

# Energie- und Ressourceneinsparung durch Innovative und CFD-basierte Auslegung von Flüssig/Flüssig-Schwerkraftabscheidern

Jan Steinhoff<sup>1</sup>, Evgenia Charlafti<sup>2</sup>, David Leleu<sup>3</sup>, Laura Reinecke<sup>4</sup>, Heinz Franken<sup>4</sup>, Karsten Becker<sup>5</sup>, Murat Kalem<sup>6</sup>, Maximilian Sixt<sup>7</sup>, Manuel Braß<sup>7</sup>, Daniel Borchardt<sup>8</sup>, Werner Bäcker<sup>8</sup>, Mirco Wegener<sup>9</sup>, Sebastian Maaß<sup>9</sup>, Manfred Weber<sup>10</sup>, Thomas Acher<sup>11</sup>, Christian Matten<sup>11</sup>, Andreas Pfennig<sup>3</sup>, Matthias Kraume<sup>2</sup> und Hans-Jörg Bart<sup>1,\*</sup>

DOI: 10.1002/cite.202000083

 This is an open access article under the terms of the Creative Commons Attribution License, which permits use, distribution and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Computational-Fluid-Dynamics (CFD)-Simulationen in Kombination mit Tropfenpopulationsbilanzen führen zu einem praxisgerechten Standard, um auf Basis verfügbarer Prozessdaten den Strömungsverlauf – und damit die Verweilzeitverteilung – in liegenden Abscheidern beliebiger Größe zu berechnen. Durch Implementierung des Tropfenverhaltens wird auch die Berechnung eines tropfenspezifischen Abscheider-Wirkungsgrades ermöglicht. Die Methodenentwicklung erfolgte mit baugleichen Anlagen an drei verschiedenen Standorten. Die darauf beruhenden CFD-Simulationen wurden erfolgreich mit experimentellen Daten der beteiligten Industriepartner validiert.

**Schlagerwörter:** Computational Fluid Dynamics, Schwerkraftabscheider, Standardisierung, Tropfenspezifische Abscheidung

*Eingegangen:* 23. April 2020; *revidiert:* 12. Oktober 2020; *akzeptiert:* 12. März 2021

## Energy and Resource Savings through Innovative and CFD-based Design of Liquid/Liquid Gravity Separators

Computational fluid dynamics (CFD) simulations in combination with droplet population balances lead to a practical standard for calculating the flow pattern – and thus the residence time distribution – in horizontal separators of any size based on available process data. The implementation of the droplet behavior also enables the calculation of a droplet-specific separator efficiency. The method development was carried out at identical plants at three different locations. The CFD simulations were successfully validated with experimental data from the participating industrial partners.

**Keywords:** Computational fluid dynamics, Droplet size specific settling, Gravity separator, Standardization

## 1 Einleitung

Die Trennung von Flüssig/Flüssig-Gemischen in Schwerkraftabscheidern ist eine weitverbreitete und Standardope-

ration in der Verfahrenstechnik. Sie kommt immer dann zum Einsatz, wenn zweiphasige Gemische aus organischen und wässrigen Flüssigkeiten getrennt werden müssen, z. B. Kohlenwasserstoffe/Wasser bei der Mineralölverarbeitung,

<sup>1</sup>Jan Steinhoff, Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Hans-Jörg Bart  
bart@mv.uni-kl.de

TU Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik, 67663 Kaiserslautern, Deutschland.

<sup>2</sup>Evgenia Charlafti, Prof. Dr.-Ing. Matthias Kraume  
TU Berlin, Fachgebiet Verfahrenstechnik, Berlin, Deutschland.

<sup>3</sup>David Leleu, Prof. Dr.-Ing. Andreas Pfennig  
Université de Liège, Department of Chemical Engineering, Liège, Belgien.

<sup>4</sup>Laura Reinecke, Heinz Franken  
Franken Filtertechnik KG, Hürth, Deutschland.

<sup>5</sup>Karsten Becker  
Bayer AG, Leverkusen, Deutschland.

<sup>6</sup>Murat Kalem  
Covestro Deutschland AG, Leverkusen, Deutschland.

<sup>7</sup>Maximilian Sixt, Manuel Braß  
LANXESS Deutschland GmbH, Leverkusen, Deutschland.

<sup>8</sup>Daniel Borchardt, Werner Bäcker  
Raschig GmbH, Ludwigshafen, Deutschland.

<sup>9</sup>Mirco Wegener, Sebastian Maaß  
SOPAT GmbH, Berlin, Deutschland.

<sup>10</sup>Manfred Weber  
INEOS Phenol GmbH, Dechenstraße 3, 45966 Gladbeck, Deutschland.

<sup>11</sup>Thomas Acher, Christian Matten  
Linde Aktiengesellschaft, München, Deutschland.

Lösungsmittel/Wasser in der Produktion von Kunststoffen, Farben, Kautschuken, Pflanzenschutzmitteln, Vitaminen, Lebensmitteln und deren Vor- und Koppelprodukten, Methyl-ester/Glycerin bei der Biokraftstoffproduktion. Typischerweise kommen für die Abscheider Behälter mit einem Durchmesser von 0,5–5 m und einer Länge von 3–30 m zum Einsatz. Je nach Werkstoff und Druckstufe ist mit Behälterkosten von ca. 20 000 € bis zu 1 000 000 € zu rechnen.

Im ERICAA Konsortium (Abb. 1) wurde eine systematische Methodik zur bedarfsgerechten Auslegung von Flüssig/Flüssig-Schwerkraftabscheidern entwickelt, die zukunftsfähig, wissenschaftlich fundiert, in der Praxis validiert und eine Anwendung für alle Apparategrößen und ein sicheres Apparatedesign für Flüssig/Flüssig-Dispersionen erlaubt. Dazu wird das Verhalten der Dispersion in Schwerkraftabscheidern durch ein gekoppeltes Partikelpopulationsbilanz-CFD-Programm für den gesamten Größenbereich, von der Labor- bis zur Betriebsanlage, simuliert.



**Abbildung 1.** ERICAA- und Partnerlogos mit „Tropfen“ als Unternehmensfarbe und Pfeile zur Darstellung der Entwicklung im Projekt.

Der wirtschaftliche und technische Vorteil eines solchen Werkzeuges ist evident: hohes Einsparpotential von bis zu 60 % bei Neuinvestitionen und bedarfsgerechte Optimierung bereits bestehender Anlagen. Proportional verringert sich der direkte Energie- und Ressourceneinsatz. Wegen der geringeren Abmessungen und der besseren Effizienz werden optimierte Prozessführungen wie Gegenstromprozesse durch Einsparung von Hilfsstoffen (Wasser, organische Lösungsmittel) begünstigt.

Für die praktischen Untersuchungen wurden drei geometrisch identische Versuchsanlagen an den Standorten Franken Filtertechnik (FFT), TU Kaiserslautern (TUK) und TU Berlin (TUB) mit definierter Tropfenerzeugung aufgebaut. Zudem wurden geeignete Messverfahren zur Bestimmung der Tropfengrößenverteilung (TGV) ausgewählt und weiterentwickelt. Für die Simulation der Tropfenabscheidung ist es erforderlich, am Eintritt des Abscheiders die Tropfengrößenverteilung als Eingabeparameter zu spezifizieren. Da sich der Zustand der Dispersion aufgrund der

Tropfen-Koaleszenz permanent ändert, ist der Einsatz einer passenden Inline-Messtechnik notwendig.

Aus den unterschiedlichen Experimenten werden die prozessrelevanten Parameter der Tropfen-Koaleszenz isoliert, die für die Implementierung des Vorgangs im CFD-Programm nötig sind. Dazu zählen neben den physikalischen Stoffeigenschaften, Art und Menge grenzflächenaktiver Substanzen, Tropfengröße und Tropfenspektrum sowie die Grenzflächeneigenschaften der beteiligten Flüssigkeiten.

Der Aufbau der CFD-Simulation erfolgte in zwei Stufen. Zunächst wurde die Abbildung des Tropfen-Sedimentationsvorgangs für alle Geometrien und eine Reihe von Stoffsystemen unter Prozessbedingungen realisiert. Anschließend erfolgte die Erarbeitung eines Koaleszenzmodells für aufsteigende und koaleszierende Tropfen. Aufgrund des modularen Aufbaus der verwendeten CFD-Simulationsprogramme kann der entwickelte Koaleszenzkernel mit verschiedenen Simulationsumgebungen verknüpft werden.

Das Ergebnis der Simulationen ist die effektive Abscheideleistung (prozentuale Reduzierung der Nebenphasenkonzentration und abscheidbare Grenztröpfengröße). Eine standardisierte Prozedur zur Ermittlung der systemspezifischen Eingabeparameter erlaubt eine Anwendbarkeit vor Ort mit überschaubarem Aufwand und liefert Startwerte für eine CFD-Simulation. Die Wirksamkeit des erarbeiteten Verfahrens wird im Down- und Upscale an Labor- bzw. Betriebsabscheidern der beteiligten Industriepartner überprüft. Betreiber, Engineering-Firmen und Anlagenbauer verfügen damit erstmalig über eine einheitliche, energie- und ressourcenschonende Auslegungsbasis für horizontale, kontinuierlich betriebene Schwerkraftabscheider.

Im Gegensatz zur Bedeutung der Schwerkraftabscheider für einen wirtschaftlichen Produktionsprozess steht das Wissen über deren bedarfsgerechte Auslegung. Empirische Annahmen über eine mittlere Verweilzeit im Abscheider oder über die Sink-/Steiggeschwindigkeit einzelner Tropfen sind noch weit verbreitet. Dies ist gerade für große Abscheider verfahrenstechnisch mangelhaft und führt zu einer Überdimensionierung. Aus diesem Grund ist das direkte und indirekte Energie-Einsparpotential bei diesem wichtigen Verfahrensschritt sehr hoch.

Zur Auslegung von kontinuierlichen Schwerkraftabscheidern wurden in der Literatur eine Reihe von Auslegungsmethoden vorgeschlagen, wobei generell akzeptiert ist, dass zur Auslegung ein Absetzversuch mit dem realen Stoffsystem durchzuführen ist, um das systemspezifische Koaleszenzverhalten zu charakterisieren. Auf solch einen Absetzversuch aufbauend schlägt Golob [1] eine Methode zur Abscheiderauslegung vor, die berücksichtigt wie schnell die Dispersionshöhe abgebaut wird. Es wird konkret die Abscheidegeschwindigkeit ausgewertet, die angibt wie schnell Koaleszenz und Sedimentation gemeinsam zur Reduktion der Dispersionsmenge führen. Dies entspricht quasi einer Auslegung entsprechend der Flächenbelastung, d. h. wie viel Dispersion pro Fläche im Absetzversuch abgebaut wird.

