

# Entwicklung eines semianalytischen Berechnungswerkzeuges zur Modellierung des Stoffeintrages durch technische Zerstäuber für die Auslegung und Optimierung verfahrenstechnischer Prozesse

D. Beerbaum<sup>1\*</sup>, D. Bernhardt<sup>1</sup>, M. Beckmann<sup>1</sup>, T. Jakobs<sup>2</sup> und T. Kolb<sup>2</sup>

\*daniel.beerbaum@tu-dresden.de

<sup>1</sup> Professur für Energieverfahrenstechnik, Technische Universität Dresden, 01062 Dresden, Deutschland

<sup>2</sup> Institut für Technische Chemie, Karlsruher Institut für Technologie, 76021 Karlsruhe, Deutschland

## Abstract

In einer Vielzahl verfahrenstechnischer Anwendungen werden Zerstäuber zur Erzeugung von Tropfenkollektiven eingesetzt, Beispiele sind: die Sprühtrocknung, die Gaswäsche, die Rauchgasreinigung oder die Brennstoffdosierung. Die Zerstäuber selbst sind auf den jeweiligen Anwendungsfall zugeschnitten und nur in bestimmten Grenzen durch prozesstechnische Maßnahmen anpassbar. CFD-basierte Auslegungsmodelle sind aufgrund des hohen Berechnungsaufwandes für die Realisierung kurzfristig Änderungen zu aufwendig und damit nicht geeignet, um kundenspezifische Anpassungen umzusetzen. Um eine schnelle Optimierung vornehmen zu können ist ein vereinfachtes Berechnungsmodell, das aber die wesentlichen physikalisch-chemischen Vorgänge (Tropfenerzeugung und -bewegung, Phasenumwandlung sowie chemische Reaktionen) abbildet ein sinnvoller Lösungsansatz. Im Rahmen eines AiF-IGF Forschungsvorhabens soll ein solches Modell entwickelt werden. In diesem Beitrag werden erste Ergebnisse zum Modellierungskonzept und zu begleitenden experimentellen Untersuchungen vorgestellt. Dies beinhaltet u. a. die Bestimmung realitätsnaher Spraycharakteristika sowie die Erarbeitung von analytischen Berechnungsansätzen für z. B. die Tropfenbewegung im Spray und die gekoppelten Verdampfungs- und Stoffübertragungsvorgänge.

## Modellkonzept

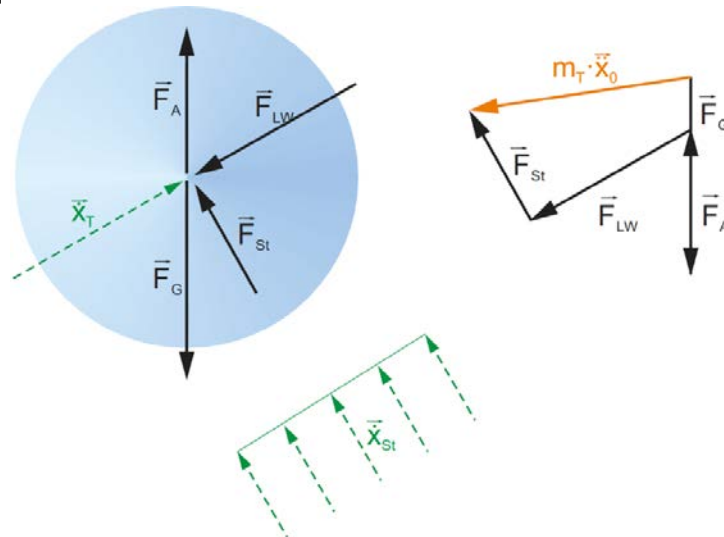
Das zu entwickelnde Spraymodell hat zum Ziel, den Stoffeintrag eines verdampfenden Tropfenkollektivs in einen Reaktionsraum physikalisch korrekt abzubilden. Es ist dazu erforderlich, die wesentlichen interagierenden Vorgänge zu berücksichtigen. Diese sind die Beschreibung der Flugbahn des Tropfens sowie die Verdampfung des Sprühmediums entlang dieser Bahn. Ausgangsparameter für das Modell sind die Zusammensetzung und der thermodynamische Zustand von Sprühmedium und umgebendem Medium, die im Reaktionsraum vorliegende Strömung sowie die Spraycharakteristik. Die Zerfallsmechanismen, die in der Düse sowie unmittelbar am Düsenaustritt wirken, sind nicht Teil der Betrachtungen. Es wird eine stabile Tropfengrößenverteilung nach Abschluss des Sekundärzerfalls vorausgesetzt. Das heißt: Tropfenzerfälle oder -kollisionen finden nicht statt. Im Rahmen des Forschungsprojekts ist die Spraycharakteristik der verwendeten Düsen durch Messungen mit einem Phasen-Doppler-Anemometer, einem Laserbeugungsspektrometer und einer Hochgeschwindigkeitskamera (HG-Kamera) für verschiedene Betriebspunkte bestimmt worden. Aus den Versuchsdaten sind unter anderem empirische Nukiyama-Tanasawa-Verteilungsfunktionen für die Beschreibung der Tropfengrößenverteilung gebildet worden. Weiterhin wurden Informationen zur Geschwindigkeitsverteilung sowie dem Spraywinkel generiert.

