



Karlsruher Institut für Technologie
Institut für Technische Chemie und Polymerchemie

Bericht zum
Chemisch-Technischen
Vertieferpraktikum

Numerische Simulation eines Wirbelschichtreaktors

Einfluss der Einlasshöhe auf das Strömungs- und Mischungsfeld

Vorgelegt von:

Patrick Lott

Betreuer:

Dr. Matthias Hettel

Prof. Dr. Olaf Deutschmann

Erklärung

Ich versichere hiermit wahrheitsgemäß, die Arbeit bis auf die dem Aufgabensteller bereits bekannten Hilfsmittel selbständig angefertigt, alle benutzten Hilfsmittel vollständig und genau angegeben und alles kenntlich gemacht zu haben, was aus Arbeiten anderer unverändert oder mit Abänderungen übernommen wurde.

Karlsruhe, den 17.02.2016

(Patrick Lott)

Inhalt

Erklärung	i
Inhalt.....	ii
Abkürzungsverzeichnis.....	iv
1 Einleitung	1
2 Theoretische Grundlagen.....	3
2.1 Numerische Simulationen	3
2.1.1 CFD	4
2.1.2 DEM	5
2.1.3 CFDEM	5
2.2 Erzeugung von Rechengittern	6
2.3 Wirbelschichtreaktoren.....	7
2.3.1 Wirbelschichten.....	7
2.3.2 Reh-Diagramm.....	10
2.3.3 Klassifikation nach Geldart.....	12
2.4 Verweilzeit	13
3 Durchführung der Berechnungen	15
3.1 Experimenteller Aufbau und Simulation	15
3.2 Eingesetzte Rechengitter und Bedingungen	16
3.3 Verweilzeit	19
4 Auswertung und Diskussion.....	21
4.1 Einfluss der Einlasshöhe auf das Strömungs- und Mischungsfeld	21
4.1.1 Gasgeschwindigkeit.....	22
4.1.2 Feststoffgeschwindigkeit.....	24
4.1.3 Freies Volumen (voidfraction).....	26
4.1.4 Mischungsfeld	29
4.2 Verweilzeitverteilung.....	30
4.2.1 Vergleich verschiedener Gittertypen	31
4.2.2 Vergleich verschiedener Diskretisierungsverfahren	35
5 Zusammenfassung und Ausblick.....	37
Literaturverzeichnis.....	39

Danksagung 41
Anhang..... 42

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Bedeutung
Abb.	Abbildung
CFD	Computational Fluid Dynamics
DEM	Discrete Element Method
LAMMPS	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
LIGGGHTS	LAMMPS improved for general granular and granular heat transfer simulations
FCC	Fluid Catalytic Cracking
OpenFOAM	Open Source Field Operation and Manipulation

Formelzeichen	Bedeutung	Einheit
c	Konzentration	$\frac{mol}{l}$
d_p	Partikeldurchmesser	m
D	Diffusionskoeffizient	$\frac{m^2}{s}$
$E(t)$	Verweilzeitverteilung	-
f	Allgemeine (Transport-)Größe	-
$F(t)$	Verweilzeitsummenfunktion	-
g	Erdbeschleunigung	$\frac{m}{s^2}$
L	Charakteristische Länge	m
SL	Standard Liter	SL
t	Zeit	s
V	Volumen	m^3
\dot{V}	Volumenstrom	$\frac{m^3}{s}$
ε	Lückenvolumen	m^3
ν	Kinematische Viskosität	$\frac{m^2}{s}$
ρ	Dichte	$\frac{kg}{m^3}$
τ	Hydrodynamische Verweilzeit	$\frac{1}{s}$
∇	Nabla-Operator	-

1 Einleitung

Wirbelschichtreaktoren werden in technischen Prozessen immer dann eingesetzt, wenn ein intensiver Kontakt zwischen einem Feststoff und einem Fluid gewährleistet werden soll. Die intensive Durchmischung der beiden Phasen gewährleistet homogene Bedingungen im gesamten Reaktionsraum und sorgt aufgrund des resultierenden großen Wärmeaustauschs für beinahe isotherme Bedingungen. Wirbelschichtreaktoren eignen sich insbesondere für Reaktionen zwischen Gasen und kleinen Feststoffpartikeln, bei welchen ein großes Oberflächen-zu-Volumen-Verhältnis den Wirkungsgrad maximiert [1, S. 187]. So finden Wirbelschichtreaktoren beispielsweise zur Realisierung von Verbrennungs- und Vergasungsprozessen wie der Kohleverbrennung zur Erzeugung von Energie und Dampf breite Anwendung [2]. Hierbei wird die Kohle bei verhältnismäßig geringen Temperaturen um ca. 850 °C verbrannt, um die Bildung von Stickoxiden weitestgehend zu vermeiden. Möglich machen dies der hohe Durchmischungsgrad sowie die große Wärmekapazität der Wirbelschicht. Auch ausgewählte katalytische Prozesse wie das Katalytische Cracken im Rahmen der Erdölverarbeitung (FCC) nutzen die Eigenschaften von Wirbelschichten in großtechnischen Anlagen [3] und sogar in der Biotechnologie gibt es Ansätze, Wirbelschichtreaktoren für die Vergasung von Biomasse einzusetzen [4,5].

Im Rahmen dieser Vertieferarbeit soll ein Modell zur Simulation eines bereits im Labormaßstab realisierten Wirbelschichtreaktors erarbeitet werden. Dieser Zwei-Zonen-Wirbelschichtreaktor mit einer Schüttschicht von ca. 5,5 Millionen katalytisch beschichteten Partikeln dient der Synthese von Butadien aus Butan [6]. Um den Rechenaufwand bei der Entwicklung eines geeigneten Modells in einem vertretbaren Rahmen zu halten, soll das reale System durch ein vereinfachtes Modellsystem mit ca. 86.000 Partikeln beschrieben werden, welches sich ähnlich verhält wie das experimentelle Vorbild. Die ermittelten Rahmenbedingungen können zu einem späteren Zeitpunkt zur Modellierung des realen Reaktors verwendet werden. Langfristig soll es möglich sein, experimentelle Ergebnisse nicht nur nachzurechnen, sondern auch vorhersagen zu können. Grundlage der Modellierung ist dabei eine Kopplung zwischen numerischer Strömungsmechanik (CFD), welche die Fluidmechanik im Reaktor modelliert, mit der Diskreten Elemente Methode (DEM), welche die Beschreibung der Partikelbewegungen erlaubt. Zunächst soll lediglich der kalte Reaktor

modelliert werden. Der Einbezug chemischer Reaktionen in die Simulation kann zu einem späteren Zeitpunkt erfolgen, wenn das Wirbelverhalten des Modellreaktors den Charakteristika des realen Systems entspricht. Sobald die optimalen Betriebsbedingungen des Modellreaktors gefunden sind, soll das Strömungs- und Mischungsfeld in diesem Reaktor berechnet und analysiert werden. In einem Zwei-Zonen-Wirbelschichtreaktor liegen zwei verschiedene Zonen im Wirbelbett vor: Eine sogenannte Regenerationszone, in welcher die katalytisch beschichteten Partikel regeneriert werden, und eine Reaktionszone, in welcher der Umsatz von Butan zu Butadien stattfindet [7]. Die Größe der Zonen hängt stark von der Einlasshöhe des Butangases in die Wirbelschicht ab. Ein Schema des Modellreaktors ist in Abbildung 1 dargestellt.

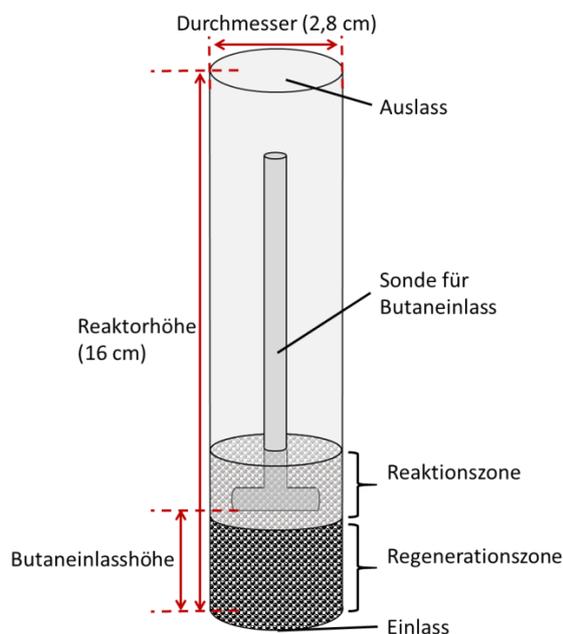


Abbildung 1: Schema des Modellreaktors

Da experimentelle Untersuchungen gezeigt haben, dass der chemische Umsatz des Reaktors von der Einlasshöhe des Butangases im Wirbelbett abhängt [7], soll im Rahmen dieser Vertiefungsarbeit der Einfluss der Butaneinlasshöhe auf das Strömungs- und Mischungsfeld herausgearbeitet werden. Dazu wird die Sonde, über die Butan eingespeist wird, im Modellreaktor axial verschoben und der Einfluss auf die Gas- und Feststoffgeschwindigkeiten, auf die Blasenbildung in der Wirbelschicht sowie auf das Mischungsfeld untersucht.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Numerische Simulationen

Numerische Verfahren folgen unabhängig vom Problem einigen allgemeinen Arbeitsschritten [8, S. 106 ff]. Abbildung 2 fasst die allgemeine Herangehensweise bei der Durchführung numerischer Strömungssimulationen zusammen. Zunächst muss die Geometrie, innerhalb derer die Simulation stattfinden soll, mithilfe eines CAD-Programmes definiert werden. Anschließend wird ein Gitter erstellt, das die zuvor festgelegte Geometrie ausfüllt, vernetzt und während der numerischen Berechnungen als Rechengitter dient. Dieses Gitter diskretisiert den Körper in Finite-Volumina, was die numerische Lösung aller zur Beschreibung der Fluidmechanik notwendigen mathematischen Gleichungen ermöglicht. Sind die Randbedingungen, welche Materialeigenschaften wie Dichte und Viskosität aber auch allgemeine Voraussetzungen wie Druck und Temperatur umfassen, festgelegt, kann mithilfe eines Solvers (deutsch: Gleichungslöser) die numerische Berechnung durchgeführt werden. Eine detaillierte Auswertung der erhaltenen Daten schließt die Bearbeitung eines strömungstechnischen Problems ab. Im Idealfall kann das erhaltene Ergebnis durch den Vergleich mit experimentell erhaltenen Daten validiert werden.

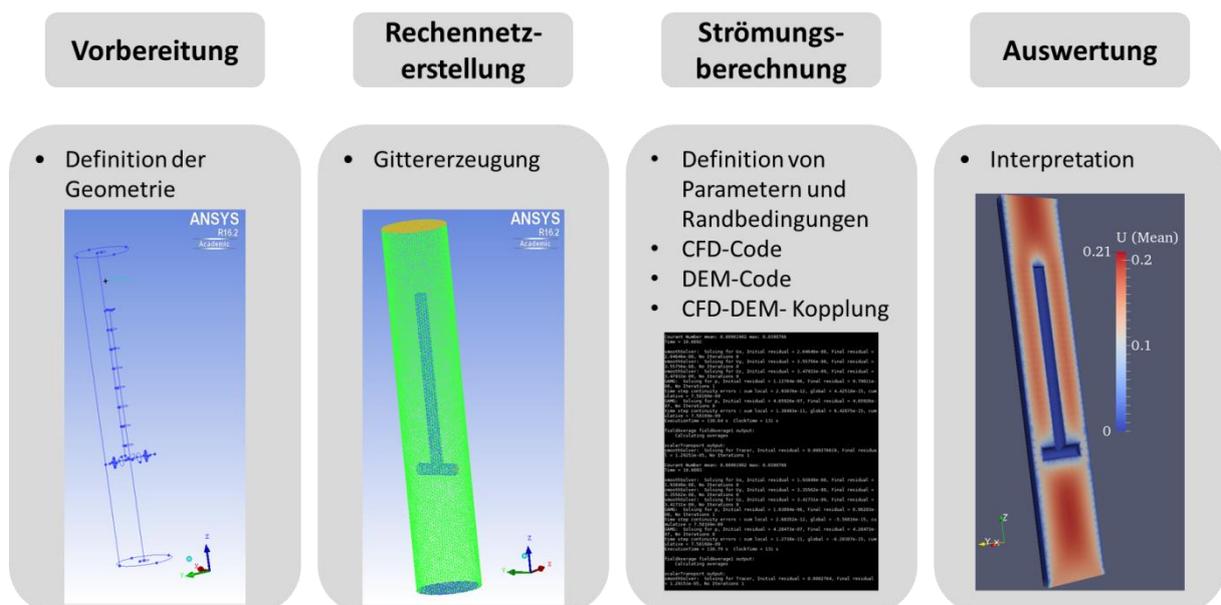


Abbildung 2: Allgemeines Vorgehen bei numerischen Strömungssimulationen am Beispiel des im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Wirbelschichtreaktors

2.1.1 CFD

Die Untersuchung von Strömungsproblemen ist für viele Anwendungen von zentraler Bedeutung. Diese reichen von der Spitzenschwimmerin, die mit einem strömungstechnisch optimierten Badeanzug ihre Leistung verbessern kann, bis hin zum Ingenieur, der einen Automotor auslegen oder ein neues Flugzeug entwickeln möchte. Während die Analyse und Lösung strömungstechnischer Probleme vor einigen Jahrzehnten nur durch aufwendige Experimente möglich war, können inzwischen dank immer leistungsfähigeren Computern auch komplexe Zusammenhänge zumindest approximativ berechnet werden. Möglich macht dies die numerische Strömungsmechanik, kurz CFD (englisch für **C**omputational **F**luid **D**ynamics). Dabei werden Erhaltungsgleichungen (partielle Differentialgleichungen) numerisch gelöst [8]. Im Allgemeinen lassen sich fünf Erhaltungsgleichungen aus der Strömungsmechanik ableiten: Eine Gleichung für die Massenerhaltung, drei Gleichungen für die Impulserhaltung (die sogenannten Navier-Stokes-Gleichungen, je eine für jede Raumrichtung) sowie eine Gleichung für die Energieerhaltung. Die allgemeine Form derartiger Bilanzgleichungen für eine beliebige Transportgröße f ist durch Gleichung (2.1) beziehungsweise in Worten durch Gleichung (2.2) gegeben.

$$\frac{\partial(\rho f)}{\partial t} = -\nabla\vec{u}\rho f + \nabla\rho\Gamma\nabla f + q_f + \text{Fernwirkung} \quad (2.1)$$

$$\text{Änderung von } f = \text{Konvektion} + \text{Diffusion} + \text{Quellterm} + \text{Fernwirkung} \quad (2.2)$$

Da im Rahmen dieser Vertieferarbeit auch das Mischungsfeld eines Wirbelschichtreaktors untersucht werden soll, muss eine weitere Transportgleichung gelöst werden, welche den Transport eines Skalars beschreibt.

Eine wichtige Rolle bei der numerischen Strömungsberechnung spielt dabei das sogenannte Rechengitter, welches unter Abschnitt 2.2 näher erläutert wird. Dieses ist notwendig, weil die oben aufgeführten Erhaltungsgleichungen nicht analytisch gelöst werden, sondern das strömungstechnische Problem räumlich und zeitlich diskretisiert wird und das Rechengitter die Finiten-Volumina für die einzelnen Rechenschritte liefert [8].

2.1.2 DEM

Die Diskrete Elemente Methode, kurz DEM (englisch für **D**iscrete **E**lement **M**ethod), erlaubt die mathematische Beschreibung diskreter Teilchen, also zum Beispiel sphärischer Partikel in einem Wirbelschichtreaktor.

