität aus der Oberfläche des äquivalenten Partikels $A_{O,\ddot{a}q}$ und der tatsächlichen Oberfläche des betrachteten Partikels A_O berechnet wird. Hier wird die Oberfläche des äquivalenten Partikels aus dem Feststoffvolumen V_s eines Agglomerats berechnet. Somit ergibt sich aus Gleichung (4-7) für die Oberfläche dieses Äquivalentpartikels.

$$A_{O,\ddot{a}q} = \pi \left(\frac{6V_s}{\pi} \right)^{2/3} = C \cdot V_s^{2/3} \quad (4-7)$$

Darin ist C eine Konstante. Setzt man nun Gleichung (4-7) in (3-6) erhält man für die Sphärizität Ψ_{Agg}

$$\Psi_{Agg} = \frac{A_{O,\ddot{a}q}}{A_O} = \frac{C \cdot V_s^{2/3}}{A_O} \quad (4-8)$$

Aus Gleichung (4-8) folgt, dass für kleine A_O die Sphärizität hoch ist. In Tabelle 4-8 sind die freien Agglomeratoberflächen A_O , sowie die Feststoffvolumina der Agglomerate V_s und der daraus berechneten Äquivalentoberfläche $A_{O,\ddot{a}q}$ für unterschiedliche Partikelviskositäten aufgelistet. In den letzten beiden Zeilen ist der prozentuale Wert der freien und der Äquivalent-Oberfläche gegenüber dem Referenzwert bei 10,0 Pa·s gezeigt. Es lässt sich ablesen, dass mit sinkender Partikelviskosität die freie Agglomeratoberfläche A_O schneller abnimmt, als die berechnete Äquivalentoberfläche $A_{O,\ddot{a}q}$. Mit Gleichung (4-8) folgt daher, dass mit sinkender Partikelviskosität der Wert für die Sphärizität höher ist, als bei hohen Viskositäten. Somit lässt sich die Verschiebung der Sphärizitätsmaxima in Abbildung 4.51 in Richtung höherer Werte für niedrige Partikelviskositäten erklären.

Tabelle 4-8: Freie Agglomeratoberfläche A_O , Partikelvolumen V_s und berechnete Äquivalentoberfläche $A_{O,\ddot{a}q}$ sowie prozentualer Anteil von A_O und $A_{O,\ddot{a}q}$ gegenüber dem Referenzwert bei 10,0 Pa·s

	0,1 Pa·s	0,5 Pa·s	1,0 Pa·s	5,0 Pa·s	10,0 Pa·s
A_O [m ²]	$1,04 \cdot 10^{-8}$	$1,30 \cdot 10^{-8}$	$1,37 \cdot 10^{-8}$	$1,46 \cdot 10^{-8}$	$1,49 \cdot 10^{-8}$
V_s [m ³]	$2,46 \cdot 10^{-14}$	$2,84 \cdot 10^{-14}$	$2,93 \cdot 10^{-14}$	$3,06 \cdot 10^{-14}$	$3,11 \cdot 10^{-14}$
$A_{O,\ddot{a}q}$ [m ²]	$8,50 \cdot 10^{-10}$	$9,30 \cdot 10^{-10}$	$9,50 \cdot 10^{-10}$	$9,80 \cdot 10^{-10}$	$9,9 \cdot 10^{-10}$
% A_O	70	87	92	98	100
% $A_{O,\ddot{a}q}$	86	94	96	99	100

In Abbildung 4.49 zeigte sich, dass Agglomerate mit einer Partikelviskosität von 0,1 Pa·s eine deutlich geringere Porosität aufweisen, als Agglomerate höherer Viskosität. Die Porositätsmaxima für Viskositäten höher als 0,1 Pa·s liegen dicht beieinander. Auch die Verteilung der fraktalen Dimension D_f (Abbildung 4.52) spiegelt diesen Trend wider. Die Werte der Verteilungsmaxi-

ma in Abbildung 4.52 lassen auf eine kompakt sphärische Struktur der gebildeten Agglomerate schließen.

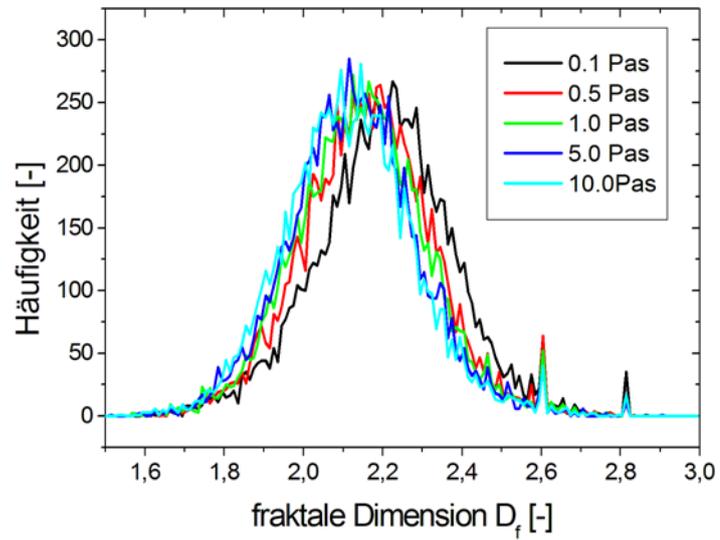


Abbildung 4.52: Verteilungsdichte der fraktalen Dimension D_f bei unterschiedlichen Partikelviskositäten.

5 Simulation der Agglomeration in einem Sprühtrockner im Pilotmaßstab

In den vorangegangenen Kapiteln wurde neben den Partikelkollisionen vor allem die Auswirkung des Äquivalentdurchmessers auf die Berechnung der dispersen Phase untersucht. Es wurde gezeigt, dass sich die Partikeldispersion durch die Wahl des Äquivalentdurchmessers beeinflussen lässt und somit auch auf das Kollisions- und Agglomerationsverhalten Einfluss genommen werden kann. Dieser Zusammenhang ist in Kapitel 4.4 nachgewiesen worden. Weiterhin ist das neuartige Agglomerationsmodell zur Vorhersage von Produkteigenschaften wie Porosität, Sphärizität und fraktaler Dimension auf Plausibilität überprüft worden. Diese Simulationen des Agglomerationsmodells zeigten gute Ergebnisse, so dass im folgenden Kapitel die Anwendbarkeit des Agglomerationsmodells in technischen Anlagen untersucht werden soll. Dazu werden CFD-Simulationen in einem Forschungssprühtrockner im Pilotmaßstab der Firma Niro A/S^{xxx} durchgeführt. Zunächst werden Geometrie, Rechengitter und Randbedingungen beschrieben. Anschließend werden die Ergebnisse der durchgeführten Simulation diskutiert. Als Letztes wird ein Ausblick auf weitere Untersuchungen und Verbesserungen des Modells gegeben.

5.1 Geometrie und Randbedingungen

5.1.1 Geometrie und Betrieb des Sprühtrockners

Bei dem für die Modellierung verwendeten Sprühtrockner handelt es sich um einen „cylinder-on-cone“ Sprühtrockner, der aus einem zylindrischen und einem konischen Teil besteht, mit dem Lufteinlass am Kopf des Trockners. Die Gesamthöhe beträgt 4096 mm, wobei der obere zylindrische Teil eine Höhe

^{xxx} Adresse: Niro A/S, Gladsaxevej 305, Soeborg, DK-2860, Dänemark.

von 1960 mm und der untere konische Teil eine Höhe von 2136 mm aufweist. Der Öffnungswinkel des konischen Teils beträgt 60° . Die Trocknungsluft strömt in Form einer Drallströmung über einen Ringspalt mit einem äußeren Radius von 527 mm und einem inneren Radius von 447 mm in den Trockner ein. Abbildung 5.1 zeigt das Verfahrensbild schematisch.

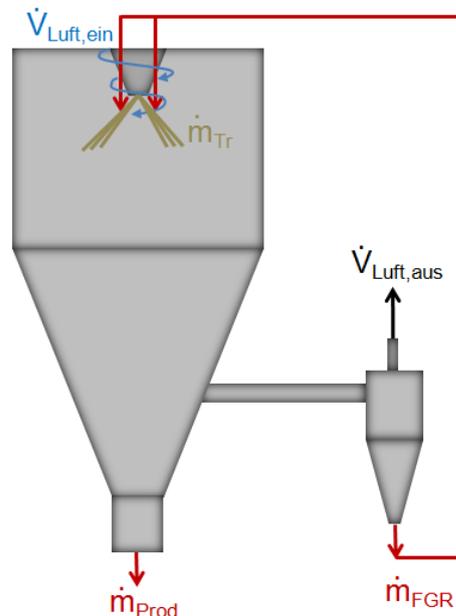


Abbildung 5.1: Verfahrensschaubild des Sprühtrockneraufbaus ($\dot{V}_{Luft,ein}$: Volumenstrom einströmende Luft, $\dot{V}_{Luft,aus}$: Volumenstrom ausströmende Luft, \dot{m}_{FGR} : Massenstrom Feingutrückführung, \dot{m}_{Tr} : Massenstrom Suspensionstropfen).

Innerhalb der Luftzuführung liegt der Zerstäuber über den die zu trocknende Suspension als Sprühnebel in die Trockenkammer injiziert wird. Die Düsenöffnung liegt 270 mm unterhalb der Trocknerdecke. Beim Zerstäuber handelt es sich um eine Druckdüse, die bei einem Druck von 85 bar betrieben wird. Es besteht die Möglichkeit bereits getrocknete Partikel als Feingut zur Förderung der Agglomeration dazu zu geben. Dazu wird das trockene Pulver in einem Gasvolumenstrom über einen Ringspalt mit einem inneren Durchmesser von 63 mm und einem äußeren Durchmesser von 72 mm um die Zerstäuberdüse herum in den Sprühtrockner eingeleitet. Während der Sprühnebel als Hohlkegel über die Druckdüse in den Sprühtrockner strömt, wird das Feingut axial eingeleitet. Der Luftauslass ist senkrecht zur Trocknerachse in einer Höhe von 3303 mm unterhalb der Trocknerdecke angeordnet. Über diesen Luftauslass wird auch das zurückgeführte Feingut mit dem Gasvolumenstrom ausgetragen und über einen Zyklon von diesem abgetrennt. Das eigentliche Produkt – getrocknetes Pulver – wird am Boden des Trockners ausgeschleust.

Für die Simulation wird der Sprühtrockner mit Hilfe eines blockstrukturierten Hexaeder-Netzes räumlich diskretisiert. Insgesamt besteht das Rechengitter aus

138 Blöcken und 586.564 Zellen. Die Abbildung 5.2 zeigt das verwendete Rechengitter sowie die Randbedingungen.

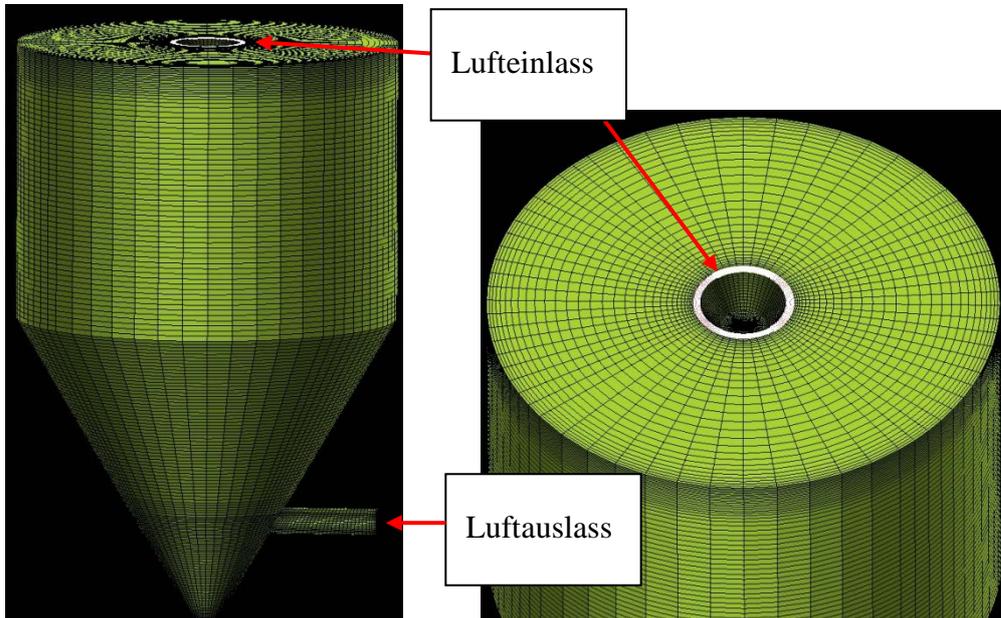


Abbildung 5.2: Verwendetes Rechengitter (erstellt mit Ansys ICEMCFD V14).