Ansatz für die Tropfenbewegung ist eine Beschreibung der Tropfenbahn über das Gleichgewicht der am Tropfen angreifenden Kräfte (Abbildung 1). Berücksichtigt werden Gravitations-, Auftriebs- und aerodynamischen Kräfte sowie die Krafterwirkung durch eine Strömung der umgebenden Gasphase.

Die Lösung der resultierenden Differenzialgleichung (DGL) (Gleichung 1) liefert zeitabhängig Ort und Geschwindigkeit des Tropfens.

$$\frac{\partial^2 \vec{x}}{\partial t^2} = \frac{1}{m_T} \sum \vec{F}_i \quad (1)$$

Beim Auflösen der Gleichung zeigt sich die Abhängigkeit von der Tropfengröße. Es besteht somit ein Zusammenhang zwischen Flugbahn und Verdampfung der Tropfen. Verschattungseffekte im Spray werden über einen angepassten Luftwiderstandsbeiwert nach Putnam und Eisenklam et. al. berücksichtigt [1, 2].



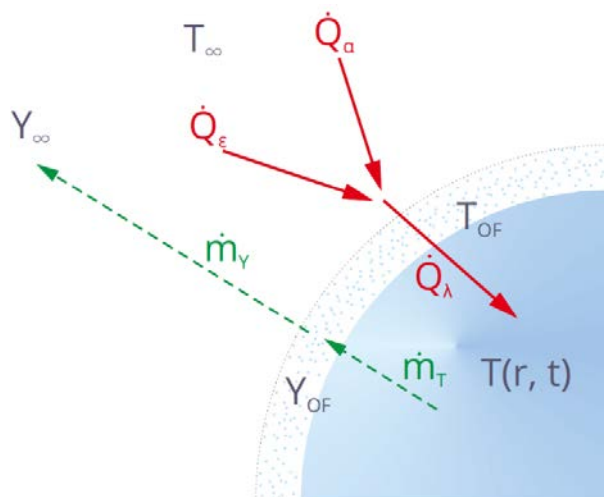
**Abbildung 1** Kräftegleichgewicht am Einzeltropfen unter Berücksichtigung der Gravitations-, Auftriebs- und aerodynamischen Kräfte sowie die Krafteinwirkung durch eine Strömung der umgebenden Gasphase

Grundlage für die Entwicklung der Verdampfungsmodelle ist die Beschreibung der Einzeltropfenverdampfung durch das D<sup>2</sup>-Gesetz (Gleichung 2). Das D<sup>2</sup>-Gesetz geht von einer Limitierung der Verdampfungsrate durch den Wärmetransport in den Tropfen und einer Limitierung durch den Stofftransport von der Phasengrenze in die Umgebung aus (siehe Abbildung 2).

$$d_T(t)^2 = d_0^2 - 8 \cdot a_v \cdot \frac{\rho_v}{\rho_l} \cdot \ln \left( 1 + \frac{c_{p,l}(T_\infty - T_0)}{\Delta h_v} \right) \cdot t \quad (2)$$

Randbedingungen für dieses Gesetz sind [3 S. 600 ff.]:

