

**KfK 4329
Dezember 1987**

Hydrodynamische Modellierung einer Trennstufe

**K. Nagel
Institut für Datenverarbeitung in der Technik
Projekt Wiederaufarbeitung und Abfallbehandlung**

Kernforschungszentrum Karlsruhe

Kernforschungszentrum Karlsruhe

Institut für Datenverarbeitung in der Technik
Projekt Wiederaufarbeitung und Abfallbehandlung

KfK 4329
PWA 74/87

Hydrodynamische Modellierung einer Trennstufe

Klaus Nagel

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

ISSN 0303-4003

Zusammenfassung

Zur Beschreibung hydrodynamischer Vorgänge in verfahrenstechnischen Trennstufen wurden die sogenannten Stufen- und Dispersionsmodelle herangezogen. Die Modelle benötigen die stofflichen Bilanzgleichungen und die jeweiligen apparativen Randbedingungen zu ihrer Lösung. Die Vorgehensweise, um stationäre Lösungen zu erhalten, und die prinzipiellen Unterschiede der Modelle konnte aufgezeigt werden, außerdem gelang es die Abhängigkeiten der Lösungen von Prozeßparametern darzustellen.

Im Fall des Stufenmodells waren auch zeitabhängige Rechnungen möglich. Diese Berechnungen demonstrierten auch anschaulich den Einfluß unterschiedlicher Randbedingungen einer Trennstufe.

Hydrodynamical Models of Extraction

The hydrodynamical operation of an extractor has been modelled. The basis of these models are first the subdivision of the extractor into well-mixed discrete stages, and second the diffusion. The calculations need material balances around each phase of a stage, or in a differential slice and the appropriate boundary conditions. The methods for getting time-independent solutions, fundamental differences of the models, as well as dependences of the results on operation parameters have been demonstrated.

In the case of the discrete stage model time-dependent calculations have been performed, and the results showed clearly influences of different boundary conditions.

Inhaltsverzeichnis

	Seite
I Einleitung	3
II Modellansätze	4
III Ausführung der Modelle	5
IV Ergebnisse	13
V Schlußfolgerungen	20
Literatur	21

I Einleitung

Die Trennung verschiedener Stoffsysteme in flüssiger Phase spielt in der chemischen Verfahrenstechnik eine große Rolle. Man möchte diese Systeme in kurzer Zeit bei geringem apparativem Aufwand möglichst vollständig trennen. Dies läßt sich in technischen Prozessen im allgemeinen nicht in vollem Umfange erfüllen, und man sucht abhängig von der Aufgabenstellung ein Optimum zu erreichen. Da sich auch die optimalen Bedingungen mit der Zeit ändern können, sollte ein solcher Trennprozeß überwacht- und steuerbar sein. Dies bedeutet jedoch die Kenntnisse zumindest der Haupteinflußgrößen des Verfahrens.

Ähnliche Probleme treten in der Wiederaufarbeitung abgebrannter Kernbrennstoffe auf. Aus dem Auflöser kommt das in Salpetersäure gelöste Brennstoffmaterial. Aus dieser Lösung will man Uran und Plutonium zur Wiederverwendung von den stark radioaktiven Spaltstoffen trennen.

Die hydrodynamischen Vorgänge glaubt man recht gut zu kennen, die Stoffaustauschmechanismen jedoch sind von vielen Parametern beeinflußt und nur unvollständig verstanden. Diese Parameter, wie z.B. Benetzungsgrad der Einbauten, verändern sich im Laufe des Extraktionsprozesses und damit auch das Trennergebnis. Aus diesem Grunde werden die verfahrenstechnischen Apparate vor ihrem Einsatz im Prozeß vielerlei Experimenten unterworfen, um diese Einflüsse abschätzen zu können. Das Verhalten der Parameter erlaubt dann die Steuerung des eigentlichen Prozesses /1/.

In der vorliegenden Arbeit werden nun zuerst die mathematischen Grundlagen der hydrodynamischen Vorgänge dargestellt. Daran schließen sich Ergebnisse unterschiedlicher Modellrechnungen und Vergleiche der Modelle an.

II Modellansätze

Extraktion ist die Überführung eines Stoffes aus der Raffinat- in die Extraktphase. Bei der hier zu betrachtenden flüssig-flüssig-Extraktion ist der Feed die wäßrige Raffinatphase, dieser wird im Gegenstrom das organische Extraktionsmittel zugeleitet. Die beiden Flüssigkeiten dürfen nicht mischbar sein, während der zu extrahierende Stoff in beiden löslich sein muß. In Gegenstromverfahren mit unmittelbarem Phasenkontakt werden in jeder Stufe die Phasen zunächst dispergiert, z.B. in der Sprudelschicht von Siebböden oder in der Rührzone von Mischbatterien. Zunächst stellt sich ein Konzentrationsgleichgewicht ein, danach trennen sich die Phasen aufgrund ihrer Nichtmischbarkeit wieder und werden dann getrennt aus der Stufe abgeleitet.

Die Dispergierung der Phasen schafft die für den Stoffaustausch wichtige Oberfläche. Die zur Oberflächenbildung notwendige Energie wird durch den Gegenstrom der beiden Phasen allein nicht aufgebracht, es muß deshalb zusätzliche Energie von außen zugeführt werden.

Ideale Extraktionsverhältnisse wären Pfropfenströmung bei hohem Dispergierungsgrad. Eine hohe Dispergierung heißt starke Turbulenz und bedeutet damit immer Verminderung des Konzentrationsgradienten. Aufgrund der Turbulenz werden sowohl Tröpfchen der dispergierten Phase von der kontinuierlichen als auch kontinuierliche Phase durch Tröpfchen mitgerissen. Auf diese Weise kommt es zur Rückvermischung, die die Konzentrationsunterschiede reduziert. Diese Rückvermischung, auch entrainment genannt, wird mit Hilfe mathematischer Modelle quantitativ beschrieben.

In den dieser Arbeit zugrundeliegenden Modellen wird die Kolonne im ersten Fall in Stufen eingeteilt. Man nimmt dabei an, daß jede Phase in jeder Stufe vollständig vermischt wird, und daß die Phasen die Stufen entweder mit dem Hauptstrom oder mit dem Rückfluß verlassen. Der Rückfluß ist ein hypothetischer Stoffstrom und wird als Bruchteil des Hauptstromes ausgedrückt.

Im zweiten Modell, dem sogenannten Dispersionsmodell, ersetzt man die Rückvermischungsströme durch Dispersionsströme. In Analogie zur Molekulardiffusion werden diese proportional dem Konzentrationsgradienten angenommen. In Anlehnung an das Stufenmodell hat man es jetzt mit einer Kolonne unendlicher Stufenzahl zu tun, d.h. man betrachtet sie als Kontinuum.

Diese beiden Modelle werden nun ausführlich dargestellt und ihre mathematischen Lösungen untersucht.

III Ausführung der Modelle

In diesem Kapitel sollen nun die qualitativen Modellvorstellungen in eine mathematische Form gebracht und Lösungsansätze angegeben werden, die eine quantitative Beschreibung einer Extraktionsstufe erlauben.

Stufenmodell

Abbildung 1 zeigt in schematischer Darstellung die hydrodynamischen Grundlagen des Stufenmodells /2/.

