

UNIVERZA V LJUBLJANI  
FAKULTETA ZA FARMACIJO

TOMAŽ MARK ZOREC

NUMERIČNO MODELIRANJE IN EKSPERIMENTALNO  
VREDNOTENJE AEROSOLA V WURSTERJEVI KOMORI

NUMERICAL MODELING AND EXPERIMENTAL  
CHARACTERIZATION OF NOZZLE SPRAY WITHIN THE  
WURSTER CHAMBER

LJUBLJANA, 2013

Magistrsko nalogo sem opravljal na Fakulteti za farmacijo pod mentorstvom doc. dr. Roka Dreu-a. Asist. Rok Šibanc, mag. farm. je ustvaril računsko mrežo za numerično analizo tokov, sestavil mehaniko naprave 'Marklar 1.0', sprogramiral mikrokontroler naprave 'Marklar 1.0', ter napisal program za hitri zajem signalov po 8-bitnem protokolu, z napravo 'Marklar 1.0'.

*Gilgameš je odprl svoja usta in rekel vzvišeni Ištar:*

*"Kaj naj ti dam, ko te bom jemal?*

*Naj ti dam olje za tvoje telo in za tvojo obleko?*

*Naj ti dam kruha ali kake druge jedi?*

*Verjemi, imam kruh, kakršen gre bogovom,*

*tudi pijačo imam, kakor jo kralji pijo.*

*Toda čemu? Ob cesti naj bo tvoje mesto,*

*...v oguljen plašč bodi oblečena*

*in naj te vzame, komur se poljubi!"*

*- Ep o Gilgamešu, šesta plošča*

## *Zahvala*

*Zahvalil bi se rad kolegi asist. Roku Šibancu za pomoč, potrpežljivost in požrtvovalnost.*

*Brez njega bi to črnilo nikdar ne uzrlo dne.*

## *Izjava*

Izjavljam, da sem magistrsko delo samostojno izdelal pod vodstvom mentorja doc. dr. Roka Dreu-a, mag. farm.

# Vsebina

<b>1</b>	<b>Seznam okrajšav</b>	
<b>2</b>	<b>Uvod</b>	<b>1</b>
2.1	Fluidizacija in tehnologije z vrtnčenjem . . . . .	1
2.1.1	Wursterjeva komora . . . . .	1
2.1.2	Pnevmatsko razprševanje . . . . .	3
2.1.3	Dvokanalne šobe . . . . .	4
2.2	Matematično modeliranje procesa oblaganja pelet v Wursterjevi komori . .	5
2.2.1	Napovedni modeli za velikosti generiranih kapljic . . . . .	6
2.3	Numerična analiza tokov . . . . .	8
2.3.1	Postopek reševanja problema s CFD-orođjem . . . . .	9
2.3.2	Model diskretne faze ( <i>'Discrete-phase model'</i> ) . . . . .	10
2.4	Eksperimentalni pristopi h karakterizaciji aerosolov . . . . .	11
2.4.1	Mikroskopsko določevanje . . . . .	11
2.4.2	Sonda z optično mrežo - ( <i>'Optical array probe'</i> - OAP) . . . . .	11
2.4.3	Laserska dopplerska anemometrija ( <i>'Laser Doppler anemometry'</i> - LDA) . . . . .	12
2.4.4	Fazna Dopplerska interferometrija ( <i>'Phase Doppler interferometry'</i> - PDI) . . . . .	12
2.4.5	Metoda senc ( <i>'Shadowgraph method'</i> ) . . . . .	13
2.4.6	Merjenje hitrosti s sledenjem delcev ( <i>'Particle tracking velocimetry'</i> - PTV) . . . . .	13
2.4.7	Karakterizacija velikosti kapljic s pomočjo laserske ravnine ( <i>'Laser sheet dropletsizing'</i> - LSD) . . . . .	14
2.4.8	Navzkrižno korelacijske tehnike . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Namen in načrt dela</b>	<b>17</b>
<b>4</b>	<b>Eksperimentalno delo</b>	<b>18</b>

