

## Modellierung der Fluidodynamik und des Stoffübergangs in Extraktionskolonnen

Gilbert Casamatta und Alfons Vogelpohl\*

Nach der Destillation ist die Flüssig/Flüssig-Extraktion das wichtigste Trennverfahren in der thermischen Verfahrenstechnik. Im Gegensatz zur Destillation ist der Kenntnisstand hinsichtlich Auslegung und Verhalten solcher Kolonnen jedoch noch sehr unbefriedigend. Die Ursache hierfür liegt im wesentlichen in dem komplexen Verhalten der dispersen Phase, das geprägt wird von der Tropfenverteilung, dem Zerfall und der Koaleszenz der Tropfen sowie dem Einfluß dieser Vorgänge auf die axiale Vermischung. Die bisherigen Ergebnisse der Extraktionsforschung lassen erkennen, daß eine gesicherte Auslegung von Extraktionskolonnen allein von den Grundlagen ohne eine genaue Beschreibung dieser Teilvorgänge nicht möglich sein wird. In der vorliegenden Arbeit werden Ansätze zur Beschreibung dieser Teilprobleme vorgestellt und ihr Einfluß hinsichtlich Fluidodynamik und Stoffübergang untersucht.

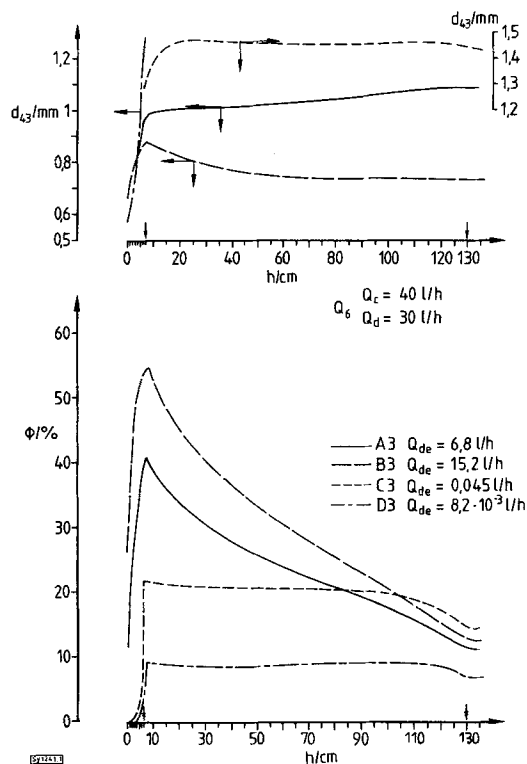


Abb. 1. Holdup  $\phi$  und Tropfengrößenverteilung  $d_{43}$  in der dispersen Phase;  $Q$  Volumendurchsatz; Index c: kontinuierlich, Index d: dispers, Index e: mitgerissen.

Die Fluidodynamik von Extraktionskolonnen wird im wesentlichen von dem Verhalten der dispersen Phase, d.h. dem Verhalten der Tropfen bestimmt. Das dieser Arbeit zugrunde liegende mathematische Modell geht daher von einer Verteilung der Tropfen aus und läßt ferner den Zerfall und die Koaleszenz von Tropfen zu, woraus sich folgende instationäre Bilanzgleichung ergibt:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(h, d) = - \frac{\partial}{\partial h} \{ P(h, d) \cdot U_d(h, d) \} + \frac{\partial}{\partial h} \left\{ D \frac{\partial}{\partial h} P(h, d) \right\} + R(h, d). \quad (1)$$

In dieser Gleichung sind  $P(h, d)$  und  $U_d(h, d)$  die Verteilungsfunktionen der Tropfengröße bezüglich der Tropfengeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Tropfengröße  $d$  und der Kolonnenhöhe  $h$ .  $D$  ist der als konstant angenommene Dispersionskoeffizient der Tropfen, und der Produktionsterm  $R(h, d)$  berücksichtigt den Tropfenzerfall und die Tropfenkoaleszenz. Für den Tropfenzerfall  $R_z(h, d)$  wurde ein kinetisches Gesetz der Form

$$R_z(h, d) = -r(h, d) \cdot P(h, d) \quad (2)$$

angenommen, wobei  $r(h, d)$  die Zerfallsgeschwindigkeit der Tropfen ist. Zur Beschreibung des Koaleszenzvorgangs wird vereinfachend davon ausgegangen, daß infolge der unterschiedlichen Geschwindigkeit der Tropfen ein kleiner Tropfen von einem großen Tropfen eingefangen wird und beide zu einem Tropfen mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit koaleszieren.