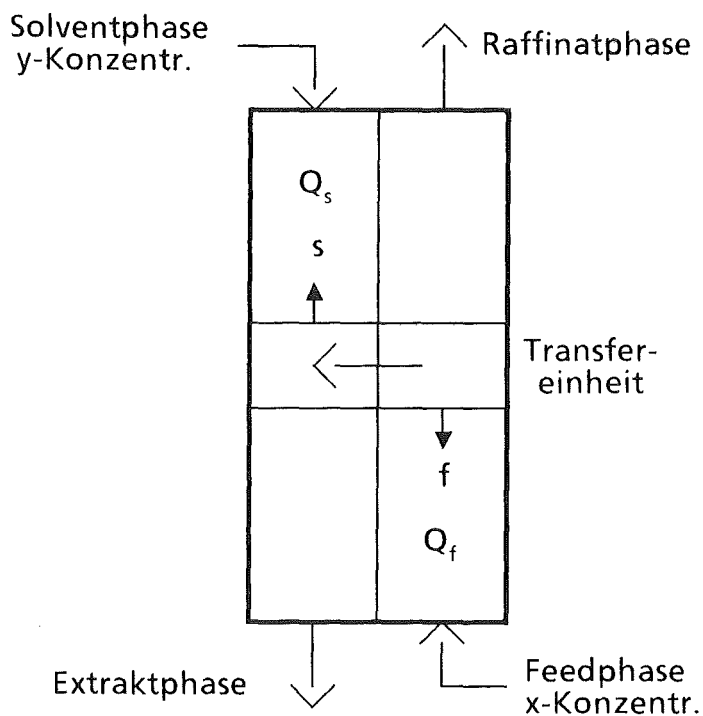


Abbildung 1: Schematische Darstellung einer Extraktionsstufe

Ausgehend von Abbildung 1 ergeben die Bilanzgleichungen der Stufen folgendes Gleichungssystem:

$$\frac{dx_n}{dt} = Q_f (x_{n-1} - x_n + f (x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1})) - \frac{Q_f}{Q_s} K a v (x_n - m y_n) \quad (1)$$

$$\frac{dy_n}{dt} = Q_s (y_{n+1} - y_n + s (y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1})) + \frac{Q_f}{Q_s} K a v (x_n - m y_n) \quad (2)$$

wobei:

- x = Konzentration der Raffinatphase,
- y = Konzentration der Extraktphase,
- Q_f = Flußrate der Raffinatphase,
- Q_s = Flußrate der Extraktphase,
- f = Rückvermischungskoeffizient der Raffinatphase,
- s = Rückvermischungskoeffizient der Extraktphase,
- $K a v$ = Produkt aus Übergangskoeffizient und Oberfläche,
- m = Verteilungskoeffizient im Gleichgewicht.

Die zur Lösung dieser linearen Differentialgleichungen notwendigen Randbedingungen ergeben sich aus den Bilanzgleichungen für die Nullte- und (N + 1)-Stufe. Unter der Annahme, daß die Rückströme die Kolonne nicht verlassen können und außerhalb kein Stoffaustausch stattfindet, ergibt sich:

$$\frac{dx_0}{dt} = Q_f (x_i - x_0 + f(x_1 - x_0)) \quad (3)$$

$$\frac{dx_{N+1}}{dt} = Q_f (x_N - x_{N+1} + f(x_N - x_{N+1})) \quad (4)$$

$$\frac{dy_0}{dt} = Q_s (y_1 - y_0 + s(y_1 - y_0)) \quad (5)$$

$$\frac{dy_{N+1}}{dt} = Q_s (y_i - y_{N+1} + s(y_N - y_{N+1})) \quad (6)$$

Mit:

$$T = \frac{K a v}{Q_s} \quad \text{und} \quad F = \frac{m Q_f}{Q_s}$$

Folgt für die Gleichungen (1) und (2):

$$\frac{dx_n}{dt} = Q_f (x_{n-1} - x_n + f(x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1})) - Q_f T (x_n - m y_n) \quad (1a)$$

$$\frac{dy_n}{dt} = Q_s (y_{n+1} - y_n + s(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1})) + Q_f T (x_n - m y_n) \quad (2a)$$

In dimensionsloser Darstellung haben die Gleichungen (1a) und (2a) folgendes Aussehen:

$$\frac{d\Psi_n}{dt} = Q_f (\Psi_{n-1} - \Psi_n + f(\Psi_{n+1} - 2\Psi_n + \Psi_{n-1})) - Q_f T (\Psi_n - 1 + F \Gamma_n) \quad (7)$$

$$\frac{d\Gamma_n}{dt} = Q_s (\Gamma_{n+1} - \Gamma_n + s(\Gamma_{n+1} - 2\Gamma_n + \Gamma_{n-1})) + Q_f T (\Psi_n - 1 + F \Gamma_n) \quad (8)$$

Die dimensionslosen Ausdrücke der Konzentrationen sind:

$$\Psi_n = \frac{x_i - x_n}{x_i - my_i} \quad \text{für die Raffinatphase} \quad (9)$$

$$\Gamma_n = \frac{Q_s (y_n - y_i)}{Q_f (x_i - my_i)} \quad \text{für die Extraktphase} \quad (10)$$

Die zeitabhängigen Gleichungen (7) und (8) lassen sich nicht geschlossen lösen und es müssen numerische Verfahren zur Berechnung angewendet werden. Auf die numerischen Verfahren wird im Kapitel *Ergebnisse* eingegangen. Im weiteren beschränken wir uns auf die Beschreibung des stationären Zustands der Kolonne. In diesem Fall gilt:

$$x_{n-1} - x_n + f(x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}) = T(x_n - my_n) \quad (11)$$

$$m(y_n - y_{n+1} - s(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1})) = FT(x_n - my_n) \quad (12)$$

$$F(x_{n-1} - x_n + f(x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1})) = m(y_n - y_{n+1} - s(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1})) \quad (13)$$

Aus dem Differentialgleichungssystem (11)-(13) ergibt sich folgendes Polynom:

$$f(1+s)\lambda^3 - [(1+s)(1+T) + f(2+3s+FT)]\lambda^2 + [(1+f)(1+FT) + s(2+3f+T)]\lambda = s(1+f) \quad (14)$$

Die Nullstellen dieses Polynoms führen zu folgendem Lösungsansatz:

$$\Psi_n = A_0 + A_1\lambda_1^n + A_2\lambda_2^n + A_3\lambda_3^n \quad (15)$$

Bevor wir die Konstanten A_0 , A_1 , A_2 und A_3 berechnen, schreiben wir die Randbedingungen (3)-(6) für den stationären Fall nieder und bringen sie zusammen mit den Gleichungen (11)-(13) unter Zuhilfenahme der Ansätze (9) und (10) in die dimensionslose Form. Aus den Gleichungen (3)-(6) ergibt sich:

$$f\Psi_1 = (1+f)\Psi_0 \quad (16)$$

$$\Psi_N = \Psi_{N+1} \quad (17)$$

$$\Gamma_0 = \Gamma_1 \quad (18)$$

$$s\Gamma_N = (1+s)\Gamma_{N+1} \quad (19)$$

Die Gleichungen (11)-(13) ergeben:

$$\Psi_n - \Psi_{n-1} - f(\Psi_{n+1} - 2\Psi_n + \Psi_{n-1}) = T(1 - \Psi_n - F\Gamma_n) \quad (20)$$

$$\Gamma_n - \Gamma_{n+1} - s(\Gamma_{n+1} - 2\Gamma_n + \Gamma_{n-1}) = T(1 - \Psi_n - F\Gamma_n) \quad (21)$$

$$\Psi_n - \Psi_{n-1} - f(\Psi_{n+1} - 2\Psi_n + \Psi_{n-1}) = \Gamma_n - \Gamma_{n+1} - s(\Gamma_{n+1} - 2\Gamma_n + \Gamma_{n-1}) \quad (22)$$