Im liegenden Schwerkraftabscheider wird angenommen, dass ebenfalls diese Flächenbelastung erreicht wird. In vielen weiteren Literaturstellen wird die Auslegung basierend auf der Flächenbelastung als Stand der Technik beschrieben. Diese Vorstellung muss allerdings fehlerhaft sein, da nicht korrekt berücksichtigt wird, dass eine höhere, dichtgepackte Tropfenschicht die Koaleszenzrate erhöht, längere Sedimentationswege die Trennung verlangsamen, beide simultan ablaufenden Effekte also eine unterschiedliche Abhängigkeit von der Abscheiderhöhe aufweisen und daher eine Auslegung einfach durch Skalieren der Dispersionshöhe nicht genau sein kann.

Die meisten Autoren werten den Absetzversuch mithilfe von einfachen globalen Modellen aus, anhand derer sie einen Koaleszenzparameter bestimmen [2–4], der dann Basis für eine Abscheiderauslegung ist. Hartland [5] unterscheidet dabei sogar zwischen verschiedenen Fällen, je nachdem ob im Absetzversuch eine Zone dichtgepackter Dispersion beobachtet wird oder nicht. Henschke [6] und Kopriwa [7] vergleichen diese Ansätze mit ihren eigenen Messungen und kommen zu dem Schluss, dass sie selbst für Systeme aus reinen Lösungsmitteln (Reinstoffen) mit großen Ungenauigkeiten behaftet sind. Tropfengrößenverteilungen und aus den feinen Tropfen resultierende Restbelastungen der Phasen können mit keinem der Modelle beschrieben werden.

Henschke et al. [6, 8] entwickelten einen präziseren Modellansatz, der tropfenbasiert die Vorgänge im Abscheider beschreibt. Der Koaleszenzparameter wird dabei aus einem standardisierten Absetzversuch ermittelt, der das Koaleszenzverhalten des Stoffsystems beschreibt, wie Kopriwa eindrucksvoll belegen konnte [7]. Auch die Modellierungen von Henschke berücksichtigen keine Tropfengrößenverteilungen, es wird mit einem im Abscheider ortsabhängigen aber stets mittleren Tropfendurchmesser gerechnet. Auch wird die Großraumströmung im Abscheider nur für die Dispersion berücksichtigt. Dennoch wird der Ansatz von Henschke auch heute noch als beste Basis für weitere Modellentwicklungen angesehen [9, 10]. Arbeiten zu Abscheidern mit Einbauten sind vielfältig, Versuche zur Modellierung von Blass und Mitarbeitern zu Plattenabscheidern basieren auf Einzeltröpfenbetrachtungen, haben sich allerdings nicht allgemein durchgesetzt [11]. Aufbauend auf den Untersuchungen von Henschke gibt es erste Arbeiten zum Einfluss von unterschiedlichen Einbauten, die allerdings über eine sehr generelle Korrelation nicht hinauskommen [12, 13].

Zur Erfassung des zur Auslegung von Abscheidern essenziellen Absetz- und Koaleszenzverhaltens gibt es keine unmittelbaren Stoffparameter bzw. allgemein gültige Korrelationen. Vielmehr müssen indirekte Größen, wie die Koaleszenzzeit, in speziellen Apparaturen gemessen werden. Hierbei beeinflussen auch Geometrie- und Betriebsparameter das experimentelle Resultat. Aufgrund der Vielzahl an existierenden Stoffsystemen und verwendeten Versuchsaapparaturen gestaltet sich die Vergleichbarkeit

von vorliegenden experimentellen Ergebnissen zur Charakterisierung insbesondere des Koaleszenzverhaltens äußerst schwierig. Ein Ansatz die Vergleichbarkeit zu verbessern, ist die Standardisierung von Versuchsaufbauten und -abläufen.

Ziel dieser Standardisierung ist dabei vorrangig, die Reproduzierbarkeit von Messdaten und die einheitliche Charakterisierung unterschiedlichster Stoffsysteme hinsichtlich ihres Absatz- und Trennverhaltens sowie eine Übertragbarkeit der experimentellen Ergebnisse zu gewährleisten. Ein Beispiel für eine standardisierte Versuchsaapparatur zur Untersuchung des Koaleszenzverhaltens von Flüssig/Flüssig-Systemen ist eine in der Arbeitsgruppe (AG) Pfennig entwickelte gerührte Absetzapparatur [6], welche seitdem fortlaufend weiter optimiert wird. Damit war es z. B. möglich, ein Modell mit einem einzelnen integralen Koaleszenzparameter zu entwickeln, das eine Vorhersage des Koaleszenzverhaltens von unterschiedlichen Flüssig/Flüssig-Systemen erlaubt [8]. In einem DFG-Kooperationsprojekt der AG Kraume und Bart wurde durch den Aufbau von zwei identischen, geschüttelten Absetzapparaturen und die detaillierte Harmonisierung des gesamten Versuchsaablaufs eine Standardisierung vorgenommen. Dadurch konnte die Vergleichbarkeit der erzielten Ergebnisse an den zwei Standorten deutlich erhöht werden [14]. Für die technische Anwendung dienen Absetzversuche als Charakterisierungsverfahren für verschiedene Stoffsysteme, das zur Abschätzung der erforderlichen Absetz- und Koaleszenzzeit für die Abscheiderauslegung herangezogen wird.

Zur fundamentalen Untersuchung des Koaleszenzprozesses und der beeinflussenden Parameter ist eine Verringerung der Komplexität in der Versuchsdurchführung im Hinblick auf klassische Absetz- oder Rührkesselversuche notwendig. So lassen sich durch die Minimierung von Überlagerungen und Wechselwirkungen unterschiedlicher Phänomene einzelne Einflussparameter dezidiert untersuchen. Da sich der Koaleszenzprozess grundlegend auf ein binäres Ereignis reduzieren lässt, werden zumeist Einzeltröpfenuntersuchungen durchgeführt. In dynamischen Versuchen wird dazu die Kollision zweier Tropfen bei Variation einzelner Parameter untersucht und in statischen Experimenten erfolgt die detaillierte Betrachtung des Verlaufs der Koaleszenz eines einzelnen Tropfens mit einer kontinuierlichen Phase [14–17].

## 2 Ansatz des Projekts

Im Projekt ERICAA ist eine systematische Methodik zur Auslegung von Flüssig/Flüssig-Schwerkraftabscheidern entwickelt worden, die basierend auf CFD-Modellierungen und standardisierten Laborversuchen ein bedarfsgerechtes, wissenschaftlich fundiertes und zukunftsfähiges Dimensionieren von Abscheidern erlaubt.

Für die praktischen Untersuchungen zur Auslegung von Flüssig/Flüssig-Schwerkraftabscheidern wurden drei geo-

metrisch identische Versuchsanlagen aufgebaut. Die Versuchsanlagen ermöglichten die kontinuierliche Erzeugung und Abtrennung von Flüssig/Flüssig-Dispersionen in einem horizontalen DN150-Schwerkraftabscheider. Für die parallel stattfindenden Experimente wurden Dispersionen von Paraffinöl und Wasser und für die kontinuierliche, definierte Tropfenerzeugung eine Dispergiereinheit mit modularer Geometrie genutzt. Es wurden zwei unterschiedliche Messverfahren zur Bestimmung der Tropfengrößenverteilungen benutzt, zum einem mittels inline-Bilderfassung die Auflicht-Endoskopsonde der SOPAT GmbH, Berlin, und zum anderen die telezentrische Sonde der TU Kaiserslautern nach dem Durchlichtprinzip. Es wurde gezeigt, dass die Tropfenerzeugung und Tropfenmessungen reproduzierbar und unabhängig vom Versuchsort und Messtechnik waren [18].

Für die systematische Untersuchung des Sedimentations- und Koaleszenzverhaltens der Paraffin-Wasser Dispersionen und die Erfassung der benötigten Messdaten zur Entwicklung und Validierung der Simulationsergebnisse, wurden Batch-Absetzversuche an der kontinuierlich betriebenen Versuchsanlage DN150 durchgeführt. Für die Batch-Absetzversuche wurde die Dispersion direkt nach der Dispergiereinheit in die ERICAA-Zelle (standardisierte zylindrische Absetzzone) umgeleitet [18]. Die ERICAA-Zelle wurde dadurch sowohl für die Berechnung eines Sedimentations-charakteristischen Tropfendurchmessers als auch für die Bestimmung des charakteristischen Koaleszenzparameters benutzt. Die entsprechenden CFD-Simulationen wurden mittels der Sedimentations- und Koaleszenzkurve mit den Batch-Absetzversuchen verglichen.

Mittels kontinuierlicher Trennversuche wurde die Abscheideleistung des DN150-Schwerkraftabscheiders und der Fraktionsabscheidegrad von verschiedenen Tropfengrößen gemessen. Der Einfluss von verschiedenen Betriebsbedingungen wie beispielsweise Phasenverhältnis, Verweilzeit, Eingangstropfengrößenverteilung und Einlaufgeometrie wurde untersucht.

Eine Methodik für CFD-Simulationen der kontinuierlichen Abtrennung ohne oder mit Berücksichtigung von Koaleszenzphänomenen wurde entwickelt und oben genannte experimentelle Ergebnisse zur Validierung benutzt. Für die Erarbeitung der Simulationsmethodik wurden wichtige Simulationsparameter wie die Randbedingungen, der Einfluss der Anzahl von Tropfengrößenklassen für die Anwendung von Populationsbilanzen oder die benötigte Simulationszeit untersucht. Es wurde zusätzlich gezeigt, dass eine mathematische Beschreibung der Eingangstropfengrößenverteilungen durch eine repräsentative Lognormalverteilung möglich ist. Schließlich wurden die Einschränkungen und der Gültigkeitsbereich der CFD-Modellierung für das benutzte Flüssig/Flüssig-System definiert. Die Wirksamkeit der erarbeiteten Verfahren an Down- und Upscale-Anlagen in Labor- und Betriebsabscheidern der beteiligten Industriepartner wurde über-

prüft. Dafür wurden zusätzlich technische Stoffsysteme bei den Partnern getestet.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass es durch intensiven Austausch von Mess- und Simulationsdaten ermöglicht wurde, eine standardisierte Vorgangsweise zur Auslegung liegender Abscheider zu entwickeln. Dazu wurden erstmalig die gemeinsamen Erfahrungen von unterschiedlichen Versuchsorten als Basis für die Auslegung von Schwerkraftabscheidern benutzt. Im Anschluss an das Projekt sollen weitere Erfahrungen für die Übertragbarkeit und die Grenzen der entwickelten Methodik gewonnen werden. Betreiber, Engineering-Firmen und Anlagenbauer verfügen damit zukünftig erstmalig über eine einheitliche, energie- und ressourcenschonende Auslegungsbasis.