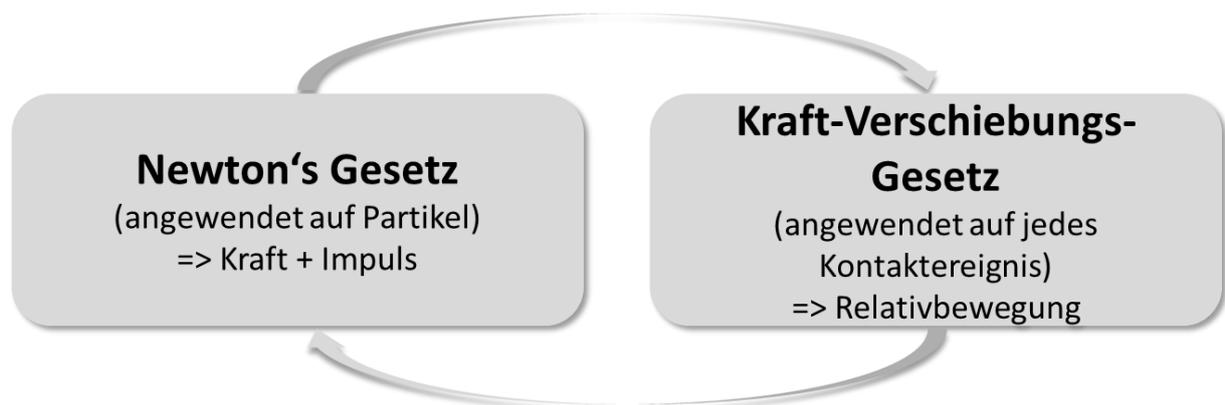


Abbildung 3: Ablauf einer typischen DEM-Rechnung (nach [9])

Nach Definition der Anfangskoordinaten eines Partikels wird während des DEM-Verfahrens zunächst das Newton'sche Gesetz auf einen Partikel und im Anschluss daran ein Kraft-Verschiebungsgesetz, welches das Kontakt ereignis eines Partikels mit der Reaktorwand oder weiteren Partikeln beschreibt, angewendet. Die daraus resultierenden Kräfte (Impulsänderungen) und Relativbewegungen liefern dann neue Partikelkoordinaten, auf die wiederum die oben aufgeführten physikalischen Gesetze angewendet werden [9, 10]. Für die zwischen den Partikeln im Kontaktfall auftretenden Wechselwirkungen gibt es eine Vielzahl von Modellen, auf deren ausführliche Diskussion an dieser Stelle jedoch verzichtet wird (vergleiche hierzu auch [11]).

2.1.3 CFDEM

Wird ein strömungstechnisches Problem mit einem partikulären Problem verknüpft, so müssen zur Simulation CFD und DEM kombiniert werden, es wird daher auch von der CFD-DEM-Methode, kurz CFDEM, gesprochen. Erst die Kopplung der beiden Verfahren macht die Simulation von Wirbelschichtreaktoren überhaupt möglich. Weitere Details zur Funktionsweise einer solchen Kopplung sind Abschnitt 3.2 zu entnehmen.

2.2 Erzeugung von Rechengittern

Basis einer jeden numerischen Simulation stellt das mit einem Gittergenerator erstellte Rechengitter dar. Dieses Gitter spiegelt die Geometrie des simulierten Reaktors wider und teilt den Körper wie ein Netz in viele kleine Zellen auf. Diese Zellen stellen Finite-Volumina dar, die für die numerische Lösung der unter Abschnitt 2.1.1 beschriebenen Erhaltungsgleichungen benötigt werden. Die Güte des Rechengitters hat entscheidenden Einfluss auf das Ergebnis der Simulation. Die Strömung kann beispielsweise umso genauer beschrieben werden, je mehr Zellen vorhanden sind, andererseits steigt mit der Zellenzahl auch die Rechenzeit, weswegen im Allgemeinen der Grundsatz „So fein wie nötig, so grob wie möglich“ [8, S. 61] gelten sollte.

Je nach betrachtetem Problem können verschiedene Gittertypen für die Simulation herangezogen werden. Strukturierte Gitter, die regelmäßig auftretende Elemente beinhalten, werden insbesondere für einfachere Geometrien herangezogen. Unstrukturierte Gitter hingegen kommen aufgrund ihrer Flexibilität insbesondere bei komplizierten Strukturen zum Einsatz. Sollen große und komplizierte Geometrien mit mehreren Körpern untersucht werden, können diese bei Bedarf in verschiedene Zonen unterteilt werden, um Hybrid-Rechennetze zu erzeugen. Dies bietet den Vorteil, dass in Bereichen mit strömungstechnisch anspruchsvollen Vorgängen unstrukturierte, engmaschige und daher rechenzeitintensive Rechengitter verwendet werden können, unkomplizierte Abschnitte hingegen mit einem groben strukturierten Gitter versehen werden, um Rechenzeit zu sparen [8].

Allen Verfahren ist gemeinsam, dass eine abschließende Rechennetzadaption stattfinden sollte, welche das Rechengitter an Besonderheiten der Geometrie (beispielsweise Knicke und starke Krümmungen) und der Strömung (z.B. Berücksichtigung von Grenzschichten) anpasst. In Gebieten mit starken Strömungsgradienten sollte das Rechengitter verdichtet werden, um alle strömungstechnischen Aspekte mit hinreichender Genauigkeit auflösen zu können. Moderne Programme wie das im Rahmen dieser Vertieferarbeit verwendete ANSYS ICEM CFD passen das Gitter automatisch an geometrische Besonderheiten an.

2.3 Wirbelschichtreaktoren

Wirbelschichtreaktoren bestehen ähnlich einem Festbettreaktor aus festen Partikeln, dem sogenannten Schütt- bzw. Wirbelgut, die durch ein aufwärtsströmendes Fluid – also ein Gas oder eine Flüssigkeit – aufgewirbelt werden. Dabei nimmt die Feststoffschicht flüssigkeitsähnliche Eigenschaften an, weswegen auch von einem „fluidisierten“ Zustand gesprochen wird [12, S. 59]. Besonders für kleine Partikel existiert eine hohe Feststoff-Fluid-Kontaktfläche, was einen intensiven Stoff- und Wärmeaustausch zwischen den Phasen begünstigt. Wirbelschichtreaktoren erlauben aufgrund ihres sehr schnellen inneren Wärmeaustauschs eine beinahe isotherme Prozessführung. Sowohl an den Reaktorwänden als auch an den Partikeln selbst kann im Allgemeinen ein starker Abrieb beobachtet werden, der aus der starken Verwirbelung resultiert [1, S. 187].

2.3.1 Wirbelschichten

Wirbelschichten treten immer dann auf, wenn ein von unten in eine Schüttschicht eintretender Gas- oder Flüssigkeitsstrom die Gewichtskraft der Partikel überwinden kann und diese durch Reibungskräfte in der Schwebe zu halten vermag [13, S. 483]. Dabei haben die Eigenschaften der Partikel wie Größe oder Materialbeschaffenheit sowie die Eigenschaften des Fluides, insbesondere dessen Strömungsgeschwindigkeit und Viskosität, erheblichen Einfluss auf die sich ausbildende Wirbelschicht. Abbildung 4 zeigt verschiedene Zustände einer Schüttschicht bei Erhöhung der Strömungsgeschwindigkeit eines von unten einströmenden Fluides.

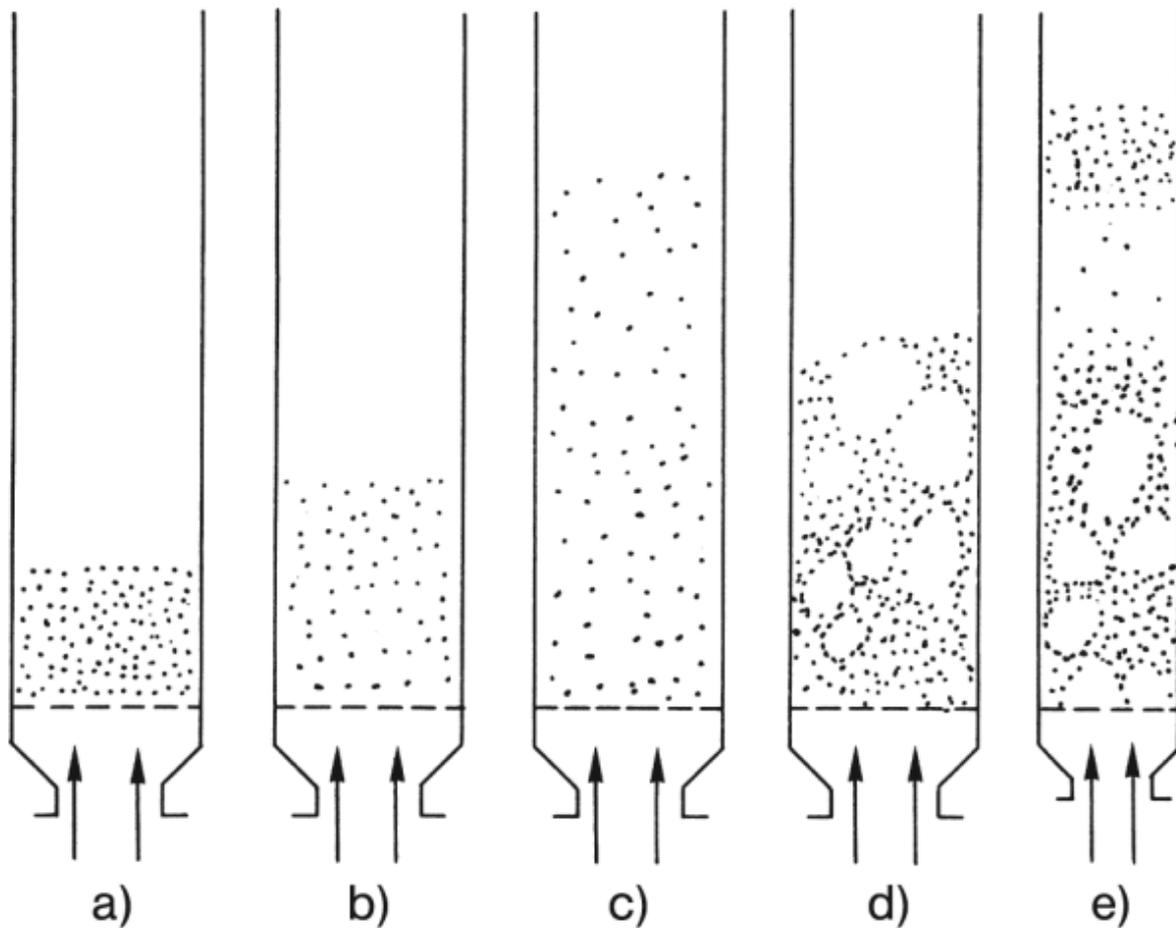


Abbildung 4: Erscheinungsformen von Wirbelschichten [1, S. 188]

Eine Wirbelschicht kann sich erst dann ausbilden, wenn eine gewisse Geschwindigkeit, die sogenannte Lockerungsgeschwindigkeit überschritten wird, vorher liegt ein Festbettreaktor vor (Abb. 4.a). Eine homogene Wirbelschicht, auch Fließbett genannt, tritt bevorzugt dann auf, wenn als Fluid Flüssigkeiten einströmen (Abb. 4.b und Abb. 4.c). Wird hingegen Gas dosiert, so bildet sich zunächst eine inhomogene Wirbelschicht aus (Abb. 4.d), die sich durch deutliche Blasenbildung auszeichnet. Insbesondere bei kleinen Reaktordurchmessern kann auch eine stoßende Wirbelschicht auftreten, in der die Größe der Gasblasen den Apparatedurchmesser erreichen kann (Abb. 4.e). Eine weitere Erhöhung der Strömungsgeschwindigkeit hat einen Feststoffaustrag zur Folge [13, S. 484 f]. Der ausgetragene Feststoff muss dann aufgefangen und rückgeführt werden; diese sogenannte zirkulierende Wirbelschicht kommt zum Beispiel im FCC-Reaktor zum Einsatz, in welchem die katalytisch beschichteten Partikel nach ihrem Austrag in einem zweiten Reaktor regeneriert werden können.

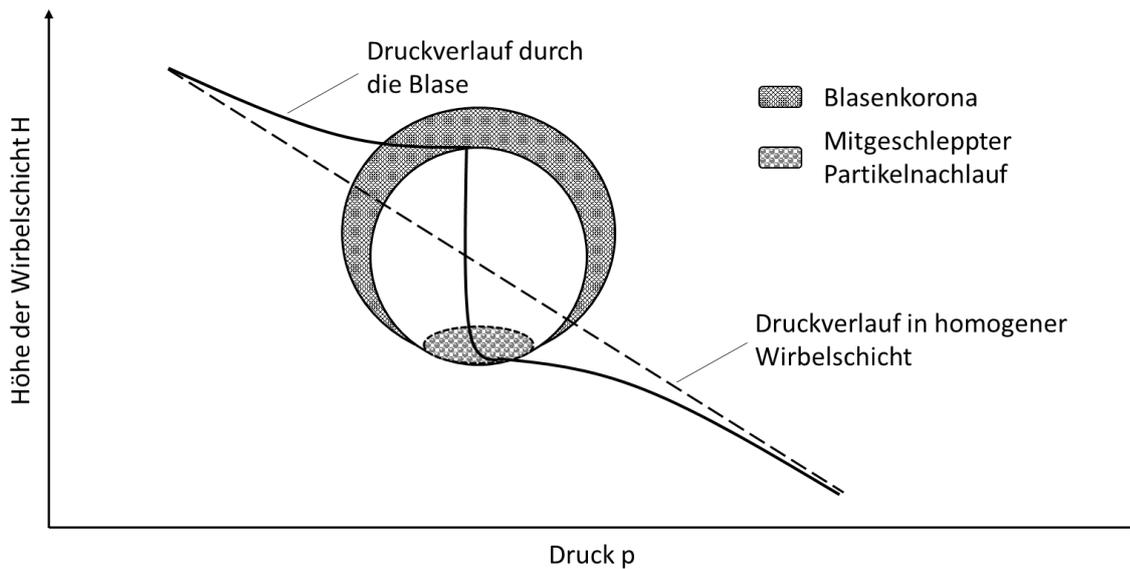


Abbildung 5: Druckverlauf durch und im Nahbereich einer Gasblase [nach 13, S. 493]

Abbildung 5 illustriert den Feststofftransport in einer Gas/Feststoff-Wirbelschicht. Die Gasblasen, welche die Wirbelschicht passieren, reißen an ihrer Unterseite Feststoffpartikel mit nach oben, was zu einer Vermischung des Feststoffes führt. Ursache für dieses Phänomen ist der Druckverlauf im Nahbereich einer Gasblase sowie der Druckgradient in der Blase selbst. Während der Druckverlauf in einer homogenen Wirbelschicht der gestrichelten Linie in Abbildung 5 folgen würde und linear mit der Höhe der Schüttschicht abfallen würde, ist in einer voll ausgebildeten Wirbelschicht das Druckprofil ein anderes. Infolge des „um den Auftrieb verminderten Gewicht[es] des Feststoffes“ [13, S. 483] kommt es zu einem Strömungsdruckverlust, weswegen Gas von unten in die Blase hineingesaugt und dabei Partikel im Nachlauf der Blase mitgeschleppt werden. Da immer neue Partikel angesaugt werden, die Wirbelschlepe am unteren Blasenrand jedoch nicht beliebig groß werden kann, kommt es zu einem intensiven Feststoffmischungsvorgang, da Teile der Wirbelschlepe wieder verloren gehen [13, S. 492 f]. Aus der Blase austretendes Gas bildet eine Korona, die aufgrund der erhöhten Geschwindigkeit der Blase im Vergleich zur Gasgeschwindigkeit in der Suspensionsphase am unteren Ende der Blase wieder in selbige eintritt; ein Gasaustausch findet daher kaum statt, die Blasen haben also eine erhebliche Bypass-Wirkung. Dass kleinere Blasen von größeren Blasen angesaugt und aufgenommen werden verstärkt einerseits diesen Effekt und sorgt andererseits für ein stetiges Blasenwachstum [14, S. 75 f].