Durch Einsetzen der Gleichungen (20) und (21) in die Randbedingungen (16)-(19) ergeben sich die Konstanten des Lösungsansatzes. Es folgt:

$$A_0 + (1 + f(1 - \lambda_1))A_1 + (1 + f(1 - \lambda_2))A_2 + (1 + f(1 - \lambda_3))A_3 = 0 \quad (16a)$$

$$\lambda_1^N(\lambda_1 - 1)A_1 + \lambda_2^N(\lambda_2 - 1)A_2 + \lambda_3^N(\lambda_3 - 1)A_3 = 0 \quad (17a)$$

$$\begin{aligned} & [B_1(1 - \lambda_1) - B_2(1 - \lambda_1)\lambda_1 + B_3(1 - \lambda_1)\lambda_1^2]A_1 + \\ & [B_1(1 - \lambda_2) - B_2(1 - \lambda_2)\lambda_2 + B_3(1 - \lambda_2)\lambda_2^2]A_1 + \\ & [B_1(1 - \lambda_3) - B_2(1 - \lambda_3)\lambda_3 + B_3(1 - \lambda_3)\lambda_3^2]A_1 = 0 \end{aligned} \quad (18a)$$

wobei:

$$B_1 = 1 + f + s + sf + FT + fFT$$

$$B_2 = 1 + T + 2f + s + sT + 2sf + fFT$$

$$B_3 = f(1 + s)$$

Und:

$$\begin{aligned} & A_0 + (\lambda_1^N + \lambda_1^{N-2}(1 - \lambda_1)C_1 - \lambda_1^{N-1}(1 - \lambda_1)C_2 + \lambda_1^N(1 - \lambda_1)C_3)A_1 + \\ & (\lambda_2^N + \lambda_2^{N-2}(1 - \lambda_2)C_1 - \lambda_2^{N-1}(1 - \lambda_2)C_2 + \lambda_2^N(1 - \lambda_2)C_3)A_2 + \\ & (\lambda_3^N + \lambda_3^{N-2}(1 - \lambda_3)C_1 - \lambda_3^{N-1}(1 - \lambda_3)C_2 + \lambda_3^N(1 - \lambda_3)C_3)A_3 = 1 \end{aligned} \quad (19a)$$

wobei:

$$C_1 = \frac{s(1 + f)}{T}$$

$$C_2 = \frac{1 + f + s + 2sf + sT + FT + fFT}{T}$$

$$C_3 = \frac{f(1 + s + FT)}{T}$$

damit ist die allgemeine Lösung des stationären Zustands des Stufenmodells gegeben.

In vielen Beispielen bezieht man diese Konzentrationsrechnungen auf die Ergebnisse mit Pfropfenströmung. D.h. man bildet den Quotienten aus:

$$\Psi_N / \Psi_{N0}$$

Ψ_{N0} läßt sich aus dem Vorausgehenden berechnen, unter der Voraussetzung:

$$s = f = 0.$$

Aufgrund der Gleichungen (11) und (12) ergibt sich:

$$\begin{aligned} x_{n-1} - x_n &= T(x_n - my_n) \\ m(y_n - y_{n+1}) &= FT(x_n - my_n) \end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$x_{n+1} - x_n = \frac{1 + FT}{1 + T} (x_n - x_{n-1})$$

oder:

$$x_n = x_1 + (x_1 - x_0)(\lambda + \lambda^2 + \dots + \lambda^{n-1})$$

mit:

$$\lambda = \frac{1 + FT}{1 + T}$$

Die dimensionslose Raffinatkonzentration der Pfropfenströmung errechnet sich aus:

$$\Psi_{no} = \frac{\lambda^n - 1}{F\lambda^N - 1} \quad (23)$$

Dispersionsmodell

In diesem Modell resultieren die Bilanzgleichungen aus der Betrachtung eines infinitesimalen Abschnitts. Daraus ergibt sich:

$$\frac{dx}{dt} = e_f \frac{d^2x}{dz^2} - V_f \frac{dx}{dz} - Ka(x - my) \quad (24)$$

$$\frac{dy}{dt} = e_s \frac{d^2y}{dz^2} - V_s \frac{dy}{dz} - Ka(x - my) \quad (25)$$

wobei:

- x = Konzentration der Raffinatphase,
- y = Konzentration der Extraktphase,
- V_f = Geschwindigkeit der Raffinatphase,
- V_s = Geschwindigkeit der Extraktphase,
- e_f = Dispersionskoeffizient der Raffinatphase,
- e_s = Dispersionskoeffizient der Extraktphase.

Die zeitlichen Konzentrationsänderungen werden durch den Dispersionsanteil, den konvektiven Teil und den Stoffaustausch beschrieben. Die Vorzeichen von konvektivem Teil und Stoffaustausch hängen von der experimentellen Prozeßführung ab. Auch in diesem Modell bringen wir die Gleichungen (24) und (25) mit Hilfe der Gleichungen (9) und (10) in eine dimensionslose Form:

$$\frac{H}{V_f} \frac{d\Psi}{dt} = - \frac{d\Psi}{d\omega} - \frac{1}{P} \frac{d^2\Psi}{d\omega^2} - T(\Psi - 1 + F\Gamma) \quad (24a)$$

$$\frac{H}{V_s} \frac{d\Gamma}{dt} = \frac{d\Gamma}{d\omega} - \frac{1}{R} \frac{d^2\Gamma}{d\omega^2} - T(\Psi - 1 + F\Gamma) \quad (25a)$$

Weiterhin wurden folgende dimensionslose Parameter eingeführt:

$$\omega = \frac{z}{H} \quad \text{Abstand in der Kolonne}$$

$$P = \frac{V_f H}{e_f} \quad \text{Pecletzahl der Raffinatphase}$$

$$R = \frac{V_s H}{e_s} \quad \text{Pecletzahl der Extraktphase}$$

$$T = \frac{K a H}{V_f} \quad \text{Stoffaustauschzahl}$$

Für den stationären Zustand des Systems ergibt sich folgendes Differentialgleichungssystem /3/:

$$\frac{d^2\Psi}{d\omega^2} - P \frac{d\Psi}{d\omega} = TP(\Psi - 1 + F\Gamma) \quad (26)$$

$$\frac{d^2\Gamma}{d\omega^2} + R \frac{d\Gamma}{d\omega} = TP(\Psi - 1 + F\Gamma) \quad (27)$$

mit seinen Randbedingungen:

für $\omega = 0$

$$-\frac{d\Psi}{d\omega} + P\Psi = 0 \quad (28)$$

$$\frac{d\Gamma}{d\omega} = 0 \quad (29)$$

für $\omega = 1$

$$\frac{d\Gamma}{d\omega} + R\Gamma = 0 \quad (30)$$

$$\frac{d\Psi}{d\omega} = 0 \quad (31)$$

Der Lösungsansatz dieses gekoppelten Differentialgleichungssystems ergibt sich aus seiner charakteristischen Gleichung, die folgendes Aussehen hat:

$$\Psi'''' + (R - P)\Psi''' - (PR + TP + TRF)\Psi'' + TPR(F - 1)\Psi' = 0 \quad (32)$$

$$\lambda(\lambda^3 + (R - P)\lambda^2 - (PR + TP + TRF)\lambda + TPR(F - 1)) = 0 \quad (32a)$$

Mit:

$$\lambda_1 = 0.$$

Das führt dann zu:

$$\Psi(\omega) = D_0 + D_1 e^{\lambda_2 \omega} + D_2 e^{\lambda_3 \omega} + D_3 e^{\lambda_4 \omega} \quad (33)$$

wobei $\lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ die Nullstellen der charakteristischen Gleichung sind.