5.1.2 Randbedingungen fluide Phase

Am Gaseinlass wurden die Gasgeschwindigkeit und –temperatur sowie der Feuchtigkeitsgehalt aus Simulationsdaten von Ullum *et al.* (2008) vorgegeben (s. Abbildung 5.3).

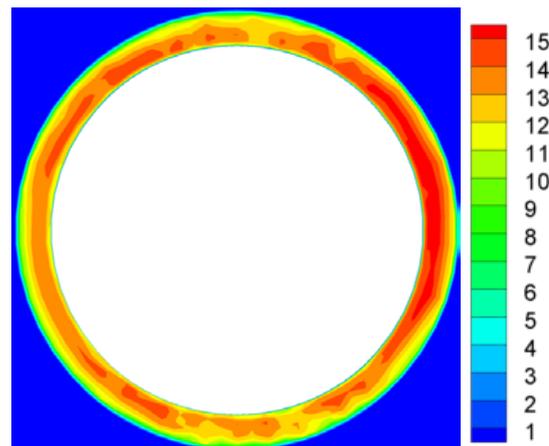


Abbildung 5.3: Gasgeschwindigkeit [m/s] am Trocknerfluideinlass.

Das Trocknungsgas wird mit einem Swirl mit einer mittleren axialen Geschwindigkeit von 9,8 m/s und einer mittleren tangentialen Geschwindigkeit von 2,4 m/s über den Einlassringspalt in die Trocknungskammer zugeführt.

Aus den Daten ergibt sich ein Gasmassenstrom von 1900 kg/h mit einem Feuchtigkeitsgehalt von 1,1 Mass.-% bei einer Temperatur von 452,5 K.

5.1.3 Randbedingungen disperse Phase

Für den Sprühebel wurde eine Tropfengrößenverteilung^{xxxii} aus den Simulationsdaten von Ullum *et al.* (2008) vorgegeben. Diese wurde von den Autoren mit Messungen an der Zerstäubereinheit verifiziert und ist in Abbildung 5.6 dargestellt. Als Vorlage wurde im Experiment ein Massenstrom von 92 kg/h einer 29 Mass.-% ige wässrigen Lösung von Maltodextrin DE-18 mit einer Dichte von 1090 kg/m³ bei 85 bar mittels einer Hohlkegeldüse versprüht. In der Simulation wurden die Tropfen in Form eines Hohlkegels mit einem Öffnungswinkel von 52° mit einer mittleren Geschwindigkeit von 125 m/s und einer Temperatur von 293 K vorgegeben. Um die Hohlkegelform des Sprühnebels in der Simulation abzubilden wurden die Tropfengeschwindigkeiten am Düsenauslass (Durchmesser: $D = 2$ mm), wie in Abbildung 5.4 gezeigt, berechnet. Aus der Definition für den Hohlkegel ergibt sich für die Geschwindigkeitskomponente in x-Richtung $u = \cos(26^\circ) \cdot 125 \text{ m/s}$.^{xxxii} Die Geschwindigkeitskomponenten in y-Richtung v und in z-Richtung w können anhand des Winkels β sowie dem Betrag des Geschwindigkeitsvektors in der y-z-Ebene r ^{xxxiii} berechnet werden. Der Winkel β ergibt sich aus der Position des injizierten Partikels innerhalb der Düse.

^{xxxii} Anzahldichteverteilung.

^{xxxiii} Hier darf nur der halbe Öffnungswinkel des Hohlkegels betrachtet werden.

^{xxxiiii} Aus dem Satz von Pythagoras folgt $r = (125 \text{ m/s})^2 + u^2$.

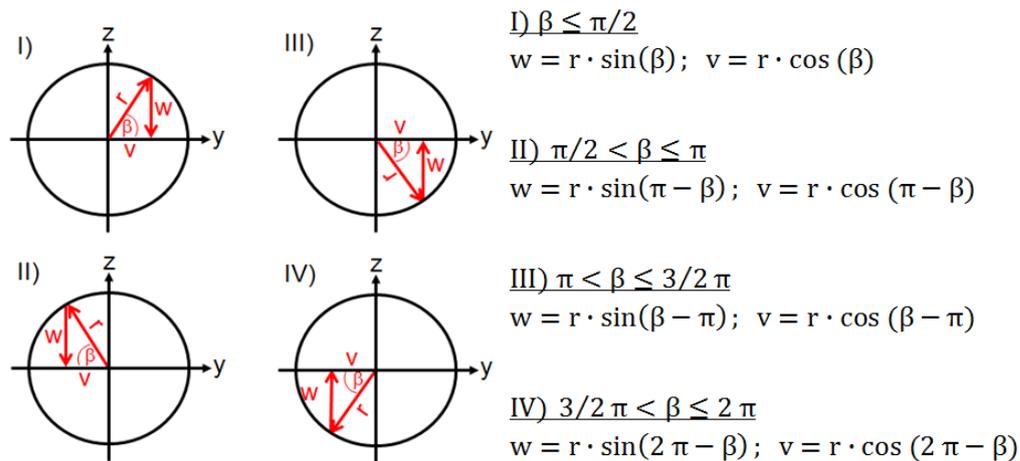


Abbildung 5.4: Definition des Hohlkegelsprühnebels am Tropfeinlass.

Zur Erhöhung der Agglomeration wird in der vorgestellten Simulation Feingut zurückgeführt. Die bereits getrockneten Partikel werden mit einer axialen Geschwindigkeit von 37 m/s in den Sprühtrockner injiziert. Das Feingut umgibt den Sprühnebel dabei in Form eines Hohlzylinders, so dass es zu gezielten Kollisionen zwischen den trockenen und noch feuchten Partikeln kommt (s. Abbildung 5.5).

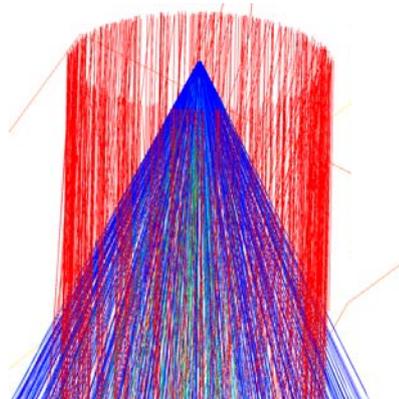


Abbildung 5.5: Injektion des Feinguts in Form eines Hohlzylinders (außen) und des Sprühnebels in Form eines Hohlkegels (innen). Die Trajektorien sind mit dem Feststoffgehalt des jeweiligen Partikeltyps eingefärbt.

Die Partikelgrößenverteilung des Feinguts wurde in einem extra für diese Arbeit durchgeführten Experiment am Sprühtrockner gemessen. Für die Messung wurde ein Malvern Mastersizer e2000 Scirocco eingesetzt und die Anzahldichteverteilung gemessen. In Abbildung 5.6 ist die experimentell bestimmte Partikelgrößenverteilung des zurückgeführten Feinguts als rote Linie gezeigt. Diese gemessenen Werte stellen die Einlassbedingungen für die Partikel und Tropfen dar. Da die Feingutpartikel bereits als vollständig getrocknet angenommen werden, wird dafür ein Feststoffanteil von 99 Mass.-% bei einer Dichte von 440 kg/m^3 vorgegeben. Insgesamt wurden 10.000 Parcels durch das Rechengebiet verfolgt.

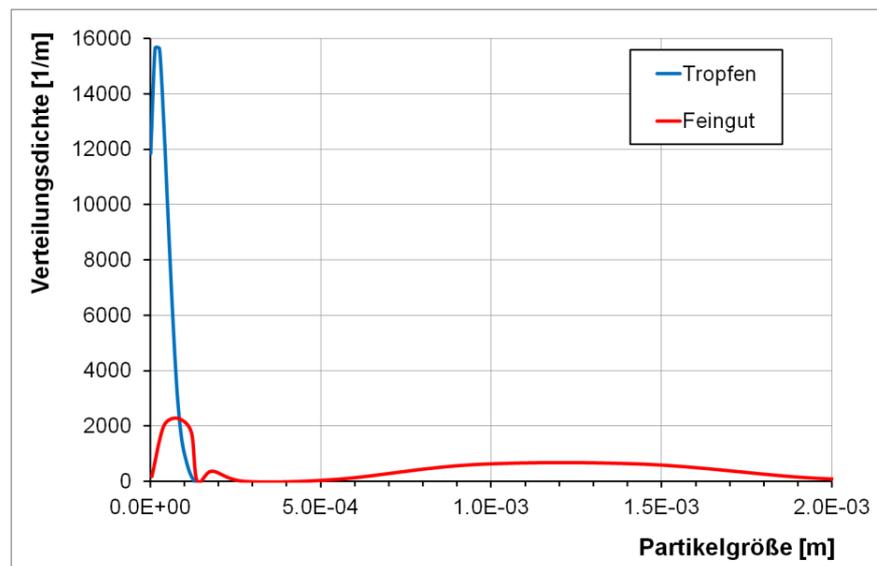


Abbildung 5.6: Experimentell ermittelte Größenverteilung (Anzahldichte) der injizierten Suspensionstropfen (blau) und Feingutpartikel (rot) (Messung durchgeführt von Niro A/S).

5.1.4 Randbedingungen Trocknerwände

Messungen der Firma Niro A/S ergaben für den verwendeten Sprühtrockner eine Verlustwärme von $Q = 8,5 \text{ kW}$. Daraus errechnet sich ein mittlerer konvektiver Wärmeleitkoeffizient von $h = 10,5 \text{ W/(m}^2\text{K)}$, der in der Simulation als Randbedingung für die Trocknerwände gesetzt wurde. Die Wände des Auslassrohres sowie der Zerstäubereinheit sind im Rechenmodell als adiabat angenommen. Für die Fluidströmung gilt an den Trocknerwänden die Hafttrandbedingung. Bei einer Kollision der Partikel mit den Trocknerwänden, werden diese unter Berücksichtigung einer Wandrauigkeit reflektiert.^{xxxiv} Als mittlerer Schwankungswert („root mean square“, rms) für den Wandrauigkeitswinkel wurden 20° angenommen. Das verwendete Wandrauigkeitsmodell wurde von Sommerfeld (2003) vorgestellt.

5.1.5 Auslassrandbedingung

Am Auslass des Sprühtrockners wurde für die Simulation eine Auslassrandbedingung gesetzt, d.h. der Gradient der Gasströmung ist hier gleich Null.

^{xxxiv} Es findet somit in der Simulation keine Wanddeposition statt.