- kugelförmige Tropfenform
- einseitige Diffusion (d.h. keine oder vernachlässigbare Löslichkeit des Umgebungsgases im Tropfen)
- konstante, homogene Temperatur im Tropfeninneren
- reine Flüssigkeit
- quasistationäre Gasphase, insbesondere ruhende Atmosphäre
- Wärmeübertragung nur durch Wärmeleitung und Konvektion
- keine chemischen Reaktionen



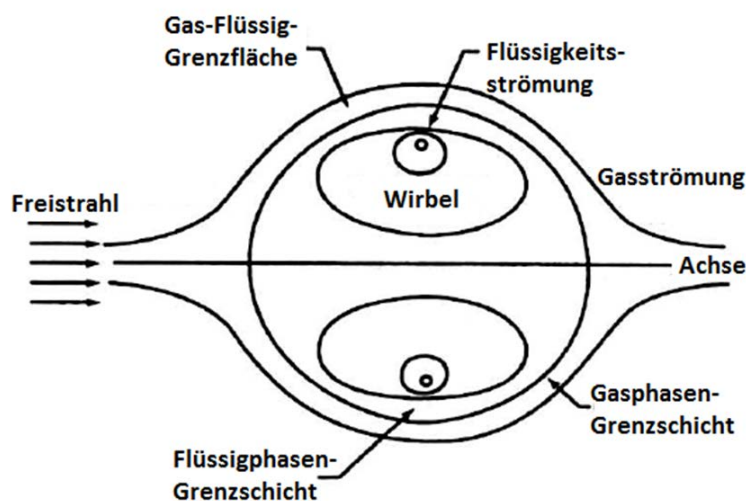
**Abbildung 2** Phänomenologische Beschreibung der Verdampfung nach D<sup>2</sup>-Gesetz

Die erste Annahme ist im Bereich des entwickelten Sprays nach dem Tropfenzerfall aufgrund am Tropfen wirkender Kräfte [4 S. 18 ff.] in guter Näherung an die realen Verhältnisse vertretbar. Die zweite Annahme ist für Flüssigkeiten mit geringer Gaslöslichkeit bei Atmosphärendruck ebenfalls eine gute Näherung. Es werden im Folgenden Korrekturansätze angewendet.

Aus der hohen Geschwindigkeit am Düsenaustritt resultiert eine Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gas, sodass die Annahme einer ruhenden Atmosphäre nicht gilt. Aus dieser Umströmung resultiert eine Wirbelbildung im Tropfeninneren (siehe Abbildung 3). Ausgehend von einer Temperaturdifferenz zwischen Gas und Flüssigkeit stellen sich Temperaturgradienten im Tropfeninneren von den Wirbelkernen zur Tropfenoberfläche ein, womit nicht mehr von einer homogenen Temperaturverteilung ausgegangen werden kann. [5 S. 35 ff.]

Zur Berücksichtigung der Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gas, sowie der daraus resultierenden Temperaturgradienten im Tropfeninneren, wird ein Ansatz nach Abramzon und Sirignano verwendet [6]. Die für die Verdampfung relevante temporäre Temperatur an der Tropfenoberfläche wird nach dem Fourier'schen Wärmeleitansatz für eine radiale Temperaturverteilung berechnet. Die Abweichung gegenüber der aus den Wirbeln resultierenden Temperaturverteilung wird über die Einführung eines effektiven Temperaturleitkoeffizienten berücksichtigt.