Die Konstanten D_1, D_2, D_3, D_4 werden durch Anwendung von Gleichung (32) auf die Randbedingungen (28)-(31) ermittelt. Es folgt:

$$PD_0 + (P - \lambda_1)D_1 + (P - \lambda_2)D_2 + (P - \lambda_3)D_3 = 0 \quad (28a)$$

$$(\lambda_1^3 - P\lambda_1^2 - TP\lambda_1)D_1 + (\lambda_2^3 - P\lambda_2^2 - TP\lambda_2)D_2 + (\lambda_3^3 - P\lambda_3^2 - TP\lambda_3)D_3 = 0 \quad (29a)$$

$$\lambda_1 e^{\lambda_1} D_1 + \lambda_2 e^{\lambda_2} D_2 + \lambda_3 e^{\lambda_3} D_3 = 0 \quad (30a)$$

$$TPR D_0 + e^{\lambda_1} (TPR + (TP + PR)\lambda_1 + (P - R)\lambda_1^2 - \lambda_1^3) D_1 + e^{\lambda_2} (TPR + (TP + PR)\lambda_2 + (P - R)\lambda_2^2 - \lambda_2^3) D_2 + \quad (31a)$$

$$e^{\lambda_3} (TPR + (TP + PR)\lambda_3 + (P - R)\lambda_3^2 - \lambda_3^3) D_3 = TPR$$

Damit läßt sich jetzt die stationäre Lösung des Dispersionsmodells angeben, diese ist allerdings für $F = 1$ unbestimmt. In diesem Fall erhält man:

$$\Psi'''' + (R - P)\Psi''' - (PR + TP + TR)\Psi'' = 0 \quad (34)$$

$$\lambda^2(\lambda^2 + (R - P)\lambda - (PR + TP + TR)) = 0 \quad (34a)$$

Mit:

$$\lambda_{1,2} = 0$$

λ_3 und λ_4 folgen aus der Lösung einer quadratischen Gleichung. Die allgemeine Lösung für $F = 1$ sieht dann folgendermaßen aus:

$$\Psi(\omega) = E_0 + E_1\omega + E_2e^{\lambda_3\omega} + E_3e^{\lambda_4\omega} \quad (35)$$

Auch hier werden die Konstanten E_0, E_1, E_2 und E_3 wiederum durch Einsetzen der Gleichung (35) in die Randbedingungen (28)-(31) bestimmt.

Die Gleichung (33) ist unbestimmt für den Fall $F = 1$, deshalb wird dort $F = 1,001$ benutzt. Die Ergebnisse durch Gleichung (35) werden herangezogen, um die Abweichungen von (33) mit $F = 1,001$ vom exakten Wert nach (28) angeben zu können.

Ähnlich dem Stufenmodell wird auch beim Dispersionsmodell häufig das Verhältnis der Ausgangskonzentrationen in der Raffinatphase mit Rückvermischung zur Pfropfenströmung gebildet:

$$\Psi(1) / \Psi_\infty(1).$$

Die Konzentration ohne Rückvermischung folgt aus den Bedingungen:

$$e_f = e_s = 0$$

bzw.

$$P = R = \infty.$$

Aufgrund dieser beiden Voraussetzungen läßt sich die charakteristische Gleichung mit Hilfe der Gleichungen (26) und (27) für den stationären Zustand berechnen:

$$\lambda(\lambda + T(1 - F)) = 0$$

daraus ergibt sich als Lösung:

$$\Psi_\infty(\omega) = A + B e^{T(F-1)\omega}$$

und mit den Randbedingungen folgt:

$$\Psi_{\infty}(\omega) = \frac{1 - e^{T(F-1)\omega}}{1 - F e^{T(F-1)\omega}}$$

IV Ergebnisse

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Stoffkonzentrationen einer chemischen Trennstufe berechnet durch Anwendung zweier mathematischer Modelle. In beiden Fällen wurden stationäre Lösungen gesucht in Abhängigkeit von:

- Extraktionsfaktor F,
- Zahl der Transfereinheiten T,
- Rückvermischung in der Raffinatphase,
- Rückvermischung in der Extraktphase,
- Pfropfenströmung.

Für das Stufenmodell stehen auch numerische Ergebnisse des zeitabhängigen Modells zur Verfügung.

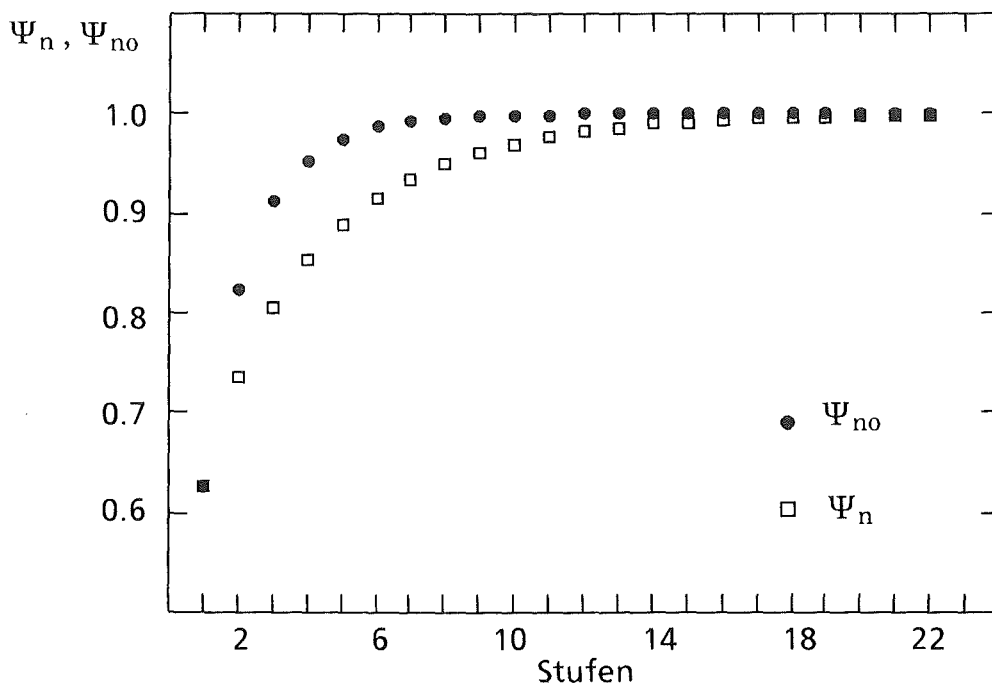


Abbildung 2: Konzentration der Raffinatphase abhängig von der Anzahl der Extraktionsstufen mit und ohne Rückvermischung bei stationären Bedingungen.

