

## Anwendung des Bonded-Particle-Modells für die Modellierung der Packungen von nicht-sphärischen Partikeln

**Jun.-Prof. Dr.-Ing. Maksym Dosta**

Arbeitsgruppe für Mehrskalensimulation von Feststoffsystemen,  
Technische Universität Hamburg

### Einleitung

In vielen Industrien wie z.B. der Chemie-, Pharma- und Lebensmittelindustrie können heutzutage zahlreiche Beispiele gefunden werden, bei denen die Charakteristiken von Packungen nicht-sphärischer Partikel einen großen Einfluss auf den Gesamtprozess oder auf die Eigenschaften der Endprodukte haben. Die Packungscharakteristik beeinflusst unter anderem:

- das Strömungsprofil und den Druckverlust in durchströmten Festbetten bei Vergasung, Pyrolyse, Absorption, Katalyse etc.
- die Wärmespeicherung in Festbetten
- das Fließverhalten von Schüttgütern beim Entleeren von Silos
- mechanische und Diffusionseigenschaften von Kompositwerkstoffen

Für die numerischen Untersuchungen der Partikelpackungen kann die Diskrete-Elemente Methode (DEM) auf der Mikroskala effektiv angewendet werden. Bei der DEM werden alle Partikel als einzelne Objekte betrachtet, was zu einer hohen Simulationsgenauigkeit führt. Allerdings wurde die DEM für die Simulation von ideal sphärischen Kugeln entwickelt. Für die Modellierung der nicht-sphärischen Partikel kann eine Erweiterung der DEM, die sogenannte „Multi-Sphere“ (MS)-Methode [1] angewendet werden. Bei der MS-Methode wird der Form der Partikel durch mehrere überlappende Kugeln nachgebildet (Abb. 1). Als andere Erweiterung der DEM kann das „Bonded-Particle-Model“ (BPM) [2] zum Einsatz kommen. Laut des BPMs wird der untersuchte Körper mittels eines Agglomerates, das aus mehreren ideal-sphärischen Primärpartikeln mit verschiedenen Durchmessern besteht, repräsentiert. Die Primärpartikel sind über Feststoffbrücken miteinander verbunden. Aufgrund der Tatsache dass jede Brücke separat berechnet wird, hat die Verwendung des BPMs wesentliche Vorteile im Vergleich zum MS-Ansatz, weil das BPM:

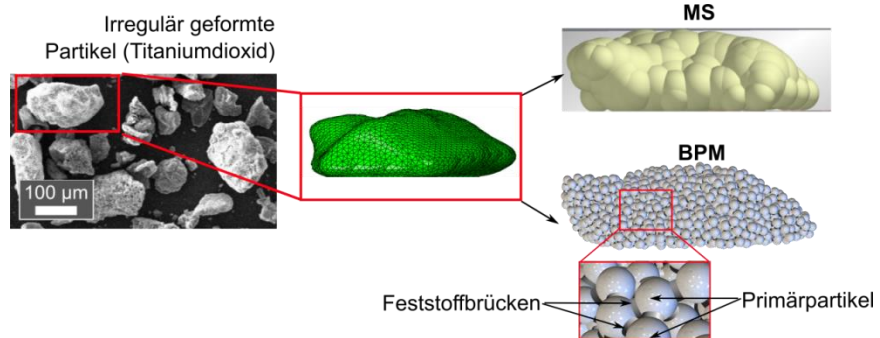


Abb. 1. Anwendung der MS und BPM Methoden für die Darstellung von irregulär-geformten Partikel.

- die Berücksichtigung von Deformation und Bruchverhalten der einzelnen Partikel ermöglicht
- zu einer größeren Flexibilität während der Erstellung der komplex aufgebauten Partikel führt
- die effektive Nachbildung der inneren Struktur von hochporösen Körpern ermöglicht
- zu einer Minimierung des Rechenaufwands führen kann.