2.3.2 Reh-Diagramm

Die verschiedenen Zustände einer Wirbelschicht lassen sich grafisch im sogenannten Reh-Diagramm erfassen. In diesem wird die (modifizierte) Froude-Zahl Fr gegen die Partikel-Reynold-Zahl Re aufgetragen. Als zusätzliche dimensionslose Kennzahlen dienen die Archimedes-Zahl Ar sowie Ω . Die im Diagramm verwendeten dimensionslosen Kennzahlen sind wie folgt definiert [1, S. 232; 14, S. 64]:

$$Re = \frac{uL}{\nu} = \left\{ \frac{\text{Trägheitskraft}}{\text{Zähigkeitskraft}} \right\} \quad (2.3)$$

$$Fr = \frac{u^2}{gL} = \left\{ \frac{\text{Trägheitskraft}}{\text{Schwerkraft}} \right\} \quad (2.4)$$

Die im Diagramm aufgetragene modifizierte Froude-Zahl ist gemäß Gleichung (2.5) definiert:

$$Fr = \frac{3}{4} \frac{u^2}{gd_p} \frac{\rho_g}{\rho_s - \rho_g} \quad (2.5)$$

$$Ar = \frac{(d_p)^3 g \rho_s - \rho_g}{\nu^2 \rho_g} = \left\{ \frac{\text{Auftriebskraft}}{\text{Trägheitskraft}} \right\} \quad (2.6)$$

$$\Omega = \frac{(u)^3}{g\nu} \frac{\rho_g}{\rho_s - \rho_g} \quad (2.7)$$

- u Strömungsgeschwindigkeit des Fluids
- L Charakteristische Länge; hier: Partikeldurchmesser
- ν Kinematische Viskosität
- g Gravitationskonstante
- d_p Partikeldurchmesser
- ρ_g Dichte der Gaskomponente
- ρ_s Dichte des Partikelmaterials

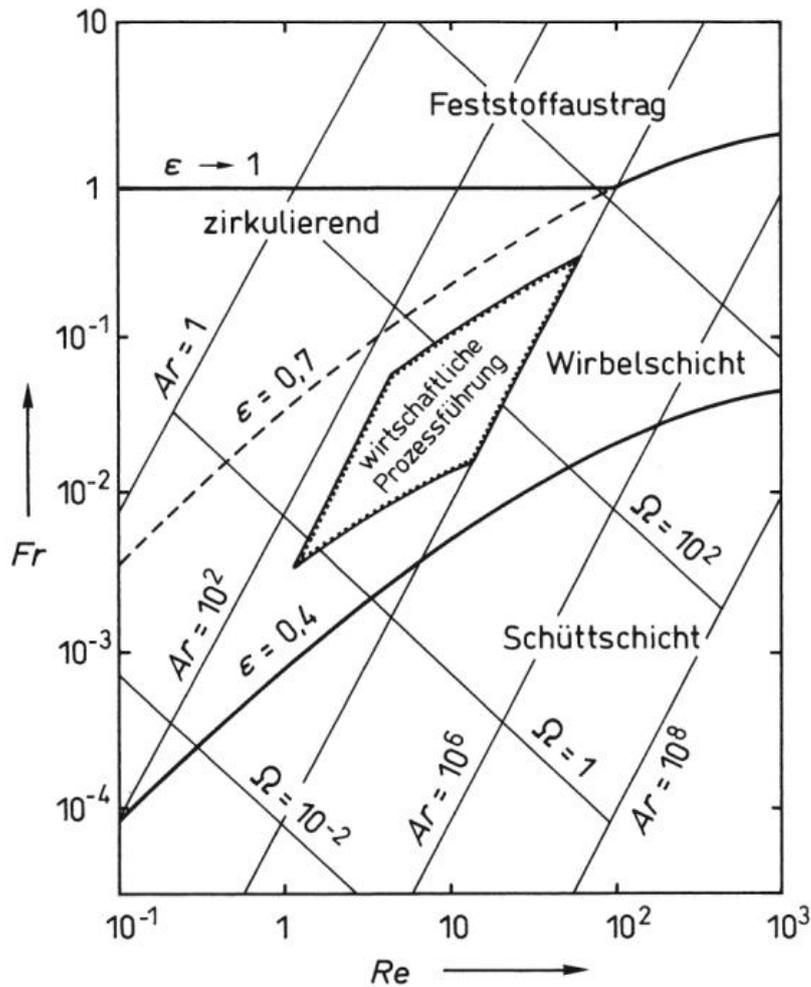


Abbildung 6: Zustandsdiagramm nach Reh [1, S. 232]

Die in der Abbildung gekennzeichnete Größe ε ist dabei das Lückenvolumen:

$$\varepsilon = \frac{V_{ges} - V_s}{V_{ges}} \quad (2.8)$$

ε Lückenvolumen

V_{ges} Gesamtvolumen

V_s Volumen des Feststoffes

Gerade bei der Planung und Auslegung neuer Reaktoren kann das Reh-Diagramm von Nutzen sein, da die Kenntnis der dimensionslosen Kennzahlen, die sich aus Material- und Reaktoreigenschaften berechnen lassen, eine Abschätzung optimaler Betriebsbedingungen erlaubt, auch wenn diese von vielen verschiedenen Faktoren abhängig sind.

2.3.3 Klassifikation nach Geldart

Da die Eigenschaften des Feststoffes, aus dem die Schüttschicht besteht, erheblichen Einfluss auf die Ausbildung einer Wirbelschicht haben, systematisierte D. Geldart Feststoffe nach ihren Eigenschaften und ihrem Verhalten in der Wirbelschicht. Dabei werden vier Gruppen unterschieden [13, S. 489 f; 14, S. 65 ff, 15, S. 324]:

Gruppe A: Zur Gruppe A zählen Stoffe mit kleinen Korngrößen ($d_p \approx 100 \mu\text{m}$) und niedriger Feststoffdichte. Oberhalb des Lockerungspunktes kommt es zur Expansion, bevor die Blasenbildung einsetzt. Zwischen den Partikeln erfolgt der Gasaufstieg langsamer als in den sich bildenden Gasblasen.

Gruppe B: Gruppe B schließt Partikel mit einer Größe von $40 \mu\text{m}$ bis $500 \mu\text{m}$ ein, deren Feststoffdichte im Bereich von 1400 kg/m^3 bis 4000 kg/m^3 liegt. Charakteristisch für die Gruppe B ist das sofortige Auftreten von Blasen nach Überschreitung des Lockerungspunktes.

Gruppe C: Gruppe C umfasst kleine Partikel ($d_p < 50 \mu\text{m}$), zwischen denen starke Kohäsionskräfte wirken; infolge der starken Kräfte, welche die Partikel aufeinander ausüben, gestaltet sich die Fluidisierung der Materialien der Gruppe C häufig schwierig. Den Haftkräften kann beispielsweise durch den Einsatz von mechanischen Rührern entgegengewirkt werden. Im Allgemeinen kann festgehalten werden, dass der Einfluss der Kohäsionskräfte mit abnehmender Korngröße zunimmt.

Gruppe D: Der Gruppe D werden Materialien hoher Partikeldichte mit Partikelgrößen von mehr als $500 \mu\text{m}$ zugeordnet, deren Aufwirbelung aufgrund ihres hohen Gewichts hohe Volumenströme erfordert. Daraus resultiert insbesondere ein hoher Grad an Erosion, sowohl der Partikel selbst, als auch der Wände.

2.4 Verweilzeit

Die Aufenthaltszeit von Molekülen in einem kontinuierlich durchströmten Reaktor hat großen Einfluss auf den Verlauf und Umsatz chemischer Reaktionen. Zwar ist es möglich, eine definierte Menge an Molekülen gleichzeitig in einen Reaktor einzuspeisen, diese werden allerdings nicht simultan am Reaktorausgang austreten, es ergibt sich ein Spektrum von Verweilzeiten, das sogenannte Verweilzeitspektrum $E(t)$. Dieses Verhalten ist auf Effekte wie Turbulenzen, Diffusion, Scherkräfte, Totvolumina und erzwungene Konvektion zurückzuführen und kann durch die Verweilzeitverteilung charakterisiert werden; sie stellt ein Maß für die Verteilung der aus dem Reaktor austretenden Volumenelemente dar [1, S. 166 ff]. Das Verweilzeitspektrum $E(t)$ ist definiert als

$$E(t) = \frac{\dot{n}(t)}{n_0} = \frac{\dot{V}c(t)}{n_0} = \left\{ \frac{\text{pro Zeiteinheit austretende Elemente}}{\text{Summe aller zugeführten Elemente}} \right\} \quad (2.9)$$

$\dot{n}(t)$ Zum Zeitpunkt t aus Reaktor austretender Stoffmengenanteil

n_0 Zum Zeitpunkt 0 zugegebene Stoffmenge

\dot{V} Volumenstrom

$c(t)$ Konzentration zum Zeitpunkt t

Da davon ausgegangen wird, dass alle eingespeisten Volumenelemente auch wieder austreten [1, S. 167], gilt die Normierungsbedingung (2.10).

$$\int_{t=0}^{\infty} E(t) dt = 1 \quad (2.10)$$

Die zweite wichtige Größe ist die Verweilzeitsummenfunktion $F(t)$ [13, S. 121].

$$F(t) = \frac{c(t)}{c_0} \quad (2.11)$$

$c(t)$ Konzentration zum Zeitpunkt t

c_0 Konzentration zum Zeitpunkt 0

Die Verweilzeitverteilung $E(t)$ und die Verweilzeitsummenfunktion $F(t)$ hängen gemäß Gleichung (2.12) zusammen [13, S. 121].

$$E(t) = \frac{dF(t)}{dt} \quad (2.12)$$

Experimentell stehen zwei Möglichkeiten zur Verfügung, um die Verweilzeit zu ermitteln [1, S. 167 f; 16, S. 68]:

a) Stoßmarkierung (Pulsfunktion)

Zum Zeitpunkt $t = 0$ wird ein Puls einer Markierungssubstanz, des sogenannten Tracers, dem in den Reaktor einströmenden Volumenstrom zugegeben; im Idealfall entspricht dieser Puls gerade der Dirac'schen Deltafunktion, im Realfall ist der Puls etwas verbreitert.

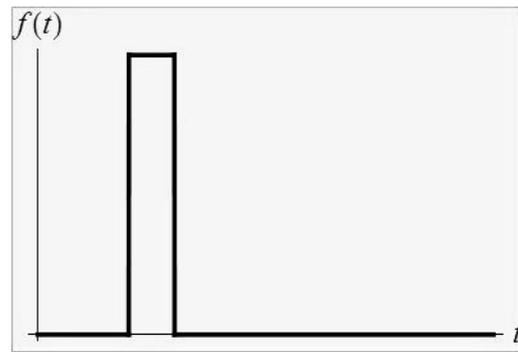


Abbildung 7: Pulsfunktion

b) Verdrängungsmarkierung
(Sprungfunktion)

Zum Zeitpunkt $t = 0$ wird der tracerfreie Zulaufstrom durch einen mit einer konstanten Tracerkonzentration ersetzt.

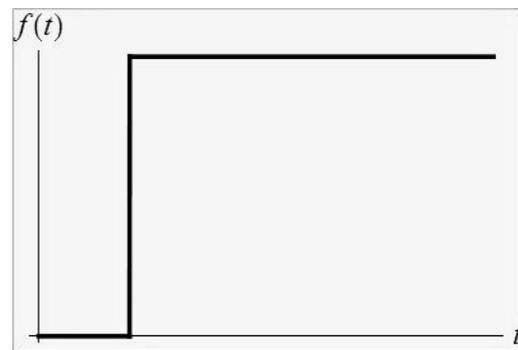


Abbildung 8: Sprungfunktion

Abbildung 7 und Abbildung 8 illustrieren das Eingangssignal, welches in den Reaktor eingespeist werden kann. Nachdem das Signal das System durchlaufen hat, kann der Tracer am Reaktorausgang gemessen werden. Aus der Form des Ausgangssignals können dann Rückschlüsse auf Reaktoreigenschaften gezogen werden. In realen Systemen sind die Signale am Reaktorausgang „verschmiert“, was auf nichtideale Phänomene wie beispielsweise Rückvermischung oder Turbulenzen zurückzuführen ist. Die Markierungssubstanz sollte chemisch inert sein, darf also die physikalischen Eigenschaften des Systems wie zum Beispiel Dichte und Viskosität nicht beeinflussen und sollte einfach nachweisbar sein [1, S. 167].

3 Durchführung der Berechnungen

Als Lösungsprogramm für die Modellgleichungen können diverse kommerzielle Programme herangezogen werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde das OpenSource Programmpaket OpenFOAM für die Strömungssimulation in Kombination mit LIGGGHTS für die Berechnung der Partikelbewegungen verwendet. Die (grafische) Auswertung der erhaltenen Daten im Rahmen des Postprocessing erfolgte mit dem OpenSource-Programm Paraview. Ein beispielhafter Auszug der Steuerungsdateien für die Strömungs- und Partikelsimulation findet sich im Anhang.

3.1 Experimenteller Aufbau und Simulation

Der dieser Simulation zugrunde liegende experimentelle Aufbau wurde im Rahmen einer Diplomarbeit von J. M. Rischard entwickelt [6]. Es handelt sich dabei um einen Zwei-Zonen-Wirbelschichtreaktor. In der Zone über dem Gaseinlass, durch den Butan einströmt, der sogenannten Reaktionszone, findet an katalytisch beschichteten Partikeln der chemische Umsatz von Butan zu Butadien statt, während die Katalysatorpartikel in der unteren Zone durch den von unten einströmenden Sauerstoff regeneriert werden. Da die Partikel der Wirbelschicht während der Reaktion durch Verkokung deaktiviert werden, ist die Regeneration für einen kontinuierlichen Betrieb zwingend notwendig. Stabile Betriebsbedingungen und damit ein stationärer Zustand sind nur durch geeignete Wahl der Höhen der Zonen zu erreichen. Der Aufbau des experimentell untersuchten Reaktors sowie im Vergleich dazu ein Schema des Modellreaktors kann Abbildung 9 entnommen werden. Während im Experiment ca. 5,5 Millionen Partikel mit Durchmessern von 160 – 250 μm im Reaktor enthalten waren, wurden für die Simulation etwa 86.000 Partikeln mit einem Durchmesser von 0,8 mm berücksichtigt. Eine Reduktion der Partikelanzahl ist notwendig, um die Rechenzeit zu verringern.