Abbildung 2 beinhaltet die Konzentration der Raffinatphase als Funktion der Extraktionsstufen. Es sind die Ergebnisse mit und ohne Rückvermischung dargestellt, für $T = 10$, $F = 0,5$ und den Rückvermischungskoeffizienten $s = f = 0,8$.

Die nächsten 4 Abbildungen zeigen Ausgangskonzentrationen der Raffinatphase als Funktion der Transfereinheiten und dem Extraktionsfaktor als Parameter. Abbildung 3 enthält die Rückvermischungskoeffizienten $s = f = 0,1$ und Abb. 4 die Pecletzahlen $R = P = 5$.

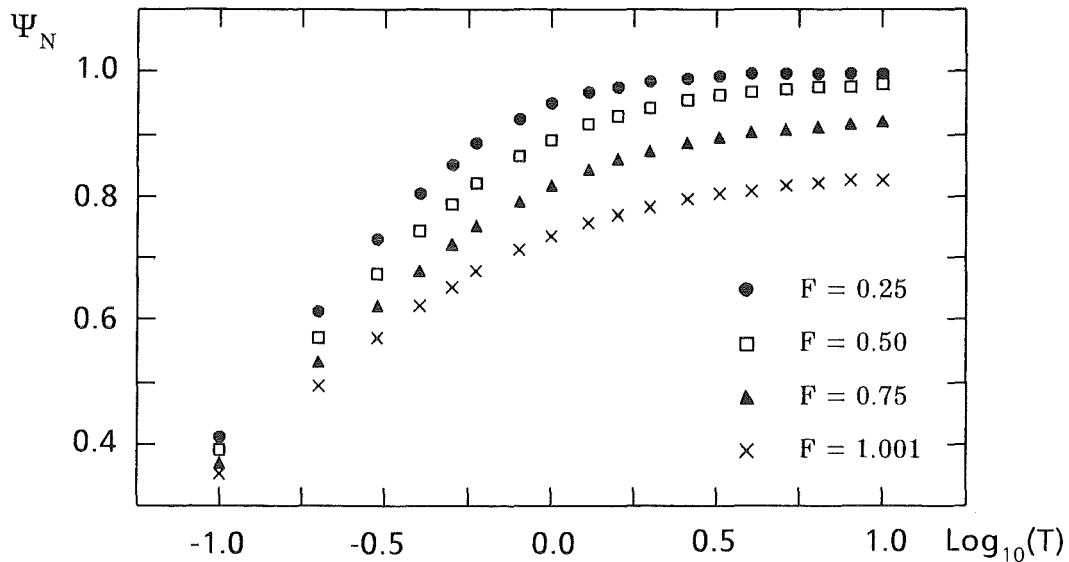


Abbildung 3: Ausgangskonzentration der Raffinatphase als Funktion der Transfereinheiten (T) für $N = 6$.

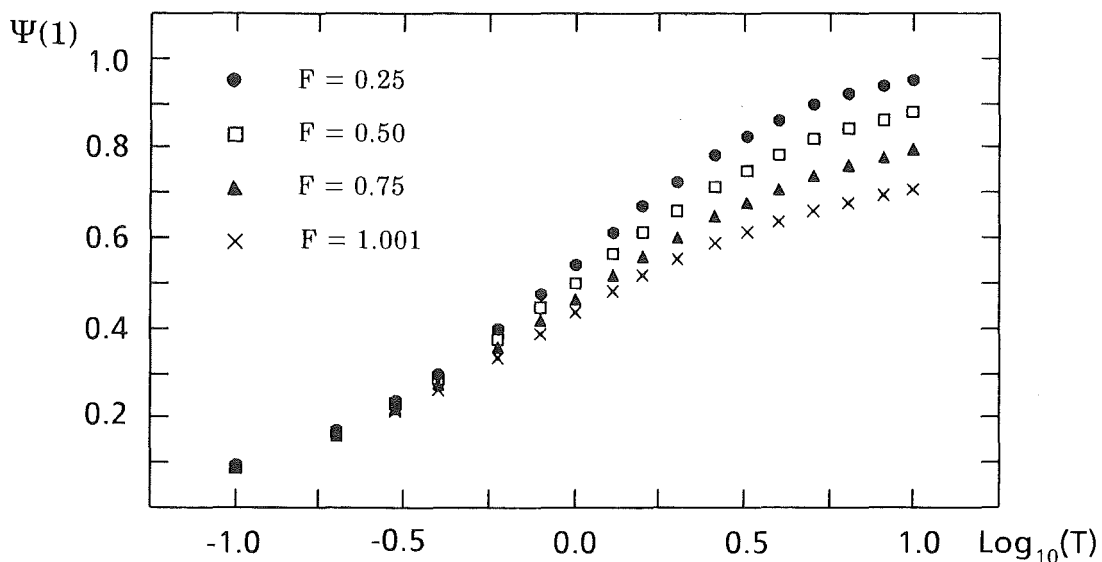


Abbildung 4: Wie Abb. 3 für das Dispersionsmodell.

Dies sind jeweils die kleinsten Koeffizienten, die in den Berechnungen der Modelle Verwendung fanden. Aus den Abbildungen erkennt man Unterschiede der beiden Modelle im stationären Fall. Die Ausgangskonzentrationen des Stufenmodells sind größer als die des Dispersionsmodells, d.h. die berechneten Kon-

zentrationen beginnen bei höheren Werten und erreichen ihr Maximum früher. Zeigen die Ergebnisse des Stufenmodells über den ganzen Bereich einen konvexen Verlauf, so werden die des Dispersionsmodells erst ab Werten $T \geq 1$ konvex.

In den folgenden Abbildungen 5 und 6 sind die Ausgangskonzentrationen der Abb. 3 und 4 auf die entsprechenden Pfropfenströmungen bezogen.

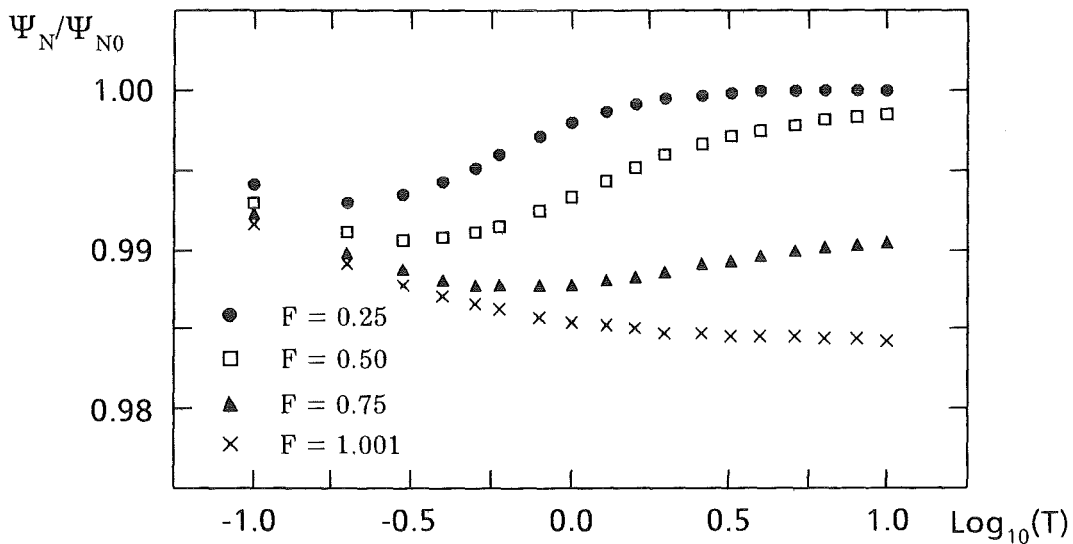


Abbildung 5: Normierte Ausgangskonzentrationen abhängig von T für das Stufenmodell.

