

# **Numerische Simulation des Sedimentationsprozesses von polydispersen Partikelsystemen**

*F. Bülow, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe;*

*H. Nirschl, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe;*

*W. Dörfler, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe;*

In vielen industriellen Prozessen, beispielsweise in der chemischen Industrie bei der Herstellung diverser Produkte, in der Abwasseraufbereitung, oder auch in der Bioverfahrenstechnik bei der Eindickung von Algensuspensionen spielen Sedimentationsprozesse von sehr kleinen Partikeln eine bedeutende Rolle. Oftmals sind diese Partikel so klein, dass sie der Klasse der Kolloide zugeordnet werden können. Dies sind Partikel mit einem Durchmesser zwischen 1nm und 1 $\mu$ m. Der Sedimentationsprozess von Systemen derartiger Partikel ist nicht nur aufgrund der Brownschen Bewegung komplex und schwer vorherzusagen. Neben einem thermalen Einfluss auf die Bewegung der Partikel sind hier Van-der-Waals-Kräfte und elektrostatische Kräfte nicht mehr zu vernachlässigen.

## **Mathematische Modellierung und Simulation**

Aufgrund der geringen Größe von kolloidalen Partikeln lässt sich die Strömung der kontinuierlichen Phase durch die Stokesgleichung beschreiben. Hierauf basiert die Methode der Stokesian Dynamics. Der Hauptvorteil dieser Methode ist, dass die Partikelgeschwindigkeiten berechnet werden können, ohne die Fluidgeschwindigkeiten zu kennen. Somit wird kein numerisches Gitter benötigt. Eine Dimensionsanalyse zeigt, dass das Verfahren für technisch relevante Partikelsysteme weiter vereinfacht werden kann. Hieraus ergibt sich eine effiziente Simulationsmethode, mit der die Sedimentation einer sehr großen Anzahl von Partikeln in relativ kurzer Zeit simuliert werden kann. Elektrostatische und Van-der-Waals-Kräfte zwischen Partikeln können auf einfache Art und Weise mithilfe der DLVO-Theorie beschrieben und in die Simulation eingebunden werden.

Wir haben die Stokesian Dynamics Methode und die DLVO-Theorie kombiniert, um ein effizientes numerisches Schema zu erhalten, mit dem wir das komplexe Sedimentationsverhalten von mehrere tausend Partikel umfassenden, polydispersen Kolloidsuspensionen simulieren können. Daraus lassen sich relevante Informationen wie zum Beispiel Cluster- oder Agglomeratgröße, sowie der Einfluss der Partikelgrößenverteilung auf diese gewinnen.