5.2 Durchführung der Simulationen

Für die durchgeführte Simulation eines industriellen Sprühtrockners im Pilotmaßstab wurde ein einfaches Trocknungsmodell genutzt. In Kapitel 2.2.5 wurde das Verdampfungsmodell von Ranz und Marshall (1952) vorgestellt. Dieses Modell unterstellt eine unendliche Temperaturleitfähigkeit des Tropfenfluids, was sicherlich eine zu starke Vereinfachung darstellt und die Physik der Verdampfung nicht korrekt abbildet. Um die Diffusion von Wärme und Materie innerhalb eines trocknenden Suspensionstropfens zu berücksichtigen, wurde das Ranz und Marshall Trocknungsmodell von Blei (2006) mit einem sogenannten Schalenmodell verknüpft. Dabei wird ein Tropfen oder Partikel mit einer definierten Anzahl Schalen diskretisiert. In der vorliegenden Arbeit wurden zwei Schalen verwendet. Somit kann der Wärme- und Stofftransport innerhalb des Partikels, sowie an der Oberfläche betrachtet werden.

Zur Beschreibung der Tropfenverdampfung werden verschiedene Materialeigenschaften der zerstäubten Suspension benötigt. Für das im Experiment verwendete Maltodextrin DE-18 konnten in der Literatur die benötigten Stoffwerte nicht gefunden werden. Diese sind bei entsprechenden Herstellern zwar experimentell bestimmt worden, jedoch stellen sie ein erhebliches Unternehmens-Know-How dar und sind daher der Allgemeinheit nicht zugänglich. Um dennoch Simulationen mit verdampfenden Suspensionstropfen durchführen zu können, werden die am Lehrstuhl vorhandenen Stoffwerte für molkebasiertes Milchpulver verwendet (s. Blei 2006).

Während des Aufenthalts der Tropfen/Partikel im Rechengebiet wird neben der Partikel-trocknung auch die Agglomeration berücksichtigt. Diese soll durch das Zuführen bereits getrockneter Partikel in den Suspensionsnebel gefördert werden. Da sowohl getrocknetes Feingut wie auch Suspensions-sprühnebel eine Tropfengrößenverteilung aufweisen, wird bei der Partikelkollision die bereits vorgestellte Auftreffwahrscheinlichkeit (s. Kap. 2.2.3) berücksichtigt. Entstandene Agglomerate werden für die weitere Partikelbahn-berechnung durch den Trägheitsdurchmesser beschrieben.

Die finale Auswertung der Agglomerate findet am Luftauslass des Sprühtrockners statt. An dieser Stelle wurden im Experiment auch die Daten für das zurückgeführte Feingut ermittelt, so dass hier ein Vergleich mit der Simulation teilweise möglich ist. Für das Feingut wurde im Experiment die Partikelgröße mit Hilfe eines Streulichtmessgerätes der Firma Niro A/S bestimmt. Weiterhin wurden mit einem am Lehrstuhl vorhandenen Lichtmikroskop Bildaufnahmen der Agglomerate gemacht. Anhand dieser Fotos können die Agglomerate aus dem Experiment mit den in der Simulation erzeugten Agglomeraten verglichen werden. Das eigentliche Produkt, das im Experiment am Fuß des Trockners ausgeschleust wurde, wurde in den Simulationen nicht weiter betrachtet.

Bei der Simulation wurde die Zwei-Wege-Kopplung (s. Kap. 2.2) angewendet. Dadurch werden die fluiddynamischen Wechselwirkungen der Partikel sowie die Auswirkung von Partikelkollisionen auf die Fluidströmung nicht berücksichtigt. Die berechneten Partikelflugbahnen sowie die sich daraus ergebenden Partikelkollisionen werden dadurch möglicherweise nur unzureichend berechnet. Da in der vorliegenden Arbeit allerdings weder die Berechnung der kontinuierlichen noch der dispersen Phase anhand experimenteller Daten validiert werden konnte, wurde aus Gründen der Einfachheit auf eine Vier-Wege-Kopplung verzichtet. Die Anwendbarkeit des in dieser Arbeit erweiterten Agglomerationsmodells kann durch dieses Vorgehen trotzdem gezeigt werden.

Bei der Berechnung der Partikelbewegung wurden nur der Widerstand und die Schwerkraft berücksichtigt. Zusätzliche Kräfte sowie die Partikelrotation wurden nicht berücksichtigt. Als Partikeldispersionsmodell wurde das anisotrope Langevin Modell (s. Kap. 2.2.2) angewendet.

5.3 Modellergebnisse und Diskussion

5.3.1 Ergebnisse der Fluidphase

Das sich ausbildende Strömungsfeld (Abbildung 5.7 links) innerhalb des Sprühtrockners ist durch einen zentralen Strahl geprägt. Im konischen Teil des Trockners verläuft die zentrale Strömung in einem leichten Bogen auf das Auslassrohr zu. Im Bereich der Partikelzugabe unterhalb des konischen Zerstäuberteils ist im Strömungsfeld deutlich der Einfluss der Partikel zu erkennen. Hier ist die lokale Fluidgeschwindigkeit deutlich erhöht, da das Trocknungsgas von den injizierten Partikeln und Tropfen mitgerissen und somit beschleunigt wird. Die mittlere Gasgeschwindigkeit wird von etwa 11 m/s am Einlass auf bis zu 20 m/s im Bereich der Tropfeninjektion erhöht.

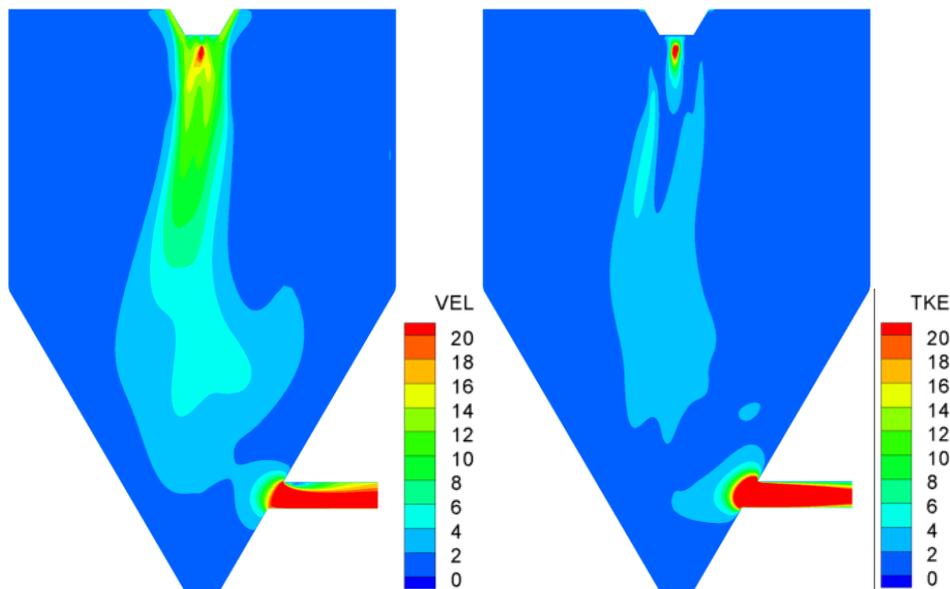


Abbildung 5.7: Geschwindigkeitsfeld des Trocknungsgases im Sprühtrockner VEL [m/s] (links) und Turbulente kinetische Energie TKE [m²/s²] des Trocknungsgases im Sprühtrockner (rechts).

Die hier vorgestellten Ergebnisse der Euler-Simulationen zeigen keine auskonvergierte Lösung. Ab einer bestimmten Iterationsanzahl fingen die Residuen an um einen asymptotischen Wert zu schwanken. Dieses Konvergenzverhalten deutet darauf hin, dass es sich bei der berechneten Strömung nicht um eine stationäre Lösung handelt. Im Wesentlichen handelt es sich bei der Strömung um einen swirlbehafteten Freistrahler, der um seine Mittelachse präzediert. Somit ist die Strömung instationär. Ullum *et al.* (2008) haben bei der Simulation eines ähnlichen Sprühtrockners gezeigt, dass die Strömung innerhalb des Trockners aufgrund der Frequenz mit der der zentrale Wirbelkern um seine Längsachse rotiert als stationär betrachtet werden kann.^{xxxv}

Deutlich wird der Einfluss des Sprühnebels auf das Trocknungsgas auch bei der Betrachtung der turbulenten kinetischen Energie. In Bereichen hoher Geschwindigkeitsgradienten wird Turbulenz erzeugt, so dass dort der Wert der turbulenten kinetischen Energie k (TKE, s. Abbildung 5.7) besonders hoch ist. Aus der rechten Seite der Abbildung 5.7 wird ersichtlich, dass besonders im Bereich der Partikel- und Tropfeninjektion hohe Geschwindigkeitsgradienten zwischen den Fluidelementen entstehen und somit die turbulente kinetische Energie hoch ist. Aber auch im Auslassrohr ist ein Bereich erhöhter turbulenter kinetischer Energie zu finden. Durch die Umlenkung der Gasströmung um 90° entstehen an der Rohreintrittskante turbulente Wirbel, die für eine Erhöhung

^{xxxv} Die verwendete Modelllösung stellt eine mögliche Lösung des Strömungsfelds innerhalb des Sprühtrockners dar, so dass es lokal zu unterschiedlichen Ergebnissen bei der Auswertung kommen kann.

der turbulenten kinetischen Energie sorgen. Zudem muss der gesamte Volumenstrom durch ein im Durchmesser gegenüber dem Sprühtrockner deutlich verringertes Rohr strömen, wodurch die Reynolds-Zahl ansteigt und die Strömung turbulenter wird.

Der Einfluss der injizierten Tropfen macht sich auch in der Temperatur und der Spezieskonzentration bemerkbar. Ziel der Sprühtrocknung ist es, aus einem flüssigen Sprühnebel ein trockenes Pulver zu erzeugen. Dabei entziehen die Flüssigkeitstropfen dem Trocknungsgas Wärme, so dass sich dieses abkühlt. Gleichzeitig wird die Spezieskonzentration des Lösungsmittels, hier Wasser, im Trocknungsgas erhöht. In Abbildung 5.8 links ist deutlich die Abnahme der Trocknungsgastemperatur im Bereich der Tropfeninjektion zu erkennen. Die injizierten Tropfen nehmen Wärme aus ihrer Umgebung auf, erwärmen sich und verdampfen schließlich das Lösungsmittel Wasser bis ein trockener Partikelzustand erreicht wird. Die Konzentration an Wasserdampf im Trocknungsgas steigt in den Bereichen der Tropfenverdampfung an, was aus Abbildung 5.8 rechts ersichtlich wird.