### 3 Material und Methoden

#### 3.1 Testanlage und Versuchsstoffe

Die Testanlage DN150 wurde so ausgelegt, dass sie die Erfassung des Betriebszustands eines Abscheiders im Hinblick auf Strömungsmechanik, Koaleszenz und Stoffdaten ermöglicht. Der Einsatz an drei unterschiedlichen Standorten gewährleistete die Vergleichbarkeit und die Reproduzierbarkeit der Experimente.

Die Versuchsanlage enthält die folgenden Komponenten:

- Abscheider DN150 (zylindrische Abscheidelänge, 0,5 oder 1 m).
- Nachabscheider zur Aufreinigung der Phasen.
- Dispergiereinheit für die Tropfenerzeugung.
- Messstellen für die Tropfenmessung.
- Absetzzone im Bypass.
- Vorratsbehälter für Paraffinöl und die wässrige Phase.
- Pumpen zur Förderung der Medien.
- Messgeräte zur Regelung und Überwachung der Prozessbedingungen.
- Wärmeübertrager für die Temperierung der Dispersion.

Auf Basis vorheriger Erfahrungen mit dem Betrieb von Versuchsanlagen zur Phasentrennung wurde als Flüssig/Flüssig-Gemisch Wasser/Paraffinöl benutzt. Die Vorteile dieses Stoffsystems sind die einfache Handhabbarkeit und Verfügbarkeit des Paraffinöls in einer weiten Viskositäts-spanne. Für das Paraffinöl wurden drei Typen des Herstellers Fauth GmbH + Co. KG gewählt. Die Stoffdaten sind in nachfolgender Tab. 1 zusammengefasst.

**Tabelle 1.** Stoffdaten der Testsysteme Wasser/Paraffinöl bei 20°C.

Paraffinöl	$\rho$ [kg m <sup>-3</sup> ]	$\eta$ [m Pa s]	$\nu$ [mm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]	$\sigma$ [mN m <sup>-1</sup> ]
FC1013	748	1,14	1,53	34
FC2006	823	10,62	12,9	37
FC2015	848	25,02	29,5	40

Für die Tropfenerzeugung wurde durch den Projektpartner Franken Filtertechnik KG eine Inline-Dispergiereinheit ausgelegt, die ohne zusätzlichen Energieeintrag betrieben wurde. Basis für deren Auslegung waren die Betriebsbedingungen der ERICAA-Versuchsanlage DN150, wie Durchsatz (150 bis 800 Lh<sup>-1</sup>), Konzentration der Dispersphase (1 bis 20 Vol.-%) und die physikalischen Stoffdaten der Testsysteme. Die Tropfenerzeugung erfolgte durch einen ein- oder zweistufigen Betrieb der Dispergiereinheit mit verschiedenen Lochblenden. Durch deren Einsatz konnten unterschiedliche TGV an den Standorten FFT, TUK und TUB vergleichbar und reproduzierbar erzeugt werden [18].

### 3.2 Absetzversuche

Batch-Absetzversuche sind praktisch, um das Trennverhalten chemisch unterschiedlicher Mehrphasensystemen zu charakterisieren. Während eines typischen Experiments wird die gesamte Trennzeit bestimmt und die Phasentrennung mit einer Kamera dokumentiert. Die Bilder des Absetzversuches werden für diskrete Zeitschritte exportiert und nebeneinandergestellt, um den zeitlichen Ablauf der Phasengrenzfläche zu beobachten. Mit der Bildauswertung können die Sedimentations- und Koaleszenzkurven nach Hartland und Jeelani [5] dargestellt und damit die Schwarm sedimentationsgeschwindigkeit und die Koaleszenzrate berechnet werden. Daraus können jeweils ein modellierter Sauterdurchmesser  $d_{32}$  nach Pilhofer und Mewes [19] und ein Koaleszenzparameter  $r_s^*$  nach Henschke [6] berechnet werden. Diese können in einer CFD-Simulation als Eingabedaten für die Anfangsbedingungen benutzt werden und ermöglichen die Simulation der Abscheideleistung eines kontinuierlichen Prozesses. Abb. 2 verdeutlicht exemplarisch einen Absetzversuch für das Stoffsystem Paraffinöl Wasser/FC1013 (w/o) in der Henschke-Apparatur (AG Pfennig). Die Sedimentationskurve (Abb. 2, oben) verläuft entlang der oberen Phasengrenze zu Wasser. Die Koaleszenzkurve ist im unteren Bereich von Abb. 2 zu erkennen.

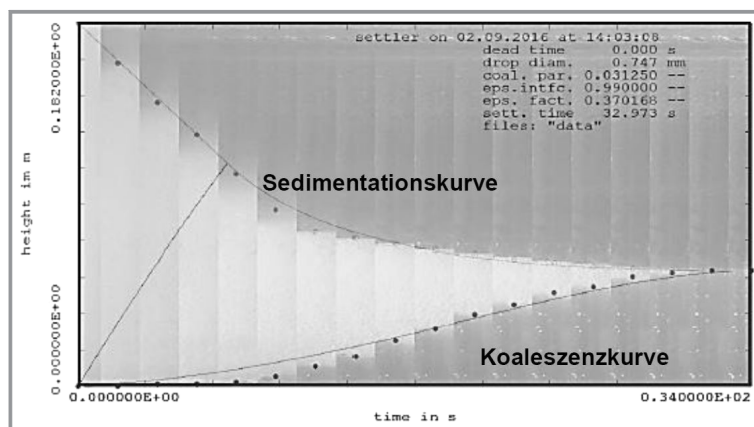


Abbildung 2. Absetzversuch für das Stoffsystem Paraffinöl Wasser/FC1013 (w/o).

Im Rahmen dieses Arbeitspakets wurden Absetzversuche mit folgenden Zielen durchgeführt:

- Die Trennzeit je nach experimentellen Bedingungen (Durchsatz, Phasenanteil und Tropfengrößenverteilung) zu bestimmen und daraus die kleinste benötigte Zeit für eine Trennung im kontinuierlichen Abscheider zu ermitteln.
- Aus den Schwarm sedimentationsgeschwindigkeiten die entsprechenden Sauterdurchmesser zu berechnen und diese mit den gemessenen zu vergleichen.
- Aus den Koaleszenzkurven den Koaleszenzparameter  $r_s^*$  des Flüssig/Flüssig- Systems nach Henschke ermitteln.
- Die Ergebnisse zwischen den Versuchsorten zu vergleichen sowie Schlussfolgerungen über die optimalen Messmethoden und Messbereiche zu ziehen.
- Die CFD-Simulationsergebnisse für den liegenden Abscheider DN150 mit den Parametern des Batch-Absetzversuches zu validieren.

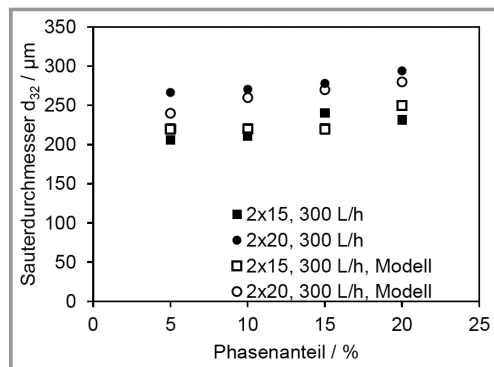
Für den letzten Punkt wurden bei FFT, TUB, TUK, Bayer AG und Université de Liège Batch-Absetzversuche mit der ERICAA-Absetzzelle durchgeführt [18]. Zum Vergleich dazu erfolgten Absetzversuche in einer Schüttelapparatur [20,21] und einer gerührten Henschke-Zelle [6,22]. Die Schüttelapparatur besteht aus einem Motor und einer Aufnahmeplatte, womit zwei gefüllte Flaschen mit bestimmten Rotationsfrequenzen und Zeiten geschüttelt werden können, um das ausgewählte Flüssig/Flüssig-System zu dispergieren. Die Flaschen wurden mit einem LED-Panel von hinten beleuchtet. Nach dem Schütteln wurde die Phasentrennung gefilmt. Das experimentelle Verfahren ist für die Henschke-Zelle analog. Allerdings findet das Dispergieren anstelle des Schüttelns durch das Rühren in einem DN80-Glaszylinder statt.

Die ERICAA-Messzelle ermöglicht es im industriellen Produktionsfeld (auch im Ex-Schutz-Bereich) vorliegende Dispersionen (in Rohrleitungen, Rührkesseln etc.) experimentell zu charakterisieren – sozusagen als At-line-Messung. Der zylindrische Glaskörper ist im oberen und unteren Teil jeweils durch eine metallische Platte verschlossen. Der Glaskörper wird durch mehrere Gewindestangen verspannt und über Dichtungen abgedichtet. Der Medienzulauf erfolgt von unten. Zur Be- und Entlüftung sowie zur Flüssigkeitsentleerung sind beide Platten mit zentralen Anschlüssen versehen. Der Leitungsdurchmesser beträgt 20 mm [18]. Nach der Befüllung kann das Absetzverhalten charakterisiert werden. Ein separater Energieeintrag ist nicht vorgesehen, da die vorhandene Dispersion direkt in die Messzelle geführt wird.

Alternativ kann die Versuchsdurchführung offline im Labor ohne direkte Anbindung an den laufenden Prozess erfolgen. Das zu untersuchende zweiphasige Stoffsystem wird entsprechend der Randbedingungen (z. B. Phasen-

verhältnis, Temperatur) in die Messzelle eingebracht. Die separierten Phasen sind durch externen Energieeintrag, z. B. Rühren, zu dispergieren und im Anschluss wird die Phasentrennung wie oben beschrieben untersucht.

