

# ■ Computational Fluid Dynamics

## Strömungen in Reaktoren

V 5.01

### Simulationsmethoden für Partikel-Populationsbilanzen zur Analyse von Fällungsprozessen in Strömungsfeldern

Dr. T. Mitkova<sup>2)</sup>, Prof. Dr. V. John<sup>2)</sup>, Prof. Dr. L. Tobiska<sup>2)</sup>, Dipl.-Ing. C. Steyer<sup>1)</sup>, Dr. A. Voigt<sup>3)</sup>, Prof. Dr. K. Sundmacher<sup>1)</sup> (E-Mail: kai.sundmacher@vst.uni-magdeburg.de)

<sup>1)</sup>Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg;

<sup>2)</sup>Institut für Analysis und Numerik, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Universitätsplatz 2, D-39106 Magdeburg;

<sup>3)</sup>Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme, Sandtorstraße 1, D-39106 Magdeburg.

DOI: 10.1002/cite.200590094

Fällungsprozesse in Rührreaktoren werden häufig eingesetzt, um feinste Partikel aus flüssigen Lösungen herzustellen. In einer vorgelegerten schnellen chemischen Reaktion wird dabei ein gelöstes Produkt erzeugt, aus dem bei Überschreiten der kritischen Übersättigung Keime gebildet werden, die zu größeren Partikeln wachsen. Für die gezielte Auslegung der Reaktoren und die zuverlässige Vorhersage der Größenverteilung der erzeugten Teilchen bedarf es einer sorgfältigen modellgestützten Analyse des komplexen Zusammenwirkens der Partikelpopulationsdynamik mit dem Stoff- und Impulstransport. Die Modellierung derartiger gekoppelter eigenschaftverteilter Systeme erfolgt auf der Basis der Populationsbilanzen der Partikel, der Massenerhaltungsgleichungen der gelösten Reaktanden und der Navier-Stokes-Gleichungen für das Strömungsfeld. Das Modellgleichungssystem ist ein System partieller Integrodifferentialgleichungen, für dessen Diskretisierung numeri-

sche Schemata vorgestellt und hinsichtlich Effizienz und Genauigkeit bewertet werden. Die Untersuchungen erfolgen am Beispiel der Fällung von Bariumsulfat-Partikeln in einer 2D-Driven Cavity (s. Abb.) mit getrennten Zuflüssen der Reaktanden  $\text{BaCl}_2$  und  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ .

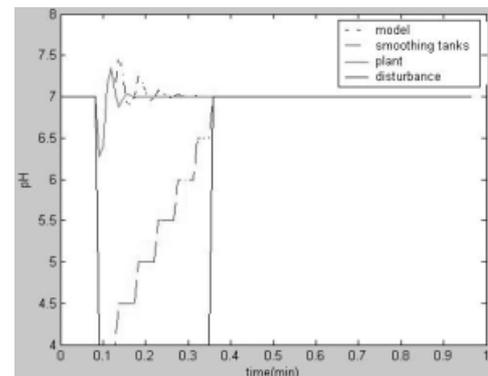


Abbildung. 2D-Driven Cavity: Konzentrationsverteilung berechnet auf finiten Elementen.

V 5.02

### Numerische Untersuchung der Kristallisation zur Enantiomerentrennung in komplexen Strömungen

M. Sci. A. A. Öncül<sup>1)</sup> (E-Mail: alper.oencuel@vst.uni-magdeburg.de), Dr.-Ing. M. P. Elsner<sup>2)</sup>, Prof.-Ing. D. Thévenin<sup>1)</sup>, Prof.-Ing. A. Seidel-Morgenstern<sup>2,3)</sup>

<sup>1)</sup>Institut für Strömungstechnik und Thermodynamik, Lehrstuhl für Strömungsmechanik und Strömungstechnik, Otto-von-Guericke-Universität-Magdeburg, Universitätsplatz 2, D-39106 Magdeburg;

<sup>2)</sup>Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme, Sandtorstraße 1, D-39106 Magdeburg;

<sup>3)</sup>Institut für Verfahrenstechnik, Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik, Otto-von-Guericke-Universität-Magdeburg, Universitätsplatz 2, D-39106 Magdeburg.

DOI: 10.1002/cite.200580013

Die „Bevorzugte Kristallisation“ als spezielle Separationsmethode von racemischen Gemischen stellt eine geeignete Alternative zu

den in der Regel aufwändigeren und auch kostenintensiveren Methoden (z. B. den chromatographischen Trennverfahren oder den