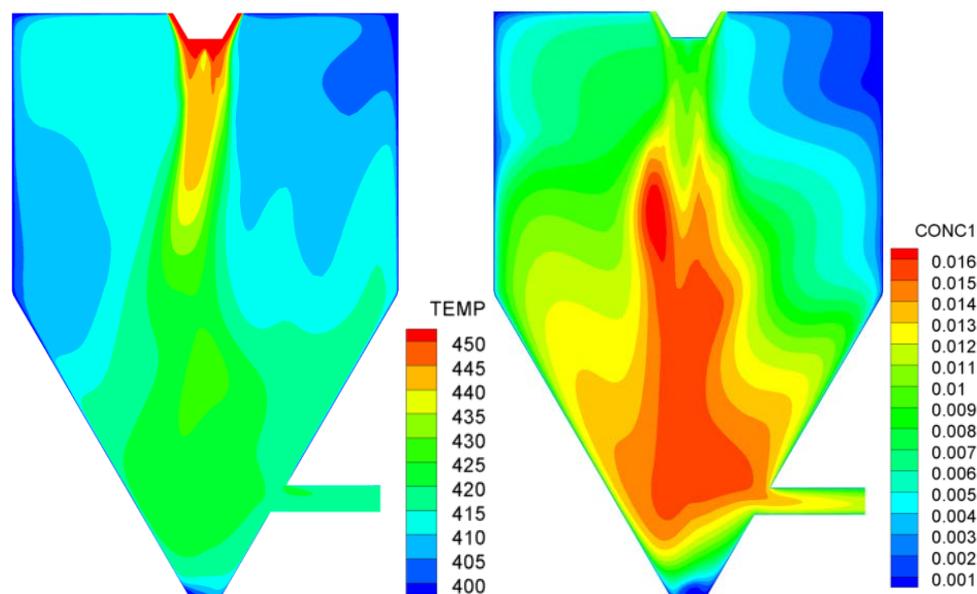


Abbildung 5.8: Temperaturfeld des Trocknungsgases im Sprühtrockner TEMP [K] (links), und Wasserdampfkonzentration im Sprühtrockner CONC1 [kg_{Dampf}/kg_{tr.Luft}] (rechts).

5.3.2 Ergebnisse der dispersen Phase

Ziel der Simulationen ist es, das entstehende Produkt hinsichtlich seiner Struktur zu charakterisieren. Dazu werden die vorgestellten Strukturparameter verwendet. Ein Vergleich mit experimentellen Werten ist aufgrund der fehlenden Datenlage nicht möglich, daher sollen hier lediglich die Möglichkeiten des weiterentwickelten Agglomerationsmodell vorgestellt werden.

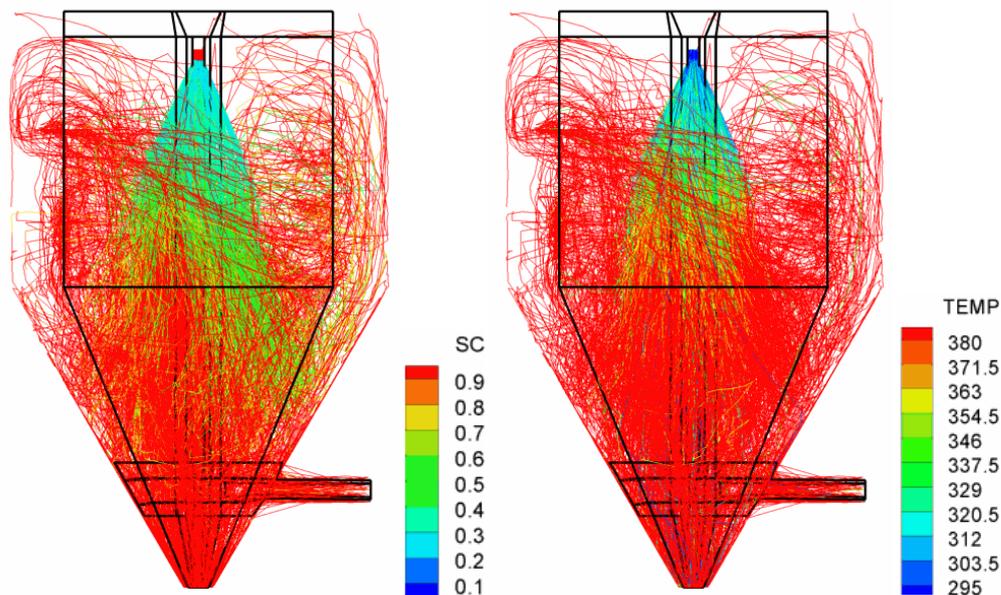


Abbildung 5.9: Feststoffgehalt SC [-] (links) und Temperatur TEMP [K] der Partikel (rechts) entlang ihrer Flugbahnen im Sprühtrockner.

Im linken Teil der Abbildung 5.9 sind die einzelnen Trajektorien mit dem Feststoffgehalt eingefärbt. Der Feststoffgehalt SC^{xxxvi} ist definiert als Anteil der Feststoffmasse im Tropfen bezogen auf die Gesamtmasse des Tropfens. Es ist deutlich der steigende Trocknungszustand der Partikel entlang der Flugbahn zu erkennen. Im Bereich des Zerstäubers haben die Feingutpartikel einen Feststoffgehalt von über 90%, während die Tropfen einen Feststoffgehalt von 29% besitzen. Während der Trocknung steigt der Feststoffgehalt der Tropfen soweit an, bis eine vollständige Trocknung der Partikel bei Feststoffgehalten von über 90% erreicht wird. Auf der rechten Seite von Abbildung 5.9 ist ein kontinuierlicher Anstieg der Partikeltemperatur von anfänglich 20°C auf etwa 110°C am Partikelauslass zu erkennen. Abbildung 5.9 zeigt somit, dass eine Trocknung der injizierten Partikel entsprechend des Trocknungsmodells stattfindet. Eine Änderung des Feststoffgehalts führt auch zu einer steigenden Partikelviskosität, die bei der Berechnung von Partikelkollisionen berücksichtigt wird. Kollisionen von flüssigen Tropfen führen bei einer Koaleszenz zu einer Vergrößerung des Tropfendurchmessers. Auch bei einer Kollision zwischen einem vollständig getrockneten Partikel und einem Suspensionstropfen wird im Falle einer Koaleszenz der Kollisionspartner der Durchmesser des trockenen Partikels erhöht. Das Kollisionsmodell wurde für die Berücksichtigung von Agglomeratstrukturen dahingehend geändert, dass ein Agglomerat immer den trockenen/viskosen Kollisionspartner darstellt. Wird durch das stochastische Kollisi-

^{xxxvi} engl. „solid content“

onsmodell^{xxxvii} das reale Partikel als flüssig ermittelt und besteht dieses gleichzeitig aus mehr als einem Primärpartikel (Agglomerat), wird diese Konstellation verworfen und es findet keine Kollision statt. Kollisionen zwischen trockenen/viskosen Partikeln finden nur statt, wenn das reale Partikel entweder kein Agglomerat ist, oder aber das reale Partikel (Agglomerat) den trockenen/viskosen Kollisionspartner darstellt. In diesem Fall wird eine mögliche Koaleszenz der stoßenden Partikel gemäß des Kollisionsmodells von Blei (2006) berechnet. Strukturierte Agglomerate entstehen somit nur bei der Kollision zwischen trockenen und viskosen Partikeln. Auf die Ergebnisse der Strukturberechnung wird nachfolgend eingegangen.

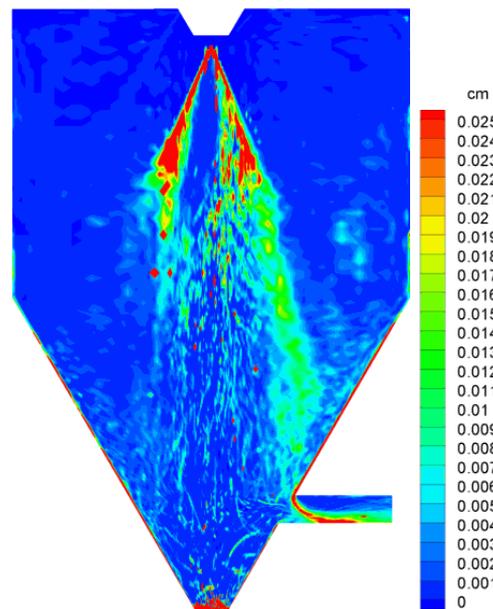


Abbildung 5.10: Volumen und zeitgemittelter Massenanteil cm [$kg_{\text{Partikel}}/kg_{\text{Gas}}$] im Sprühtrockner.

Bei der Betrachtung der volumen- und zeitgemittelten Partikeleigenschaften in jedem Kontrollvolumen des Rechengitters zeigt sich, dass die höchste Massenkonzentration der Partikel entlang der Trocknerlängsachse sowie an den konischen Trocknerwänden zu finden ist (s. Abbildung 5.10). In Abbildung 5.10 ist die Hohlkegelstruktur des injizierten Sprühnebels deutlich zu erkennen. Es zeigt sich auch, dass sich die Partikel im konischen Bereich des Sprühtrockners an den Wänden anlagern. Um Wandablagerungen in diesem Bereich vorausberechnen zu können, sollte das Wandkollisionsmodell hinsichtlich der Deposition von Partikeln erweitert werden. Vor allem der Trocknungszustand der Partikel muss in eine solche Erweiterung des Modells mit einbezogen werden, da hauptsächlich klebrige viskose Partikel zur Wanddeposition neigen dürften.

^{xxxvii} Sommerfeld (2001). Siehe dazu auch Kapitel 2.2.3.

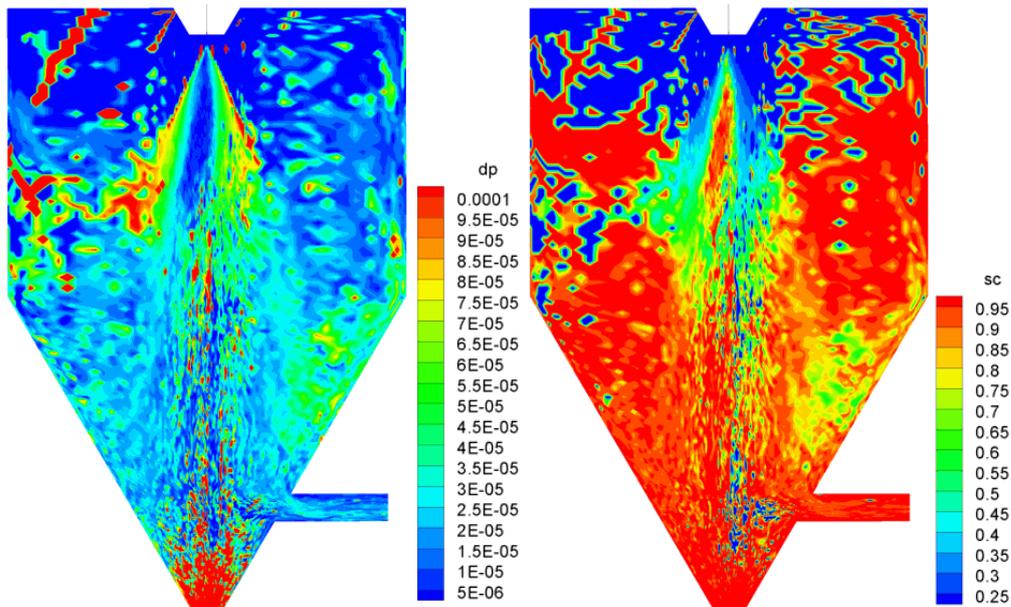


Abbildung 5.11: Volumen und zeitgemittelte Partikeleigenschaften (Partikeldurchmesser [m] (links), Feststoffgehalt [-] (rechts)) im Sprühtrockner.

Abbildung 5.11 zeigt auf der linken Seite die volumen- und zeitgemittelten Partikeldurchmesser in jeder Zelle. Am Boden des Sprühtrockners setzen sich Partikel mit einer Größe von etwa 1-2 mm ab. Hier wird im Experiment das Produkt aus dem Trockner ausgeschleust. Über den Gasauslass werden hauptsächlich kleine Partikel ausgetragen, was dem Feingut im Experiment entspricht. Der Trocknungszustand der Partikel ist im unteren konischen Bereich des Sprühtrockners sehr hoch, welches einem vollständig getrockneten Produkt entspricht (Abbildung 5.11 rechts). Im Kernbereich des Sprühnebels ist der Feststoffgehalt und damit der Trocknungszustand der Partikel bei etwa 60 bis 70 %, was auf eine sehr schnelle Partikeltrocknung hindeutet. In Zerstäubernähe ist der Feststoffgehalt der Partikel bei etwa 40 %, so dass in diesem Bereich viskose Partikel vorgefunden werden können.