---

---

4.1	Oprema . . . . .	18
4.2	CFD-simulacije . . . . .	18
4.2.1	Velikostne porazdelitve kapljic in koti pršenja . . . . .	19
4.2.2	Območje aerosola in hitrosti kapljic . . . . .	23
4.2.3	Obdelava rezultatov simulacij modela diskretne faze . . . . .	24
4.3	Eksperimentalno vrednotenje velikosti kapljic in kotov pršenja . . . . .	25
4.4	Vrednotenje območja pršenja in hitrosti kapljic . . . . .	28
4.4.1	Vrednotenje območja aerosola . . . . .	29
4.4.2	Vrednotenje hitrosti potovanja kapljic . . . . .	30
<b>5</b>	<b>Rezultati z razpravo</b>	<b>36</b>
5.1	Velikost kapljic . . . . .	36
5.1.1	Primerjava velikostnih porazdelitev kapljic: Eksperiment - simulacija	36
5.1.2	Premeri kapljic - simulacija . . . . .	36
5.2	Koti pršenja . . . . .	38
5.3	Hitrost kapljic . . . . .	42
5.3.1	Eksperimentalno vrednotenje hitrosti . . . . .	42
5.3.2	Simulacije in hitrost kapljic . . . . .	47
5.3.3	Primerjava rezultatov: Simulacija - eksperiment . . . . .	47
5.4	Karakterizacija območja aerosola . . . . .	51
5.4.1	Simulacije območja aerosola . . . . .	51
5.4.2	Eksperimentalno vrednotenje območja aerosola . . . . .	53
<b>6</b>	<b>Sklep</b>	<b>57</b>
<b>7</b>	<b>Literatura</b>	<b>59</b>

---

## Povzetek

Tehnologija z vrtnčenjem se pogosto uporablja v operacijah oblaganja delcev v farmacevtski, prehrabeni in kemični industriji. Za razjasnitev narave osnovnih mehanizmov, ki pri teh procesih sodelujejo, se z namenom optimizacije in zagotavljanja kontrole kakovosti, uporabljajo različni numerični in eksperimentalni pristopi. Z numeričnimi pristopi lahko dobimo pomemben vpogled v dogajanje znotraj opazovanega sistema, vendar pa je za napovedovanje obnašanja parametrov med procesom oblaganja uporaben samo validiran numerični model.

Pri raziskovalnem delu smo se osredotočili na aerosol dvokanalne šobe za razprševanje, ki se uporablja pri oblaganju pelet v Wursterjevi komori. S pomočjo numeričnega modeliranja večfaznih tokov smo popisali nekatere od lastnosti aerosola, za katere predvidevamo da igrajo ključne vloge pri oblaganju npr.: porazdelitev velikosti kapljic, hitrost kapljic, oblika aerosola in kot pršenja. Numerični model smo nato poskusili še eksperimentalno validirati. Velikostne porazdelitve kapljic in kote pršenja smo izven komore izmerili z uporabo fotografske tehnike, za vrednotenje hitrosti kapljic in oblike aerosola znotraj Wursterjeve komore pa smo zasnovali in izdelali napravo za meritve signala transmitance med dvema premičnima točkama. Z nizom meritev lokalnih transmitanc smo sestavili matrike opazovanega polja, iz katerih smo generirali slike aerosola. Meritve hitrosti kapljic so temeljile na funkciji navzkrižne korelacije signalov iz dveh vertikalno postavljenih detektorjev v razmaku 5 mm.

Eksperimentalni pristopi, ki smo jih uporabili pri raziskovalnem delu so se izkazali kot perspektivni, vendar pa s stališča ponovljivosti rezultatov še vedno potrebujejo dodatne izboljšave, rezultati numeričnih simulacij in eksperimentalnega dela, pa so se izkazali kot rangovno primerljivi.

**Ključne besede:** Tehnologija zvrtnčenih plasti, numerična analiza tokov, eksperimentalna karakterizacija aerosolov, funkcija navzkrižne korelacije.

---

## Abstract

Fluid-bed technology is often used in particle-coating operations in pharmaceutical, food and chemical industry. With the objective of their optimization and quality-control assurance, different numerical and experimental approaches have been utilized to unravel the nature of the elementary mechanisms taking place in these operations. A numerical approach can provide an important insight into processes occurring during these operations, however, only a validated numerical model can be used to predict the behaviour of parameters during a coating process.