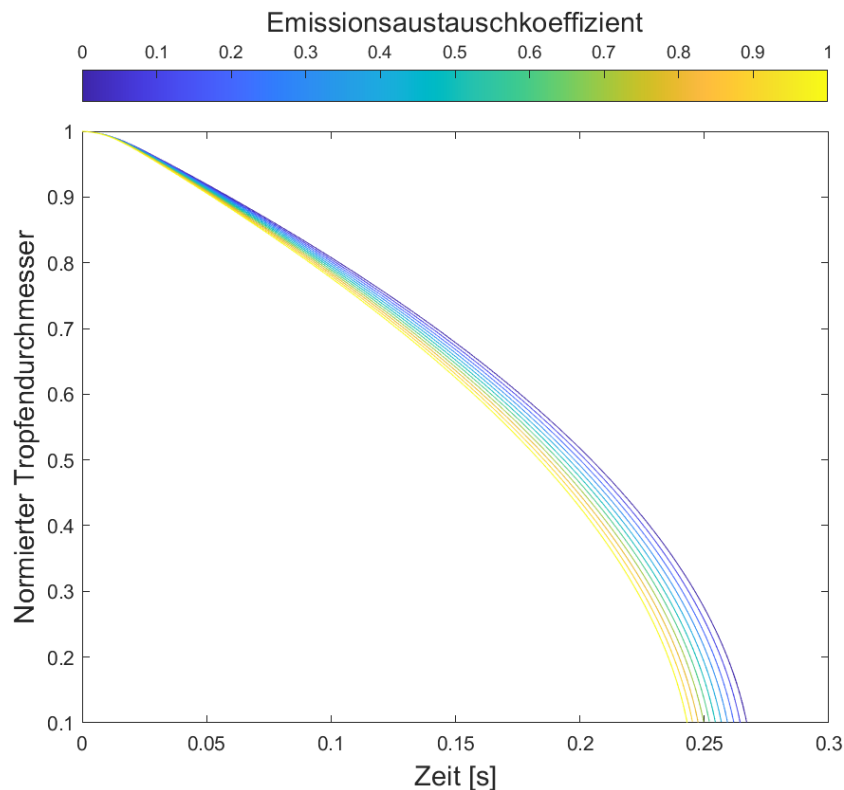
Für die Tropfenverdampfung von Gemischen wird der beschriebene Ansatz für die Temperaturverteilung in abgewandelter Form – unter Einführung einer effektiven Lewiszahl – zur Berechnung des Stofftransports innerhalb des Tropfens genutzt [5 S. 98 ff.]. Es lässt sich hierüber die Konzentration der Einzelkomponenten an der Tropfenoberfläche bestimmen. Ausgehend davon werden die Verdampfungsanteile der Einzelkomponenten nach dem Raoul'schen Gesetz bestimmt.



**Abbildung 3** Wirbelströmung im Tropfen aufgrund von Umströmung [5 S. 35]

Der zugrundeliegende Berechnungsansatz kann zusätzlich um den Einfluss von Strahlungswärme erweitert werden. Die zusätzlich aufgenommene Wärme wirkt sich auf die Verdampfungsrate und Oberflächentemperatur des Tropfens aus. In Abbildung 4 ist der Strahlungseinfluss für die Verdampfung eines  $150\ \mu\text{m}$  großen Tropfens bei einer Reaktorwandtemperatur von  $1000\ \text{K}$  für verschiedene Emissionskoeffizienten dargestellt. Bei  $\varepsilon = 0$  nimmt der Tropfen keine Wärme durch Strahlung auf. Für  $\varepsilon = 1$  kann der Tropfen als schwarzer Strahler angesehen werden und nimmt das mögliche Maximum der übertragbaren Wärme auf.

Es wird deutlich, dass der Einfluss auf die Verdampfungszeit gering ist, insbesondere wenn berücksichtigt wird, dass der reale Emissionskoeffizient  $\varepsilon < 1$  ist und zusätzlich Reflektion und Transmission am Tropfen auftreten. Der Strahlungseinfluss ist somit für die meisten Anwendungsfälle vernachlässigbar.



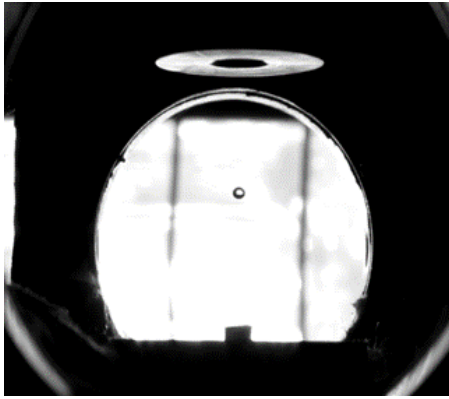
**Abbildung 4** Strahlungseinfluss durch Variation des Emissionskoeffizienten auf die Tropfenverdampfung