Aufgrund der schnellen Partikeltrocknung sind die Penetrationstiefen der agglomerierenden Partikel eher gering, was aus Abbildung 5.12 hervorgeht. Daraus resultiert einerseits eine höhere freie Agglomeratoberfläche gegenüber hohen Penetrationstiefen, allerdings ist auch mit einer geringeren Festigkeit der Agglomerate zu rechnen. Über die Wahl des Betriebszustands des Sprühtrockners kann beispielsweise durch niedrigere Temperaturen und somit langsamere Trocknungsverläufe auf die Produkteigenschaften Einfluss genommen werden.

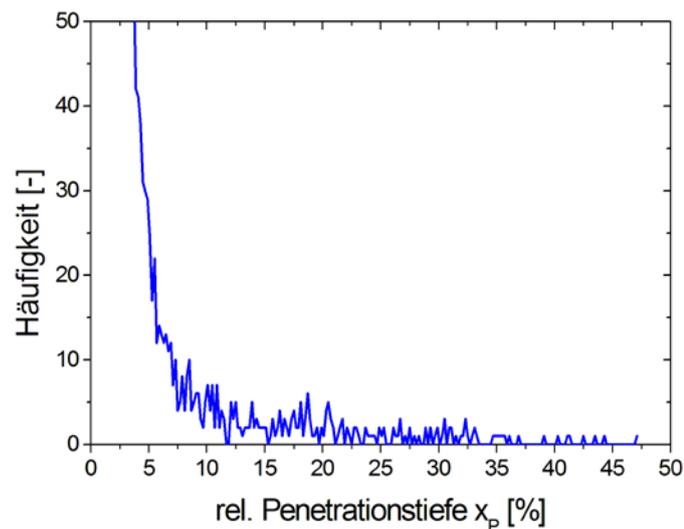


Abbildung 5.12: Relative Penetrationstiefe x_p bei der Kollision von viskosen Partikeln mit viskosen oder trockenen Partikeln.

Tabelle 5-1 zeigt die unterschiedlichen Kollisionsergebnisse, die bei der Simulation des Sprühtrockners aufgetreten sind, in ihrer prozentualen Verteilung. Weiterhin sind die verschiedenen Kombinationen der Trocknungszustände der Kollisionspartner aufgelistet. Darin werden flüssige Tropfen mit STD („surface tension dominated“), viskose Partikel mit VD („viscosity dominated“) und trockene Partikel mit DRY bezeichnet.^{xxxviii}

Tabelle 5-1: Auswertung der Kollisionen. Anzahl der berechneten Kollisionen, sowie Anteil der Agglomeration/Koaleszenz sowie die Anteile der verschiedenen Kollisionsarten

Ereignis	Anzahl	[%]	Kollisionstyp	Anzahl	[%]
Kollisionen	1273621	100	STD-STD	9585	1
missed	277177	-	STD-DRY	225774	18
Agglomeration	34446	3	DRY-DRY	725538	57
Koaleszenz	8326	1	VD-VD	312724	25
Separation	269952	21			

In der Simulation wurden durch das Kollisionsmodell etwa 1,3 Mio. Partikel-Partikel-Kollisionen berechnet. Diese Zahl wird bei der Berücksichtigung der Agglomeratstrukturen um die Anzahl „missed“ vermindert, wenn das kollidierende Partikel kein Primärpartikel im Agglomerat trifft (s. Kap. 3). Unter gewissen Umständen (s. Kap. 2.2.4 und 2.2.6) führt die Kollision zweier Partikel zu einer Koaleszenz oder zur Agglomeration. Im hier simulierten Sprühtrockner liegt der Anteil der Koaleszenz bei 1% und der Anteil der Agglomerationen

^{xxxviii} Diese Bezeichnungen sind der Arbeit von Blei (2006) übernommen und werden dort näher erläutert.

bei 3%. Ein weitaus größerer Teil der Kollisionen führt zu einer Trennung der Partikel nach der Kollision („Separation“).

Dieses Kollisionsergebnis resultiert aus Kollisionen mit mindestens einem flüssigen oder viskosen Partikel, da zuvor eine zeitweise Agglomeration vorgelegen haben muss. Im vorliegenden Fall, werden Feingutpartikel zur Erhöhung der Agglomerationsrate zurückgeführt, um gezielt mit noch nicht vollständig getrockneten Partikeln zur Kollision gebracht zu werden. Das trockene Feingut wird direkt am Zerstäuber zugeführt, so dass vor allem Kollisionen zwischen trockenen und flüssigen/niedrigviskosen Partikeln stattfinden. Aus Tabelle 5-1 geht hervor, dass die Kollisionen, bei denen eine Trennung der Partikel nach der Kollision stattfinden kann (STD-STD, STD-DRY und VD-VD), insgesamt 44% aller Kollisionen ausmachen. Kollisionen zwischen trockenen Partikeln stellen mit 57% aller Kollisionen den Hauptanteil dar. Dieser Wert spiegelt die schnelle Trocknung der Suspensionstropfen wider.

Abbildung 5.13 zeigt auf der linken Seite einige ausgewählte Agglomerate, die in der Simulation entstanden sind, sowie in der Struktur ähnlich aussehende Agglomerate aus dem Experiment auf der rechten Seite. Die Agglomeratbilder wurden mit Hilfe eines Lichtmikroskops aufgenommen. Wegen der geringen Tiefenschärfe des verwendeten Mikroskops sind nicht alle Bereiche der fotografierten Agglomerate scharf. Dennoch ist ihr struktureller Aufbau gut zu erkennen. Der Vergleich mit den modellierten Agglomeraten aus der Simulation zeigt eine gute qualitative Übereinstimmung. In wie weit die Strukturparameter wie Primärpartikelzahl oder Porosität zwischen Simulation und Experiment quantitativ übereinstimmen, konnte aufgrund der fehlenden Messdaten nicht überprüft werden. Im Folgenden werden die Strukturparameter aus der Simulation näher erläutert.

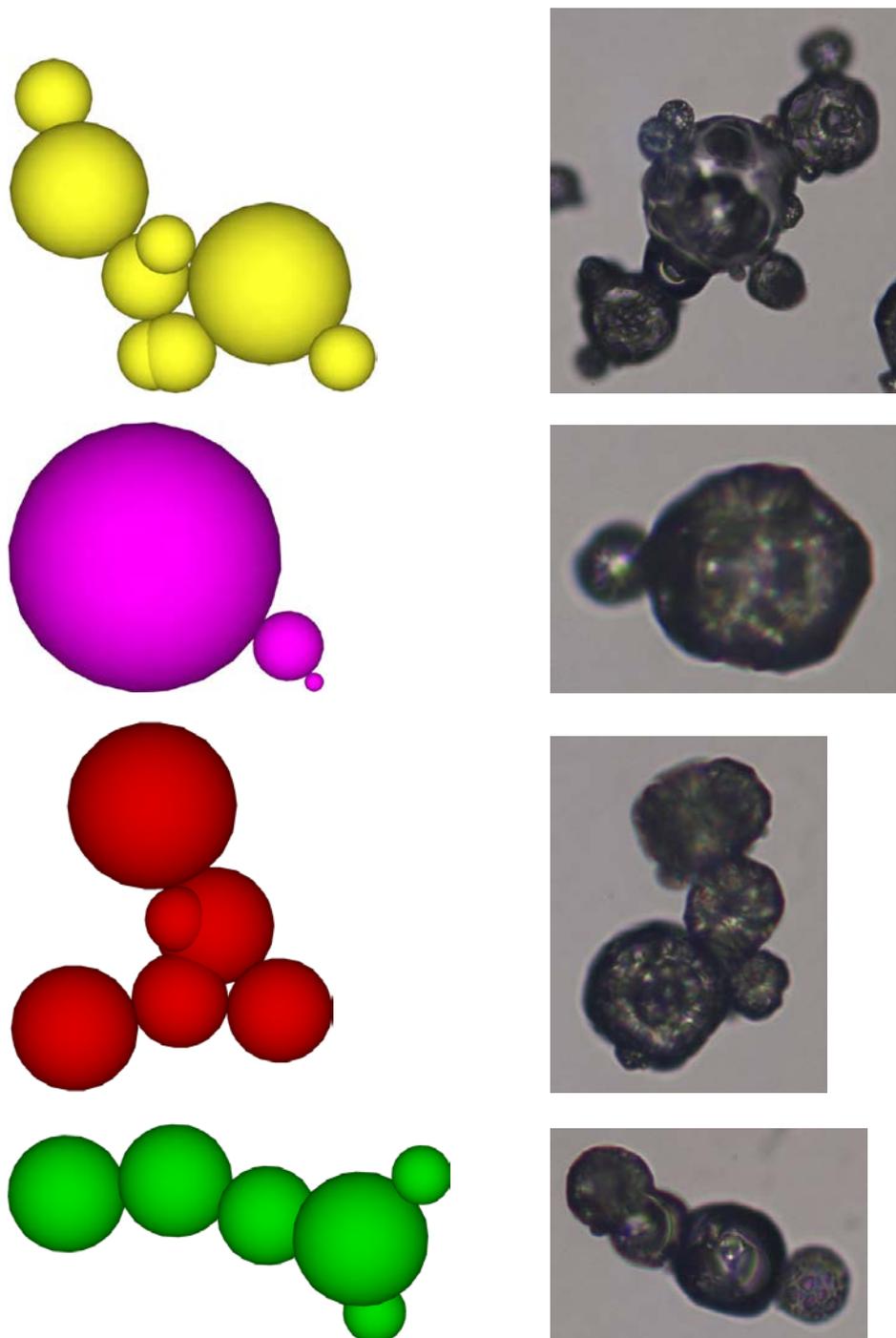


Abbildung 5.13: Ausgewählte Agglomerate aus der Simulation (links) und vergleichbare Lichtmikroskopaufnahmen von experimentell erzeugtem Feingut (rechts).^{xxxix}

Im Wesentlichen bestehen die Agglomerate aus weniger als 10 Primärpartikeln, wie Abbildung 5.14 zeigt. Daraus ergeben sich Strukturparameter, die auf sehr kompakte Agglomerate (Abbildung 5.15 bis Abbildung 5.20) hindeuten.

^{xxxix} Der Vergleich zwischen Simulation und Experiment spiegelt den qualitativen Aufbau der Agglomerate wider.

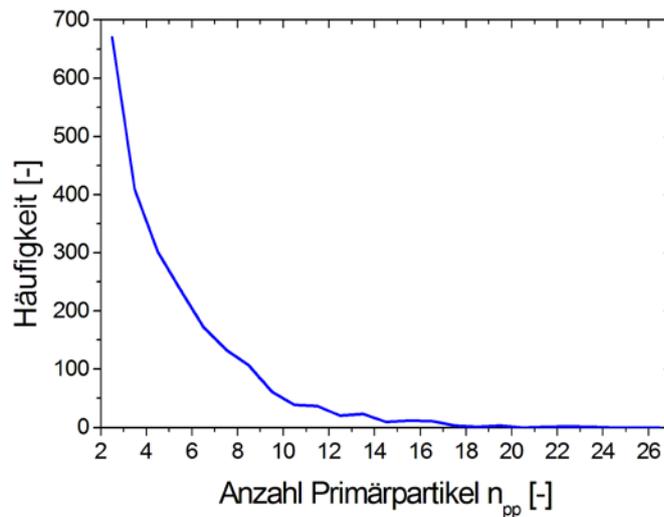


Abbildung 5.14: Verteilung der agglomeratbildenden Primärpartikel.

