

# Fluiddynamische Simulation in der Membrantechnik

Max Staudacher<sup>1,2</sup>, Dr. Michael Harasek<sup>1</sup>, Dr. Torsten Brinkmann<sup>2</sup>, Walter Hilgendorff<sup>2</sup>

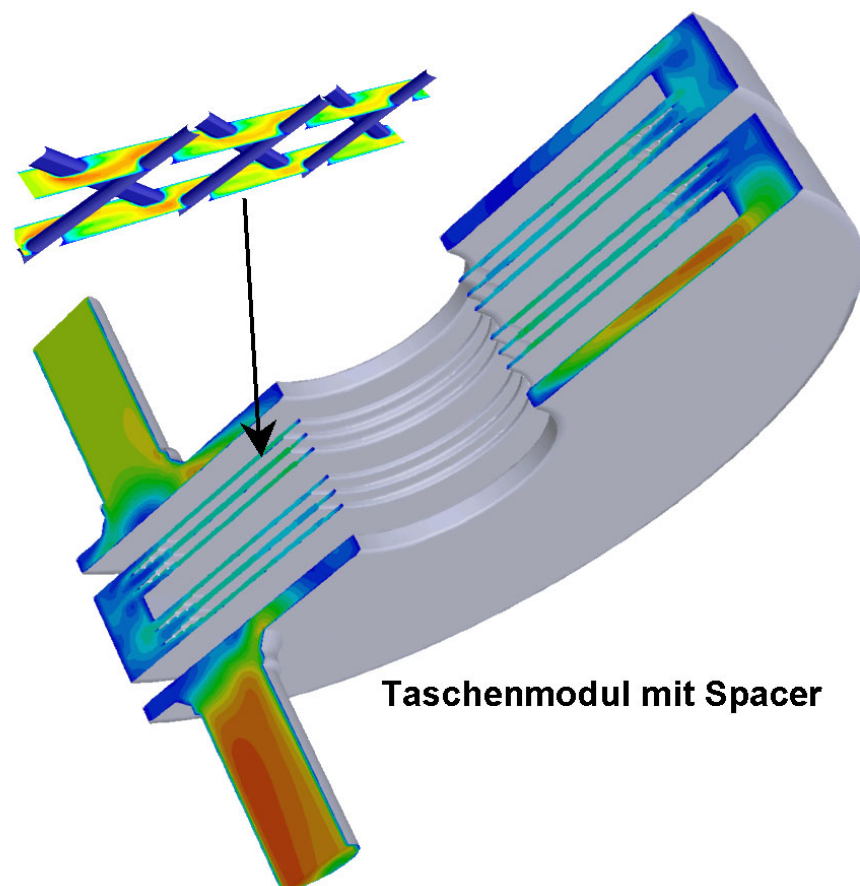
<sup>1</sup> Institut für Verfahrens- Brennstoff und Umwelttechnik, TU Wien, Getreidemarkt 9/159, A - 1060 Wien

<sup>2</sup> Abteilung Verfahrenstechnik, Institut für Chemie, GKSS Forschungszentrum, D - 21502 Geesthacht

14. Dezember 2001

## Zusammenfassung

In Zusammenarbeit mit dem Institut für Chemie des HGF Forschungszentrums GKSS wurden mit Hilfe des Softwarepakets FLUENT Untersuchungen an Membranmodulen zur Gasaufbereitung vorgenommen. Der transmembrane Stofftransport wurde mit sogenannten „user defined functions“ (UDF) modelliert.



## 1. Einleitung

Die fluidodynamische Untersuchung von Membranmodulen zur Gaspermeation ist ein wichtiger Beitrag zum besseren Verständnis von Stofftransportphänomenen an der Membranoberfläche. Die Triebkraft für den transmembranen Stofftransport ist hier die Differenz der Partialdrücke vor (sog. „Feedseite“) und hinter (sog. „Permeatseite“) der Membran (Gleichung 1).

$$gP_A = L_A \cdot A_{Membran} \cdot (p_A^{Feed} - p_A^{Permeat}) \quad (1)$$

Der Quotient aus den Permeabilitäten  $L_A$  und  $L_B$  beschreibt den Unterschied des Permeationsverhaltens zweier Komponenten A und B, wobei die bevorzugt permeierende Komponente im Zähler des Bruches steht.  $\alpha_{A,B}$  wird als Selektivität der Membran bezeichnet.

$$\alpha_{A,B} = \frac{L_A}{L_B} \quad (2)$$

Ausgehend von Gleichung 1 läßt sich der ideale Stofftransport durch eine Membran beschreiben. Messungen ergeben oft eine mitunter sehr große und nicht vernachlässigbare Differenz zu den auf den idealen Gleichungen basierenden Berechnungen.

