

Modellbasierte Methoden zur simulativen Beschreibung des Misch- verhaltens von Knetreaktoren

zur Erlangung des akademischen Grades eines
DOKTORS DER INGENIEURWISSENSCHAFTEN (Dr.-Ing.)
der Fakultät für Maschinenbau
der Universität Paderborn

genehmigte DISSERTATION

von
M.Sc. Tobias Maxisch
aus
Paderborn

Tag des Kolloquiums:	26.03.2010
Referent:	Prof. Dr.-Ing. H.-J. Warnecke
Korreferent:	Prof. Dr.-Ing. H.-J. Schmid
Externer Gutachter:	Prof. Dr. D. Bothe

Schriftenreihe Institut für Polymere Materialien und Prozesse

Band 1/2011

Tobias Maxisch

Modellbasierte Methoden zur simulativen Beschreibung des Mischverhaltens von Knetreaktoren

D 466 (Diss. Universität Paderborn)

Shaker Verlag
Aachen 2011

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Paderborn, Univ., Diss., 2010

Copyright Shaker Verlag 2011

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8322-9810-4

ISSN 2191-2025

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • E-Mail: info@shaker.de

Beim Mischen ist es besonders schwer,
nichts durcheinanderzubringen.

Abstract

The mixing behavior of a twin-shaft kneader is predicted by the use of a scale reduced model approach. The interaction of the relevant sub-processes is described by combining direct numerical simulation and an additional mixing protocol. Regarding a sub-system with only one shaft, discrete lagrangian particle are used to obtain particle concentration distributions on in- and outlet cross-sections out of numerically computed flow fields. The particle distributions are correlated by a mapping-matrix which represents the overall mixing process. This leads to low computational costs, because calculations of the overall mixing process can be done by matrix multiplication.

The transient mixing process between the rotors of the twin-shaft system is approximated by sequences of discrete mixing steps. To achieve this, the one-shaft model is extended by a baker-map and a transport step. The resulting concentration distributions allow the estimation of the mixing quality on cross-sections orthogonal to the axial transport direction. Aside from integral measures local information can be obtained to investigate complex mixing tasks. In case of fast chemical reactions by applying a layer model allows calculation of product concentration out of specific contact area can be done.

Starting from the axial distribution of a laminar pipe flow the mixing process on cross-sections leads to an axial distribution that can be matched by the dispersion model.

Zusammenfassung

Durch Entwicklung eines skalenreduzierten Modells wird das Mischverhalten eines Zweiwellen-Kneters vorhergesagt. Die Interaktion relevanter Teilprozesse wird durch die Kombination von Direkter Numerischer Simulation (DNS) mit einem zusätzlichen Mischprotokoll (baker's map) beschrieben. Unter Einsatz diskreter Lagrange'scher Partikel werden aus dem numerisch berechneten Strömungsfeld des einwelligen Teilsystems Partikelkonzentrationen auf Ein- und Auslassquerschnitt einer Elementarzelle des Kneters erhalten. Diese Profile werden über eine Mapping-Matrix korreliert. Damit kann der Gesamtmischprozess durch eine Matrizenmultiplikation mit geringem Aufwand abgebildet werden.

Durch eine Abfolge diskreter Mischschritte im Zwischenbereich der Rotoren wird der kontinuierliche Mischvorgang des zweiwelligen Systems approximiert. Das Modell der einwelligen Elementarzelle wird um eine baker's map und einen Transportterm erweitert. Die resultierenden Konzentrationsprofile ermöglichen die Berechnung der Mischgüte orthogonal zur axialen Transportrichtung. Neben integralen Größen werden ergänzend lokale Informationen zur Bewertung komplexer Mischaufgaben erhalten. Für sehr schnelle Reaktionen wird mit Hilfe der spezifischen Kontaktfläche die Erzeugung des Produkts unter Verwendung eines Schichtenmodells beschrieben.

Bezüglich der axialen Mischwirkung im Knetter wird gezeigt, dass das axiale Profil der laminaren Rohrströmung durch die Mischwirkung in orthogonaler Richtung in eine durch das Dispersionsmodell gut beschreibbare Verweilzeitverteilung übergeht.