Wie bereits in Kapitel 4.4 erläutert wurde, ist die Porosität von zwei gleich großen Kugeln, die im Punktkontakt miteinander stehen etwa 18%. Aus Abbildung 5.14 geht hervor, dass sehr viele Agglomerate aus nur 2 Primärpartikel bestehen. Aufgrund der geringen Penetrationstiefen kann somit von einem Punktkontakt der Partikel im Agglomerat ausgegangen werden. Damit lässt sich das ausgeprägte Maximum in der Verteilung der Agglomeratporositäten in Abbildung 5.15 bei etwa 0,18 erklären. Niedrigere Werte in der Porosität stammen aus Agglomeraten, die beispielsweise aus wenigen, in ihrem Durchmesser sehr stark variierenden Partikeln bestehen (vgl. Abbildung 5.13 violetteres Agglomerat). Die Porositäten der berechneten Agglomerate sind mit Werten kleiner 0,7 eher gering.

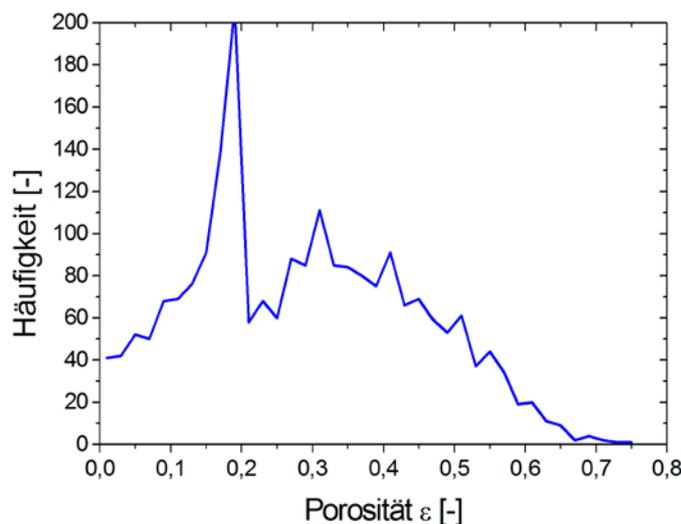


Abbildung 5.15: Verteilung der berechneten Agglomeratporositäten ϵ .

Niedrige Porositätswerte äußern sich auch in der freien Oberfläche eines Agglomerats. Es wurde bereits in Kapitel 4.4 gezeigt, dass bei trockenen oder vis-

kosen Partikeln, die nur sehr wenig ineinander eindringen, die freie Oberfläche mit steigender Primärpartikelzahl ansteigt. Die sprühgetrockneten Agglomerate bestehen aus wenigen Primärpartikeln, die geringe Penetrationstiefen aufweisen. Somit ist die berechnete Verteilung der freien Oberfläche der Agglomerate als plausibel anzusehen.

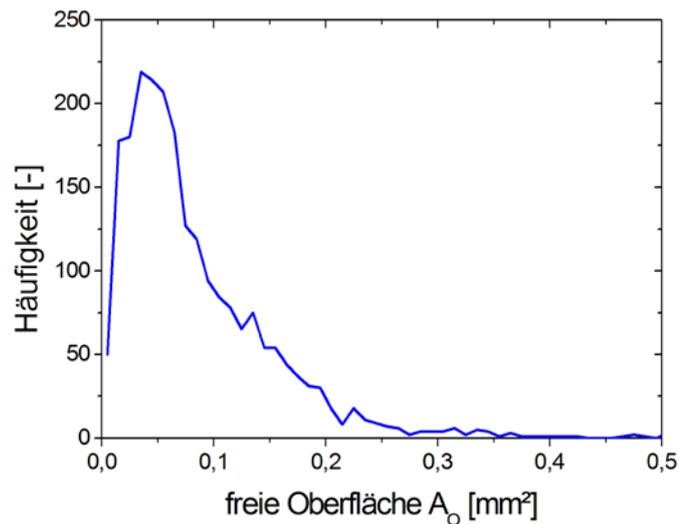


Abbildung 5.16: Berechnete freie Oberflächen A_0 der Agglomerate.

Ein weiterer Strukturparameter, der die Aussage der kleinen Agglomerate stützt, ist der Trägheitsradius (Abbildung 5.17).

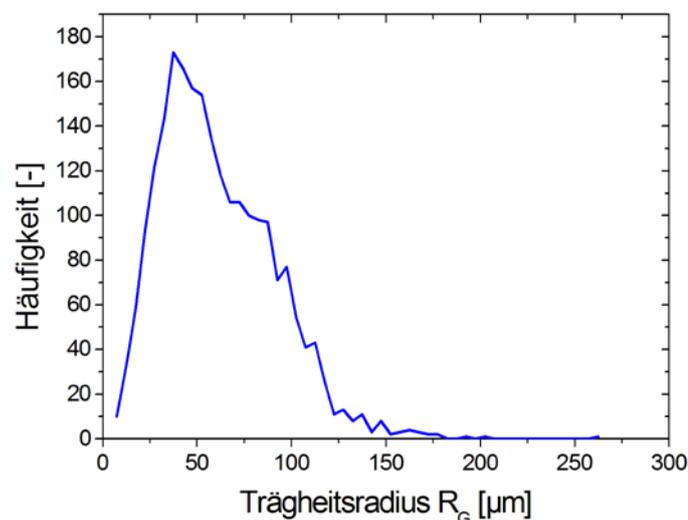


Abbildung 5.17: Verteilung der Trägheitsradien R_g den berechneten Agglomerate.

Der Trägheitsradius gibt an, wie die Masse innerhalb eines Agglomerats verteilt ist. Besteht ein Agglomerat beispielsweise aus Primärpartikeln, die bei einer Kollision sehr weit ineinander eingedrungen sind, so liegt die Masse dicht um den Schwerpunkt des Agglomerats verteilt und der Trägheitsradius nimmt einen kleinen Wert an. Bilden Primärpartikel mit sehr niedrigen Penetrations-

tiefen ein Agglomerat, so ist die Masse innerhalb des Agglomerats weit vom Schwerpunkt entfernt und der Wert des Trägheitsradius ist groß. Mit steigender Primärpartikelanzahl nimmt auch der Trägheitsradius zu. Da die in der Simulation des Sprühtrockners berechneten Agglomerate aus wenigen Primärpartikeln bestehen, sind die niedrigen Werte der Trägheitsradien in Abbildung 5.17 ebenfalls plausibel.

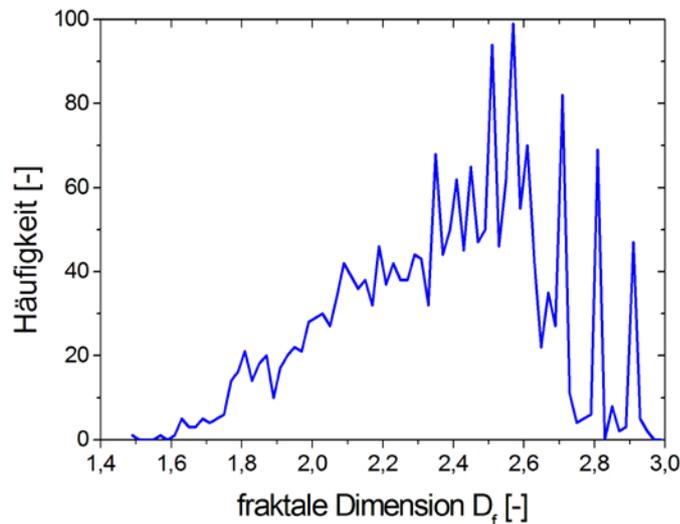


Abbildung 5.18: Verteilung der fraktalen Dimension D_f der berechneten Agglomerate.

Ein häufig zur Charakterisierung von Partikeln verwendeter Strukturparameter ist die fraktale Dimension. Bereits in Kapitel 4.4 wurde die eingeschränkte Verwendbarkeit bei kleinen, d.h. aus wenigen Primärpartikeln bestehenden Agglomeraten hingewiesen. Die fraktale Dimension kann strenggenommen nur für echte fraktale Strukturen verwendet werden, so dass die Aussagekraft dieses Parameters in dem hier vorgestellten Fall eingeschränkt ist. Kettige Agglomerate weisen im Gegensatz zu sphärischen Agglomeraten einen geringeren Wert für die fraktale Dimension auf (vgl. Kap. 4.4). In Abbildung 5.18 ist die Verteilung der fraktalen Dimension der in der Simulation erzeugten Agglomerate gezeigt. Es ist deutlich ein Maximum der Verteilung bei Werten von etwa 2,5 zu erkennen. Die Agglomeratstrukturen weisen somit einen kompakt kugeligen Charakter auf.

Zur Beschreibung der äußeren Form von Agglomeraten kann die Sphärizität herangezogen werden. Sie beschreibt die Abweichung der Agglomeratstruktur von der Kugelform (s. Kap. 3.3). Für kugelig kompakte Agglomerate ist demnach mit hohen Werten der Sphärizität zu rechnen. Ein Blick auf Abbildung 5.19 zeigt, dass das Maximum der Verteilung bei ungefähr 0,92 liegt. Tabelle 4-6 zeigt typische Werte der Sphärizitäten verschiedener ausgewählter Körper. Für ein regelmäßiges Zwölfeck ist dort ein Wert von 0,91 angegeben, so dass die in der Simulation des Sprühtrockners erzeugten Agglomerate eine ähnliche

Form aufweisen, wenn die Agglomerate durch ihre konvexe Hülle dargestellt werden.

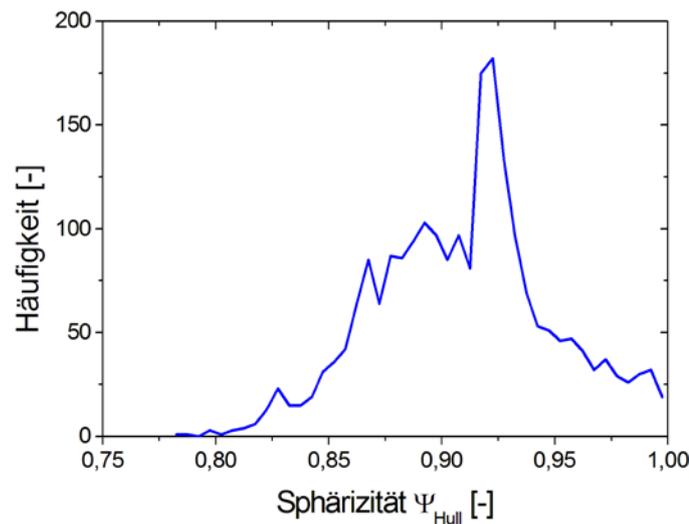


Abbildung 5.19: Verteilung der Agglomeratsphäritäten Ψ_{Hull} berechnet mit der konvexen Hülle.

Wird die Sphärizität mit der Partikeloberfläche und dem –volumen berechnet, hat sich gezeigt (s. Kap. 4.4.2), dass mit zunehmender Primärpartikelanzahl im Agglomerat der Wert für die Sphärizität Ψ_{Agg} abnimmt. Dies liegt darin begründet, dass die Partikeloberfläche mit steigender Partikelzahl stärker zunimmt, als das Volumen der Partikel. Dieser Zusammenhang gilt nur bei Agglomeraten, deren Primärpartikel eine geringe Penetrationstiefe aufweisen und somit mehr oder weniger in Punktkontakt miteinander stehen. Bei der Simulation des Sprühtrockners zeigte sich eine schnelle Partikeltrocknung (s. Abbildung 5.9), die zu geringen Eindringtiefen der Primärpartikel führt (s. Abbildung 5.12). In Abbildung 5.20 zeigt sich ein Maximum der Sphärizität von 0,8 was ebenso auf sphärische Partikel hinweist. Jedoch ist die Verteilung hier wesentlich breiter, als bei der Berechnung der Sphärizität aus der konvexen Hülle, was den Zusammenhang zwischen berechneter Sphärizität und Primärpartikelanzahl widerspiegelt.