Um bessere Voraussagen die Trennleistung betreffend machen zu können, sollten daher in den Rechnungen Aspekte, wie

- Konzentrationspolarisation
- Joule Thomson Effekt
- Realgasverhalten

berücksichtigt werden. Nicht immer müssen alle genannten Nichtidealitäten berücksichtigt werden. Im Prinzip gilt aber, je höher die Drücke, desto höher die Abweichung vom idealen Verhalten. Abbildung 1 zeigt die Konzentrationsüberhöhung in der Grenzschicht.

Auch der Modulaufbau selbst hat einen Einfluß auf den transmembranen Stofftransport. So läßt sich zum Beispiel durch den Einbau von Spacern aufgrund der besseren Durchmischung der negative Einfluß von Konzentrationspolarisationseffekten reduzieren.

Außerdem bewirkt der Spacer eine bessere Ausnützung der Membranfläche. Auch Platten mit Strömungskanälen wirken in ähnlicher Weise einer Verminderung der Trennleistung entgegen.

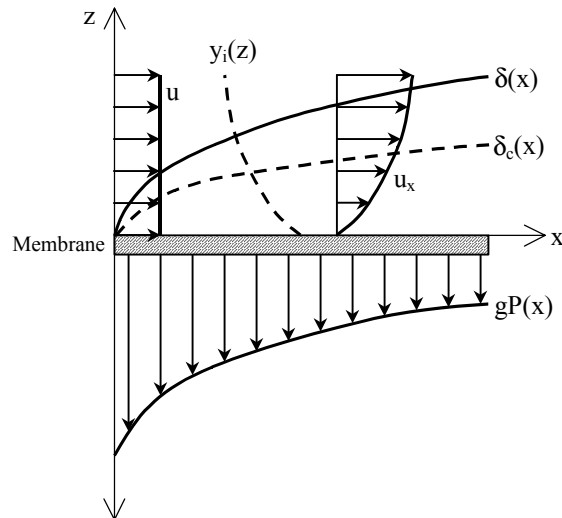


Abb. 1: Ausbildung der Grenzschicht nach Rautenbach

Ein weiterer wichtiger Aspekt bei Betrachtung der Trennleistung ist der Druckverlust über das Modul. Abbildung 2 zeigt den grundsätzlichen Aufbau des untersuchten Moduls, das bei GKSS entwickelt wurde.