Der Arbeitsbereich der ERICAA-Zelle wird durch die Zeit des Einfüllprozesses definiert, um eine Beeinflussung der Trennkurven durch eine Vorabscheidung bei der Befüllung der Absetzzelle zu vermeiden. Es wurde eine Höhe von 180 mm für das Füllvolumen (ca. 0.9 L) festgelegt [18]. Abb. 3 zeigt den Vergleich zwischen den experimentellen Sauterdurchmessern aus den Tropfengrößenmessungen und den berechneten Sedimentationsgeschwindigkeiten nach Henschke [6, 8, 19] aus Absetzversuchen mit der ERICAA-Zelle.



**Abbildung 3.** Berechnete Sauterdurchmesser aus der ERICAA-Zelle im Vergleich mit TGV-Messungen (Phasenteil 15 und 20 %, 300 L h<sup>-1</sup>), FC2006.

Der Vergleich zeigt eine gute Gegenüberstellung bei einem Phasenteil von 5 bis 20 Vol.-% o/w bei unterschiedlicher Lochblendenkonfiguration (2×15 und 2×20) und einem Gesamtvolumenstrom von 300 L h<sup>-1</sup>. Die Modellberechnung kann somit für die Bestimmung der Sauterdurchmesser aus Absetzversuchen herangezogen werden. Die Abweichungen zwischen modellierten und gemessenen Sauterdurchmessern können als vernachlässigbar angesehen werden, da sie innerhalb der Standardabweichungen (20 µm) der experimentellen Ergebnisse liegen.

### 3.3 Mathematische Modellierung der Tropfengrößenverteilung

Eine TGV-Analyse der ERICAA-Anlage (Standort TUK) wurde aus knapp 200 Messungen für eine Log-Normalverteilung mit einer Korrelation und der dimensionslosen Darstellung über  $\log(d/d_{32})$  durchgeführt.

Aus gemessenen Sauterdurchmessern (Analyse der Schwarm sedimentation) einer Absetzzelle konnten vergleichende Tropfengrößenverteilungen für die Randbedingungen von CFD-Simulation benutzt werden. Die Volumendichteverteilung  $q_3$  wird mit Gl. (1) gebildet.

$$q_3(x) = \frac{1}{\sigma_{\ln} \sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{x} \cdot \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\ln \left( \frac{x}{x_{50}} \right)}{\sigma_{\ln}} \right)^2 \right] \quad (1)$$

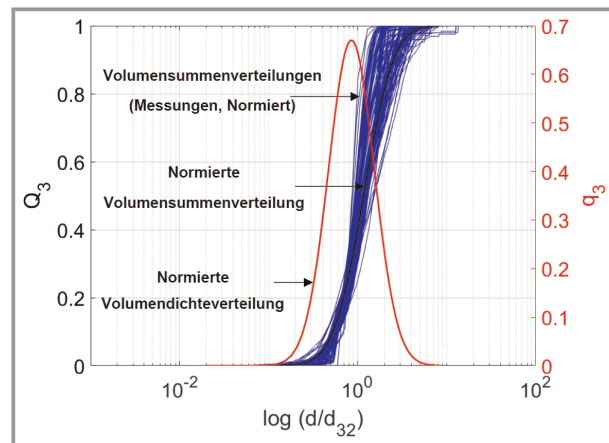
Die logarithmische Standardabweichung  $\sigma_{\ln}$  wird mit Gl. (2) berechnet [23].

$$\sigma_{\ln} = \ln \frac{x_{84}}{x_{50}} = \ln \frac{x_{50}}{x_{16}} = \frac{1}{2} \ln \frac{x_{84}}{x_{16}} \quad (2)$$

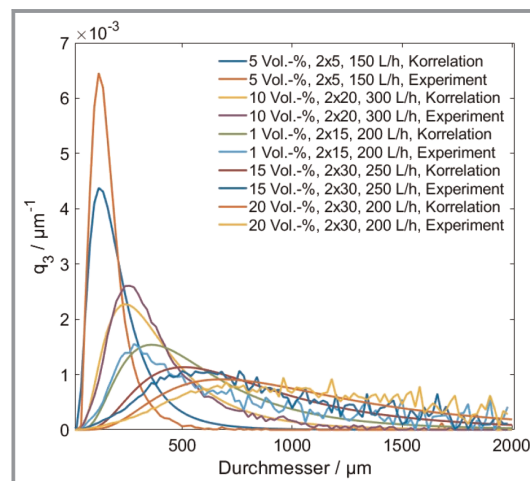
Die Entdimensionierung wird mit berechnetem Sauterdurchmesser für jede TGV für die Breite der Verteilung (20, 40, ..., 2000 µm) mit Gl. (3) durchgeführt.

$$x = \frac{d}{d_{32}} \quad (3)$$

Die Berechnung von  $x_{16} = 0,656$ ,  $x_{50} = 1,2025$  und  $x_{84} = 2,1304$  folgt schließlich aus der Mittelung der Volumensummenverteilungen ( $Q_3$ ) der gemessenen TGV. Abb. 4 zeigt die 200 Messungen der TGV in der dimensionslosen Darstellung über  $Q_3$  und  $q_3$  und in Abb. 5 ist die gemessene



**Abbildung 4.** Dimensionslose Darstellung von  $Q_3$  und  $q_3$ .



**Abbildung 5.** Vergleich der TGV aus Experiment mit der Korrelation für verschiedene Betriebspunkte, Paraffinöl FC2006/Wasser.

TGV und die Berechnung der TGV aus einem Sauterdurchmesser gegenübergestellt.

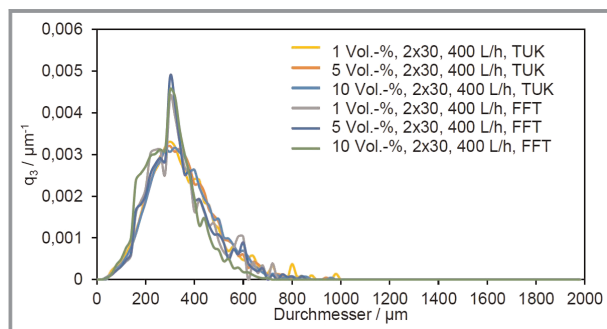
Die Sauterdurchmesser (Tab.2) können aus der Geschwindigkeit einer Schwarm sedimentation z. B. aus der Henschke-Zelle [6] oder der ERICAA-Zelle [18] berechnet werden und mit dem beschriebenen Ansatz für die Erstellung einer TGV verwendet werden.

**Tabelle 2.** Daten für die Validierung.

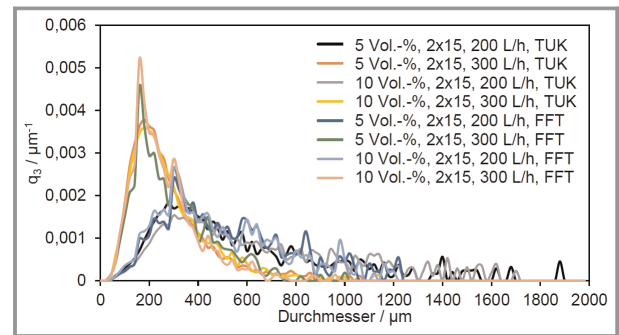
Phasenanteil [%]	Lochblende [-]	Volumenstrom [ $\text{L h}^{-1}$ ]	$d_{32}$ (TGV) [ $\mu\text{m}$ ]
5	2×5	150	150
10	2×20	300	290
1	2×15	200	433
15	2×30	250	640
20	2×30	200	818

Wie in Abb. 5 zu erkennen ist, zeigen die Modellierungen eine gute Übereinstimmung in der Breite der Verteilung und können den Verlauf der TGV gut nachbilden. Bei einem Sauterdurchmesser von  $150 \mu\text{m}$  kann der Maximalwert nicht optimal repräsentiert werden, da die Breite der experimentellen TGV für eine Log-Normalverteilung sehr schmal ist. Dieser Unterschied spielt aber für die Beschreibung der TGV eine zu vernachlässigende Rolle, da lediglich der Verlauf (prozentuale Veränderung der Volumendichteverteilung) für eine Repräsentation der Tropfengrößen am Eintritt des Abscheiders wichtig ist. Diesen Verlauf kann auch bei einem Sauterdurchmesser von  $150 \mu\text{m}$  gewährleistet werden. Das Modell ist in einem weiten Bereich gültig und bildet eine gute Vorgabe für die Beschreibung der TGV am Eintritt des Abscheiders.

Die Genauigkeit der verfügbaren Inline-Tropfenmesstechnik [18] wurde am Abscheider DN150 bei FFT validiert. Dafür wurde das Messsystem am Eintritt in den Abscheider DN150 von SOPAT und von der TUK im Parallelbetrieb für verschieden Betriebspunkte vermessen und verglichen. Die Abbn. 6 und 7 zeigen den Vergleich der gemessenen TGV für Phasenanteile von 1 bis 10 Vol.-% und



**Abbildung 6.** Volumendichteverteilungen der Experimente, FFT mit SOPAT und TUK, 1–10 Vol.-% o/w,  $400 \text{ L h}^{-1}$ .



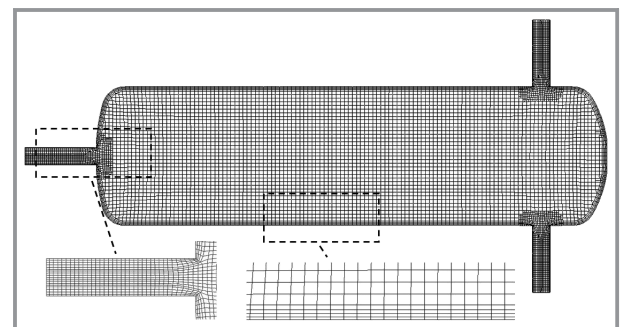
**Abbildung 7.** Volumendichteverteilungen der Experimente, 5 und 10 Vol.-% o/w bei  $200$  und  $300 \text{ L h}^{-1}$ .

einem Durchsatz von  $200$  bis  $400 \text{ L h}^{-1}$  bei verschiedenen Lochplatten der Dispersiereinheit. Beide Messtechniken können die Tropfen im Einlauf des Abscheiders gut beschreiben und unterscheiden sich nicht wesentlich im angegebenen Messbereich.