Trotz des zunehmenden Interesses am BPM-Ansatz und einer steigenden Anzahl an Forschungsarbeiten in diesem Bereich wurde bisher keine vollständige Studie durchgeführt, welche

die Anwendbarkeit dieser Methode für die Modellierung von Partikelpackungen untersucht. Im Rahmen dieses Projektes wurde anhand von numerischen und experimentellen Untersuchungen die Anwendbarkeit des BPM auf die Modellierung von Packungen aus nicht-sphärischen Partikel untersucht.

### Partikelherstellung

Für die experimentellen Untersuchungen von Packungseigenschaften von nicht-sphärischen Partikeln wurde Schmelzschichtung (Fused Deposition Modeling), eine 3D-Druck Technologie, eingesetzt. Dabei wurde Partikeln aus dem Polymer Polyactide (PLA) hergestellt. Die mittlere Partikelgröße war im Bereich 0.8-1.5 cm, welches die minimale Größe ist, welche ohne erhebliche Oberflächenfehler gedruckt werden kann. Es wurden sechs unterschiedliche Partikelformen untersucht: Tetraeder, Halbkugel, Zylinder sowie drei Typen von Quader mit variierten geometrischen Eigenschaften. In Abb. 2 sind drei Beispiele von Packungen von gedruckten Partikeln dargestellt.



a) Quadern

b) Halbkugeln

c) Mischung von Tetraedern und Zylinder

Abb. 2. Hergestellte nicht-sphärische Partikeln

Um die Materialparameter von hergestellten Partikeln zu bestimmen, wurden mehrere experimentellen Untersuchungen durchgeführt. Die Steifigkeit wurde mit quasi-statischen Kompressionsversuchen bestimmt. Für die Messung der Dichte wurde ein Heliumpyknometer eingesetzt. Der Restitutionskoeffizient wurde mit einer Freifallapparatur ermittelt. In Tab. 1 sind die gemessenen Materialparametern aufgelistet.

Tab. 1. Parametern von gedruckte Partikeln.

Elastizitätsmodul [GPa]	2.22
Restitutionskoeffizient (PLA-PLA) [-]	0.74
Reibungskoeffizient [-]	0.27
Dichte [kg/m <sup>3</sup> ]	1230

### Simulationsergebnisse

Die Numerischen Untersuchungen wurden mit dem Simulationssystem MUSEN durchgeführt. MUSEN wurde bereits erfolgreich für unterschiedliche Probleme wie z.B. Sinterprozesse [3], Mischprozesse oder die Untersuchung des Bruch- und Abriebverhaltens [2,4] angewendet. Die Berechnungsalgorithmen von MUSEN sind für Mehrkernprozessoren sowie für Grafikkarten parallelisiert, was effektive Simulation von großen Partikelkollektiven ermöglicht, wie es in Abb. 3 dargestellt ist. Hier ist die Packung von Tetraedern dargestellt, die aus 219000 Primärpartikel und 347000 Feststoffbrücken bestehen.

Die Form von nicht-sphärischen Objekten wurde mit mehreren miteinander verbundenen sphärischen Primärpartikeln repräsentiert. Wegen der fehlenden Kontaktdetektion zwischen dem Partikel und der Feststoffbrücke kann die Form von Partikel nicht mit hoher Genauigkeit dargestellt werden. Darüber hinaus es entstehen Lücken auf der Partikeloberfläche. Um diesen Fehler zu reduzieren und um die simulierten nicht-sphärischen Partikeln zu vergrößern wurde ein Skalierungsfaktor eingeführt.