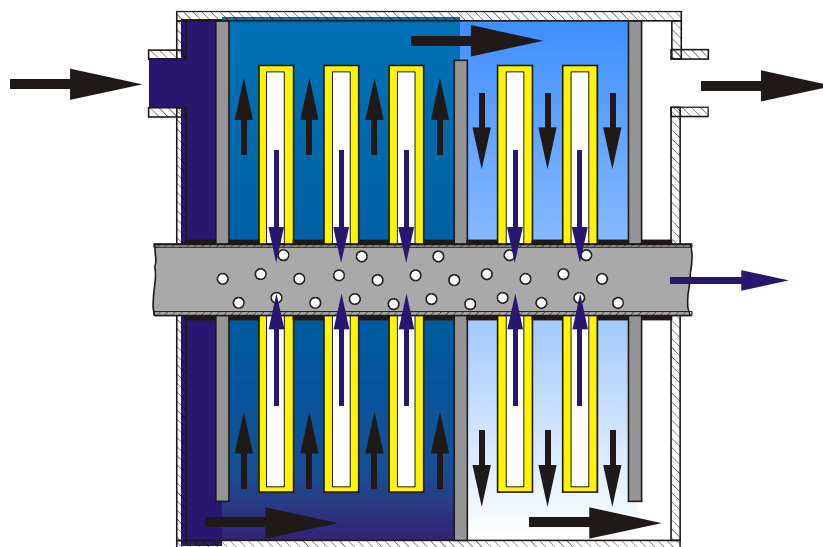


Abb. 2: Prinzipieller Aufbau eines Membranmoduls

## **2. Modellierung**

### **2.1. Soft- und Hardware**

Das zur Berechnung herangezogene Softwarepaket besteht aus dem Preprozessor GAMBIT (Version 1.3.2), mit dem die Geometrie und das Berechnungsnetz generiert wurden. Die Lösung und das Auswerten der Berechnungsdaten erfolgte mit dem Solver FLUENT (Version 5.5.14). Die Modelle basieren auf teilweise unstrukturierten Gittern mit einer Zellanzahl zwischen 300.000 und 1.200.000. Dies entspricht einem Hauptspeicherbedarf von circa 400 bis 1500 MB. Durch den Einbau zusätzlicher Funktionen (siehe auch 2.2), die wahlweise interpretiert oder kompiliert werden können, erhöht sich die Rechenzeit. Bis zur Konvergenz wurden bis zu 600 Iterationsschritte benötigt, da die Konvergenzkriterien aufgrund der zusätzlichen Funktionen verfeinert werden mußten, um die Massenbilanz zu erfüllen.

Für die Berechnungen verwendet wurden die zentralen Rechner des ZID an der TU Wien `fe.zserv.tuwien.ac.at` und `cfid.zserv.tuwien.ac.at` (Multiprozessor – Alpha - Systeme von Compaq). Das Betriebssystem dieser Rechner ist Tru 64 Unix.

### **2.2. Modellierung des Stofftransportes**

Der transmembrane Fluß wurde mit Hilfe sogenannter benutzerdefinierter Funktionen („user defined functions“, „UDF“) simuliert. Der Solver bezieht diese in C geschriebenen (Zusatz)funktionen in seinen Lösungsalgorithmus ein und erlaubt so, zusätzliche Informationen zu verarbeiten.

Die UDF simuliert basierend auf Gleichung 1 den Stoffübergang an der Feedseite als Senke in den Zellen an der Membranoberfläche. Da in dieser Arbeit nur die Feedseite interessiert, war es nicht notwendig der Senke auf der Feedseite, eine entsprechende Quelle auf der Permeatseite gegenüberzustellen.

### **2.3. Stoffdaten**

Der Solver bietet die Möglichkeit mit einem Mehrkomponentensystem zu arbeiten. Die Berechnung erfolgte mit einem dampfförmigen Ethanol - Wasser Gemisch mit 15% Stoffmengenanteil an Wasser.

Die Selektivität hatte nach Gleichung 2 einen Wert von

$$\alpha_{Wasser,Ethanol} = \frac{L_{Wasser}}{L_{Ethanol}} = \frac{40}{0,6} = 66,67 .$$

Außerdem wurden die Permeabilitäten als konstant d.h. als druck- und temperaturunabhängig angenommen. Der Druck auf Permeatseite wurde gleich null gesetzt, was einer idealen Triebkraft bei der Berechnung der transmembranen Flüsse entspricht.

## 2.4. Spacer

Das Modell des Spacers wurde aus einer Grundeinheit (Abbildung 3) bestehend aus einem gekreuzten Faserpaar aufgebaut. Gerechnet wurde mit jeweils 6, 16 oder 128 Grundeinheiten. Je mehr Grundeinheiten aneinander gereiht werden, desto gröber wird das generierte Netz, da die Gesamtanzahl der Zellen aus Leistungs- und Kapazitätsgründen des Rechners einen gewissen Wert nicht übersteigen soll. Parallel dazu wurde die Kanalströmung ohne Spacer gerechnet, um den Stoffübergang mit und ohne Spacer vergleichen zu können.

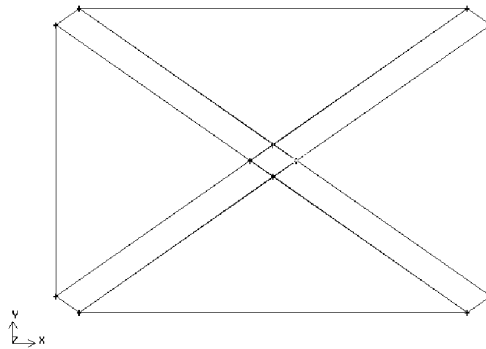


Abb. 3: Grundeinheit des Spacers

Abbildung 4 zeigt die Verminderung der Konzentrationspolarisation durch den Spacer. Die durchgezogene Linie des Konzentrationsprofils im Kanal mit Spacer verläuft nahezu gerade. Die punktierte Linie, die das Profil im spacerlosen Kanal darstellt, ist hingegen stärker gekrümmt, was einem verminderten Stoffmengenanteil des bevorzugt permeierenden Stoffes (hier Wasserdampf) an der Membranoberfläche und damit einer Verminderung der Trennleistung gleich kommt.