### 3.4 CFD-Simulationen

Bezüglich der CFD-Simulationen ist in Abb. 8 ein Beispiel für das an der TUK erstellte Gitter gezeigt. Es wurde ein dreidimensionales Modell des zu berechnenden Strömungsgebietes mit dem in ANSYS® integrierten Design Modeler entsprechend der Geometrie des DN150-Schwerkraftabscheiders erstellt. Für die geometriebegrenzende Inlet-Fläche wird die Randbedingung *velocity-inlet* festgelegt, da hier direkt hinter der Einlassmessstrecke die Durchflussrate sowie der volumetrische Phasenanteil der Dispersion durch die Tropfenmessungen bekannt sind. Die beiden Outlet-Randflächen werden mit der Randbedingung *outflow-outlet* versehen, da an diesen die Auslassdrücke nicht aus den Experimenten abgeleitet werden konnten. Für die Wände wurde die Randbedingung *wall* festgelegt und wegen der reibungsbehafteten Strömung an der Wand mit der *no-slip-condition* versehen. Weitere Randbedingungen sind in Tab. 3 zusammengefasst.

Die Vernetzung des Modellgebietes erfolgte über blockstrukturierte Hexaeder-Elemente. Zusätzlich wurde die



**Abbildung 8.** Querschnitt durch das generierte Berechnungsgitter, kurze Konfiguration, DN150-Schwerkraftabscheider.

**Tabelle 3.** Randbedingungen der CFD-Simulation für Schwerkraftabscheider.

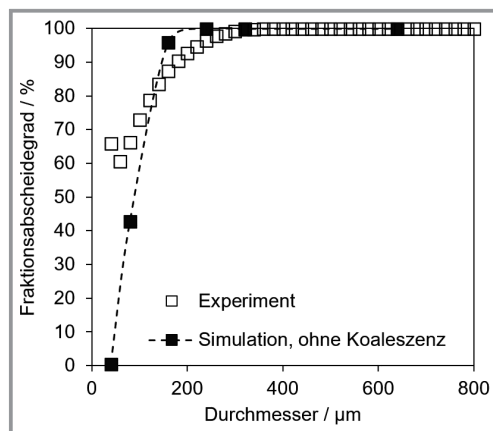
CFD-Software	ANSYS Fluent
Turbulenzmodell	$k - \varepsilon$ Wall treatment
Mehrphasenströmungsmodell	Euler-Euler (implizit) + PBE
Zellengeometrie	orthogonal
Zeitschritt	$10^{-3} - 10^{-2}$ s
Drag Modell	Symmetry, erweiterter Schiller-Naumann [24, 25]
Lösungsmethode für Populationsbilanzen	PBE (inhomogene Klassenmethode) [24]
Anfangsbedingungen	TGV und Klassen
Abbruchkriterium	Verweilzeit

Gitterweite der Hexaeder-Elemente an dem Einlass sowie an beiden Auslässen verringert, da in diesen Bereichen größere Geschwindigkeits- und Druckgradienten zu erwarten sind. Die Grenzschichten an der gesamten Außenwand wurden über Prismen-Elemente miteinander vernetzt und anschließend verdichtet. Aufgrund der feineren Vernetzung werden dadurch reibungsbehaftete Strömungen an Festkörperändern besser abgebildet.

## 4 Ergebnisse

### 4.1 Abscheideeffizienz

Abb. 9 beschreibt auf Basis eines Sauterdurchmessers von  $290 \mu\text{m}$  die Abscheideeffizienz im stationären Zustand bei einem Phasenanteil von 10 Vol.-% o/w mit dem Stoffsystem FC2006. Für dieses Beispiel wurde die Tropfengrößenverteilung in 7 Klassen verteilt ( $d = 40, 80, 120, 160, 240, 320,$

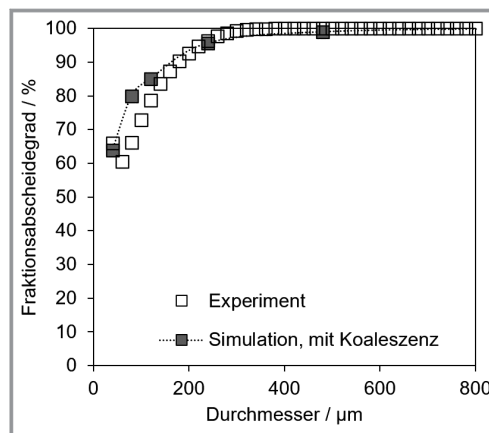


**Abbildung 9.** Experimenteller Fraktionabscheidegrad mit dem Vergleich der Simulation ohne Koaleszenzmodell, DN150,  $300 \text{ L h}^{-1}$ ,  $2 \times 20$  und bei 10 Vol.-% o/w, FC2006.

$640 \mu\text{m}$ ) und die Tropfen-Tropfen-Koaleszenz vernachlässigt.

Mit der Simulation kann die Abscheideeffizienz tropfengrößenspezifisch beschrieben werden. Der Verlauf der Abscheideeffizienz zwischen Experiment und Simulation bei  $300 \text{ L h}^{-1}$ , 10 Vol.-% o/w und einer Lochblendenkonfiguration von  $2 \times 20$  ohne Koaleszenzmodell zeigt eine mangelhafte Übereinstimmung des Fraktionsabscheidegrades für Tropfendurchmesser kleiner als  $320 \mu\text{m}$ . Diese Abweichungen können zum Beispiel auf das Auftreten von Tropfen-Tropfen-Koaleszenz im Schwerkraftabscheider zurückzuführen sein.

Die experimentellen Ergebnisse der Abb. 9 sind in Abb. 10 mit einer CFD-Simulation, die Koaleszenzphänomene betrachtet, weitervergleichen. Für die Anwendung des Koaleszenzmodells nach Henschke wurde ein Koaleszenzparameter von 0,006, der aus einem Batch-Absetzversuch bestimmt wurde, benutzt.



**Abbildung 10.** Experimenteller Fraktionabscheidegrad mit dem Vergleich der Simulation mit Koaleszenzmodell, DN150,  $300 \text{ L h}^{-1}$ ,  $2 \times 20$  und bei 10 Vol.-% o/w, FC2006.

Für die CFD-Simulation werden für eine effiziente Darstellung des Experiments Klassen von  $d = 40, 80, 120, 240, 480, 960, 1920 \mu\text{m}$  für die einzelnen Tropfen gewählt. Der Vergleich der Simulationsergebnisse mit dem Experiment zeigt, dass die Berücksichtigung von Koaleszenzphänomenen verbesserte Ergebnisse liefert. Darüber hinaus wird bestätigt, dass der Fraktionsabscheidegrad mit einer Auswahl von sieben Klassen effizient beschrieben werden kann.

Der Anteil der dispergierten Phase am Auslass wurde mit 0,38 % Phasenanteil volumetrisch gemessen und der Abscheidegrad des Experiments beträgt 96,2 %. Die Tropfen werden bei ca.  $280 \mu\text{m}$  vollständig abgeschieden. Abb. 10 zeigt daher nur einen Bereich bis zu  $800 \mu\text{m}$ . Bei einem Vergleich zwischen Ein- und Auslass beträgt der Gesamtabscheidegrad nach der CFD-Simulation 96,8 %.

Bei FFT wurden vergleichende CFD-Rechnungen mit ANSYS® Fluent zu den ERICAA-Experimenten durchgeführt und umfassten dabei den langen (1 m) und kurzen ( $0,5 \text{ m}$ ) Abscheider DN150.



Untersucht wurden die Stoffsysteme Wasser/Paraffinöl FC2006 und Wasser/Paraffinöl FC1013 in beiden Dispersionsrichtungen bei unterschiedlichen Durchsätzen (200 bis max. 800 L h<sup>-1</sup>) und Dispersphasenanteil (1 bis max. 10 Vol.-%). Alle Rechnungen wurden mit der Euler-Euler-Klassen-Methode und mindestens 5 bis maximal 6 Nebenphasenklassen durchgeführt. Die Rechnungen beruhen auf reinem Sedimentationsverhalten der Tropfen, d.h., Tropfen-Tropfen-Koaleszenz wurde nicht berücksichtigt. Die Rechnungen wurden mit den experimentell erstellten Abscheidegraden der einzelnen Tropfengrößenklasse, dem Gesamtabscheidegrad sowie dem Druckverlust über dem Abscheider verglichen.

In Abb. 11 ist beispielhaft das Ergebnis für das Stoffsystem Wasser/Paraffinöl FC1013 im kurzen Abscheider der ERICAA-Anlage (FFT) dargestellt. In der Dispersionsrichtung o/w ist die Übereinstimmung im kurzen leeren Abscheider zwischen Experiment und den CFD-Rechnungen gut. Sowohl der Gesamtabscheidegrad als auch der Kurvenverlauf stimmen für die Durchsätze zwischen 200, 400 und 800 L h<sup>-1</sup> gut überein.

Für die CFD-Rechnungen der Abscheideeffizienz wurde bei der TUB die Software STAR-CCM+ verwendet. Abb. 12 zeigt den Vergleich der simulierten Abscheidegrade ohne Koaleszenzmodell mit experimentellen Daten. Die disperse Phase wurde in diesem Beispiel mit 15 Tropfenklassen simuliert, wobei jede Klasse das gleiche Volumen an disperser Phase aufweist. Für jede Klasse kann eine Verteilung von Konzentrationen und Geschwindigkeiten im Abscheider berechnet werden. Daraus wird geschlossen, dass für eine bessere Abbildung der experimentellen Ergebnisse durch CFD-Simulationen eine optimierte Anzahl und Volumen von Tropfenklassen sowie die Berücksichtigung von Koaleszenzphänomenen erforderlich ist.

## 4.2 Tropfenspektren

Für die experimentelle Untersuchung zum Einfluss der Eintrittstropfengrößen auf den Abscheidegrad wurden Messungen mit konstanter mittlerer Strömungsgeschwindigkeit im Abscheider und unterschiedlichen Geometrien der Dispergiereinheit durchgeführt. Damit wurde die Verweilzeit der dispersen Phase konstant gehalten und nur die Eintrittstropfengrößenverteilung variiert. Die Abhängigkeit des Abscheidegrades von der einlaufenden Dispersion wurde getestet. Erwartungsgemäß nimmt der Abscheidegrad mit steigenden Sauterdurchmessern zu, wie in Abb. 13 gezeigt. Es ist zusätzlich bemerkbar, dass sich der Sauterdurchmesser am Auslass nicht deutlich ändert.