### Experimentelle Untersuchungen am Ultraschall-Levitator

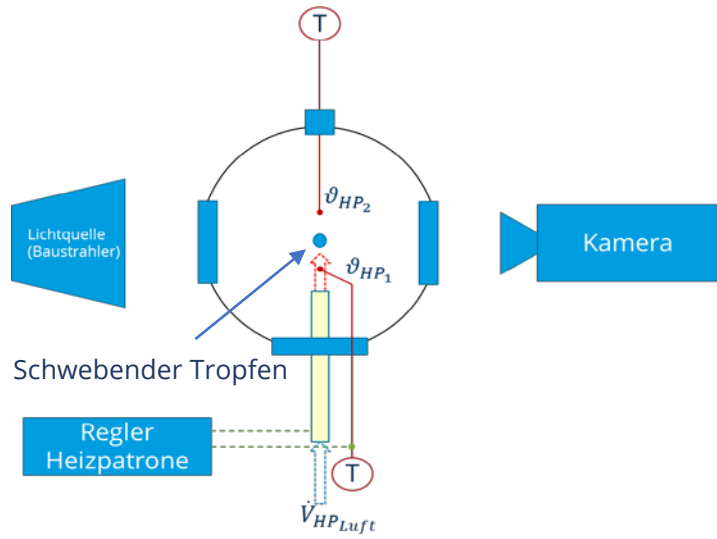
Für die Validierung der formulierten Modellansätze werden experimentelle Untersuchungen zur Einzeltropfenverdampfung an einem Ultraschall-Levitator durchgeführt. Hierzu wird ein Einzeltropfen über eine stehende Resonanzwelle in einer ruhenden schwebenden Position gehalten (siehe Abbildung 5), sodass die Untersuchung der vollständigen Verdampfung möglich ist. Besonders ist hierbei das Minimieren möglicher Störeinflüsse.

In Abbildung 6 ist als Draufsicht der Messaufbau an den vier Öffnungen des Levitators dargestellt. Über eine mit Luft durchströmte, temperaturgeregelte Heizpatrone wird die nahe Umgebungsluft am schwebenden Tropfen erhitzt. Hinter dem Tropfen wird eine weitere Referenztemperatur gemessen. Die Verdampfung des Tropfens wird mit einer HG-Kamera erfasst. Über die Auswertung des aufgezeichneten Bildmaterials wird die Abnahme des Tropfendurchmessers über die Verdampfungszeit bestimmt.

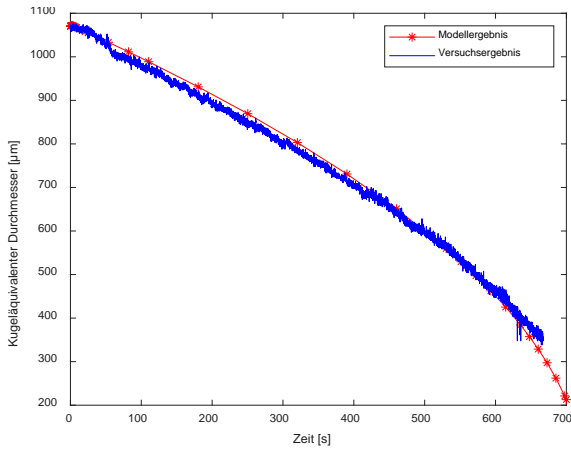
Die experimentellen Untersuchungen sind mit verschiedenen Reinstoffen, Zweistoffgemischen, Lösungen und Suspensionen durchgeführt worden. Dabei konnte ein Temperaturbereich von  $20 - 150\ ^\circ\text{C}$  realisiert werden. Die Auswertungen zeigen gute Übereinstimmung der Modellansätze mit den Versuchsdaten (siehe Abbildung 7).