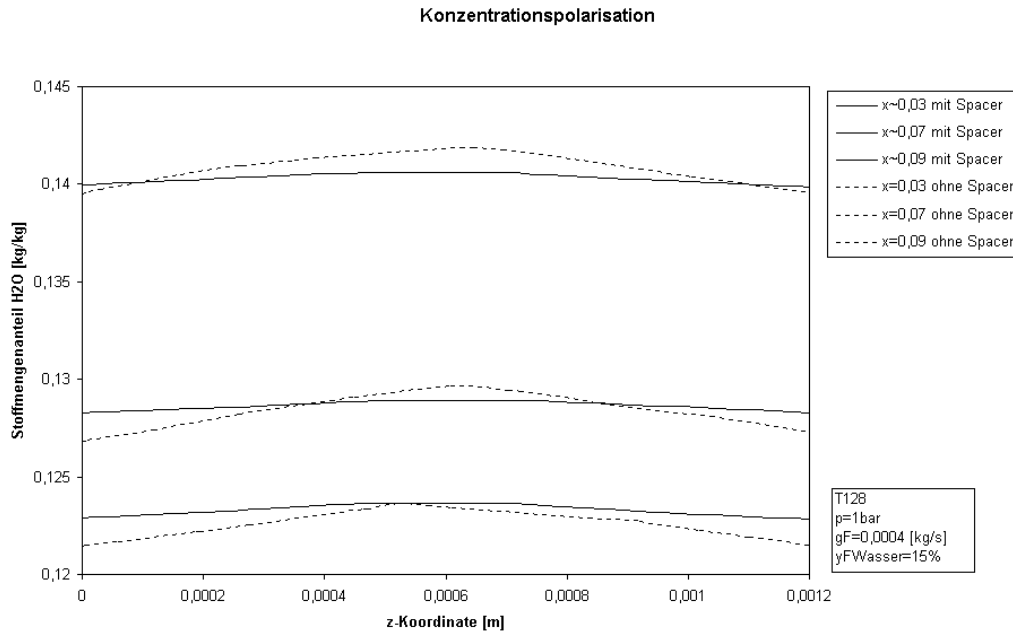


Abb. 4: Stoffmengenanteil über dem Strömungskanal

Abbildung 5 zeigt Bahnlinien („pathlines“) einzelner Fluidteilchen. Da der untersuchte Spacer nicht gewoben sondern extrudiert wurde, bilden sich je nach Schnittebene bevorzugte Flußrichtungen aus, die als eine Art Kreuzstrom für eine gute Durchmischung des Feeds sorgen.