Für eine präzisere Beschreibung der Trennleistung eines Schwerkraftabscheiders ist es notwendig, auch Informationen über den Einfluss der Eintrittsverteilungen auf die

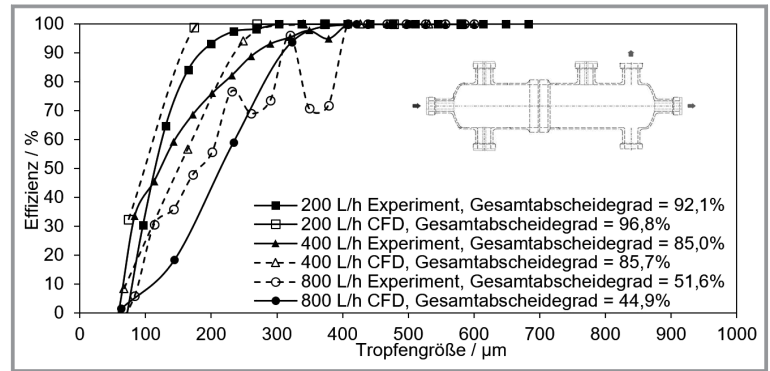


Abbildung 11. Vergleich zwischen experimentell ermittelter und berechneter Abscheideeffizienz für Wasser und 1 Vol.-% o/w, FC1013.

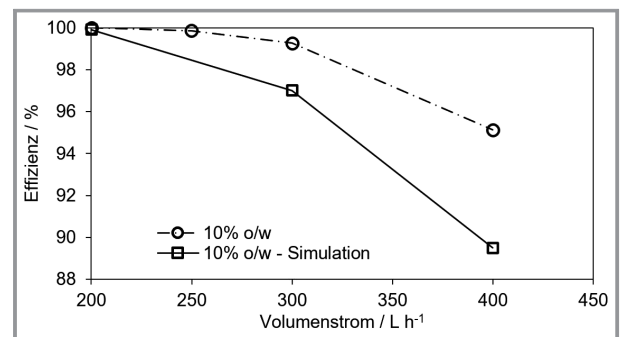


Abbildung 12. Vergleich Simulation (ohne Koaleszenz) und Experiment (Dispergiereinheit: 2 Platten mit jeweils 30 Löchern), für das Gemisch Paraffinöl FC2006/Wasser.

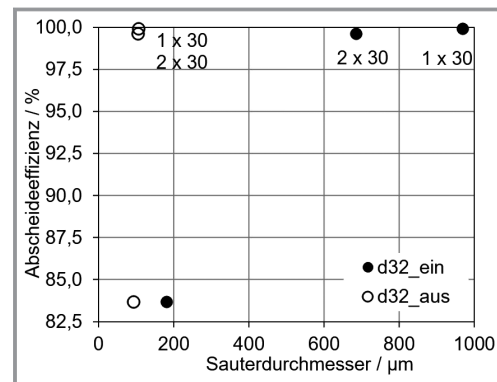
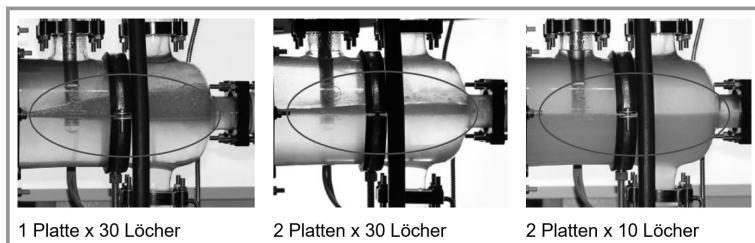


Abbildung 13. Einfluss der Eintritts- und Austritts-Sauterdurchmesser für verschiedene Geometrien der Dispergiereinheit (1 Platte × 30 Löcher, 2 Platten × 30 Löcher, 2 Platten × 10 Löcher), konstante mittlere Strömungsgeschwindigkeit (250 L h<sup>-1</sup>) und 10 Vol.-% o/w, Paraffinöl FC2006/Wasser.

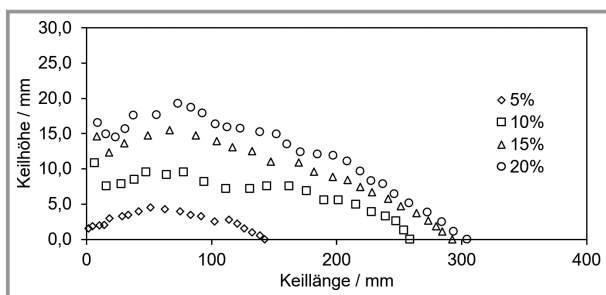
Länge des Dispersionskeils zu haben. Abb. 14 zeigt, dass mit engeren und zu kleineren Tropfendurchmessern verschobenen Eintrittsverteilungen die Dicke des Dispersionskeils abnimmt und die kontinuierliche wässrige Phase trüber wird. Insbesondere mit zwei Platten von jeweils zehn Löchern in der Dispergiereinheit werden die Tropfen so klein und deren Anzahl so groß, dass diese nicht genug Zeit



**Abbildung 14.** Dispersionskeil in Abhängigkeit von der TGV am Eintritt, für 10 Vol.-% FC2006; mittlere Strömungsgeschwindigkeit  $25,48 \text{ m h}^{-1}$ , Fließrichtung von rechts nach links.

zur Sedimentation bis zur Trennschicht haben und daher auch keinen Dispersionskeil ausbilden.

Aus Abb. 15 wird ersichtlich, weshalb die sich ausbildende Dispersionschicht bei horizontalen Abscheidern Keil genannt wird. Die Form der Dispersionschicht besitzt einseitig eine Keilform. Wie zu erkennen ist, wächst die Höhe des Keils aufgrund der reduzierten Geschwindigkeit durch die Querschnittserweiterung im Schwerkraftabscheider über die Länge bis zu einem bestimmten Punkt und nimmt dann ab. Vergleicht man dies mit anderen Phasenteilen bei gleichbleibendem Gesamtvolumenstrom, ist auch dort zu beobachten, dass die Keilhöhe erst ab einer bestimmten Keillänge ihr Maximum erreicht und dann sinkt (Abb. 15). Des Weiteren wird in Abb. 15 deutlich, dass sowohl die Keilhöhe zu jedem Zeitpunkt mit steigendem Phasenteil als auch die Länge des Dispersionskeils zunimmt.



**Abbildung 15.** Verlauf der Keilhöhe über Keillänge bei variierendem Phasenteil für das System Paraffinöl FC2006/Wasser. 5, 10, 15, 20 Vol.-% o/w,  $150 \text{ L h}^{-1}$  und konstanter Blende  $2 \times 30$ .

### 4.3 Up- und Down-Scaling

Um die Anwendbarkeit der neu erarbeiteten Methodik auf ein anderes Stoffsystem zu bewerten, hat der Projektpartner Bayer AG Untersuchungen zu dem Stoffsystem Toluol/Wasser in verschiedenen Skalierungen durchgeführt:

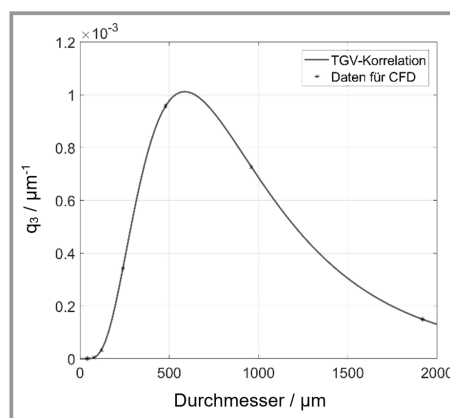
- Charakterisierung im Laborversuch (diskontinuierliche Phasentrennung).
- Charakterisierung in Miniplant-Versuchen (kontinuierliche Phasentrennung).

Die Untersuchung des Sedimentations- und Koaleszenzverhaltens des Systems Toluol/Wasser im Laborversuch

erfolgt in einer standardisierten, gerührten Messzelle nach Henschke [6].

In der aufgebauten Versuchsanlage bei der Bayer AG wurde die kontinuierliche Phasentrennung mit dem Stoffsystem Toluol/Wasser ( $\rho = 860 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\eta = 6,4 \cdot 10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) untersucht. Analog zu den ERICAA-Versuchsanlagen bei den Projektpartnern TUK, TUB und FFT besteht der Aufbau bei der Bayer AG aus Vorlagen, Pumpen, Dispergiereinheit, Haupt- und Nachabscheidern.

Zur Modellierung des Abscheiders DN100 wurden die experimentellen Daten eines Absetzversuches herangezogen. Auf Basis des Absetzverhaltens aus den Laborversuchen wurden die für die CFD-Modellierung erforderlichen Tropfengrößenklassen/Verteilungen approximiert (analog zu Abb. 5). Abb. 16 zeigt die von TUK berechnete Volumendichteverteilung aus der Analyse der Tropfengrößenverteilungen der ERICAA-Anlage basierend auf einem Sauterdurchmesser von  $704 \mu\text{m}$  aus einem Absetzversuch mit Toluol/Wasser.

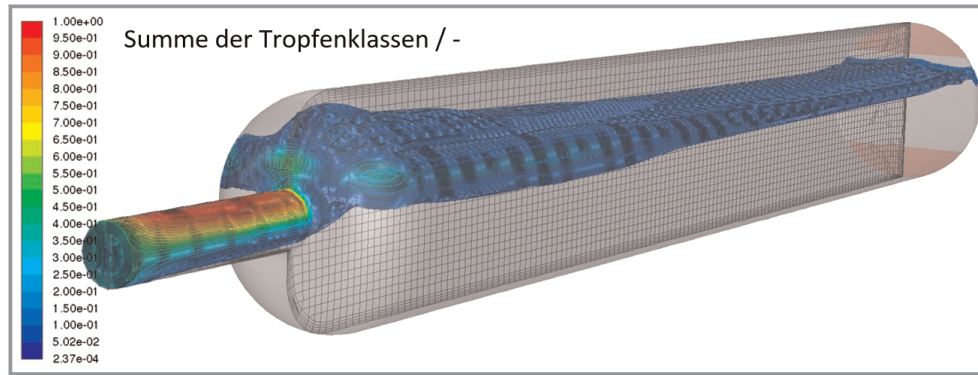


**Abbildung 16.** Tropfengrößenverteilung mit einem Sauterdurchmesser von  $704 \mu\text{m}$  und Datenpunkte für CFD-Simulationen.