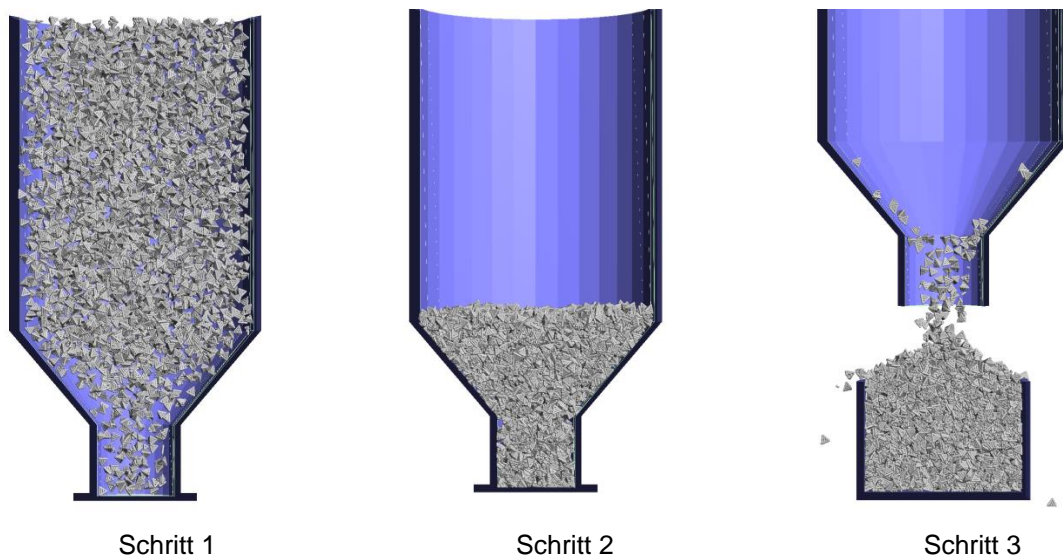


Abb. 3. Numerische Untersuchung der Partikelpackung mit Bonded-Particle-Model.

Der Vergleich zwischen Ergebnissen aus Experimenten und Simulationen hat gezeigt, dass die vorgeschlagene Methodik es ermöglicht den Zusammenhang zwischen Form und Packungseigenschaften qualitativ gut zu beschreiben. Allerdings führt die Verwendung des BPM ohne Skalierungsfaktor zur Überschätzung der Packungsdichte. Deshalb wurde zusätzlich für jede untersuchte Partikelform ein Skalierungsfaktor berechnet, welcher auch die quantitativ korrekte Beschreibung von Packungseigenschaften ermöglicht.

### Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Methodik für die Untersuchung von Packungen aus nicht-sphärischen Partikeln entwickelt. Diese basiert auf dem Bonded-Particle-Model und der Verwendung von Skalierungsfaktoren. Für die Validierung numerischer Ergebnisse wurden experimentelle Untersuchungen mit 3D-gedruckten Partikeln verwendet. Die erhaltenen Ergebnisse haben gezeigt, dass der vorgeschlagene Ansatz es ermöglicht, die Modellierung von Partikelkollektiven aus  $10^3$ - $10^4$  nicht-sphärischen Objekten effektiv zu beschreiben.

Im Rahmen der zukünftigen Untersuchungen ist die Erweiterung des BPM mit einer zusätzlichen Kontaktdetektion zwischen Primärpartikel und Feststoffbrücke geplant.

### Veröffentlichungen

Die ausgewählten Ergebnisse dieser Forschungsarbeit werden auf der „World Congress of Chemical Engineering“ 2017 in Barcelona vorgestellt: M. Dosta, L. Puebla, „Analysis of packings of non-spherical particles using bonded-particle model“ (Vortrag).

Eine Einreichung zu diesem Thema ist für die ProcessNet-Fachgruppentagung „Agglomerations- und Schüttguttechnik“ 2018 in Vorbereitung.

### Literatur

- [1] H. Kruggel-Emden, S. Rickelt, S. Wirtz, V. Scherer (2008). A study on the validity of the multi-sphere Discrete Element Method. *Powder Technology* 188.
- [2] S. Kozhar, M. Dosta, S. Antonyuk, S. Heinrich, L. Gilson, U. Bröckel (2015). DEM simulations of amorphous irregular shaped micrometer-sized titania agglomerates at compression. *Adv. Powder Techn.* 26.
- [3] Besler R., da Silva M.R., Dosta M., Heinrich S., Janssen R. (2016): Discrete element simulation of metal ceramic composite materials with varying metal content. *J. of the Eur. Cer. Soc., Bd. 36, S. 2245-2253*
- [4] Dosta M., Antonyuk S., Heinrich S. (2013): Multiscale simulation of agglomerate breakage in fluidized beds, *Ind. Eng. Chem. Research, Bd. 52, S. 11275-11281*.