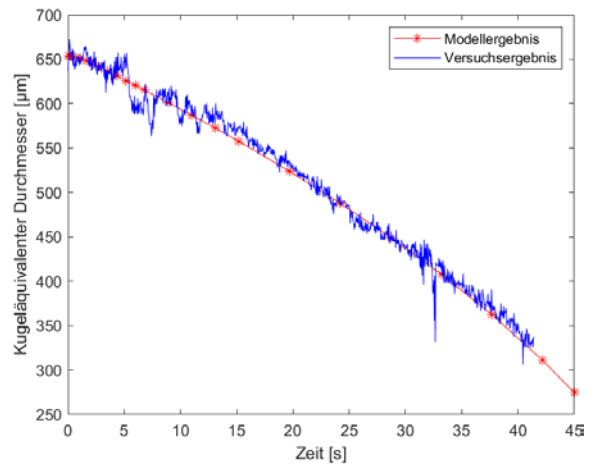
**Abbildung 5** Schwebender Tropfen im Levitator



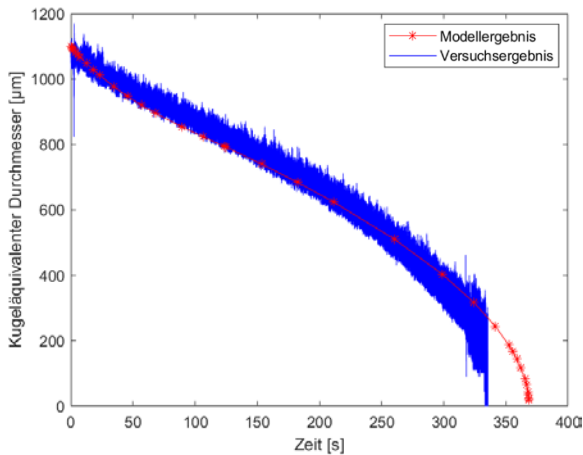
**Abbildung 6** Messaufbau am Levitator (Draufsicht)



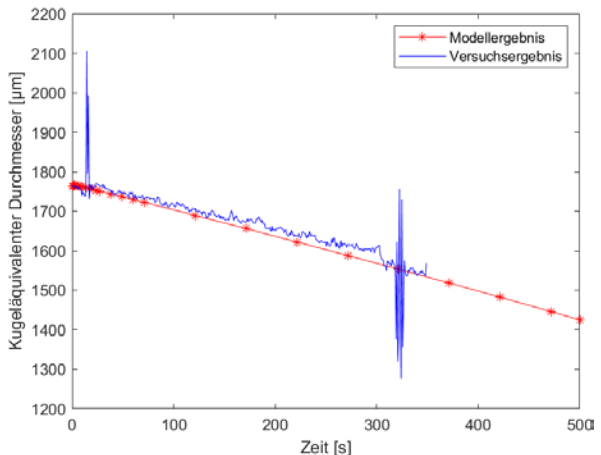
Wassertropfen bei 32°C Umgebungstemperatur und 60% Luftfeuchte



Wassertropfen bei 75°C Umgebungstemperatur und 60% Luftfeuchte



Ethanol/Wassertropfen (50/50 M-%) bei 33°C Umgebungstemperatur und 60% Luftfeuchte