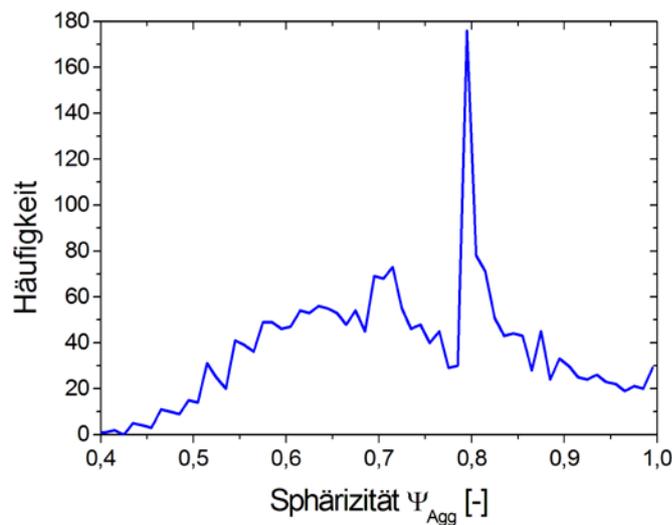


Abbildung 5.20: Verteilung der Agglomeratsphäritäten Ψ_{Agg} berechnet mit der Oberfläche und dem Volumen des Agglomerats.

5.4 Ausblick

Aus den Ergebnissen der Sprühtrocknersimulation wird deutlich, dass das in der vorliegenden Arbeit entwickelte Modell zur Vorhersage von Strukturparametern von Agglomeraten für technisch relevante Fragestellungen eingesetzt werden kann. Die Simulation eines Sprühtrockners im Pilotmaßstab lieferte plausible Ergebnisse. Eine Validierung des Modells im zuvor simulierten Sprühtrockner ist derzeit aufgrund fehlender Daten eingeschränkt möglich. Um eine Validierung des Strukturmodells durchführen zu können, müssen sowohl Daten über die Fluidströmung innerhalb des Trockners als auch über die Partikel (Flugbahnen, Trocknungszustand, etc.) vorhanden sein.

Eine von der Realität mehr oder weniger stark abweichende Fluidfeldberechnung kann zu einer fehlerbehafteten Berechnung der Partikelflugbahnen führen. Daraus ergeben sich ein abweichendes Kollisionsverhalten der Partikel und somit auch unterschiedliche Agglomerationen der Primärpartikel. Ein weiterer wichtiger Punkt bei der Simulation von Sprühtrocknern ist das Kollisionsverhalten von Partikeln verschiedenen Trocknungszustands an der Wand. Vor allem eine eventuell auftretende Partikeldeposition, die das weitere Wandkollisionsverhalten beeinflusst, ist dabei zu berücksichtigen. Im verwendeten Trocknungsmodell werden sehr starke Vereinfachungen hinsichtlich der Lösungsmittelverdampfung gemacht, welche die Berechnung der Partikel-trocknung beeinflussen können. Hierin ist ein großer Verbesserungspunkt für weitere technische Simulationen zu finden.

Wegen der schwierigen messtechnischen Zugänglichkeit innerhalb eines Sprühtrockners müssen Technikumsanlagen entwickelt und aufgebaut werden, mit Hilfe derer die Tropfenverdampfung sowie Partikel-Partikel und Partikel-Wand-Interaktion untersucht werden können und somit eine experimentelle Datenbasis geschaffen wird. Dabei könnte auch die Einbeziehung der Klebrigkeit viskoser Partikel in das Modell und deren Auswirkung auf Partikel-Wand-Kollisionen untersucht werden.

Eine weitere Verbesserung des hier verwendeten Modells ist die Erweiterung auf nicht-newtonsche Fluide, da die im Sprühtrocknungsprozess verwendeten Suspensionen sehr häufig kein Newtonsches Verhalten zeigen. Auch durch die Einbeziehung der Oberflächenveränderung^{x1} während des Penetrationsvorgangs von viskosen Partikeln würde die Agglomeratstruktur realitätsnäher abgebildet werden. Bisher kann die Rotation der gebildeten Agglomerate im hier verwendeten Simulationsmodell nicht berücksichtigt werden und wird nur durch eine zufällige Drehung abgebildet. Da sich die Agglomerate in der Strömung entsprechend der angreifenden Kräfte ausrichten werden, würden sich dadurch andere Strukturparameter ergeben. Somit wäre auch die Einbeziehung der Agglomeratrotation eine sinnvolle Erweiterung des Modells.

Das hier vorgestellte Modell schafft eine grundlegende Basis, für die Simulation von Sprühtrocknern. Mit dem Modell konnten Schlüsselparameter zur Charakterisierung von Agglomeratstrukturen sprühgetrockneter Pulver berechnet werden. Daraus lassen sich weitere Produkteigenschaften ableiten, so dass sich der Betrieb von Sprühtrocknern bereits im Vorfeld simulieren lässt. Dem Betreiber von Sprühtrocknern steht mit diesem Modell ein wichtiges Werkzeug für die optimale Prozessplanung der Trocknungsanlagen zur Verfügung.

^{x1} Bisher wird von einer Formstabilität ausgegangen, d.h. dass die Partikel während der Penetration ihre Kugelform behalten.

6 Literaturverzeichnis

BIRCHAL, V.S.; HUANG, L.; MUJUMDAR, A.S.; PASOS, M.L.: *Spray Dryers: Modeling and Simulation*. In: *Drying Technology* 24 (2006), S. 359-371.

BIRCHAL, V.S.; PASSOS, M.L.; WILDHAGEN, G.R.S.; MUJUMDAR, A.S.: *Effect of Spray-Drying Operating Variables on the whole Milk Powder Quality*. In: *Drying Technology* 23 (2005), S. 611-636.

BIRD, R.B.; STEWARD, W.E.; LIGHTFOOT, E.N.: *Transport phenomena*. In: Wiley, New York (1960).

BLEI, S.: *On the Interaction of non-Uniform Particles during the Spray Drying Process: Experiments and Modelling with the Euler-Lagrange Approach*, Dissertation, Shaker, Aachen, (2006).

BOUSSINESQ, V. J.: *Théorie de l'Écoulement Tourbillant*, In: Mem. Présentés par Divers Savants Acad. Sci. Inst. Fr. 23 (1877), S. 46- 50.

BRASIL, A.M.; FARIAS, T.L.; CARVALHO, M.G.; KOYLU, O.U.: *Numerical characterization of the morphology of aggregated particles*, *Aerosol Sciences* 32 (2001), 489-508.

BUCZKOWSKI, S.; KYRIACOS, S.; NEKKA, F.; CARTILIER, L.: *The modified box counting method: analysis of some characteristic parameters*. In: *Pattern Recognition* 31 (4) (1998), S. 411–418.

BUSHELL, G.C.; YAN, Y.D.; WOODFIELD, D.; RAPER, J.; AMAL, R.: *On techniques for the measurement of the mass fractal dimension of aggregates*, *Advances in Colloid and Interface Science* (2002) 95, 1-50.

CRANK, J.: *Mathematics of diffusion*. In: University Press, Oxford (1967).

CROWE, C. T. ; SOMMERFELD, M. ; TSUJI, Y.: *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. Boca Raton : CRC Press, (1998).

CSANADY, G. T.: *Turbulent diffusion of heavy particles in the atmosphere*, In: *Journal of The Atmospheric Sciences* 20.3 (1963), S. 201-208.

DAVIDSON, P. A.: *Turbulence*, Oxford University Press, Oxford, (2004).

DECKER, S.: *Zur Berechnung von gerührten Suspensionen mit dem Euler-Lagrange-Verfahren*. Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, (2006).

- FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M.: *Numerische Strömungsmechanik*, Berlin Heidelberg, Springer-Verlag, (2008).
- FLETCHER, D.F.; GUO, B.; HARVIE, D.J.E.; LANGRISH, T.A.G.; NIJDAM, J.J.; WILLIAMS, J.: *What is important in the simulation of spray dryer performance and how do current CFD models perform?* In: Applied Mathematical Modelling 30 (2006), S. 1281-1292.
- FRENKIEL, F. N.: *On the Kinematics of Turbulence*. In: J. Aero. Sci. (1948), S. 57–64.
- GIANFRANCESCO, A.; TURCHIULI, C.; DUMOULIN, E.: *Powder agglomeration during the spray-drying process: measurements of air properties*. In: Dairy Sci. Technol. 88 (2008), S. 53-64.
- GOURDEL, C.; SIMONIN, O.; BRUNIER, E.: *Modelling and simulation of gas-solid turbulent flows with a binary mixture of particles*. In: Third International Conference on Multiphase Flow, ICMF'98, Lyon, France (1998), June 8-12.
- GRAY, C.F.: *US Patent No. 1*, 107,784 (1914).
- GUO, B.; LANGRISH, T.A.G.; FLETCHER, D.F.: *Time-dependent simulation of turbulent flows in axisymmetric sudden expansions*. In: Thompson, M.C., Hourigan, K. (Eds.), Proc. 13th Australasian Fluid Mechanics Conference, Melbourne, Australia, (1) (1998), S. 283-286.
- GUO, B.; LANGRISH, T.A.G.; FLETCHER, D.F.: *An assessment of turbulence models applied to the simulation of a two-dimensional jet*, In: Applied Mathematical Modelling 25 (8) (2001), S. 635-653.
- HILLER, R. BR.: *Der Einfluß von Partikelstoß und Partikelhaftung auf die Abscheidung in Faserfiltern*, Dissertation, VDI – Verlag, Düsseldorf, (1981).
- HINZE, J. O.: *Turbulence*. New York : McGraw Hill, (1975).
- HO, C. A.; SOMMERFELD, M.: *Modelling of micro-particle agglomeration in turbulent flows*. In: Chemical Engineering Science 57 (2002), S. 3073 – 3084.
- HOPKINS, M.A.; LOUGE, M.Y.: *Inelastic Micro-structure in Rapid Granular Flows of Smooth Disks*, Physics of Fluids A 3 (1) (1991), S. 47-57.
- KUSCHEL, M.; SOMMERFELD, M.: *Investigation of droplet collisions for solutions with different solids content*, Experiments in Fluids (5402) (2013), S. 1-17.
- LANGRISH, T.A.G.: *New Engineered Particles from Spray Dryers: Research Needs in Spray Drying*. In: Drying Technology 25 (2007), S. 971-983.
- LANGRISH, T.A.G.; FLETCHER, D.F.: *Spray drying of food ingredients and applications of CFD in spray-drying*. In: Chemical Engineering and Processing 40 (2001), S. 345-354.