In this work we focus on a nozzle spray, used in pellet coating within the Wurster chamber. An approach for modeling fluid dynamics of multiphase flows was used to numerically characterize some of the sprays characteristics, that probably play an important role in pellet-coating, such as: droplet-size distribution, droplet velocities, spray shape and spray angles; then we tried to validate the model experimentally. To characterize droplet-size distributions and spray angles, a photographic technique was used outside the chamber itself. In order to characterize spray shapes and droplet velocities a device with movable parts, that measures local transmittance signals in designated positions inside the Wurster chamber was devised and constructed. Using local transmittance measurements a series of matrices was compiled, generating spray images for every set of experimental parameters. Velocity measurements were based on the cross-correlation of two transmittance signals from sensors placed vertically with the gap of 5 *mm*.

Used experimental approaches for nozzle spray characterization show promise, but are far from perfect and will, in terms of repeatability require improvements in the future. Our results show a range-based similarity between experimental and numerical results.

**Key words:** Fluid-bed technology, computational fluid dynamics, experimental spray characterization, cross-correlation function.

---

# 1 Seznam okrajšav

CFD - Numerična analiza tokov (*'Computational fluid dynamics'*)

DPM - Model diskretne faze (*'discrete-phase model'*)

DEM - Metoda modeliranja diskretne faze (*'Discrete element method'*)

$Re$  - Reynoldsovo število

$We$  - Webrovo število

$Oh$  - Ohnesorgevo število

$Sk$  - Stokesovo število

$SMD$  - Sauterjev povprečni premer (*'Sauter mean diameter'*)

$C(\tau)$  - Funkcija navzkrižne korelacije (*'Cross-correlation function'*)

$PTV$  - Merjenje hitrosti s sledenjem delcev (*'Particle tracking velocimetry'*)

$LSD$  - Karakterizacija velikosti kapljic s pomočjo laserske ravnine (*'Laser-sheet droplet sizing'*)

$LDA$  - Laserska Dopplerska anemometrija (*'Laser Doppler anemometry'*)

$PDI$  - Fazna Dopplerska interferometrija (*'Phase Doppler interferometry'*)

$OAP$  - Sonda z optično mrežo (*'Optical array probe'*)

---

## 2 Uvod

### 2.1 Fluidizacija in tehnologije z vrtnčenjem

Fluidizacija je proces ohranjanja delcev diskretne faze - trdnine ali kapljevine - suspendiranih v toku kontinuirane faze oz. medija za fluidizacijo - plina; slednjo ponavadi predstavlja zrak. Tehnologije z vrtnčenjem temeljijo na procesu fluidizacije. Glavna značilnost fluidizirane diskretne faze je njeno tekočini podobno obnašanje. Fluidizacijo omogoči kontinuirana faza s prenosom gibalne količine na diskretno fazo. [1, 2]

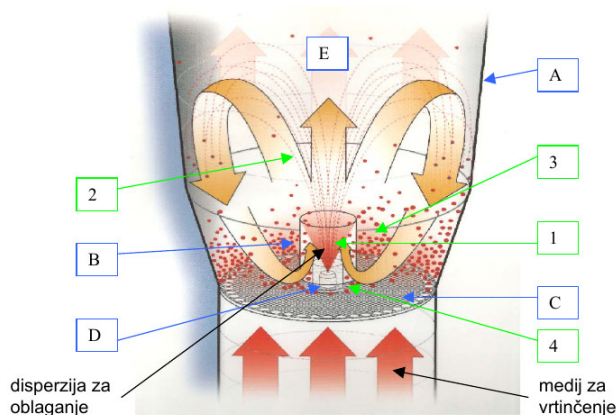
Tehnologija z vrtnčenjem temelji na fluidizaciji diskretne faze, npr. pelet, granularne ali praškaste zmesi v toku zraka in ima široko uporabo v farmacevtski, kemijski in prehrabeni industriji. V farmaciji se tovrstna tehnologija uporablja za granuliranje, sušenje, filmsko oblaganje, oblaganje z suspenzijami, raztopinami, praškastimi delci in direktno izdelavo pelet. V splošnem je tehnologija z vrtnčenjem uporabna tako pri kontinuiranem kakor tudi pri šaržnem načinu proizvodnje, a se zaradi pomankljivosti pri zagotavljanju kakovosti produkta v farmacevtski industriji kontinuiran način praviloma ne uporablja. V glavnem so v uporabi tri izvedbe te tehnologije, in sicer: komora z razprševanjem od spodaj (*'bottom-spray'*), komora z razprševanjem od zgoraj (*'top-spray'*) in rotorska komora (*'tangential-spray'*). [1, 2, 3, 4, 5]