Abb. 17 zeigt ein Ergebnis für die Simulation eines Schwerkraftabscheiders der Bayer AG bei einem Phasenteil von 40 Vol.-% o/w und der in Abb. 16 gezeigten Tropfengrößenverteilung. Der Koaleszenzparameter beträgt 0,03 für das verwendete Stoffsystem Toluol/Wasser. In Abb. 17 ist die Summe der Phasenteile der Tropfenklassen gezeigt.

Es ist zu beobachten, dass am Einlass des Schwerkraftabscheiders der Phasenteil von 40 Vol.-% o/w vorliegt und bereits vor dem eigentlichen Absetzprozess das Toluol am Rand des Rohres sedimentiert und koalesziert. Im Schwerkraftabscheider staut sich das System an und kann über die Länge an der Phasengrenze koaleszieren.

Bei der Lanxess Deutschland GmbH wurden für die beiden Modellsysteme Toluol/Wasser und MIBK (Methylisobutylketon)/Wasser die Stoffdaten ermittelt sowie diskonti-



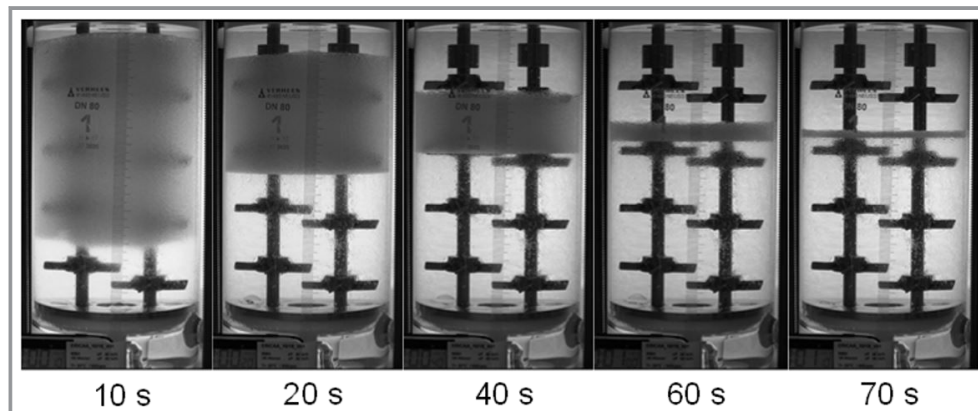
**Abbildung 17.** CFD-Simulation, DN100-Schwerkraftabscheider Bayer AG.

nuerliche Absetzversuche in der Henschke-Apparatur durchgeführt. Ein optischer Eindruck der Trennung ist in Abb. 18 dargestellt. Das System trennt sich erwartungsgemäß recht schnell in zwei klare, kohärente Phasen. Zusammen mit den Stoffdaten wurde aus der ermittelten Absetz- bzw. Koaleszenzkurve der Koaleszenzparameter  $r_s^*$  zu 0,0188 bestimmt.

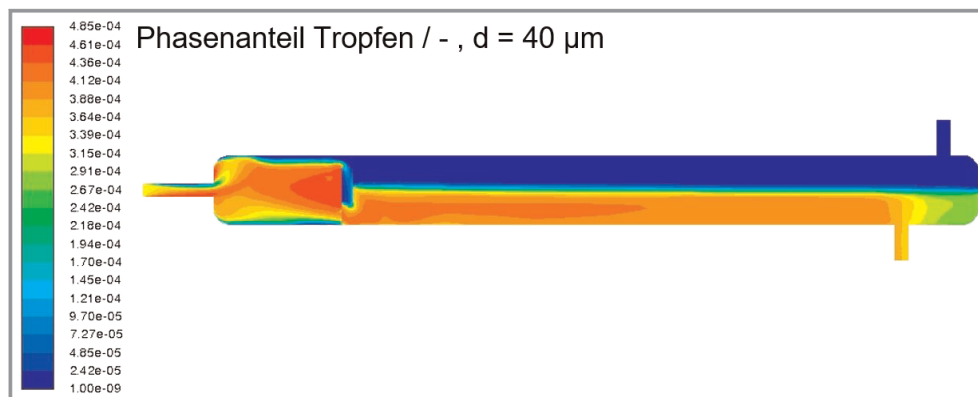
Beim System MIBK/Wasser wurden die Durchsätze 100, 150 und 225 L h<sup>-1</sup> untersucht bei einem konstanten Phasenverhältnis von 40 Vol.-% MIBK und 60 Vol.-% Wasser. Dies entspricht mittleren horizontalen Phasengeschwindigkeiten von 3, 4,4 und 6,6 mm s<sup>-1</sup> im Schwerkraftabscheider. Abbn. 19 und 20 zeigen einen Ausschnitt der CFD-Simulation für das Stoffsystem MIBK/Wasser bei der Lanxess

Deutschland GmbH. Auch hier wurde anhand eines Absetzversuches die TGV approximiert und mit einem Sauterdurchmesser von 644 µm modelliert. In Abb. 19 sind Tropfen mit einem Durchmesser von 40 µm zu sehen, die hinter einem Wehr nur schwer sedimentieren/koaleszieren und aus dem System ausgetragen werden.

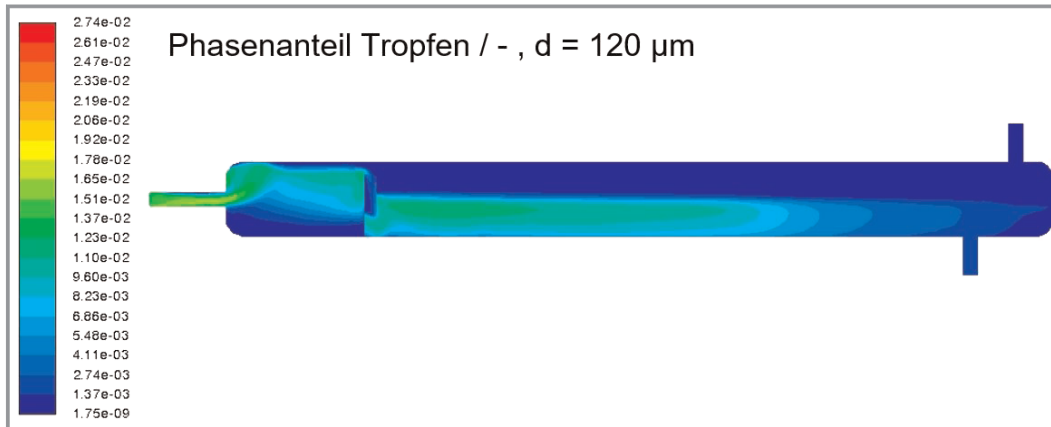
In Abb. 20 sind Tropfen mit einem Durchmesser von 120 µm zu sehen. Bereits vor dem Wehr sedimentieren die Tropfen und durch das Aufstauen kommt es zu einer Zone vermehrter Koaleszenz. Nach dem Wehr sedimentieren diese Tropfen entlang des Schwerkraftabscheiders aufgrund ihrer gegenüber den kleineren Tropfen von 40 µm größeren Auftriebsgeschwindigkeit schneller und koaleszieren frühzeitig an der Phasengrenze.



**Abbildung 18.** Optischer Eindruck der Phasentrennung von MIBK/Wasser bei 20°C.

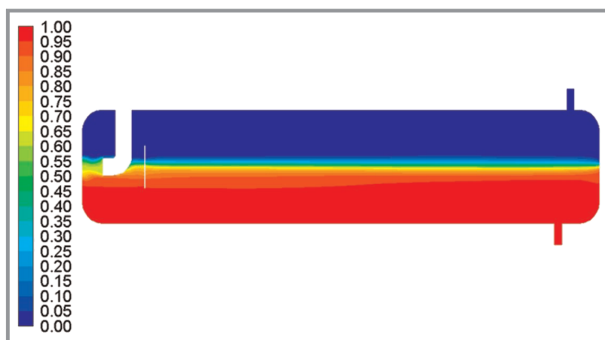


**Abbildung 19.** CFD-Simulation, DN100-Schwerkraftabscheider Lanxess Deutschland GmbH mit der Darstellung des Phasenanteils mit einem Durchmesser von 40 µm.



**Abbildung 20.** CFD-Simulation, DN100 Schwerkraftabscheider Lanxess Deutschland GmbH mit der Darstellung des Phasenanteils mit einem Durchmesser von 120  $\mu\text{m}$ .

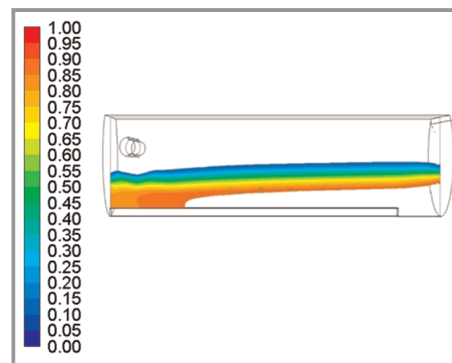
Für Betriebsversuche eines industriellen Abscheiders bei Ineos Phenol wurden CFD-Simulationen von der TUK für den Abscheider mit dem Koaleszenzmodell nach Henschke [6,8] mit 6 Tropfenklassen durchgeführt. Der Abscheider mit einer Länge von 25 und 5,3 m Durchmesser konnte mit dem Koaleszenzmodell und einer angenommenen Log-Normalverteilung auf Basis eines Absetzversuches simuliert werden. Der Sauterdurchmesser für die Simulation beträgt dabei 619  $\mu\text{m}$ .



**Abbildung 21.** Anteil wässriger Phase (-) im Abscheider, Ineos Phenol, ( $\text{Ø}$  5,3  $\times$  25 m).

Um Vorhersagen von CFD-Simulationen mit technischen Apparaten zu vergleichen, wurden Daten aus einem technischen Abscheider von der Firma Covestro Deutschland AG zur Verfügung gestellt. Das Phasenverhältnis zwischen leichter und schwerer Phase variierte im Bereich 1,4:1 bis 2,4:1.