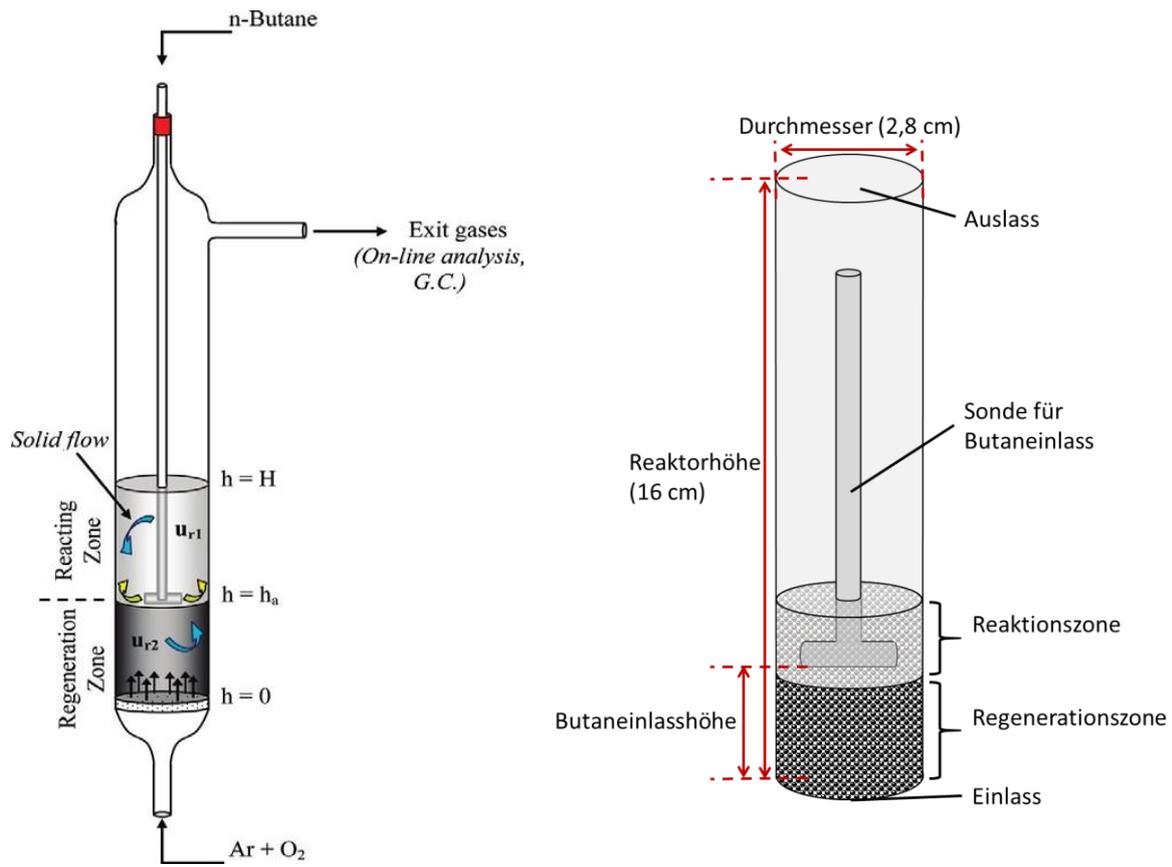


Abbildung 9: Vergleich des experimentellen Aufbaus des Wirbelschichtreaktors [6, S. 5] (links) und des simulierten Modellreaktors (rechts)

3.2 Eingesetzte Rechengitter und Bedingungen

Alle Berechnungen zum mit Partikeln gefüllten Reaktor wurden mit einem Tetraedergitter mit ca. 80.000 Zellen durchgeführt, in welchem sich etwa 86.000 Partikel befanden, wobei die Rechengitter mithilfe des kommerziellen Programms ANSYS ICEM erzeugt wurden. Abbildung 10 zeigt ein Tetraedergitter, in dem sich der Butaneinlass auf einer Höhe von 2,5 cm befindet, Abbildung 11 illustriert einerseits die unterschiedlichen Zellengrößen in unterschiedlichen Bereichen des Reaktors und stellt andererseits die Partikel im Reaktorrohr dar.

Im Allgemeinen wäre ein feineres Gitter für eine detailliertere Erfassung des Strömungs- und Mischungsfelds wünschenswert, da mit der Zellenzahl auch die Genauigkeit der Berechnung steigt. Mit einer Erhöhung der Zellenanzahl muss jedoch auch, wie bereits in Abschnitt 2.1.1 angemerkt, ein Vielfaches an Rechenzeit, oder, soll diese weiter im vertretbaren Rahmen bleiben, ein Vielfaches an Rechenleistung bereitgestellt werden. Im vorliegenden Fall, in welchem eine Strömungssimulation mit einem partikulären Problem gekoppelt wird, gelten darüber hinaus zusätzliche Einschränkungen: Um die Bewegung der Partikel erfassen und berechnen zu können, sollte die Größe der Zellen, die für die Strömungssimulation dienen, in etwa dreimal so groß sein wie ein einzelner Partikel, sodass ein Kompromiss zwischen ausreichender Genauigkeit des Gitters für die Simulation der Strömung und ausreichender Zellengröße für die Partikel(Bewegung) gefunden werden muss [17].

Die optimalen Betriebsbedingungen für den Modellreaktor wurden anhand der unter Abschnitt 2.3.2 aufgeführten Kennzahlen ermittelt. Dabei wurde darauf geachtet, die Reynolds- sowie die Froude-Zahl konstant zu halten. Eine Änderung des Partikeldurchmessers hat dann unweigerlich eine Änderung der Viskosität und der Dichte zur Folge. Grundlage der Berechnungen waren die experimentellen Daten, die in untenstehender

Tabelle den zur Simulation herangezogenen Werten gegenübergestellt sind. Eine ausführliche Dokumentation zur Ermittlung der Betriebsbedingungen findet sich in der Vertieferarbeit von F. Maurer [11].

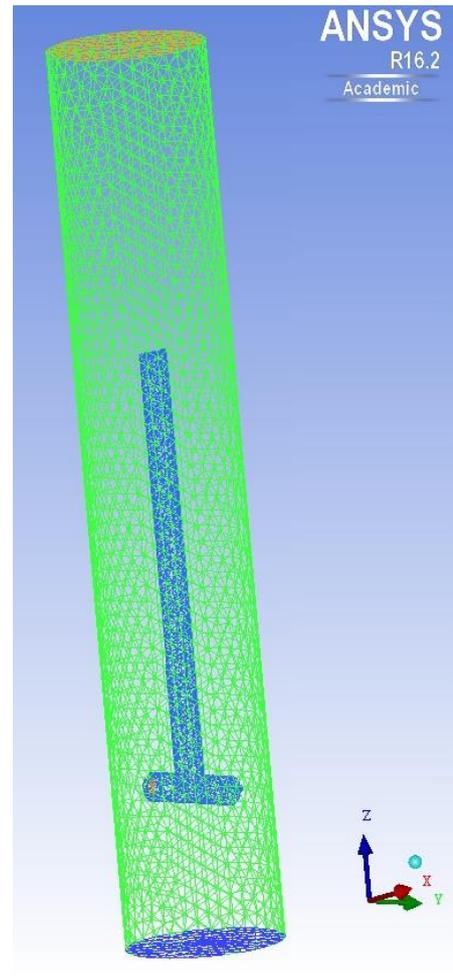


Abbildung 10: Rechengitter aus Tetraedern

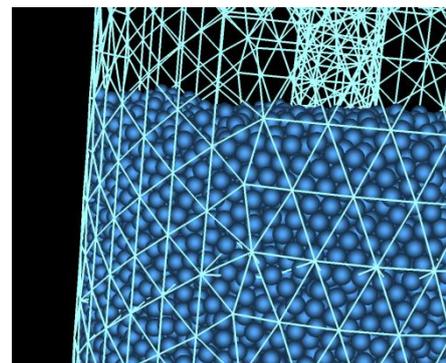


Abbildung 11: Partikel im Rechengitter

		Experiment	Simulation
Innendurchmesser Rohrreaktor	[m]	0,028	0,028
Gasgeschwindigkeit Auslass	$\left[\frac{m}{s}\right]$	0,023	0,023
Gasgeschwindigkeit Einlass	$\left[\frac{m}{s}\right]$	0,0215	0,0215
Gasgeschwindigkeit Butaneinlass	$\left[\frac{m}{s}\right]$	0,065	0,065
Partikeldurchmesser	[m]	0,00016	0,0008
Dichte der Partikel	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$	2013	402,6
Masse eines Partikels	[kg]	$3,45 \cdot 10^{-8}$	$8,63 \cdot 10^{-7}$
Viskosität des Gases	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$	$7,91 \cdot 10^{-5}$	$3,96 \cdot 10^{-4}$
Diffusionskoeffizient	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$	$1,13 \cdot 10^{-4}$	$5,66 \cdot 10^{-4}$
Dichte der Gasmischung	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$	0,577	0,577
Schwerebeschleunigung	$\left[\frac{m}{s^2}\right]$	9,81	9,81
Reynoldszahl Re	-	$2,681 \cdot 10^{-2}$	$2,681 \cdot 10^{-2}$
Archimedeszahl Ar	-	22,41	22,38
Froudezahl Fr	-	$7,242 \cdot 10^{-5}$	$7,250 \cdot 10^{-5}$
Ω	-	$4,491 \cdot 10^{-6}$	$4,496 \cdot 10^{-6}$

Tabelle 1: Bedingungen für das Experiment [6] und die Simulation im Vergleich

Die Partikel sind aufgrund ihrer Dichten und Durchmesser gemäß der in Abschnitt 2.3.3 erläuterten Klassifikation am ehesten der Geldart-Gruppe B zuzuordnen. Mit einer Erhöhung des Partikeldurchmessers in der Simulation rücken die Partikel näher an die Grenze zur Gruppe D heran.

Aufgrund der guten Durchmischung in Wirbelschichtreaktoren, welche die Annahme eines nahezu isothermen Reaktorbetriebs rechtfertigt, wurde auf die Lösung der Energieerhaltungsgleichung verzichtet.

Den Solver und die CFDEM-Kopplung betreffend war insbesondere der Zeitschritt Δt der Simulation von zentraler Bedeutung, da eine geeignete Kommunikation zwischen dem CFD-Code und dem DEM-Code für die Simulation unerlässlich ist. Nur wenn Daten zu den wirkenden Impulskräften aus der Strömungsrechnung und der Partikelrechnung zu definierten Zeiten zwischen den Computer-Codes ausgetauscht werden, ist ein physikalisch sinnvolles Ergebnis zu erwarten. Abbildung 12 stellt die Arbeitsweise des verwendeten CFDEM-Codes dar. Während der CFD-Code schrittweisen von 1 ms berechnet, arbeitet der DEM-Code mit einer Schrittweite von 0,01 ms detaillierter. Nach je 100 Zeitschritten des DEM-Codes beziehungsweise einem Zeitschritt des CFD-Codes werden Daten zwischen den Computercodes ausgetauscht, bevor die Berechnung fortgesetzt wird.

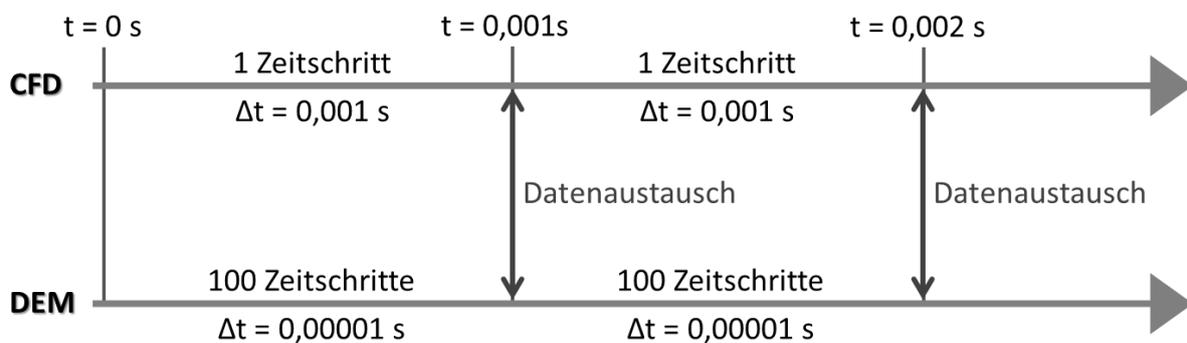


Abbildung 12: Funktionsweise des CFDEM-Codes

3.3 Verweilzeit

Sämtliche Verweilzeitsimulationen wurden mit dem OPENFoam-Solver *pimpleFoam* durchgeführt, der für inkompressible Strömungen und instationäre Problemstellungen angewendet werden kann. Der Solver *pimpleFoam* vereinigt die Algorithmen PISO (verwendet für inkompressible Strömungen) und simple (verwendet für stationäre turbulente Strömungen), woraus sich der Kunstbegriff *pimple* ableitet [18, S. U-86]. Die Berechnungen wurden für verschiedene Gitter durchgeführt, um den Einfluss der Zellenform und -anzahl auf die Verweilzeitverteilung herauszuarbeiten.

Darüber hinaus wurde anhand eines der erstellten Gitter überprüft, ob die Art der Diskretisierung während des Lösungsprozesses einen Einfluss auf die Verweilzeitverteilung hat. Dabei wurde das Diskretisierungsverfahren *QUICK 01* mit dem *upwind*-Verfahren

verglichen. Als Solver diente in beiden Fällen *pimpleFoam*, das zum Vergleich herangezogene Gitter war ein Tetraedergitter mit ca. 80.000 Zellen, welches auch bei den Simulationen mit Partikeln zum Einsatz kam. Für die Berechnungen zur Verweilzeitverteilung wurde stets ein leerer Reaktor ohne Wirbelbett zugrunde gelegt, der Tracer wurde gemäß Abbildung 8 nach Erreichen des stationären Zustandes in Form einer Sprungfunktion zugegeben.

4 Auswertung und Diskussion

4.1 Einfluss der Einlasshöhe auf das Strömungs- und Mischungsfeld

Experimentelle Ergebnisse von J. Rischard haben gezeigt, dass der n-Butan-Umsatz von der Einlasshöhe des Butans abhängt [7]. Auch wenn im Rahmen des in dieser Vertieferarbeit verwendeten Modells eine Simulation von chemischen Umsätzen (noch) nicht möglich ist, soll der Einfluss der Einlasshöhe auf das Strömungs- und Mischungsfeld im Modellreaktor untersucht werden. Der allgemeine Ablauf einer im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulation ist in Abbildung 13 dargestellt. Zunächst wurden bei den unter Abschnitt 3.2 beschriebenen Bedingungen die Partikel mithilfe der Diskreten Elemente Methode (vgl. Abschnitt 2.1.2) in den Reaktor eingefüllt. Anschließend wurde die Wirbelschicht für 35 Sekunden auf Basis eines CFDEM-Codes simuliert, was in etwa dem Fünffachen der hydrodynamischen Verweilzeit entspricht, um sicherzustellen, dass eine voll ausgebildete Wirbelschicht vorliegt. Ab diesem Zeitpunkt kann das Mischungs- und Strömungsfeld durch Betrachtung eines Skalars beziehungsweise der Strömungsgeschwindigkeiten und der freien Volumina infolge von Blasenbildung untersucht werden.

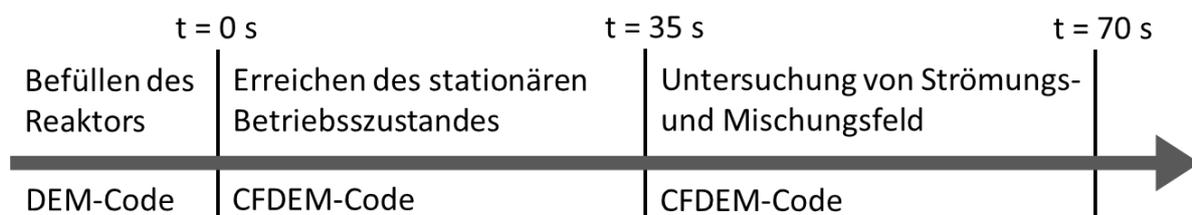


Abbildung 13: Zeitlicher Ablauf einer typischen Simulation des Wirbelschichtreaktors

Die nachfolgenden Grafiken, die zur Auswertung dienen, zeigen einen Querschnitt durch die Mitte des Reaktors (in der y-z-Ebene). Neben den Maßen des Reaktors und der Einlasshöhe der Butansonde über dem Reaktorboden ist auch die ungefähre Grenze des Partikelbettes angedeutet.