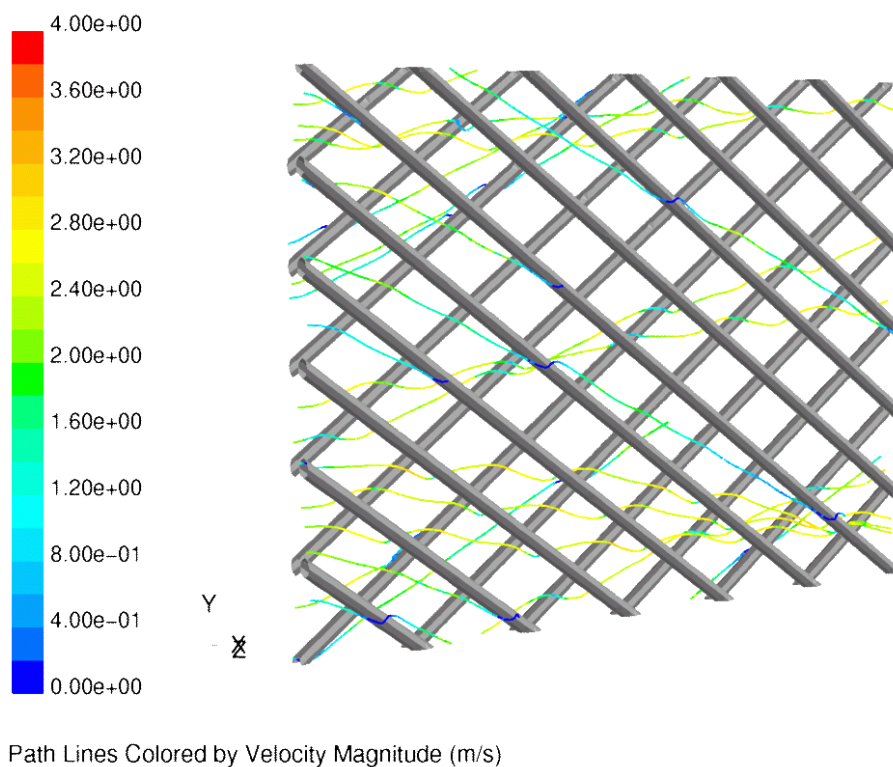


Abb. 5: Bahnlinien mit Geschwindigkeitsprofilen

## 2.5. *Platte*

Bei dieser Modulbauart wird das Ziel einer möglichst gleichmäßigen Membranüberströmung über Strömungskanäle realisiert. In der Simulation wurde ein Vergleich zwischen einer Platte mit Kanälen und einer ohne angestellt. Als Bewertungskriterium für den Vergleich wurde der Stoffübergang basierend auf dem zellulären Partialdruck herangezogen.

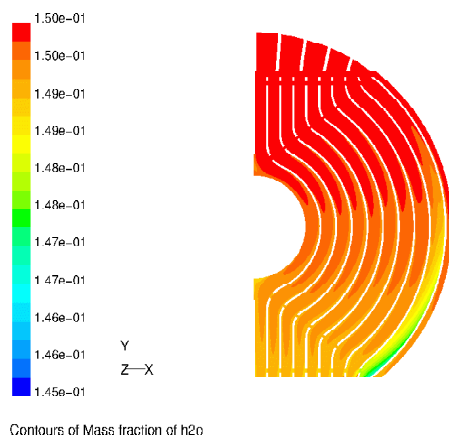


Abb. 6: Strömungsplatte mit Kanälen

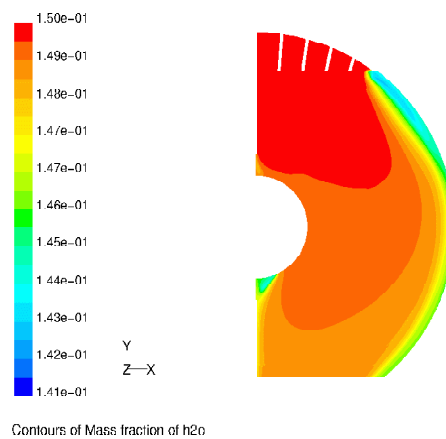


Abb. 7: Strömungsplatte ohne Kanäle

Die Berechnungen zeigten eine Verbesserung der Trennleistung durch die eingebauten Kanäle. Aus Abbildung 6 erkennt man im Vergleich zu Abbildung 7 die verbesserte Verteilung der Feedströmung durch die Kanäle.

## 3. Zusammenfassung

Die Rechnungen stimmen tendenziell gut mit den Messungen überein. Es ist allerdings vor allem bei den Spaceruntersuchungen noch schwierig, aus dem simulierten Spacerausschnitt eine quantitativ richtige Aussage über die Trennleistung des gesamten Moduls zu machen. Es zeigen aber beide sowohl Messungen als auch Rechnungen eine eindeutige Verbesserung des Stoffüberganges durch den Einbau von Spacern.

## 4. Anhang

### 4.1. Zeichen

A	Membranfläche	[m <sup>2</sup> ]
L	Permeabilität	[m <sup>3</sup> N/m <sup>2</sup> .s.Pa]
$\alpha$	Selektivität	[ - ]
gP	Volumenstrom Permeat	[m <sup>3</sup> N/s]
y	Stoffmengenanteil	[ - ]
$\delta$	Geschwindigkeitsgrenzschicht	[m]
$\delta_c$	Konzentrationsgrenzschicht	[m]

Indizes

A, B Komponenten

### 4.2. Literatur

ALPERS, A.: Hochdruckpermeation mit selektiven Polymermembranen für die Separation gasförmiger Gemische, Dissertation, Hannover, 1997.

BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N.: Transport Phenomena, Wiley, New York, 1960.

RAUTENBACH, R., ALBRECHT, R.: Membrane Processes, John Wiley & Sons Ltd., New York, 1989.

FLUENT INC. , User's Guide Volume 1 - 5, 1998.