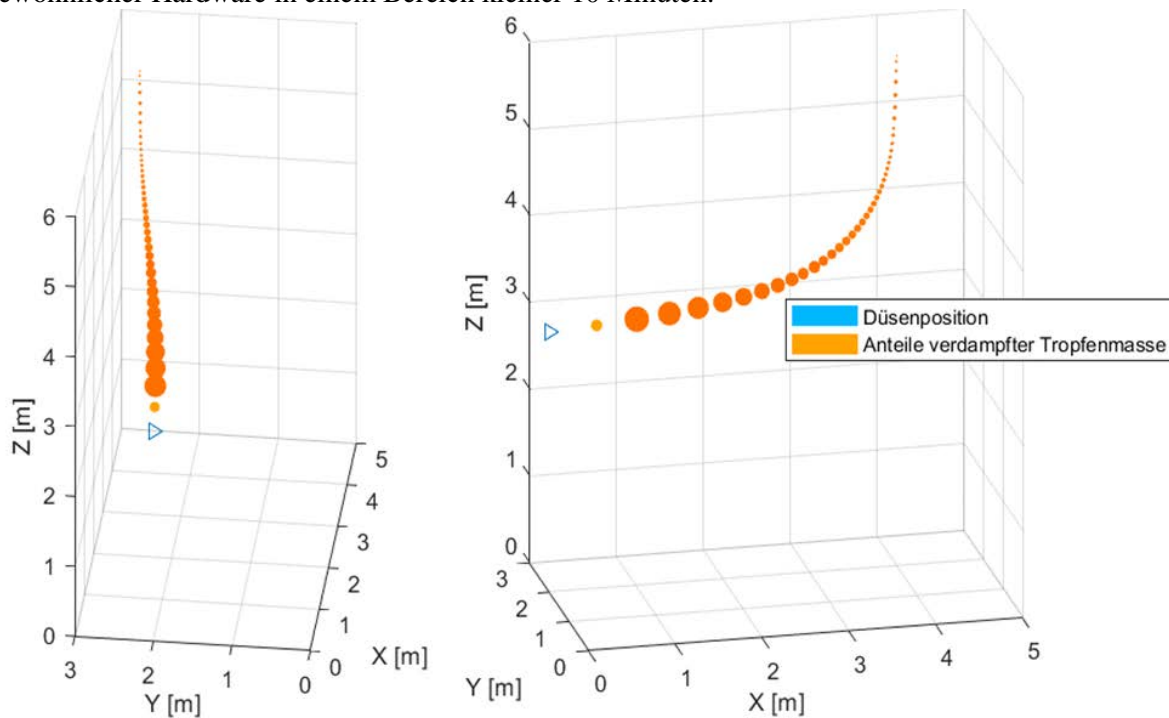


Ammoniak/Wassertropfen (25/75 M-%) bei 32°C Umgebungstemperatur und 60% Luftfeuchte

**Abbildung 7** Vergleich Verdampfungsversuche einzelner Tropfen mit Modellergebnissen der Verdampfung

### Vollständige Modellierung

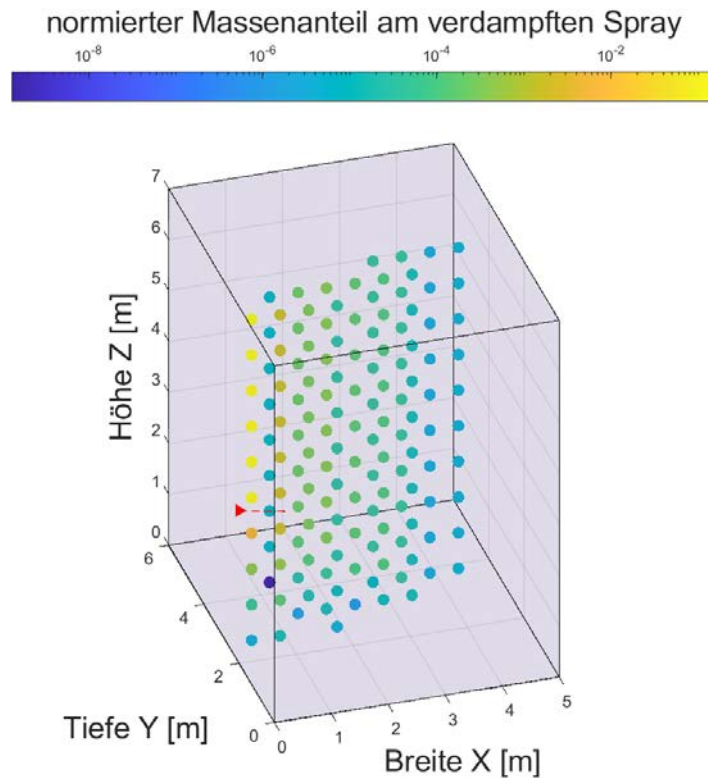
Aus der Koppelung von Tropfenbewegung und -verdampfung resultiert ein DGL-System. Die Lösung des Gleichungssystems liefert zeitlich und räumlich aufgelöst die Stofffreisetzung bei der Verdampfung eines Tropfens (siehe Abbildung 8). Angewendet auf ein Tropfenkollektiv, welches über die Betriebsparameter der Düse und der resultierenden Spraycharakteristik beschrieben ist, kann der Stoffeintrag in einen Reaktionsraum unter Berücksichtigung der dort vorherrschenden Bedingungen bestimmt werden. Abbildung 9 zeigt den lokalen Massenanteil an verdampften Sprühmedium, der durch eine Düse in einen Reaktorraum eingetragen wird. Dabei ist der Reaktor durch eine Diskretisierung in 10x10x10 Volumenelemente aufgeteilt. Jede farbige Kugel repräsentiert ein Volumenelement mit Anteil am verdampften Sprühmedium. Die Strömung im Reaktor hat großen Einfluss auf die Verteilung. So wird das verdampfte Medium mit der Strömung in Z-Richtung verteilt und ausgetragen. Das DGL-System wurde hierzu in einen MATLAB-Code überführt. Zur Lösung der DGL werden die MATLAB zugehörigen ODE-Solver genutzt. Die benötigte Rechenzeit liegt mit gewöhnlicher Hardware in einem Bereich kleiner 10 Minuten.