Vorwort und Danksagung

Diese Arbeit wurde in der Technischen Chemie und Chemischen Verfahrenstechnik im Institut für Polymere Materialien und Prozesse angefertigt. Dabei wurden bisher folgende Publikationen veröffentlicht:

- Seck O., Maxisch T., Bothe D., Warnecke H.-J., "Investigation of the Mixing Behavior and the *Generation of Contact-Area in a Continuous Twin-Shaft Kneader*", 6th International Symposium on Multiphase Flow, Heat Mass Transfer and Energy Conversion, Xi'an, China, 11-15 July 2009
- Seck O., Maxisch T., Bothe D., Warnecke H.-J., "*Investigation of the Mixing and De-volatilisation Behavior in a Twin-Shaft Kneader*" Macro. Symp. 2009, zur Veröffentlichung eingereicht

Zwei weitere Publikationen mit den Titeln "*A scale reduced approach to characterize the mixing process in twin-shaft kneaders. Part 1: One-shaft sub- process*" und "*Part 2: overall twin-shaft process*" werden zur Veröffentlichung vorbereitet.

An dieser Stelle möchte ich mich besonders bei Herrn Prof. Dr.-Ing. H.-J. Warnecke bedanken, der mich in den letzten Jahre betreut und umfangreich unterstützt hat.

Herrn Prof. Dr.-Ing. H.-J. Schmid danke ich für die Übernahme des Korreferats, sowie Herrn Prof. Dr.-Ing. V. Schöppner für die Übernahme des Vorsitzes der Promotionskommission.

Großen Dank schulde ich zudem Herrn Prof. Dr. P.D. Anderson und seinem Mitarbeiter Dr. M.K. Singh, die mir während meines Aufenthalts in Eindhoven mit Rat und Tat zur Seite standen.

Herrn Prof. Dr. Bothe danke ich besonders für seine Anregungen bezüglich der vereinfachenden Modellierung und der Übernahme des externen Gutachtens.

Des Weiteren gilt mein Dank meinem Kollegen Herrn Seck für die zur Verfügung gestellten experimentellen Daten und den offenen Dialog.

Nicht zuletzt möchte ich meinen Eltern danken, die mir durch ihre Unterstützung das Studium und diese Arbeit ermöglichten und sie mit Anteilnahme verfolgt haben.

Und abschließend möchte ich meinen herzlichen Dank allen Korrekturleserinnen und Lesern für ihre Geduld und wertvollen Anregungen aussprechen.

Inhalt

1. Einführung.....	1
Problemstellung	1
Stand des Wissens	4
Aufgaben und Ansätze.....	6
2. Numerische Simulation der Strömungsfelder.....	13
Geometrie und Betriebsbedingungen.....	13
Numerische Simulation	15
<i>Grundgleichungen</i>	16
<i>Randbedingungen</i>	17
<i>Diskretisierung</i>	19
<i>Konvektionsterme</i>	20
<i>Koordinatensystem</i>	21
<i>Lösungsalgorithmen</i>	21
<i>Konvergenzkriterien</i>	23
Strömungsgeschwindigkeitsprofile im einwelligen Modellsystem	24
<i>Axiales Strömungsprofil</i>	25
<i>Tangentiales Strömungsprofil</i>	28
3. Analyse des einwelligen Mischelementes	33
Particle-Tracking	33
Mapping-Methode	35
<i>Anwendung, Vorteile und Einschränkungen</i>	38
<i>Partikel-basierter Ansatz</i>	41
<i>Mapping am Beispiel des Partitioned Pipe Mixers</i>	43
<i>Implementierungswege</i>	45
Ergebnisse für das einwellige Modellsystem	49
<i>Einfluss des Strömungsparameters Ψ</i>	49
<i>Weitere Einflussparameter</i>	62

4. Modellbildung	65
Axiale Mischwirkung	65
Mischung auf der Querschnittsebene	69
<i>Diskretisierung des Mischprozesses zwischen den Rotoren</i>	<i>69</i>
<i>Modellierung der zusätzlichen Mischwirkung</i>	<i>71</i>
<i>Erweiterung des einwelligen Modellsystems durch die baker's map</i>	<i>77</i>
<i>Zweiwelliges Modellsystem mit zusätzlicher Misch- und Transportwirkung</i>	<i>84</i>
5. Makromischen.....	87
Beurteilung der Mischwirkung	87
Mischungsanalyse des zweiwelligen Modellsystems	94
Knetter als chemische Reaktoren – komplexe Mischaufgaben	98
6. Mikromischen	107
Scale of Segregation und Potential des diffusiven Mischens	107
Anwendung auf die numerische Simulation	109
Bedeutung und Bestimmung der Kontaktfläche mit schneller chemischer Reaktion.....	111
Vereinfachendes Modell der Kontaktflächen-Entwicklung.....	113
Numerischen Ergebnisse	117
7. Zusammenfassung	119
Literaturverzeichnis	125
Symbolverzeichnis	141
Lebenslauf	147