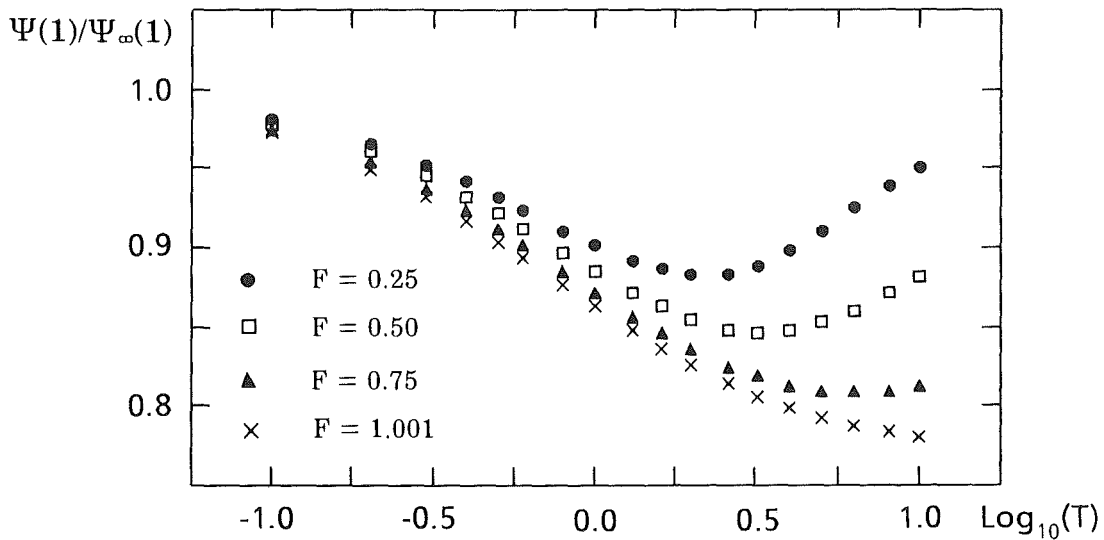


Abbildung 6: Wie Abb. 5 für das Dispersionsmodell.

Normiert man die berechneten Ausgangskonzentrationen auf die Werte bei Pfropfenströmung, so sind die Änderungen bei Anwendung des Dispersionsmodells im dargestellten Bereich größer, und ihre Minimas sind zu größeren

Transfereinheiten hin verschoben. An diesen Aussagen ändert sich im wesentlichen nichts, wenn beim Dispersionsmodell die Koeffizienten der in den Diagrammen dargestellten Ergebnisse auf $R = P = 10$, oder $R = P = 55$ erhöht werden, bzw. wenn im Stufenmodell $s = f = 0,4$, bzw. $s = f = 0,8$ verwendet werden, oder die Stufenzahl $N = 6$ durch $N = 10$ ersetzt wird. Dies wird durch die zwei folgenden Abbildungen (7) und (8) demonstriert.

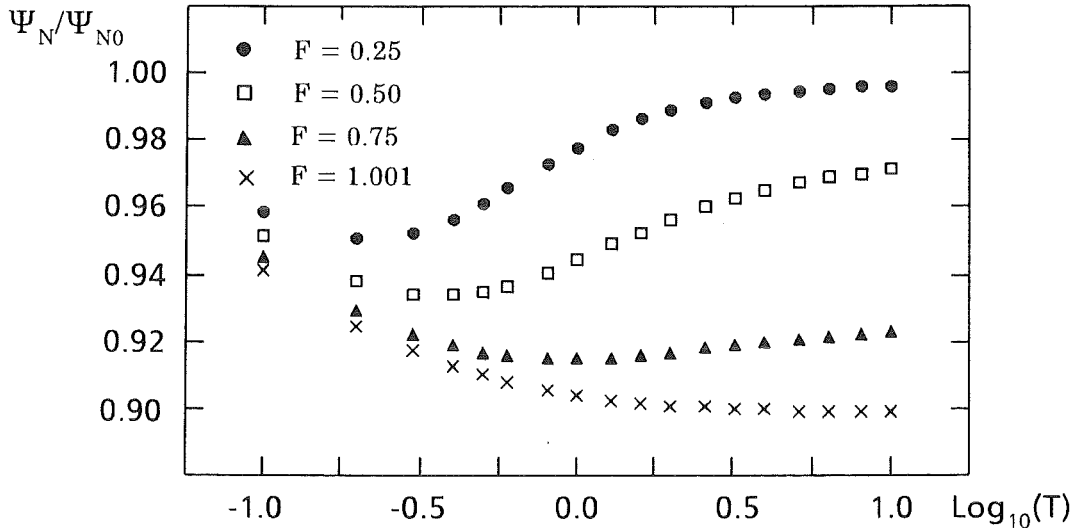


Abbildung 7: Wie Abb. 5 mit $s = f = 0,8$ und $N = 10$.

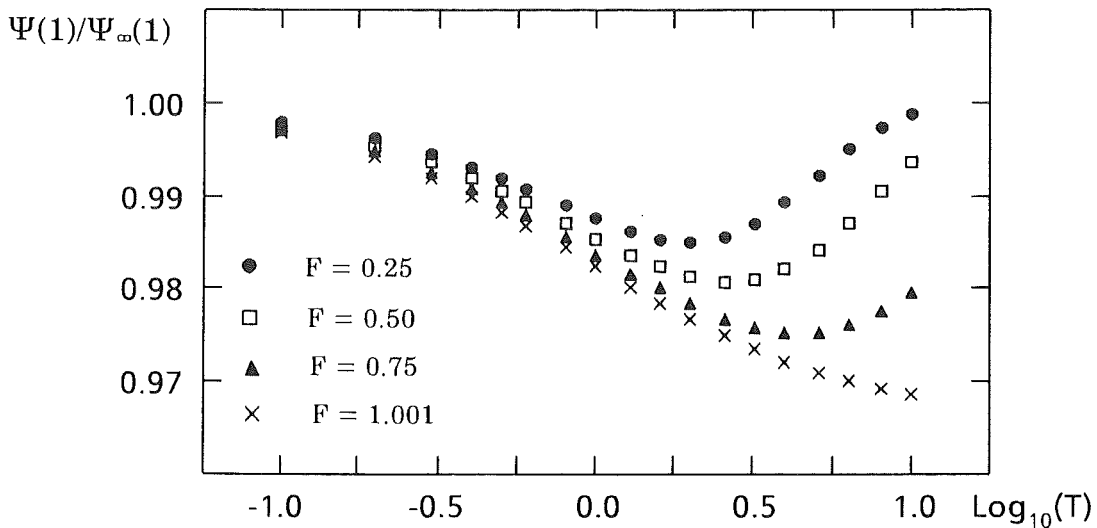


Abbildung 8: Wie Abb. 6 mit $R = P = 55$.