4.1.1 Gasgeschwindigkeit

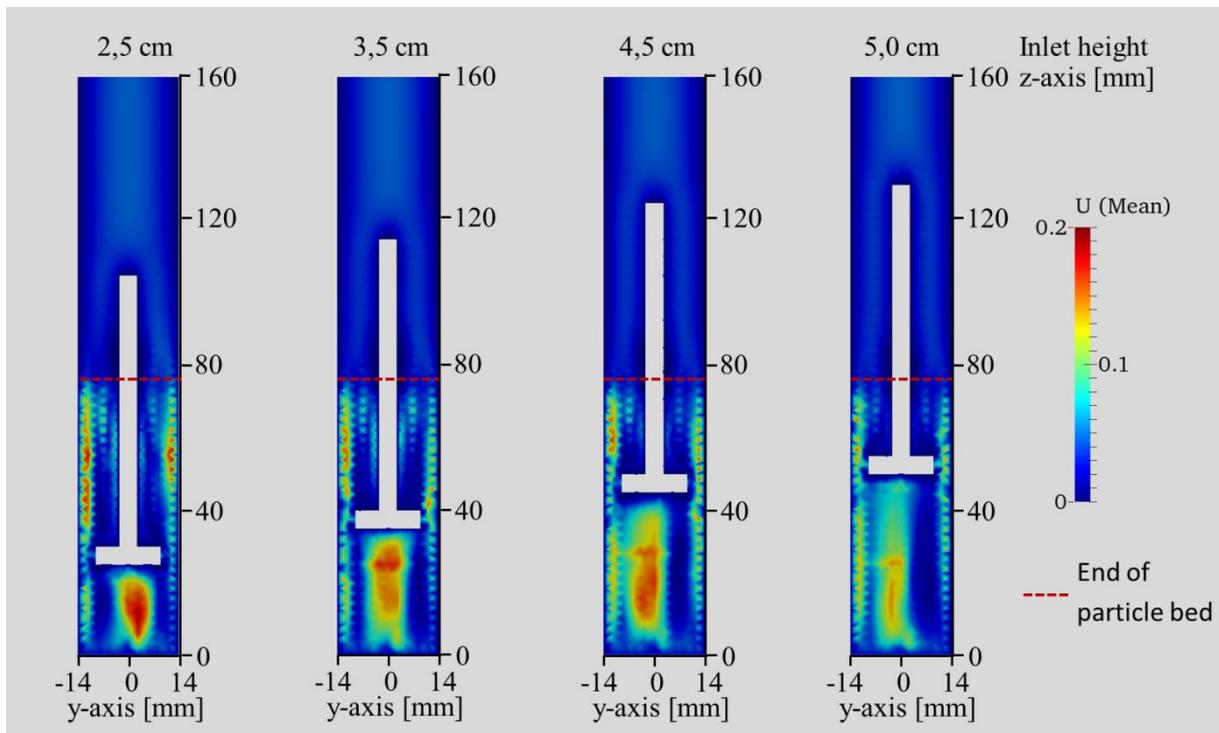


Abbildung 14: Gemittelte Gasgeschwindigkeit U (Mean)

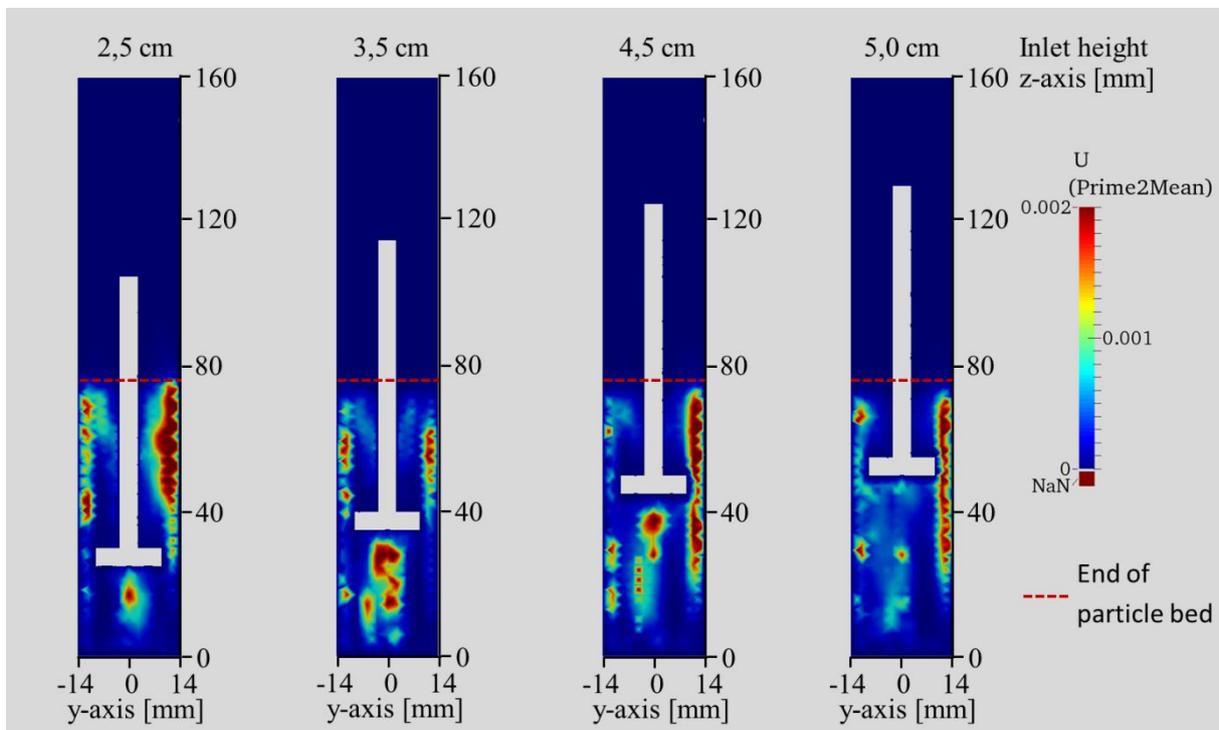


Abbildung 15: Schwankung der Gasgeschwindigkeit U (Prime2Mean)

Abbildung 14 zeigt die über 35 Sekunden gemittelten Gasgeschwindigkeiten im Reaktor. Die abgebildete Größe U (Mean) stellt den Betrag des zeitlich gemittelten Geschwindigkeitsvektors des Gases dar, entspricht also dem Erwartungswert. Die mathematische Definition des Erwartungswertes μ ist durch Gleichung (4.1) gegeben.

$$\text{Mean: } \mu = \int_0^{\infty} x \cdot f(t) dt \quad (4.1)$$

x Wert

$f(t)$ (Wahrscheinlichkeits-)Dichtefunktion

Auffällig sind die dunkelroten Areale unter der Butaneinlasssonde, die umso langgezogener werden, je höher die Sonde platziert wird, wobei gleichzeitig mit der Größe des Areals unter der Sonde auch die Homogenität des Strömungsfeldes zunimmt. Dieser Trend ist auch an der Reaktorwand erkennbar: Zwar sind in allen untersuchten Fällen an der Reaktorwand entlang beinahe kanalartige Gebiete erhöhter Strömungsgeschwindigkeit zu erkennen, allerdings nimmt deren Intensität mit der ansteigenden Butaneinlasshöhe ab. Die Randgängigkeit des Gases wird folglich etwas geringer. Um herauszuarbeiten, an welchen Stellen im Reaktor die Strömungsgeschwindigkeit am stärksten schwankt, muss die Varianz der gemittelten Geschwindigkeitswerte betrachtet werden, die in Abbildung 15 dargestellt sind. Die Varianz Var , in Abbildung 15 und allen nachfolgenden Abbildungen als „Prime2Mean“ bezeichnet, beschreibt die mittlere quadratische Abweichung der Geschwindigkeiten um den (zeitlichen) Mittelwert, ist also ein Maß für die Schwankung der Geschwindigkeit.

$$\text{Prime2Mean: } Var = \int_0^{\infty} (x - \mu)^2 \cdot f(t) dt \quad (4.2)$$

x Wert

μ Erwartungswert

$f(t)$ (Wahrscheinlichkeits-)Dichtefunktion

Auch hier sind die Areale intensiver Färbung jeweils unterhalb der Sonde sowie an den Rändern des Reaktorrohres zu finden. Dies deutet darauf hin, dass vor allem dort, wo die Gasgeschwindigkeit hoch ist, selbige auch starken Schwankungen unterworfen ist, in Bereichen geringer Strömungsgeschwindigkeiten hingegen ändert sich die Geschwindigkeit des Gases im untersuchten Zeitraum kaum.

4.1.2 Feststoffgeschwindigkeit

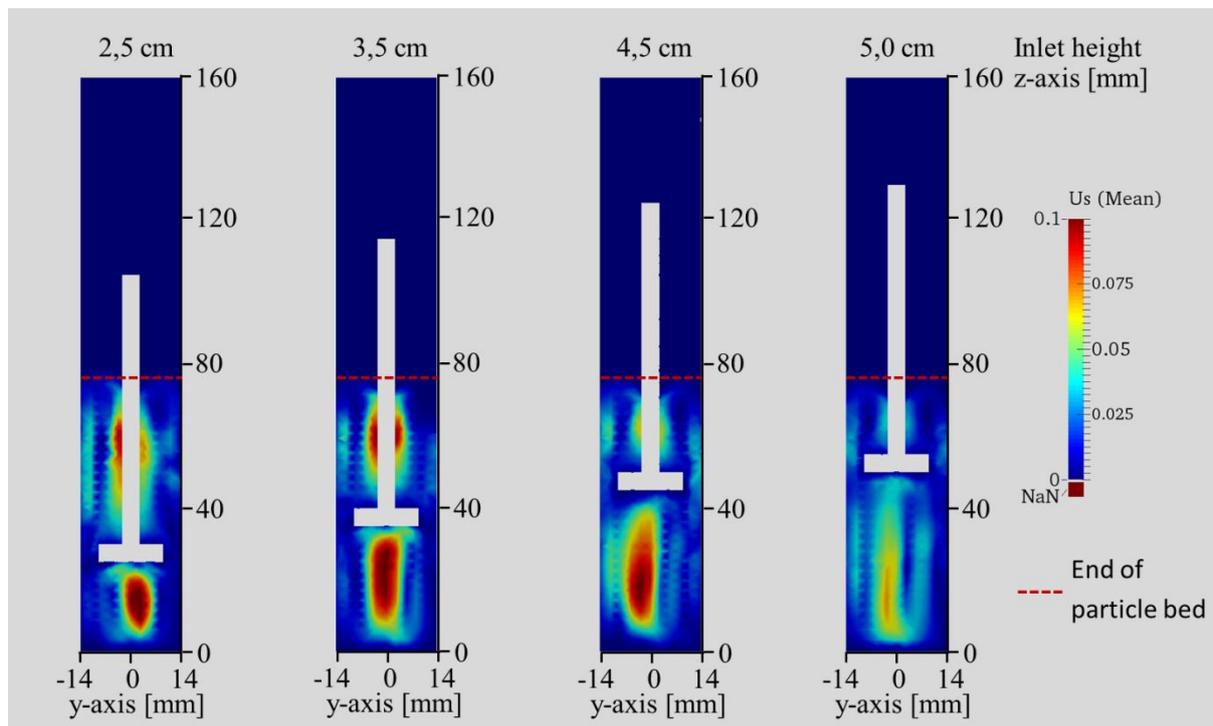


Abbildung 16: Gemittelte Feststoffgeschwindigkeit U_s (Mean)

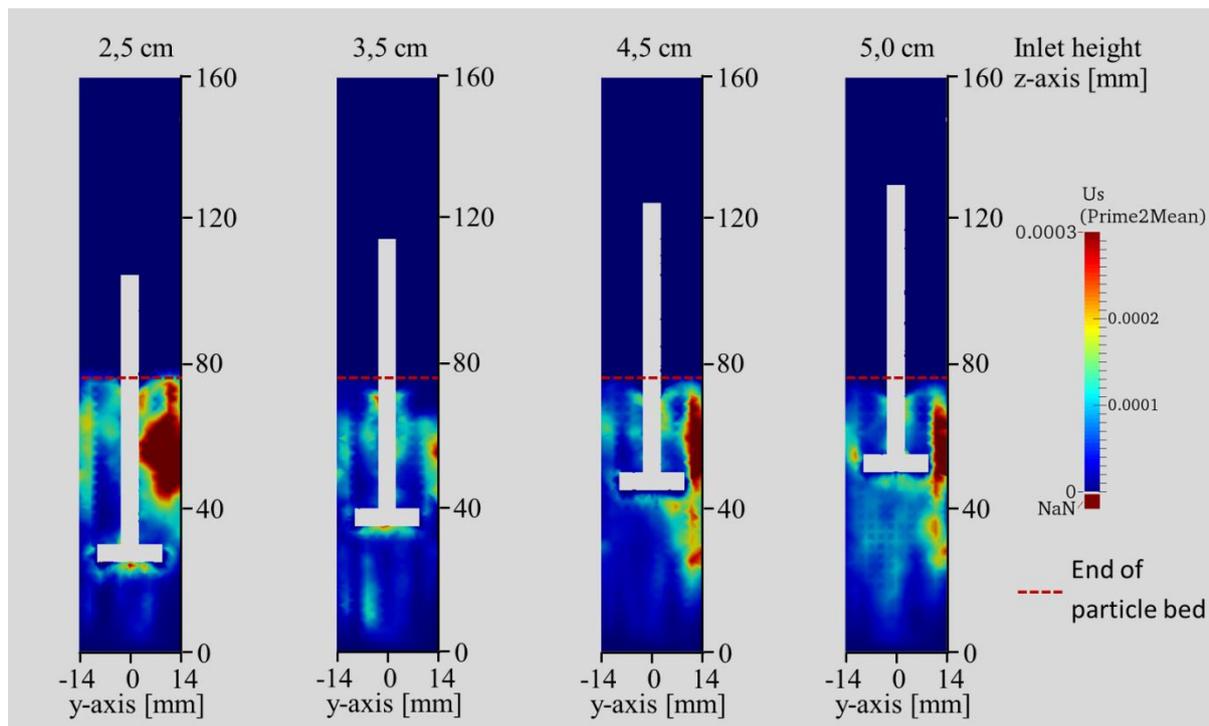


Abbildung 17: Schwankung der Feststoffgeschwindigkeit U_s (Prime2Mean)

Analog zu den Grafiken in Abschnitt 4.1.1 sind in Abbildung 16 und Abbildung 17 die zeitlich gemittelte Feststoffgeschwindigkeit U_s (Mean) sowie die Schwankung von U_s (Prime2Mean) dargestellt. Wieder fällt auf, dass unterhalb der Sonde ein Feld erhöhter Geschwindigkeit vorliegt, welches für eine gute Durchmischung der Partikel sorgt. Die hohe Gasgeschwindigkeit unterhalb der Butansonde im Zentrum des Reaktors sorgt also offensichtlich für eine starke Partikelbewegung. Bemerkenswert sind außerdem die Bereiche hoher Feststoffgeschwindigkeiten an der Butansonde entlang, die vor allem für Einlasshöhen von 2,5 cm und 3,5 cm in Abbildung 16 deutlich werden. Dies ist auf herabfallende Partikel zurückzuführen, die vom Gasstrom an der Wand stetig nach oben befördert werden und dann zügig wieder herabfallen. Noch deutlicher sind axialen Partikelbewegungen in der nachfolgenden Abbildung 18 zu erkennen, die lediglich die Feststoffgeschwindigkeiten in z-Richtung zeigt. In dieser Darstellungsform kann die Bewegungsrichtung der Partikel anhand des Vorzeichens der Feststoffgeschwindigkeit entnommen werden.