Die mittlere Leerrohrgeschwindigkeit im Abscheider lag bei etwa 9  $\text{mm s}^{-1}$ . Mit dem gleichen Stoffsystem wurden im Labor Absetzversuche in einer Henschke-Messzelle durchgeführt. Aus diesen Versuchen wurden Sauterdurchmesser und der Koaleszenzparameter für das Stoffsystem bestimmt. Diese beiden Größen dienten gleichzeitig als Input für die CFD-Simulation, wobei der aus den Versuchen errechnete Sauterdurchmesser in der Größenordnung von 500  $\mu\text{m}$  lag.



**Abbildung 22.** Darstellung des Dispersionsbandprofils über die Länge des Apparates (Strömung von l. n. r.), Covestro Deutschland AG.

## 5 Zusammenfassung

Im Projekt ERICAA wurde eine systematische Methodik zur Auslegung von Flüssig/Flüssig-Schwerkraftabscheidern entwickelt, welche basierend auf CFD-Modellierungen ein bedarfsgerechtes, wissenschaftlich fundiertes und zukunftsfähiges Dimensionieren von Abscheidern erlaubt.

Für die Entwicklung eines standardisierten Verfahrens zur Auslegung von Schwerkraftabscheidern wurden identische Versuchsanlagen an drei Standorten parallel aufgebaut und Messungen gegenseitig kontrolliert und validiert. Verschiedene Tropfenmesstechniken wurden dafür eingesetzt. Mittels kontinuierlichen Trennversuchen wurde die Abscheideleistung eines DN150-Schwerkraftabscheiders und der Fraktionsabscheidegrad unterschiedlicher Tropfengrößen ermittelt. Der Einfluss verschiedener Betriebsbedingungen, wie beispielsweise Phasenverhältnis, Verweilzeit, Eingangstropfengrößenverteilung, wurde untersucht. Die Mehrphasenströmung am Eingang des Abscheiders wurde visualisiert und die Entwicklung des Dispersionskeils im Abscheider wurde zusätzlich optisch dokumentiert.

Im ERICAA-Projekt wurde der Aufbau und ein standardisiertes Verfahren für Absetzversuche durch die ERICAA-Zelle erarbeitet. Die Methodik der ERICAA-Zelle ist für einen großen Bereich (Stoffsysteme und Dimensionen des Schwerkraftabscheiders) anwendbar. Die Auswertung und die Modellierung von experimentellen Absetzversuchen konnte realisiert werden.

Auf Basis eines aus Absetzversuchen berechneten Sauterdurchmessers können validierte tropfenspezifische TGV mathematisch beschrieben werden. Es wurde gezeigt, dass die Annäherung der Eingangstropfengrößenverteilungen durch eine repräsentative Log-Normalverteilung möglich ist. Die Anwendung für eine rein CFD-basierte Auslegung unter idealisierten Zustrombedingungen in den Abscheider kann damit ohne eine direkte Messung am Eintritt des Apparates erfolgen.

Die Untersuchung zu mehrphasigen Strömungssimulationen von Schwerkraftabscheidern wurde behandelt. Die Implementierung und Validierung von Koaleszenzmodellen für die Tropfeninteraktionen wurden dabei umgesetzt. Ein großer Vorteil von CFD im Vergleich zu klassischen Modellen besteht darin, dass diese nicht durch geometrische Zwänge begrenzt ist. CFD-Simulationen in Verbindung mit Populationsbilanzen wurden unter Verwendung eines systemspezifischen, experimentell bestimmten oder abgeschätzten Koaleszenzparameters für horizontale Schwerkraftabscheider durchgeführt.

Die Zuverlässigkeit der erarbeiteten Methodik wurde an Down- und Upscale-Anlagen in Labor- und Betriebsabscheidern überprüft. Dafür wurden zusätzlich technische Stoffsysteme getestet. Diese Experimente zeigten, dass aus Absetzversuchen das Verhalten der Phasentrennung in beliebigen horizontalen Schwerkraftabscheidern vorausberechnet werden kann. Dadurch wird der Chemikalienverbrauch reduziert; es müssen weniger aufwändige Versuchsreihen durchgeführt und keine Sicherheitsstandards eingehalten werden. Dies ist wesentlich für die Entwicklung neuer Anlagen, wenn in einem frühen Entwurfsstadium nur geringe Mengen an Chemikalien zur Verfügung stehen. Darüber hinaus ermöglicht der neue CFD-Ansatz einen Einblick in das lokale Verhalten des Schwerkraftabscheiders und erlaubt die Vorhersage des tropfenspezifischen Sedimentations- und Koaleszenzverhaltens.

Zusammenfassend kann man festhalten, dass durch die Zusammenführung der Erfahrungen von unterschiedlichen Versuchsorten in Industrie und Hochschulen verknüpft mit einem intensiven Austausch von Mess- und Simulationsdaten die Basis für die Auslegung und Vorausberechnung von Schwerkraftabscheidern geschaffen wurde. Betreiber, Engineering-Firmen und Anlagenbauer verfügen damit zukünftig erstmalig über eine einheitliche, energie- und ressourcenschonende Auslegungsbasis. Nach Beendigung des Projekts sollen weitere Erfahrungen in Bezug auf die Übertragbarkeit auf industrielle Anwendungen und die Grenzen der entwickelten Methodik erarbeitet werden.

Die Autoren danken dem Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) für die finanzielle Unterstützung (Förderkennzeichen 01168585/1). Open Access Veröffentlichung ermöglicht und organisiert durch Projekt DEAL.

## Formelzeichen

$d$	[m]	Durchmesser
$d_{32}$	[m]	Sauterdurchmesser
$q_3$	[m <sup>-1</sup> ]	Volumendichteverteilung
$Q_3$	[-]	Volumensummenverteilung
$x$	[-]	dimensionsloser Durchmesser
$\eta$	[Pa s]	Dynamische Viskosität
$\nu$	[m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]	Kinematische Viskosität
$\sigma$	[N m <sup>-1</sup> ]	Grenzflächenspannung
$\sigma_{\ln}$	[-]	Logarithmische Standardabweichung
$\rho$	[kg m <sup>-3</sup> ]	Dichte

## Abkürzungen

CFD	Computational Fluid Dynamics
ERICAA	Energie- und Ressourceneinsparung durch Innovative und CFD-basierte Auslegung von Flüssig/Flüssig-Schwerkraftabscheidern
FFT	Franken Filtertechnik KG
MBIK	Methylisobutylketon
PBE	Populationsbilanzgleichung, Population Balance Equation
TGV	Tropfengrößenverteilung
TUB	Technische Universität Berlin
TUK	Technische Universität Kaiserslautern

## Literatur

- [1] J. Golob, R. Modic, *Trans. Inst. Chem. Eng.* **1977**, 55, 207–211.
- [2] H. M. Stöner, F. Wöhler, *Inst. Chem. Eng. Symp. Ser.* **1975**, 42 (14), 1.
- [3] W. Dalingaros, S. A. K. Jeelani, S. Hartland, S., *Can. J. Chem. Eng.* **1987**, 65 (2), 210–213.
- [4] H. Y. Lee, J. K. Oh, D. H. Lee, *Hydrometallurgy* **1993**, 32 (3), 273–286.
- [5] S. Hartland, S. A. K. Jeelani, *Chem. Eng. Sci.* **1987**, 42 (8), 1927–1938.
- [6] M. Henschke, Dimensionierung liegender Flüssig-Flüssig-Abscheider anhand diskontinuierlicher Absetzversuche, Fortschritt-Berichte VDI, Reihe 3 (Verfahrenstechnik), *Dissertation*, RWTH Aachen **1995**.
- [7] N. S. Kopriwa, Quantitative Beschreibung von Koaleszenzvorgängen in Extraktionskolonnen, *Dissertation*, RWTH Aachen **2013**.
- [8] M. Henschke, L. Schlieper, A. Pfennig, *Chem. Eng. Sci.* **2002**, 85 (2–3), 369–378.
- [9] T. Frising, C. Noik, C. Dalmazzone, *J. Disp. Sci. Technol.* **2006**, 27 (7), 1035–1057.

- [10] M. Haneke, J. Leistner, M. Mendorf, Application Related Design of Liquid-Liquid Decanters of Challenging Technical Systems, *ISEC2014 – International Solvent Extraction Conference*, Würzburg, September **2014**.
- [11] W. Meon, E. Blass, *Chem. Eng. Technol.* **1991**, *14* (1), 11–19.
- [12] L. Schlieper, M. Chatterjee, A. Pfennig, *AIChE J.* **2004**, *50* (4), 802–881.
- [13] N. Mungma, P. Chuttrakul, A. Pfennig, *J. Teknol.* **2014**, *67* (4), 55–58.
- [14] J. Villwock, F. Gebauer, J. Kamp, H.-J. Bart, M. Kraume, *Chem. Eng. Technol.* **2014**, *37* (7), 1103–1111.
- [15] F. Gaitzsch, A. Gäbler, M. Kraume, *Chem. Eng. Sci.* **2011**, *66* (20), 4663–4669.
- [16] J. Kamp, M. Kraume, *Chem. Eng. Res. Des.* **2014**, *92* (4), 635–643.
- [17] R. Eiswirth, Binary Coalescence of Free Rising Droplets, *Dissertation*, Technische Universität Kaiserslautern **2014**.
- [18] J. Steinhoff, E. Charlafti, L. Reinecke, M. Kraume, H.-J. Bart, *Can. J. Chem. Eng.* **2020**, *98* (1), 384–393.
- [19] T. Pilhofer, D. Mewes, *Siebboden-Extraktionskolonnen: Vorausberechnung unpulsierter Kolonnen*, Verlag Chemie, Weinheim **1979**.
- [20] F. Gebauer, J. Villwock, M. Kraume, H.-J. Bart, *Chem. Eng. Res. Des.* **2016**, *115*, 282–291.
- [21] J. Villwock, Systematische Analyse des Koaleszenzverhaltens von zweiphasigen Flüssigsystemen bei Ionenzugabe, *Dissertation*, TU Berlin **2019**.
- [22] D. Leleu, A. Pfennig, *Chem. Eng. Technol.* **2019**, *42* (7), 1404–1413.
- [23] M. Stieß, *Mechanische Verfahrenstechnik - Partikeltechnologie 1*, Springer, Heidelberg **2009**.
- [24] *ANSYS FLUENT™ Theory Guide 18*, ANSYS Inc., Canonsburg, PA **2018**.
- [25] L. Schiller, Z. Naumann, *Z. Ver. Dtsch. Ing.* **1935**, 77–318.