**Abbildung 8** Lokale Anteile an verdampfter Tropfenmasse (Kugelgröße repräsentiert Massenanteil), Anfangsbedingungen: siehe Tabelle 1

**Tabelle 1** Anfangsbedingungen für Berechnung in Abbildung 8

Düsenposition $\vec{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ :	$\begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} m$
Tropfengeschwindigkeit $t=0$ , $\vec{\dot{x}} = \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \\ \dot{z} \end{pmatrix}$ :	$\begin{pmatrix} 49 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{m}{s}$
Tropfenradius $t=0$ :	250 $\mu m$
Tropfentemperatur $t=0$ :	303 K
Umgebungsgeschwindigkeit $\vec{\dot{X}} = \begin{pmatrix} \dot{X} \\ \dot{Y} \\ \dot{Z} \end{pmatrix}$ :	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 5 \end{pmatrix} \frac{m}{s}$
Umgebungstemperatur:	1000 K
Sprühmedium:	Wasser
Umgebungsmedium:	Luft



**Abbildung 9** Lokale Massenanteile an verdampften Sprühmedium im Reaktorraum, Anfangsbedingungen: siehe Tabelle 2

**Tabelle 2** Anfangsbedingungen für Berechnung in Abbildung 9

Dimensionen Reaktor BxTxH	5x6x7 m
Düsenposition $\vec{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ :	$\begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} m$
Düsenausrichtung (x/y-Ebene)	15°
Düsenausrichtung (x/z-Ebene)	-20°
Tropfentemperatur (t=0):	30 °C
Umgebungsgeschwindigkeit $\vec{X} = \begin{pmatrix} \dot{X} \\ \dot{Y} \\ \dot{Z} \end{pmatrix}$ :	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 10 \end{pmatrix} \frac{m}{s}$
Umgebungstemperatur:	1050 °C
Sprühmedium:	Wasser
Umgebungsmedium:	Rauchgas

### Zusammenfassung

Der entwickelte Ansatz zur Beschreibung des Stoffeintrags durch Sprays in einen Reaktionsraum basiert auf der analytischen Betrachtung von Tropfenbewegung und -verdampfung. Die Beschreibung der Tropfenverdampfung konnte bereits durch Verdampfungsversuche an Einzeltropfen mit einem Ultraschall-Levitor validiert werden. Durch das Verknüpfen dieser Ansätze und das Anwenden dieser auf empirische Verteilungsfunktionen und Parameter, welche die Charakteristik des Sprays einer Sprühdüse beschreiben, ist die schnelle Berechnung beliebiger Düsenkonstellationen und Reaktorparameter möglich. Zukünftig ist die Validierung des Modells an realen Anlagen geplant.

## Literatur

- [1] Putnam A.: *Integratable form of droplet drag coefficient*, J. Am. Rocket Soc., Vol. 31, S. 1467–1468, 1961
- [2] Eisenklam P., Arunachlaman S. A., Weston J. A.: *Evaporation rates and drag resistance of burning drops*, in: 11th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, S. 715–728, 1967
- [3] Polifke W., Kopitz J.: *Wärmeübertragung Grundlagen, analytische und numerische Methoden*, 2. München: Pearson Studium, 2009
- [4] Schneider, B. M.: *Experimentelle Untersuchung zur Spraystruktur in transienten, verdampfenden und nichtverdampfenden Brennstoffstrahlen unter Hochdruck*, Zürich : Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, 2003.
- [5] Sirignano, W. A.: *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*, 2. New York, USA : Cambridge University Press, 2010.
- [6] Abramzon B., Sirignano W. A.: *Droplet vaporization model for spray combustion calculations*, International Journal of Heat and Mass Transfer. 32, 9, S. 1605 – 1618, 1989