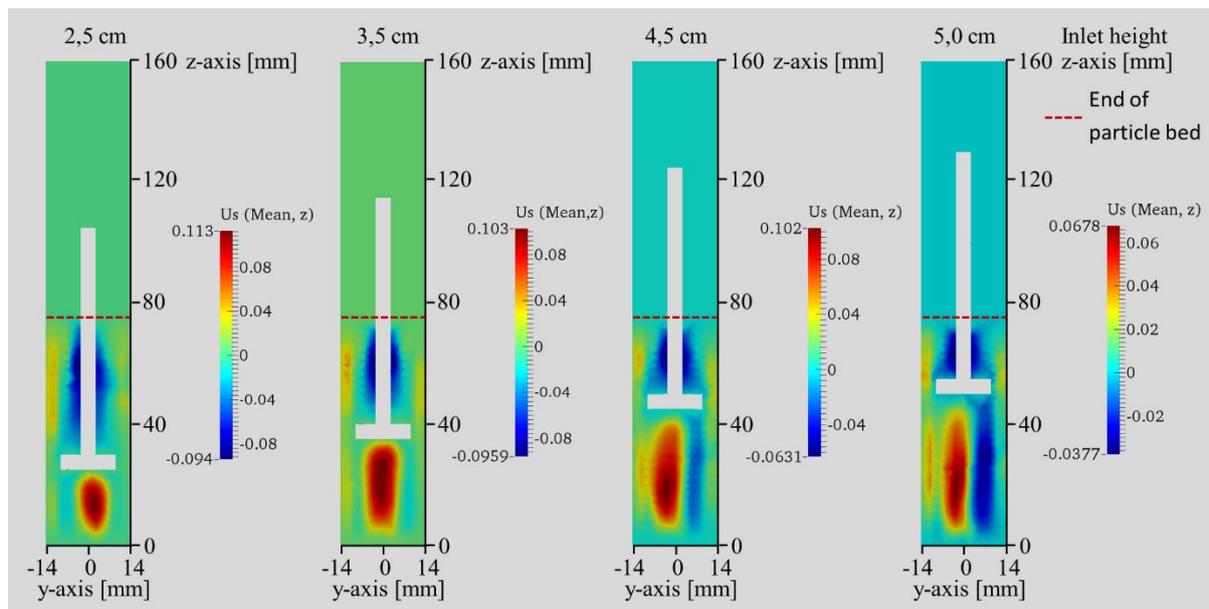


Abbildung 18: Gemittelte Feststoffgeschwindigkeit U_s (Mean, z) in z-Richtung

Ebenso wie bei den Gasgeschwindigkeiten ist auch bei der Feststoffgeschwindigkeit für eine Butaneinlasshöhe von fünf Zentimetern die beste Homogenität erkennbar, was auf eine gute Durchmischung hinweist. Obgleich sich das Modellsystem aufgrund der stark veränderten Parameter noch nicht uneingeschränkt mit dem realen, bereits experimentell untersuchten Vorbild vergleichen lässt, so ist doch eine Gemeinsamkeit unverkennbar: Während in der Simulation für eine Einlasshöhe von fünf Zentimetern die stärkste Durchmischung auftritt, die chemische Umsätze begünstigt, wird auch im Experiment beobachtet, dass bei dieser Einlasshöhe der größte Butanumsatz vorliegt [7]. Insbesondere in Abbildung 17 lässt sich eine Asymmetrie erkennen, Veränderungen der Feststoffgeschwindigkeit scheinen präferiert auf der rechten Seite stattzufinden – eine Anomalie, die sich bei der Untersuchung des freien Volumens im nachfolgenden Abschnitt manifestiert.

4.1.3 Freies Volumen (voidfraction)

Abweichend vom realen Reaktor entstehen im Modellsystem keine echten Blasen, in denen keinerlei Partikel mehr vorhanden sind, sondern vielmehr Räume unterschiedlicher Ausdehnung, in denen die Partikeldichte verringert und der Gasanteil erhöht ist. Die nachfolgende Abbildung 19 zeigt den simulierten Reaktor mit unterschiedlichen Butaneinlasshöhen, wobei es sich bei den blauen Flächen um Iso-Flächen handelt, die einen

freien Volumenanteil ϵ (englisch: voidfraction) von 50 % anzeigen. Innerhalb der konkaven Flächen ist ϵ größer als 50 %, außerhalb kleiner. Die voidfraction beschreibt also den vom Gas eingenommenen Anteil einer Zelle des Rechengitters.

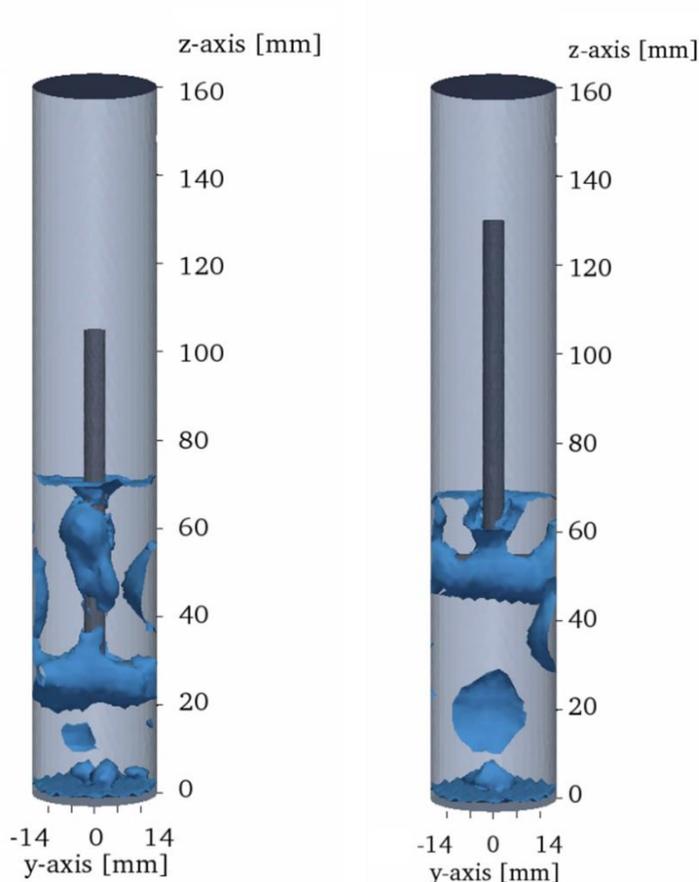


Abbildung 19: Iso-Flächen der voidfraction für $\epsilon = 50\%$ für 2,5 cm Einlasshöhe (links) sowie 5,0 cm Einlasshöhe (rechts)

Es ist erkennbar, dass insbesondere in der Mitte des Reaktors und an den Wänden Blasen aufsteigen. Für eine Sondenhöhe von 5,0 cm ist besonders gut die bereits erwähnte Asymmetrie der Simulationsergebnisse erkennbar: Vor allem an der rechten Seite sowie der vorderen Reaktorwand (vergleiche Abbildung 19) entstehen Blasen. Dies deckt sich mit den in Abbildung 15 und Abbildung 17 dargestellten Ergebnissen. Eine vermehrte Blasenbildung geht mit starken Schwankungen der Gas- und Feststoffgeschwindigkeit einher. Der erhöhte Gasdurchsatz unterhalb der Butaneinlasssonde, der in Abschnitt 4.1.1 bereits beschrieben wurde, ist auf eine erhöhte Blasenbildung im Zentrum des Reaktors zurückzuführen. Diese erklärt auch die starken Partikelbewegungen unterhalb der Sonde, die in Abschnitt 4.1.2 erläutert wurden: Die Partikel werden im Nachlauf der Blasen nach oben mitgeschleppt und

fallen dann wieder nach unten (vergleiche hierzu insbesondere Abbildung 18). Unabhängig von der Butaneinlasshöhe wird der untere Teil der Sonde, das T-Stück, von einem Bereich mit verringerter Partikeldichte eingeschlossen. Dieses Phänomen ist auf Wandeffekte zurückzuführen. Die sich bewegenden Partikel können sich direkt an der stark gekrümmten kleinen Butansonde nicht ganz so dicht packen wie in den übrigen Teilen des Reaktorrohres.

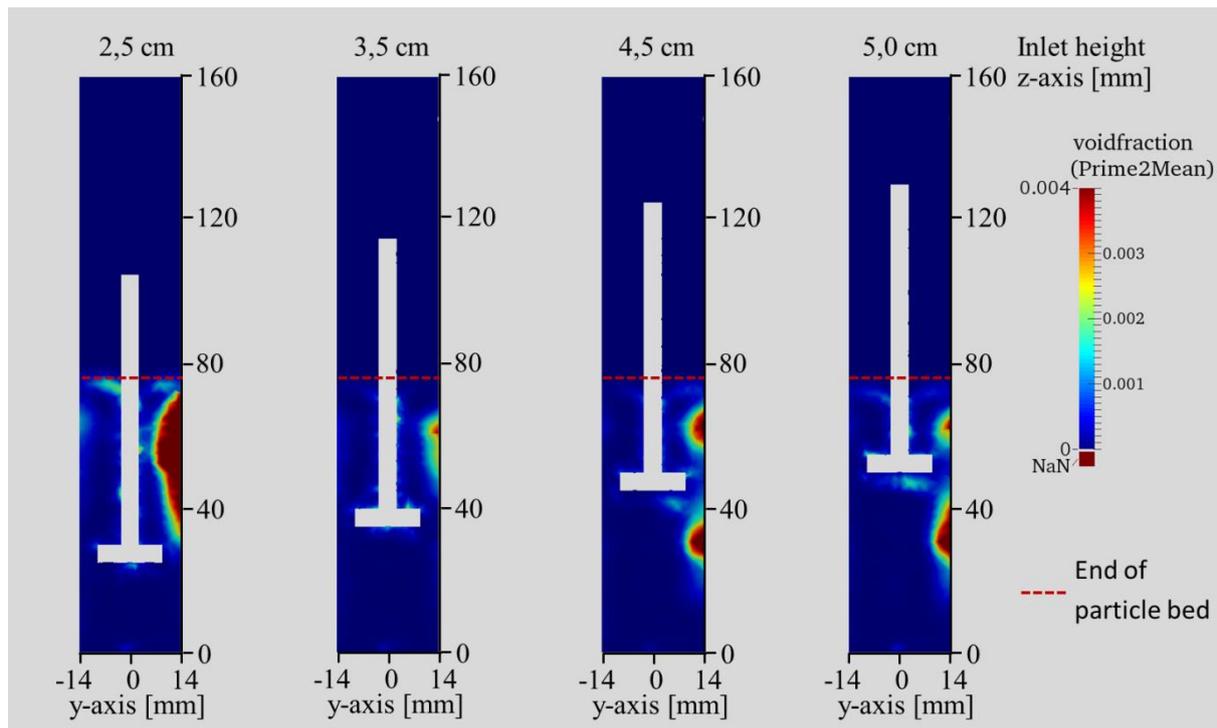


Abbildung 20: Schwankung des freien Volumens, die Asymmetrie ist deutlich erkennbar

Auch die in Abbildung 20 dargestellte Schwankung des freien Volumenanteils deutet auf eine starke Asymmetrie an der rechten Reaktorwand hin. Die Ursachen für derartige Effekte können aufgrund der Datenlage nicht abschließend erörtert werden, möglicherweise ist jedoch das asymmetrische Rechengitter für die einseitige Blasenbildung verantwortlich, so dass der Gaseintritt beziehungsweise der Gasdurchfluss an bestimmten Stellen bevorzugt wird. Um den Effekt eines durch unregelmäßig angeordnete Zellen wiedergegebenen Reaktorbodens abzumildern, kann ein zusätzlicher Stutzen vor dem eigentlichen Reaktor angebracht werden. Der bisherige Boden des Reaktors wird dann wie eine gasdurchlässige poröse Fritte behandelt, wodurch sich im Stutzen ein laminares Strömungsfeld ausbilden kann, bevor das Gas von unten in den Reaktor einströmt. Ein solcher Modellreaktor käme

dem experimentellen Vorbild deutlich näher, da dort der Gaseintritt tatsächlich durch eine solche Fritte erfolgt. Der Einfluss eines zusätzlichen Stützens auf das Strömungs- und Mischungsfeld des Modellreaktors wurde ausführlich von F. Maurer untersucht [11].

Eine weitere Ursache könnte sein, dass sich neue Blasen bevorzugt im Nachlauf bestehender Blasen ausbilden.

4.1.4 Mischungsfeld

Das Mischungsfeld im Reaktor kann durch Zugabe eines Tracers, der stellvertretend für das Butangas im Experiment steht, am Butaneinlass untersucht werden. Der maximale Wert des einströmenden Tracers liegt per Definition bei eins, während am Einlass des Reaktors von unten ein Skalar mit dem Wert null einströmt. Letztlich repräsentiert die Vermischung der dimensionslosen skalaren Größen „Null“ und „Eins“ das Mischungsfeld des Wirbelschichtreaktors.

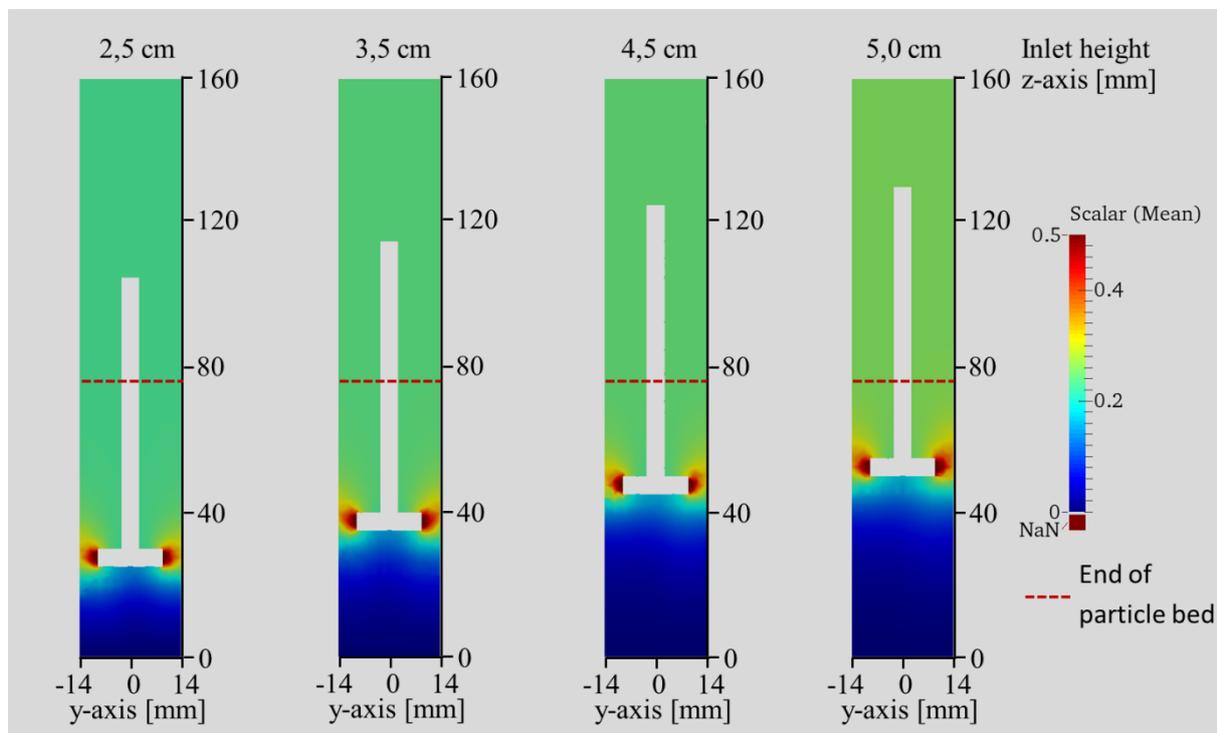


Abbildung 21: Untersuchung des Mischungsfeldes durch Zugabe eines Skalars

Abbildung 21 zeigt das Mischungsfeld. Dabei wird deutlich, dass die Bereiche niedriger Butankonzentration (dunkelblau dargestellt), also die Regenerationszone, umso größer wird,

je weiter oben die Sonde angebracht ist. Gleichzeitig wird der Teil der Wirbelschicht, in welchem hohe Butankonzentrationen vorliegen, ergo die Reaktionszone, kleiner, je höher der Butaneinlass im Reaktor liegt.

Unabhängig von der Butaneinlasshöhe ist auffällig, dass sich das Mischungsfeld sehr schnell einstellt und die Mischung schon wenige Zentimeter vom Einlass entfernt homogen ist. Auch wenn derartige Homogenität im Hinblick auf mögliche chemische Umsätze wünschenswert wäre, war dies in dieser ausgeprägten Form nicht zu erwarten. Die wahrscheinlichste Ursache dürfte der sehr große Diffusionskoeffizient sein, der für eine schnelle Mischung verantwortlich ist. Eine Herabsetzung des Diffusionskoeffizienten könnte das Modellsystem näher an die realen experimentellen Gegebenheiten angleichen. Ein Blick auf die absoluten Werte des Tracers am Reaktorausgang zeigt, dass die quantitative Aussage der Simulationsergebnisse kritisch zu sehen ist; unter den simulierten Bedingungen sollte am Auslass ein dimensionsloser Skalar von etwa 0,06 erreicht werden, tatsächlich werden jedoch ca. 0,24 erhalten. Dies deutet darauf hin, dass die Simulationemethode hinsichtlich des Mischungsfeldes qualitativ bereits geeignet ist, eine quantitative Deutung allerdings noch nicht zulässt. Somit muss der Solver im Hinblick auf die Berechnung des Mischungsfeldes nochmals validiert werden.