Die Gleichungen (7) und (8) erfordern numerische Lösungsverfahren, wofür sowohl der Euler-Cauchysche Streckenzug, als auch das Runge-Kutta Verfahren benutzt wurden. Ausgehend von den gegebenen Gleichungen kennt man die

Steigung der gesuchten Stammfunktion an jedem Punkt und es läßt sich bei beiden Verfahren die Steigung für den Anfangswert (x_0, y_0) exakt berechnen. Geht man nun entlang dieser Steigung geradlinig weiter, so entspricht dessen Endpunkt $(x_0 + h, y_0 + f_0 h)$ nur noch angenähert einem Funktionswert. Die Integration besteht nun aus der Addition der Produkte $f_i h$. Der Unterschied zwischen den beiden Verfahren liegt in den Schrittweiten, die beim Streckenzug fest vorgegeben wird, und beim Runge-Kutta Verfahren automatisch angepaßt werden kann. Zum Vergleich beider Verfahren wurde folgendes Beispiel durchgeführt:

$$N = 8 \quad s = f = 0,1 \quad T = 1 \quad F = 0,25 \quad Q_s = Q_f = 1$$

Der Anfangswert war in allen zeitabhängigen Rechnungen eine Konzentrationsänderung von + 10% in der Nullten Stufe. Gerechnet wurde bis die N-te Stufe den vorgegebenen stationären Wert erreicht hatte. Die zeitabhängigen Ergebnisse in den darunterliegenden Stufen waren kleiner als die entsprechenden Werte der stationären Lösungen. Die mit Hilfe des Euler-Cauchyschen Streckenzuges errechneten Ergebnisse stimmen mit denen des Runge-Kutta Verfahrens überein. Der Vorteil des Euler-Cauchyschen Streckenzuges ist, daß er einfach programmiert werden kann, während es beim Runge-Kutta Verfahren angebracht ist eine getestete Routine einer mathematischen Bibliothek zu benutzen. Das einfachere Verfahren verwendet konstante Schrittweiten, die für jedes Integrationsproblem neu gesucht werden muß. Das komplexere zweite Verfahren ist kaum abhängig von der vorgegebenen Schrittweite. Im oberen Beispiel benötigte das Streckenzug-Verfahren 49 Zeitschritte bei einer optimalen Schrittweite von $h = 0,6$, das Runge-Kutta Verfahren brauchte 36 Zeitschritte, und zwar unabhängig davon ob $h = 1$ oder 2 eingesetzt wurde.

In den Abbildungen (9) und (10) sind die Konzentrationen von Raffinat- und Extraktphase in Abhängigkeit der Extraktionsstufen dargestellt. Es handelt sich dabei um die Endergebnisse von zwei unterschiedlichen zeitabhängigen Berechnungen der Konzentrationsprofile.

Die heute bekannten Modelle können durch Modifikation aus dem hier dargestellten abgeleitet werden. Ein solches modifiziertes Modell entsteht z.B. dadurch, daß man die Nullte- und $(N + 1)$ te-Stufe wegläßt. Dann ist die 1. Stufe der Feedeingang bzw. Ausgang der Extraktphase und die Nte-Stufe Ausgang der Raffinat- bzw. Eingang der Solventphase (s. Abb. 1) /4/. Die Ergebnisse der stationären Rechnungen sind für beide Modelle identisch. Auch die Anzahlen notwendiger Zeitschritte zum Erreichen stationärer Zustände in den zeitabhängigen Be-

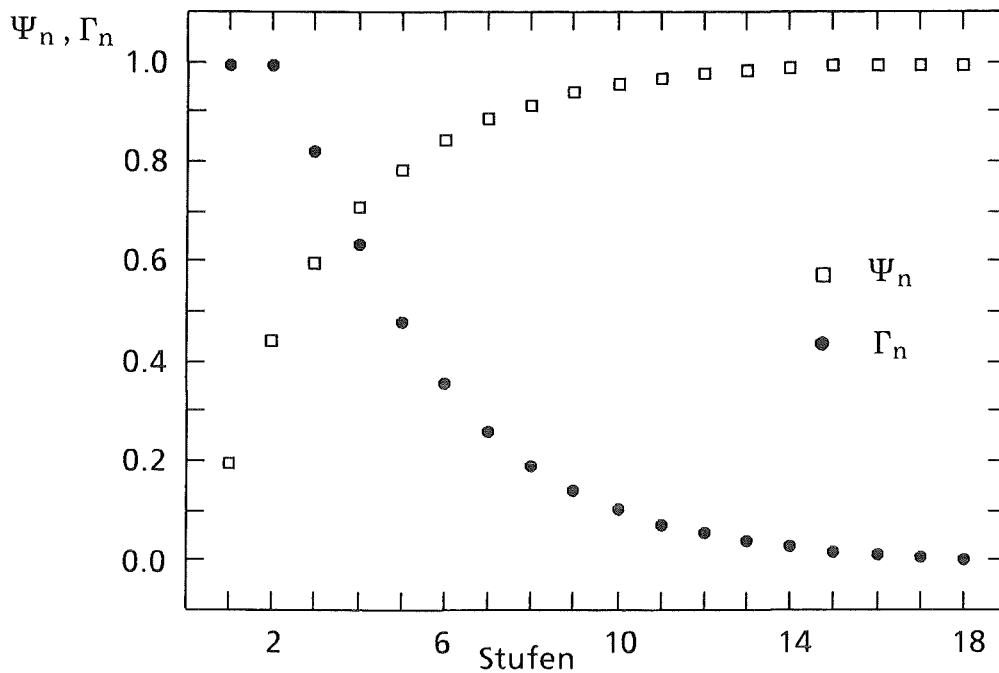


Abbildung 9: Konzentrationen von Raffinat- und Extraktphase als Funktion der Trennstufen mit $s = f = 0,8$, $T = 1$ und $F = 0,25$.

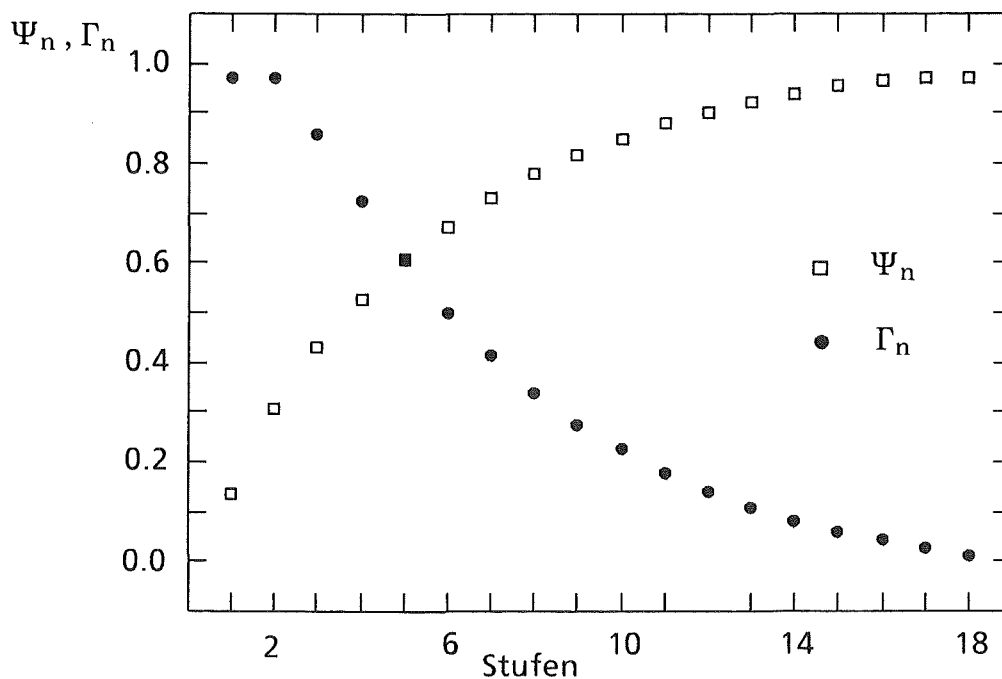


Abbildung 10: Siehe Abb. 9 mit $T = 1$, $s = f = 0,8$ und $F = 0,5$.