- LANGRISH, T.A.G; ZBICINSKI, I.: *The effects of air inlet geometry and spray cone angle on the wall deposition rate in spray dryers*. In: Trans. I. Chem. E. 72 (A) (1994), S. 420-430.
- LEGG, B. J. ; RAUPACH, M. R.: *Markov-chain simulation of particle dispersion in inhomogeneous flows – The mean drift velocity induced by a gradient in Eulerian velocity variance*. In: Bound.-Layer Met. 24 (1982), S. 3–13.
- LIEBOVITCH, L. R.; TOTH, T.: *A fast algorithm to determine fractal dimensions by box counting*. Physics Letters A 141 (8) (9) (1989), S. 386 – 390.
- LIPOWSKY, J.: *Zur instationären Euler/Lagrange Simulation partikelbeladener Drallströmungen*, Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, (2013).
- LIPOWSKY, J. AND SOMMERFELD, M.: *Influence of particle agglomeration and agglomerate porosity on the simulation of gas cyclones*, In: Proceedings of the 6th International Conference on CFD in Oil & Gas, Metallurgical and Process Industries, SINTEF/NTNU, Trondheim, Norway, 10-12 June 2008, paper CFD08-043.
- LIVESLEY, D.M.; OAKLEY, D.F.; GILLESPIE, R.F.; ELHAUS, B.; RANPURIA, C.K.; TAYLOR, D.; WOOD, W.; YEOMAN, M.I.: *Development and validation of a computational model for spray-gas mixing in spray dryers*, In: Drying '92, Proceedings of the 8th International Drying Symposium (IDS '92), Vol A., Mujumdar, A.S., Filkova, I., Eds., Elsevier, Amsterdam (1992), S. 303-313.
- LÖFFLER, F., *Staubabscheiden*, Georg Thieme Verlag, Stuttgart (1988).
- MASTERS, K.: *Spray Drying Handbook*, 5th Ed., Published by Longman Group Ltd., 491-497, (1991).
- MASTERS, K.: *Current Market-Driven Spray Drying Development Activities*, In: Drying Technology, 22 (6) (2004), S. 1351-1370.
- MANDELBROT, B.: *Die fraktale Geometrie der Natur*, Akademie-Verlag, Berlin, DDR und Birkhäuser Verlag, Basel, Schweiz, (1987).
- MELHEIM, J. A.; HORENDER, S. UND SOMMERFELD, M.: *Modeling of the vortexstructure in a particle laden mixing-layer*, In: Proceedings of the ASME Fluid Eng. Summer Conference (2005), Houston, Texas, USA.
- MINIER, J.-P.: *Closure proposal for the langevin equation model in lagrangian two-phase flow modeling*, In: Proceedings of the 3rd ASME/JSME Joint Fluids Engineering Conference (1999), San Francisco, California, USA.
- MINIER, J. P. UND PEIRANO, E.: *The pdf approach to turbulent polydispersed two-phase flows*, In: Physics Reports-review Section of Physics Letters 352 (1-3) (2001), S. 1-214.
- OAKLEY, D.F.: *Scale-up of spray dryers with the aid of computational fluid dynamics*, Drying Technol. 12 (1-2) (1994), S. 217-233.

- OAKLEY, D.F.; BAHU, R.E.; REAY, D.: *The aerodynamics of cocurrent spray dryers*, In: Proceedings of the 6th International Drying Symposium (IDS '88), Roques, M., Ed., Versailles, France, OP 373-OP 378, (1988).
- O'ROURKE, J.: *Computational Geometry in C*, Second edition, Cambridge University Press, Cambridge, UK, (2001).
- PEITGEN, H.-O.; JÜRGENS, H.; SAUPE, D.: *Bausteine des Chaos: Fraktale*, Springer: Berlin, Heidelberg, New York, Klett-Cotta: Stuttgart, Deutschland, (1992).
- PODVYSOTSKY, A.M.; SHRAIBER, A.A.: *Coalescence and break-up of drops in two-phase flows*, Int. Journal Multiphase Flow 10 (1984), S. 195-209.
- POPE, S. B.: *PDF Methods for Turbulent Reactive Flows*, In: Prog. Energy Combust. Sci. 11 (1985), S. 119-192.
- POPE, S.B.: *Lagrangian Pdf Methods For Turbulent Flows*, In: Annual Review of Fluid Mechanics 26 (1994), S. 23-63.
- POPE, S.B.: *Turbulent flows*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, (2000).
- RANZ, W.E.; MARSHALL JR., W.R.: *Evaporation from drops, Part I*. In: Chem. Eng. Prog. 48 (4) (1952), S. 173 – 180.
- RANZ, W.E.; MARSHALL JR., W.R.: *Evaporation from drops, Part II*. In: Chem. Eng. Prog. 48 (3) (1952), S. 141 – 146.
- ROTTA, J. C.: *Turbulente Strömungen*. Stuttgart : Teubner Verlag, (1972).
- RUBINOW, S. I.; KELLER, J. B.: *The transverse force on spinning sphere moving in a viscous fluid*, J. Fluid Mech. 11 (1961), 447-459
- SANO, Y.; KEEY, R.B.: *The drying of a spherical particle containing colloidal material into a hollow sphere*. In: Chem. Eng. Science 37 (6) (1982), S. 881 – 889.
- SCHÄFER, M.: *FASTEST – Flow Analysis Solving Transport Equations with Simulated Turbulence*, TU-Darmstadt (2010), http://www.fnb.tu-darmstadt.de/forschung_fnb/software_fnb/software_fnb.de.jsp.
- SCHMID, H.-J.; AL-ZAITONE, B.; ARTELT, C.; PEUKERT, W.: *Evolution of the fractal dimension for simultaneous coagulation and sintering*, Chemical Engineering Science 61 (2006), 293-305.
- SCHUCH, G.; LÖFFLER, F., *Über die Abscheidewahrscheinlichkeit von Feststoffpartikeln an Tropfen in einer Gasströmung durch Trägheitseffekte*, Verfahrenstechnik Vol. 12 (1978), 302-306.
- SHEN, Y.; DRAINE, B.T.; JOHNSON, E.T.: *Modeling porous dust grains with ballistic aggregates. I. Geometry and optical properties*, The Astrophysical Journal 689 (2008), 260-275.

SNYDER, W.H.; LUMLEY, J.L.: *Some measurements of particle velocity auto-correlation functions in a turbulent flow*, In: J. Fluid Mech., 48 (1971), S. 41-71.

SOMMERFELD, M.: *Modellierung und numerische Berechnung von partikelbeladenen turbulenten Strömungen mit Hilfe des Euler/Lagrange-Verfahrens*, Shaker, Aachen, (1996).

SOMMERFELD, M.: *Lag3D – Software zur Simulation mit dem Euler-Lagrange Verfahren*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg (2010), http://www-mvt.iw.uni-halle.de/forschung/simulationsverfahren/euler_lagrange_verfahren/

SOMMERFELD, M.: *Validation of a stochastic Lagrangian modelling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence*, In: International Journal of Multiphase Flow 27 (2001), S. 1829-1858.

SOMMERFELD, M.: *Analysis of transport effects of turbulent gas-particle flow in a horizontal channel: Part I. Particle transport*, International Journal of Multiphase Flow 29 (2003), S. 675-699.

SOMMERFELD, M.; KOHNEN, G. UND RUEGER, M.: *Some open questions and inconsistencies of lagrangian particle dispersion models*, In: Proceedings of the 9th Symposium on Turbulent Shear Flows, Kyoto, Japan (1993).

SOUTHWELL, D.; LANGRISH, T.A.G.: *Observations of flow patterns in a spray dryer*, In: Drying Technol. 18 (2000), S. 661-685.

SOUTHWELL, D.; LANGRISH, T.A.G.; FLETCHER, D.F.: *Use of computational fluid dynamics techniques to assess design alternatives for the plenum chamber of a small spray dryer*, in: Abdullah, K., Tambunan, A.H., Mujumdar, A.S. (Eds.), Proc. First Asian-Australian Drying Conference, Bali, Indonesia (1999 a), S. 626-633.

SOUTHWELL, D.; LANGRISH, T.A.G.; FLETCHER, D.F.: *Process intensification in spray dryers by turbulence enhancement*, In: Trans. I. Chem. E. 77 (A) (1999 b), S. 189-205.

STIEB, M.: *Mechanische Verfahrenstechnik 1*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1995).

STRAATSMA, J. VAN; HOUWELINGEN, G.; STEENBERGEN, A.E.; DE JONG, P.: *Spray drying of food products: 1. Simulation models*. In: J. Food Engineering 42 (1999), S. 67 - 72

STÜBING, S.; DIETZEL, M. AND SOMMERFELD, M.: *Modelling agglomeration and the fluid dynamic behaviour of agglomerates*, Proceedings of ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, AJK2011-FED, July 24-29, (2011), Hamamatsu, Shizuoka, Japan.

STÜBING, S.; HORENDER, S.; SOMMERFELD, M. UND LÜBBERS, M.: *Untersuchung der Fluidströmung und deren Auswirkung auf die Partikelflugbahnen in einem Sprühtrockner*, In: Chemie Ingenieur Technik, 79 (12) (2007), S. 2067 – 2073.

ULLUM, T.; SLOTH, J.; BRASK, A. AND WAHLBERG, M.: *CFD Simulation of a spray dryer using an empirical drying model*, 16th International Drying Symposium (IDS 2008), November 9-12, Hyderabad, India.

VERDURMEN, R.E.M.; MENN, P.; RITZERT, J.; BLEI, S.; NHUMAIO, G.C.S.; SONNE SØRENSEN, T.; GUNSING, M.; STRAATSMA, J.; VERSCHUEREN, M.; SIBEIJN, M.; SCHULTE, G.; FRITSCHING, U.; BAUCKHAGE, K.; TROPEA, C.; SOMMERFELD, M.; WATKINS, A.P.; YULE, A.J.; SCHÖNFELDT, H.: *Simulation of agglomeration in spray drying installations: The EDECAD project*. In: *Drying Technology* 22 (6) (2004), S. 1403 – 1461

VON KÁRMÁN, T.; HOWARTH, L.: *On the statistical theory of isotropic turbulence*. In: *Proc. Roy. Soc. London A*164 (1938), S. 192–215

WADELL, H.: *Volume, Shape and Roundness of Quartz Particles*, In: *Journal of Geology* 43 (1935), S. 250-280.

WALKLATE, P. J.: *A random-walk model for dispersion of heavy particles in turbulent air flow*. In: *Bound.-Layer Met.* 39 (1987), S. 175–190.

WIJLHUIZEN, A.E.; KERKHOF, P.A.J.M.; BRUIN, S.: *Theoretical study of the inactivation of phosphatase during spray drying of skim-milk*. In: *Chem. Eng. Science* 34 (1978), S. 651 – 660.

ZBICINSKI, I.; GRAD, J.; STRUMILLO, C.: *Effect of turbulence on heat and mass transfer in the atomisation zone*, In: *Drying Technol.* 14 (2) (1996), 231-244.

ZBICINSKI, I.; LI, X.: *Conditions for accurate CFD modeling of spray-drying process*, In: *Drying Technology*, 24 (9) (2006), 1109-1114.

Lebenslauf

Name: Sebastian Stübing
Geburtstag: 01. März 1979
Geburtsort: Alfeld (Leine)
Familienstand: ledig, keine Kinder

Schulbildung:

07/1998 Erlangung der allgemeinen Hochschulreife am Gymnasium Alfeld

Hochschulstudium:

10/1999 – 02/2005 Studium der Umweltschutztechnik mit der Vertiefung Umweltprozessentechnik an der TU-Clausthal

Berufliche Tätigkeit:

03/2005 – 02/2011 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl Mechanische Verfahrenstechnik der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

04/2011 – 12/2012 Berechnungsingenieur bei CFDnetwork Engineering in München

seit 01/2013 Teamleiter CAE bei der CFDnetwork GmbH in München

seit 03/2014 Vertriebsingenieur für die CFturbo Software & Engineering GmbH in Dresden

Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass ich, Sebastian Stübing, die vorliegende Dissertation entsprechend den in der Promotionsordnung des Zentrums für Ingenieurwissenschaften der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg festgelegten Regeln, ohne Mitwirkung Fremder und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form als Dissertation eingereicht und ist als Ganzes noch nicht veröffentlicht.

Darmstadt, im Dezember 2014

Sebastian Stübing