4.2 Verweilzeitverteilung

Bei sämtlichen Verweilzeitrechnungen wurde wie auch im Experiment [6, S. 50 ff] von einem Volumenstrom von 2 SL/min ausgegangen, was einer Strömungsgeschwindigkeit von 0,14 m/s bei 500 °C entspricht, der von unten in den Reaktor einströmt. Da im Experiment 2 Vol.-% CO₂ in Argon (98 Vol.-%) als Tracer diente, wurden für die Simulation näherungsweise die Stoffwerte von Argon für das einströmende Gas berücksichtigt. Während die kinematische Viskosität auf $\nu = 73,8 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$ gesetzt wurde, betrug der resultierende Diffusionskoeffizient $D = 105 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$. Zwar sind die Reaktorabmessungen in Experiment und Simulation gleich, allerdings unterscheiden sich der Ort der Tracerzugabe sowie die Analyse. Daher sind die experimentellen und simulierten Ergebnisse kaum zu vergleichen, Tabelle 2 unterstreicht die Unterschiede.

	Volumenfluss [SL/min]	Hydrodynamische Verweilzeit τ [s]	Reaktorvolumen [L]
Experiment (500° C) [6]	2	6,92	0,2309
Simulation (500° C)	2	2,96	0,0985

Tabelle 2: Vergleich der Verweilzeitbedingungen im Experiment und in der Simulation

4.2.1 Vergleich verschiedener Gittertypen

Da die Simulation der Verweilzeitverteilung mit vier verschiedenen Gittern durchgeführt wurde, können diese untereinander hinsichtlich ihrer Güte verglichen werden.

Fall	Gittertyp	Anzahl Zellen	Numerischer Rechenschritt [s]	Kurzname in Abbildungen
A	Hexaeder	80.000	0,001	Hexa80k
B	Hexaeder	400.000	0,0001	Hexa400k
C	Tetraeder	80.000	0,001	Tetra80k
D	Tetraeder	426.000	0,001	Tetra426k

Tabelle 3: Übersicht über die verschiedenen für die Verweilzeitberechnung herangezogenen Gitter

Als Eingangssignal für die Berechnungen wurde eine Sprungfunktion gewählt (vergleiche hierzu Abschnitt 2.4), die eingegebene Tracerkonzentration liegt per Definition bei eins. In Abbildung 22 sind die Ausgangssignale der Simulationen für die verschiedenen Gittertypen gezeigt. Um die dargestellten Kurven zu erhalten, wurde im Rahmen des Postprocessing mit Hilfe von Paraview eine Schnittfläche an der Oberseite des Wirbelschichtreaktors definiert, aus der für jede Zelle in dieser Ebene ein Wert für die Tracerkonzentration hervorgeht. Durch Mittelung aller auf diese Weise erhaltenen Werte der Schnittfläche ergibt sich die in Abbildung 22 aufgetragene Tracerkonzentration. Dieses Vorgehen musste für jeden betrachteten Zeitschritt wiederholt werden, wobei für alle Gittertypen ein Zeitintervall von 0,05 s als Schrittweite für die Auswertung angewandt wurde.

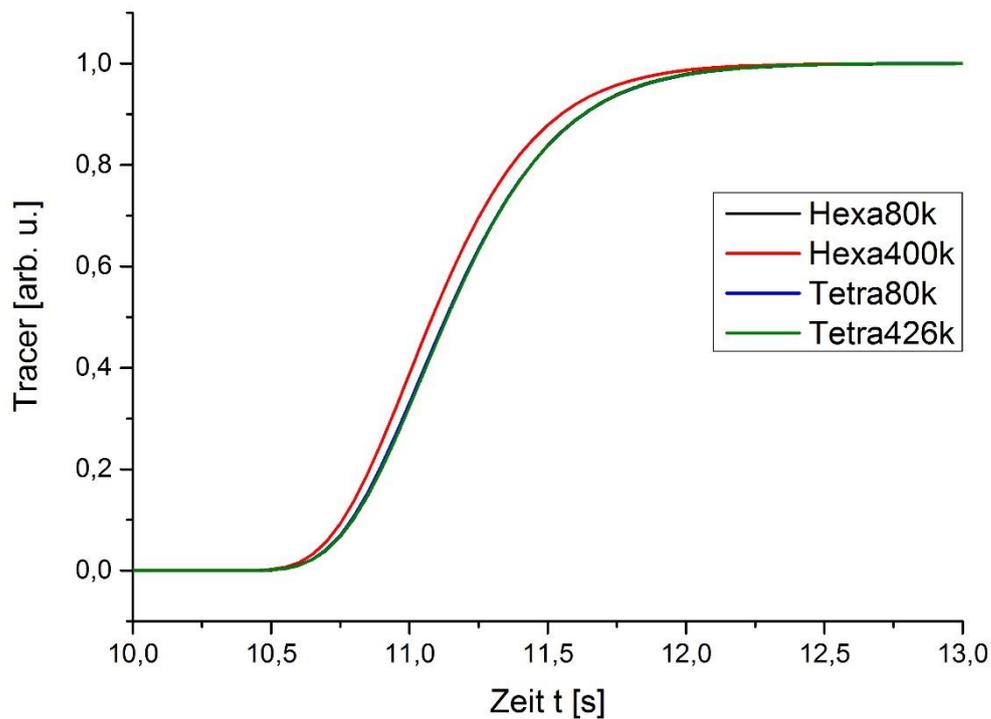


Abbildung 22: Verweilzeitsummenkurven der verschiedenen Gitter

Lediglich das Ergebnis der mit einem Hexaedergitter mit etwa 400.000 Zellen durchgeführten Simulation hebt sich etwas ab, die übrigen drei Gittertypen liefern ein nahezu identisches Ausgangssignal.

Da per Definition die maximale Tracerkonzentration bei eins liegt, zeigt Abbildung 22 gemäß Gleichung (2.11) die Verweilzeitsummenfunktion, aus der nach Gleichung (2.12) durch einfache Ableitung die Verweilzeitverteilung $E(t)$ ermittelt werden kann. Zur besseren Vergleichbarkeit sind die in Abbildung 23 für die verschiedenen Gittertypen erhaltenen Verweilzeitverteilungen normiert.

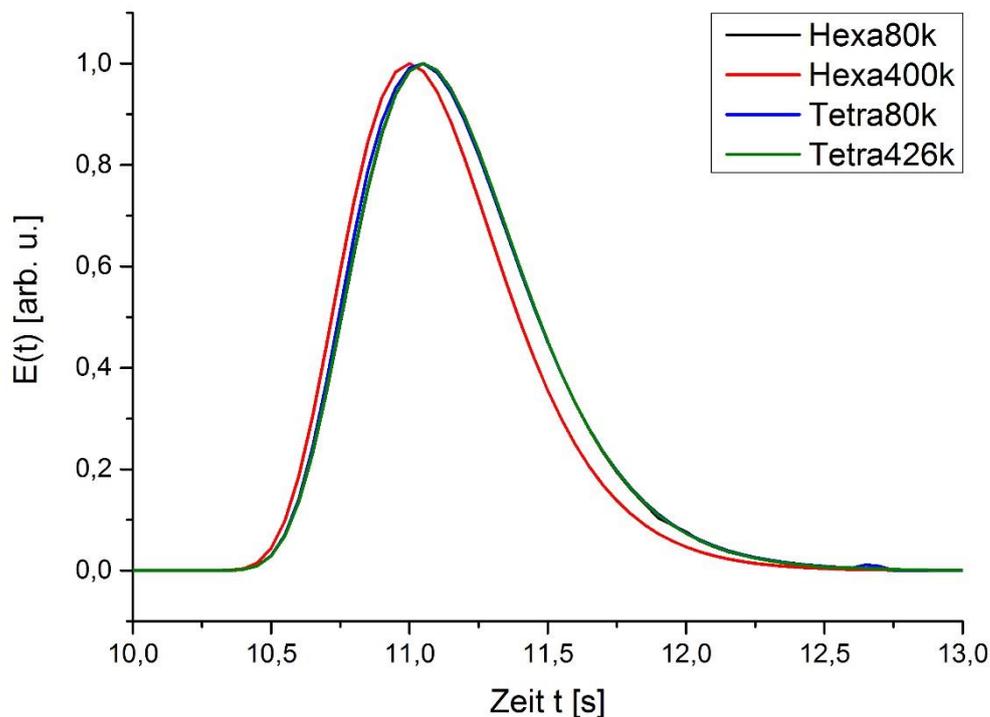


Abbildung 23: Verweilzeitverteilungen der verschiedenen Gitter

Wie schon bei den Verweilzeitsummenfunktionen stimmen die Kurven der Fälle A, C und D näherungsweise überein, wohingegen die Verweilzeitverteilung für den Fall B (Hexa400k) leicht zu kürzeren Zeiten verschoben ist.

Die gute Übereinstimmung der Daten für den Fall A (Hexa80k) und C (Tetra80k) zeigt, dass der Typ der Rechenzellen für Verweilzeitberechnungen im vorliegenden Fall kaum eine Rolle spielt. Da stets Leerrohrberechnungen durchgeführt wurden, es also kaum Störstellen gab und die Strömung recht ungehindert an der Sonde vorbei zum Auslass strömen konnte, und darüber hinaus das Zellgitter mit 80.000 Zellen verhältnismäßig grob gewählt wurde, konnte ein allzu großer Unterschied nicht erwartet werden. Überraschend ist hingegen, dass sich Fall D (Tetra426k) nicht stärker abhebt; mit 426.000 Zellen hat das Gitter mehr als achtmal so viele Zellen wie Fall C (Tetra80k) und sollte somit eine Reduktion numerischer Fehler erwarten lassen. Dass trotz der wesentlich höheren Auflösung nahezu keine Unterschiede erkennbar sind, weist darauf hin, dass auch das Tetraedergitter mit 80.000 Zellen bereits für eine Modellierung geeignet ist. Diese Erkenntnis ist in Bezug auf die in Abschnitt 4.1

beschriebenen Ergebnisse für die Berechnungen mit Partikeln wertvoll, da ebendieses Gitter (Tetra80k) auch für die Berechnungen mit Partikeln herangezogen wurde.

Das mit dem Hexaedergitter mit 400.000 Zellen (Fall B, Hexa400k) erzielte Ergebnis hebt sich von den übrigen Fällen ab. Es wäre möglich, dass im Hexaedergitter die Anzahl der Zellen einen weitaus größeren Einfluss auf das Ergebnis hat, als dies für die Tetraedergitter der Fall ist. Um die Verweilzeitberechnung für diesen Fall überhaupt stabil durchführen zu können, musste allerdings das Zeitintervall für die Simulation heruntergesetzt werden. Während für die Fälle A, C und D das Zeitintervall für die Simulation bei 0,001 s lag, musste für das Hexaedergitter mit 400.000 Zellen das Zeitintervall auf 0,0001 s abgesenkt werden, um eine stabile Rechnung durchzuführen. Dies hat zur Folge, dass das Fluid während eines numerischen Zeitschrittes weniger Zellen durchströmt, woraus ein systematischer Fehler resultiert, der die Vergleichbarkeit dieser Simulation mit den übrigen drei in Frage stellt. Um herauszuarbeiten, welchen Einfluss die Wahl des numerischen Zeitschrittes in diesem Zusammenhang auf die Verweilzeitverteilung hat, wurde Fall A ebenfalls mit einem numerischen Zeitschritt von 0,0001 s berechnet (in Tabelle 4 als Fall A* bzw. Hexa80k* bezeichnet) und mit Fall B verglichen. Wie in Abbildung 24 veranschaulicht, unterscheiden sich die erhaltenen Kurven nun nicht mehr, der numerische Zeitschritt hat also erheblichen Einfluss auf die Simulationen.

Fall	Gittertyp	Anzahl Zellen	Numerischer Rechenschritt [s]	Kurzname in Abbildung
A*	Hexaeder	80.000	0,0001	Hexa80k*
B	Hexaeder	400.000	0,0001	Hexa400k

Tabelle 4: Modifizierte numerische Rechenschritte

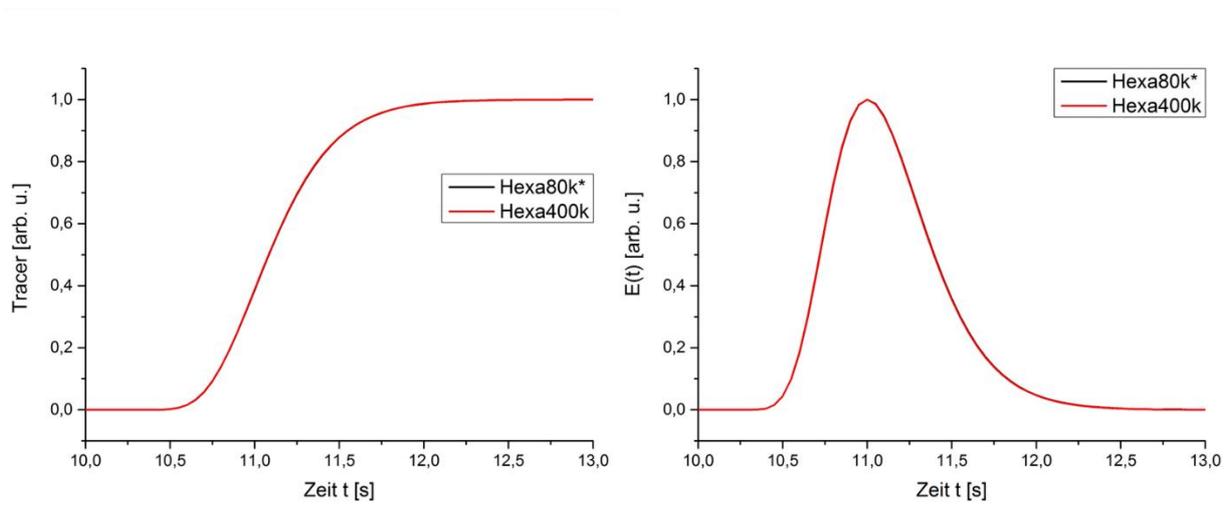


Abbildung 24: Verweilzeitsummenkurve (links) und Verweilzeitverteilung (rechts) für die Fälle A* und B, jeweils normiert

4.2.2 Vergleich verschiedener Diskretisierungsverfahren

Um den Einfluss des Diskretisierungsverfahrens für die konvektiven Terme auf das Berechnungsergebnis herauszuarbeiten, wurden die beiden Verfahren *QUICK* und *upwind* miteinander verglichen. Dazu wurde Fall C (Tetra80k) untersucht, da dieses Gitter auch für die unter Abschnitt 4.1 beschriebenen Berechnungen verwendet wurde. Die Bezeichnung *QUICK* beziehungsweise *upwind* gibt die Art der Interpolation der an den Positionen der Zellzentren gespeicherten Variablen auf die Zellgrenzen an [18, S. U-122]. Das *QUICK*-Verfahren ist gegenüber dem *upwind*-Verfahren numerisch aufwendiger, führt jedoch zu kleineren Diskretisierungsfehlern.