Mit diesen Ansätzen wurde die Differentialgleichung (1) numerisch mit Hilfe des Runge-Kutta-Verfahrens gelöst, nachdem sie zuvor durch eine Diskretisierung hinsichtlich der Tropfengröße und der Kolonnenhöhe in ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen überführt wurde. Ein Ergebnis der Rechnungen zeigt Abb. 1 für das System Wasser/Isopropylether und eine RDC-Kolonne von 50 mm Dmr. mit 24 Stufen. Aufgetragen sind für einen Durchsatz an kontinuierlicher Phase von 40 l/h und an diskontinuierlicher Phase von 30 l/h im unteren Teil des Bildes die Holdup-Verteilung und im oberen Teil die Veränderung des mittleren Tropfendurchmessers über der Höhe der Kolonne. Die unterschiedlichen Kurven geben den Einfluß von Tropfenzerfall und Koaleszenz wieder, wobei für die Kurve  $A_3$  Tropfenzerfall und Koaleszenz gleich null gesetzt sind, während für die übrigen Kurven die gleiche Zerfallsrate vorliegt und die Koaleszenzrate von  $B_3$  über  $C_3$  nach  $D_3$  steigt. An dem oberen Bildteil ist bemerkenswert, daß für den Fall  $B_3$  der Einfluß des Tropfenzerfalls den der Koaleszenz deutlich überwiegt, woraus sich eine Abnahme des mittleren Durchmessers und eine hohe Mitreißrate

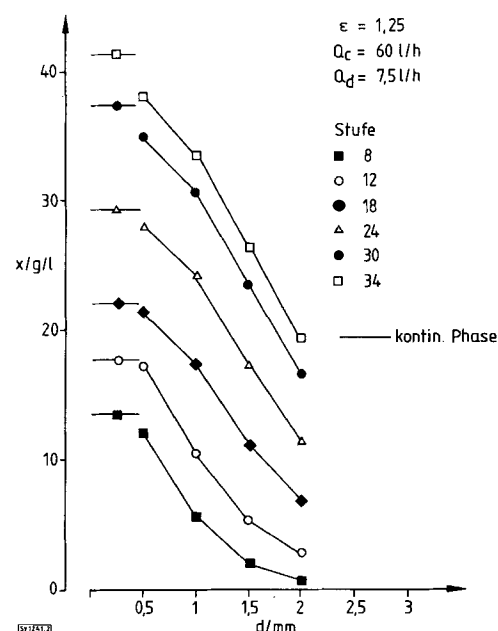


Abb. 2. Konzentrationsprofil;  $\epsilon$  Extraktionsfaktor.

\* G. Casamatta, Institut du Génie Chimique, Toulouse, und Prof. Dr.-Ing. A. Vogelpohl, Techn. Univ. Clausthal, Leibnizstr. 15, 3392 Clausthal-Zellerfeld.

an disperser Phase in dem unten aus der Kolonne austretenden Strom an kontinuierlicher Phase ergibt. Diese Mitreißrate ist in Abb. 1 mit  $Q_{de}$  bezeichnet und beträgt im betrachteten Fall 15,2 l/h, d. h. praktisch die Hälfte der zugeführten dispergierten Phase verläßt die Kolonne mit der kontinuierlichen Phase. Dieser wichtige Einfluß von Tropfenzerfall und -koaleszenz wird durch die übrigen Ergebnisse bestätigt, wie überhaupt die Simulationsrechnungen zeigen, daß bei der hier zugrunde gelegten Kolonnenkonfiguration die Verhältnisse unterhalb der Zuführstelle der dispersen Phase am unteren Kolonnenende das Flutpunktsverhalten bestimmen. Hier bildet sich ein dichtes Tropfenbett aus, in dem die mit der kontinuierlichen Phase mitgeführten kleinen Tropfen koaleszieren und damit wieder nach oben geführt werden. Mit steigender Belastung dehnt sich dieses Bett immer weiter nach unten aus, bis es schließlich mit der kontinuierlichen Phase teilweise ausgetragen und dadurch der Flutpunkt erreicht wird.

Diese Ergebnisse werden durch Hinweise aus eigenen Flutpunktmessungen bestätigt, bei denen eine grobe Vorverteilung der dispersen Phase einen um 30% höheren Durchsatz gegenüber einer feinen Verteilung erlaubte. Die Art der Dispergierung sowie die Kolonnen-Geometrie unterhalb der Feed-Zugabe sollten daher bei Auslegung und Betrieb besonders beachtet werden.

Die oben vorgestellte Bilanzgleichung läßt sich zwanglos auf den

Fall der zusätzlichen Stoffübertragung erweitern. Ein Ergebnis mit Stoffübertragung zeigt Abb. 2, in der der mittlere Gehalt an Gelöstem in der kontinuierlichen Phase sowie in den Tropfen der dispersen Phase an unterschiedlichen Stellen in der Kolonne aufgetragen ist. Während die kleinen Tropfen von 0,5 mm Dmr. sich nahezu abgesättigt haben, liegt die Absättigung der großen Tropfen von 2 mm Dmr. im allgemeinen deutlich unter 50%.

Der hinsichtlich Durchsatz und Stoffübergang optimale Betriebspunkt der Kolonne liegt nach den bisher vorliegenden Ergebnissen unmittelbar unter dem Flutpunkt.

Die Einflüsse von Tropfenzerfall und Koaleszenz sind in diesen Ergebnissen nicht berücksichtigt. Entsprechende Rechnungen sind in Vorbereitung, und es wird erwartet, daß sie die Ergebnisse deutlich beeinflussen.

Eingegangen am 23. August 1983

*Schlüsselworte:* Extraktion, Stoffübergang, Modellierung, Fluidynamik.

Das vollständige Manuskript dieser Arbeit umfaßt 29 Seiten mit 10 Abbildungen, 1 Tabelle und 14 Literaturzitaten. Es ist als Fotokopie oder Mikrofiche MS 1196/84 erhältlich. Eine Bestellkarte finden Sie am Schluß dieses Heftes.