rechnungen unterscheiden sich nur unwesentlich. Allerdings zeigte das modifizierte Modell in den Ausgangskonzentrationen der Raffinatphase für kleine Q_S -Werte, d.h. große Extraktionsfaktoren bzw. viele Transfereinheiten, deutliche Spitzen. Diese Konzentrationsschwingungen sind auch im ursprünglichen Modell

erkennbar, aber aufgrund der zwei zusätzlichen Stufen stark gedämpft. Die folgenden Abbildungen 11 und 12 demonstrieren dies anschaulich. Die Kurven mit $Q_s = 0,1$ der Abbildungen 11 und 12 enden jeweils nach etwa 105 Zeitschritten, das liegt an dem verwendeten Plotsystem der Großrechenanlage. Es verarbeitet maximal 2000 Wertepaare.

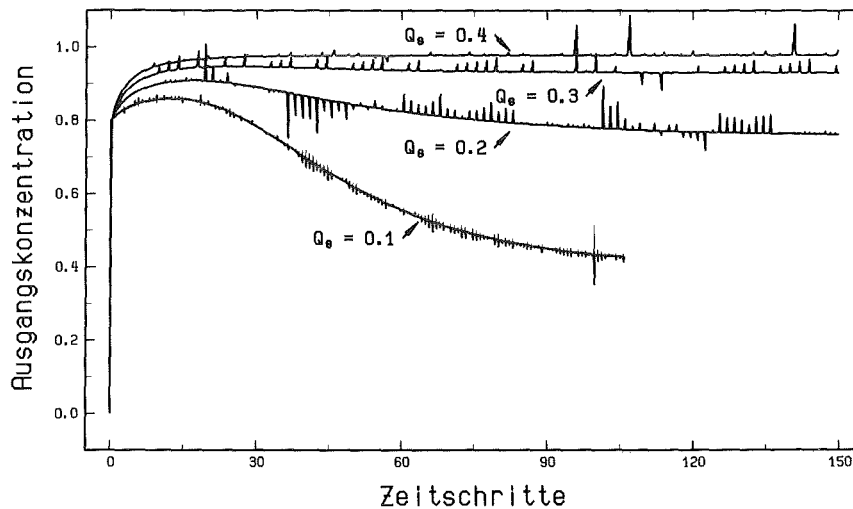


Abbildung 11: Zeitabhängige Ausgangskonzentrationen für $N = 8$ Stufen.

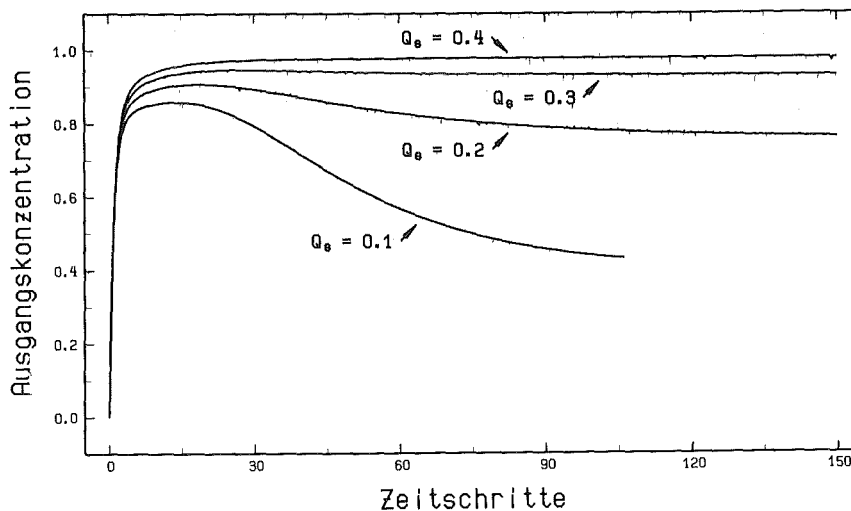


Abbildung 12: Wie Abb. 11 mit zwei zusätzlichen Stufen.

V Schlußfolgerungen

In den vorausgehenden Kapiteln wurden die mathematischen Grundlagen dargestellt, die zur Beschreibung des hydrodynamischen Verhaltens einer flüssig-flüssig Extraktion notwendig sind. Diese Grundlagen erlauben die Berechnung stationärer Zustände für das Stufen- und Dispersionsmodell, als auch zeitabhängiger Abläufe im Fall des Stufenmodells.

Es konnten sowohl die prinzipiellen Unterschiede der beiden Modelle in ihren stationären Lösungen, als auch ihre Abhängigkeit von den Rückvermischungskoeffizienten bzw. den Parametern Transfereinheit und Extraktionsfaktor gezeigt werden. Ideale Extraktionswerte ergeben sich ohne Rückvermischung, für kleine Extraktionsfaktoren und große Transfereinheiten. Diese Bedingungen lassen sich in realen Extraktionsstufen natürlich nicht verwirklichen, werden aber so gut wie möglich zu erreichen versucht.

Die Verwendung des Stufenmodells hat den großen Vorteil, daß auch zeitabhängige Lösungen relativ einfach zu erhalten sind. Die Rechnungen führen in Abhängigkeit einer Anzahl von Zeitschritten auf eine stationäre Lösung. Die Übereinstimmung von zeitabhängiger und stationärer Lösung gilt nur für die Stufe N , die Ergebnisse der anderen Stufen weichen von einander ab. Modifiziert man das in dieser Arbeit ausführlich dargestellte Modell dadurch, daß die Stufen (0) und $(N + 1)$ weggelassen werden, so zeigen dessen zeitabhängige Ergebnisse zum Teil recht große Spitzen für Flußraten kleiner 1 in der Extraktphase. Im ursprünglichen Modell sind diese Schwingungen aufgrund der zwei zusätzlichen Stufen gedämpft.

Die in dieser Arbeit vorgestellten Modelle sollen im weiteren zur Beschreibung experimenteller Ergebnisse verwendet werden.

Literatur

- /1/ Pfeiffer, W. und Schmidt, H.:
Zu den fluiddynamischen Problemen bei der Auslegung gepulster Sieb-
boden - Kolonnen.
KfK - 2560 (1978)

- /2/ Sleicher, C.A., Jr.:
Axial Mixing and Extraction Efficiency.
A.I.C.H.E. Journal, Vol. 5, p. 145 (1959)

- /3/ Sleicher, C.A., Jr.:
Entrainment and Extraction Efficiency of Mixer - Settlers.
A.I.C.H.E. Journal, Vol. 6, p. 529 (1959)

- /4/ Bühler, W.:
Simulation einer komplexen Chemieranlage am Beispiel der Uran -
Plutonium Extraktion.
Dissertation, TU Karlsruhe 1980