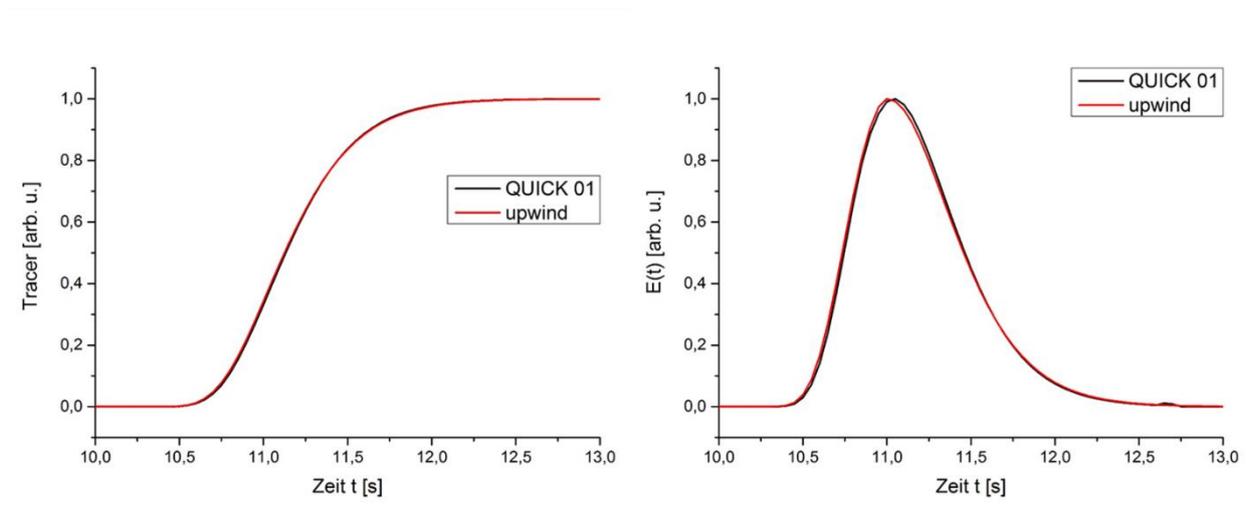


Abbildung 25: Verweilzeitsummenkurve (links) und Verweilzeitverteilung (rechts) für verschiedene Solver, jeweils normiert

Wie Abbildung 25 erkennen lässt, hat das Diskretisierungsverfahren keinen nennenswerten Einfluss auf die Verweilzeitverteilung, obgleich eine Abweichung aufgrund der unterschiedlichen Lösungsverfahren zu erwarten gewesen wäre. Die Ursache dürfte der große verwendete physikalische Diffusionskoeffizient sein, der das Mischungsfeld homogenisiert. Einflüsse des Diskretisierungsverfahrens machen sich vor allem bei Vorliegen großer örtlicher Gradienten bemerkbar, was hier nicht der Fall ist.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung eines vereinfachten Modellsystems, welches die Simulation eines realen Wirbelschichtreaktors erlaubt. In Anlehnung an einen bereits im experimentellen Maßstab realisierten Zwei-Zonen-Wirbelschichtreaktor mit 5,5 Millionen Partikeln wurde ein Modellreaktor generiert, dessen Verhalten dem des realen Vorbilds nachempfunden ist. Um die für die Simulation benötigte Rechenzeit gering zu halten, wurde die Partikelanzahl des Wirbelbettes etwa um den Faktor 64 auf 86.000 Partikel reduziert.

Nachdem die optimalen Betriebsbedingungen des Reaktors gefunden waren, konnte das Strömungs- und Mischungsfeld im Reaktor untersucht werden. Die Ergebnisse der numerischen Simulationen des Wirbelschichtreaktors zeigen einen ausgeprägten Einfluss der Butaneinlasshöhe auf das Strömungs- und Mischungsfeld. Das Mischungsfeld ist unabhängig von der Sondenhöhe homogen. Die butanarme Regenerationszone wird umso größer, je höher die Sonde positioniert ist. Umgekehrt wird die butanreiche Reaktionszone mit steigendem Butaneinlass kleiner. Das Strömungsfeld weist zwar für alle betrachteten Butaneinlasshöhen unverkennbare Ähnlichkeiten auf, unter der Sonde bilden sich jedoch Areale mit zirkulierenden Partikeln aus, die umso größer werden, je höher sich die Butan-Sonde befindet. Diese Felder erhöhter Feststoffgeschwindigkeiten im Zentrum des Reaktors gehen mit erhöhten Gasgeschwindigkeiten einher. Die Ergebnisse der Berechnungen zu den Leerraumvolumina (voidfraction) erklären diesen Zusammenhang: Die sich in der Mitte des Reaktors ausbildenden Blasen sorgen neben einer erhöhten Gasgeschwindigkeit auch für eine ausgeprägte Bewegung der Partikel, weil diese im Nachlauf der Blasen mitgeschleppt werden. Darüber hinaus ist erkennbar, dass an den Stellen im Reaktor, an denen eine ausgeprägte Blasenbildung stattfindet, die Geschwindigkeiten von Gas und Feststoff erheblichen Schwankungen unterworfen sind.

Mit steigender Butaneinlasshöhe wird die Vermischung stetig besser, sodass eine Butaneinlasshöhe von fünf Zentimetern aus strömungs- und Mischungstechnischer Sicht als Idealkonfiguration des Modellreaktors angegeben werden kann. Die Resultate dieser Simulation, obgleich diesen lediglich ein vereinfachter Modellreaktor zu Grunde liegt, decken sich mit den experimentellen Ergebnissen, bei denen der Butanumsatz bei einer Einlasshöhe von fünf Zentimetern optimal ist [7].

Die Verweilzeitsimulationen haben die Güte des verwendeten Rechengitters nachgewiesen und beweisen, dass unter den gewählten Bedingungen weder durch die Wahl eines feineren Gitters mit einer größeren Anzahl an Zellen – und somit einer längeren Rechendauer – noch eines alternativen Gittertyps signifikante Verbesserungen der Simulationsergebnisse zu erwarten wären.

Ein weiterer Schritt könnte die Ausweitung des Modellreaktors auf den realen Fall mit 5,5 Millionen Partikeln sein. Der Zuwachs an Partikeln müsste durch eine Erweiterung der eingesetzten Rechenkapazität kompensiert werden, weswegen die Simulationen künftig nicht mehr mit einem einzigen Prozessor mit acht Kernen, wie er im Rahmen dieser Vertieferarbeit eingesetzt wurde, durchgeführt werden könnte. Vielmehr bedarf es dann eines Rechenclusters sowie deutlich mehr Rechenzeit.

Langfristig ist es sicherlich erstrebenswert, auch chemische Vorgänge in die Simulation einbinden zu können. Dazu müssen jedoch noch diverse Modifizierungen und Erweiterungen des bestehenden Modells vorgenommen werden. So sind bei chemischen Vorgängen stets Wärmeänderungen zu berücksichtigen, auch wenn diese bei meist nahezu isotherm arbeitenden Wirbelschichtreaktoren zumindest in erster Näherung vernachlässigt werden können. Auch Oberflächenvorgänge und -mechanismen sind einzubeziehen. Darüber hinaus müssten Faktoren wie innerer und äußerer Stoffübergang bei katalytisch aktiven und zumeist porösen Partikeln berücksichtigt werden, was insbesondere für reale Systeme mit mehreren Millionen Partikeln selbst mit modernsten Rechenclustern eine erhebliche Herausforderung darstellen wird. In erster Näherung könnte daher bereits ein globalkinetisches Modell hinreichend genaue Aussagen über den Reaktionsverlauf liefern, dies wäre mit heutigen Rechenclustern in angemessenen Zeiten möglich. Erste Ansätze zur Simulation des chemischen Verhaltens von Wirbelschichtreaktoren existieren bereits, das schon fortgeschrittene Programmpaket ParScale [19] beispielsweise könnte die im Rahmen dieser Vertieferarbeit etablierte Simulationsmethode optimal ergänzen. Um eine detaillierte und vollständige Vorhersage des Verhaltens eines Wirbelschichtreaktors treffen zu können, muss noch viel Entwicklungsarbeit geleistet werden – sowohl im Hinblick auf einen Computercode für einen Solver, der alle Aspekte einer katalytisch aktiven Wirbelschicht verarbeiten kann, als auch in Anbetracht der Rechenleistung für immer aufwendigere und rechenintensivere Simulationen.

Literaturverzeichnis

- [1] M. Baerns, A. Behr, A. Brehm et al, *Technische Chemie*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, **2006**.
- [2] H. Effenberger, *Dampferzeugung*, 1. Aufl., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, **2000**, S. 205.
- [3] R. Sadeghbeigi, *Fluid catalytic cracking handbook: an expert guide to the practical operation, design, and optimization of FCC units*, 3. Aufl., Elsevier/BH, Amsterdam, **2012**.
- [4] P. M. Lv, Z. H. Xiong, J. Chang, C.Z. Wu, Y. Chen, J. X. Zhu, *Bioresour. Technol.* **2004**, 95, 95.
- [5] X. T. Li, J. R. Grace, C. J. Lim, A. P. Watkinson, H. P. Chen, J. R. Kim, *Biomass Bioenergy* **2004**, 26, 171.
- [6] J. M. Rischard, Diplomarbeit, Karlsruher Institut für Technologie, **2013**.
- [7] J. Rischard, C. Antinori, L. Maier, O. Deutschmann, *Appl. Catal., A* **2016**, 511, 23.
- [8] S. Lecheler, *Numerische Strömungsberechnung*, 1. Aufl., Vieweg + Teubner, Wiesbaden, **2009**.
- [9] M. Börner, *Discrete Element Method (DEM)*, **2011**.
Url: http://www.ovgu.de/ivt/tvt/media/6a3a9decbbafe2b/dem_skript_englisch.pdf;
Zugriff: 30.01.2016.
- [10] C. Jakob, H. Konietzky, *Partikelmethoden*, **2012**.
Url: https://tu-freiberg.de/fakult3/gt/feme/studium/Handbuch_Partikelmethoden.pdf;
Zugriff: 30.01.2016.
- [11] F. Maurer, Vertieferarbeit, Karlsruher Institut für Technologie, **2016**.
- [12] E. Müller-Erlwein, *Chemische Reaktionstechnik*, 3. Aufl., Springer Spektrum, Wiesbaden, **2015**.
- [13] M. Kraume, *Transportvorgänge in der Verfahrenstechnik: Grundlagen und apparative Umsetzungen*, 2. Aufl., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, **2012**.
- [14] O. Molerus, *Fluid-Feststoff-Strömungen: Strömungsverhalten feststoffbeladener Fluide und kohäsiver Schüttgüter*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, **1982**.

- [15] J. Werther, *Fluidized-Bed Reactors* in Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, **2007**.
- [16] A. Behr, D. W. Agar, J. Jörissen, *Einführung in die Technische Chemie*, 1. Aufl., Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, **2010**.
- [17] M. A. van der Hoef, M. van Sint Annaland, N. G. Deen, J. A. M. Kuipers, *Annu. Rev. Fluid Mech.* **2008**, 40, 47.
- [18] C. J. Greenshields, *OpenFOAM User Guide*, **2015**.
Url: <http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/UserGuide.pdf>; Zugriff: 30.01.2016.
- [19] Radl, S., Forgber, T., Kloss, C., and Aigner, A., *ParScale - A Compilation of Particle Scale Models*, **2015**.
Url: <https://github.com/CFDEMproject/ParScale-PUBLIC>; Zugriff: 30.01.2016.

Danksagung

Mein Dank gilt allen, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Mein besonderer Dank geht an

- Herrn Prof. Dr. Olaf Deutschmann für die Möglichkeit, diese Vertieferarbeit in seinem Arbeitskreis durchführen zu dürfen.
- Herrn Dr. Matthias Hettel für die spannende und interessante Aufgabenstellung, die hervorragende und engagierte Betreuung sowie die vielen produktiven Diskussionen.

Anhang

A: Eingabedatei, die das OpenFOAM-Programmpaket steuert

```
/*-----*- C++ -*-----*\
| ===== |
| \\ / F ield | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \\ / O peration | Version: 1.6 |
| \\ / A nd | Web: www.OpenFOAM.org |
| \\ \ M anipulation | |
\*-----*/
FoamFile
{
  version 2.0;
  format ascii;
  class dictionary;
  location "system";
  object controlDict;
}
// ***** //
application pisoFoam;
startFrom latestTime;
startTime 0;
stopAt endTime;
endTime 35;
deltaT 0.001;
writeControl adjustableRunTime;
writeInterval 0.1;
purgeWrite 10000;
writeFormat ascii;
writePrecision 6;
writeCompression uncompressed;
timeFormat general;
timePrecision 6;
runTimeModifiable yes;
adjustTimeStep no;
maxCo 0.1;
//libs ( "libgroovyBC.so" "libfiniteVolumeCFDEM.so");
Functions
(
  #include "fieldAverageDict"
);
```

B: Eingabedatei, die das LIGGGHTS-Programmpaket steuert

```
# =====
# VARIABLE DEFINITION
# =====
variable rParticles equal 4.0e-4

# Pour granular particles into chute container, then induce flow
log      ../DEM/log.liggghts
thermo_log  ../DEM/post/thermo.txt

# The map keyword determines how atom ID lookup is done for molecular problems
(hash or array)
atom_style      granular
atom_modify     map array
communicate     single vel yes

#VERY IMPORTANT: use a meaningful decomposition, such that each processor gets its
share of the particles
processors      * * 1

# style of boundaries for the global simulation box in each dimension.
# m mean the box is non-periodic, so that particles do not interact across the
# boundary and do not move from one side of the box to the other.
# m: non-periodic and shrink-wrapped with a minimum value
# f is non-periodic and fixed
# s is non-periodic and shrink-wrapped
Boundary      f f f
newton        off
units         si

# read the restart file
read_restart  ../DEM/post/restart/liggghts.restartCFDEM

#SYNTAX: neighbor skin style
#sets parameters that affect the building of pairwise neighbor lists.
#All atom pairs within a neighbor cutoff distance equal to the their force
#cutoff plus the skin distance are stored in the list.
#bin = creates the list by binning (influences the calculation time)
#delay = delay building until this many steps since last build
neighbor      ${rParticles} bin
neigh_modify  delay 0

# Material properties required for granular pair styles
```

```
fix      m1 all property/global youngsModulus peratomtype 5.e6
fix      m2 all property/global poissonsRatio peratomtype 0.45
fix      m3 all property/global coefficientRestitution peratomtypepair 1 0.3
fix      m4 all property/global coefficientFriction peratomtypepair 1 0.5

# pair style
pair_style gran model hertz tangential history # Hertzian without cohesion
pair_coeff * *

# timestep, gravity
timestep 0.00001
fix      gravi all gravity 9.81 vector 0.0 0.0 -1.0

# Import Mesh from CAD
fix      inlet all mesh/surface file stl/inlet.stl type 1 scale 1.0 curvature 1E-5
fix      outlet all mesh/surface file stl/outlet.stl type 1 scale 1.0 curvature 1E-5
fix      wand all mesh/surface file stl/wand.stl type 1 scale 1.0 curvature 1E-5
fix      sonde all mesh/surface file stl/sonde.stl type 1 scale 1.0 curvature 1E-5
fix      einbutanyposi all mesh/surface file stl/einbutanyposi.stl type 1 scale 1.0 curvature
1E-5
fix      einbutanynega all mesh/surface file stl/einbutanynega.stl type 1 scale 1.0 curvature
1E-5

# Use the imported mesh as granular wall
fix      reaktorwaende all wall/gran model hertz tangential history mesh n_meshes 6
meshes inlet outlet wand sonde einbutanyposi einbutanynega

# change the particles density (real case)
#set     group all density 2000
# change the particles density (case with Re_Fluid = const.)
#set     group all density 230
set      group all density 402.6

# cfd coupling
# Kopple mit CFD alle 100 Zeitschritte
# In OF ist eingestellt: deltaT 0.001
# Wenn der Zeitschritt in CFDEM = 0.00001 und alle 100 Zeitschritte gekoppelt werden
# so ist das alle 0.001 s.
# Gekoppelt wird also jeder 100. Zeitschritt in LIGGGHST mit jedem in OF.
fix      cfd all couple/cfd couple_every 100 mpi
fix      cfd2 all couple/cfd/force/implicit

# apply nve integration to all particles that are inserted as single particles
fix      integr all nve/sphere
```

```
# center of mass
compute centerOfMass all com

# compute total dragforce
compute dragtotal all reduce sum f_dragforce[1] f_dragforce[2] f_dragforce[3]

# screen output
compute rke all erotate/sphere
thermo_style custom step atoms ke c_rke vol c_centerOfMass[3] c_dragtotal[1]
c_dragtotal[2] c_dragtotal[3]
thermo 10
thermo_modify lost ignore norm no
compute_modify thermo_temp dynamic yes

dump dmp all custom 10000 ../DEM/post/dump*.liggghts_run id type x y z vx vy vz
radius

run 1
```