#### 2.1.1 Wursterjeva komora

Wursterjevo komoro shematsko predstavlja slika 1. V primeru sistema Glatt GPCG1 jo sestavlja zunanja posoda oblike prisekanega stožca obrnjena s širšim delom navzgor, na dnu katere je locirana značilno perforirana distribucijska plošča. V središče plošče je postavljena navzgor usmerjena šoba za razprševanje. Na distribucijski plošči so odprtine večje in gostejše v bližini šobe, v področju zunanjega kolobarja je odprtin manj in so manjše, ob robu plošče pa so te spet večje. Nekaj centimetrov nad ploščo v območju kolobarja z večjimi odprtinami je centralno glede na os šobe pritrjen razmejitveni valj. Prostor nad valjem imenujemo ekspanzijski prostor. Znotraj komore delce zadržuje filter ali mreža nameščena na vrhu posode. Pri ustreznem pretoku zraka skozi komoro omogoča razpo-



reditev odprtin na distribucijski plošči dviganje delcev po sredini komore, skozi področje razmejitvenega valja, ti se v ekspanzijskem prostoru dvignejo do najvišje višine in nato vrnejo nazaj med razmejitvenim valjem in steno posode.[1]

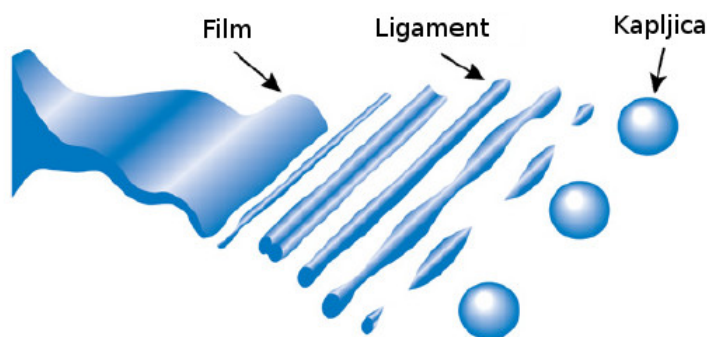


Slika 1: Shematski prikaz Wursterjeve komore. A - komora, B - razmejitveni valj, C - distribucijska plošča, D - šoba, E - ekspanzijski prostor; 1 - področje vertikalnega transporta navzgor, 2 - področje ekspanzijskega dela komore, 3 - področje vertikalnega vračanja delcev na dno komore, 4 - področje horizontalnega transporta delcev (razmik med razmejitvenim valjem in ploščo - "gap"). [1]

Oblaganje trdnih farmacevtskih oblik je ena najstarejših in najpogosteje uporabljenih tehnoloških operacij v farmacevtski industriji. Wursterjeva komora se pogosto, kot omenjeno poprej, uporablja za oblaganje pelet. V osnovi gre pri vseh procesih oblaganja za vnovično izpostavljanje trdnih delcev aerosolu koloidne disperzije ali raztopine s topljencem, s katerim želimo delce obložiti. Vsakič, ko se delec giblje skozi območje aerosola, prejme del disperzije za oblaganje iz aerosola, ki se po njem razprostire, v manjši meri pa se ob trkih prenese tudi na druge delce. Ta del procesa se v Wursterjevi komori vrši znotraj razmejitvenega valja. Drugi del procesa, to je evaporacija, v največji meri poteka, ko delec zapusti območje aerosola, to je območje izven razmejitvenega valja; tu se obloga osuši. [6]

### 2.1.2 Pnevmatško razprševanje

Izraz pnevmatsko razprševanje oz. njegov sinonim, atomizacija, (Slika 2) se nanaša na proces formiranja aerosola na osnovi razbijanja kapljevine s pomočjo toka plina z visoko relativno hitrostjo. Pri tem procesu sta ponavadi v rabi dve tekočini: kapljevina, ki je razprševana in plin, ki jo razpršuje. Do razbitja kapljevine pride zaradi strižnih sil med plinom in površino kapljevine. V grobem se tekočina najprej razbije na vezice oz. ligamente in velike kapljice, te pa se nadalje razbijejo do manjših kapljic. Na proces vplivajo predvsem površinska napetost, gostota in viskoznost kapljevine ter hitrost in gostota plina, pri čemer se najpogosteje uporablja zrak. [7]



Slika 2: Shematski prikaz procesa atomizacije kapljevinskega filma do kapljic, preko predhodnega stanja imenovanega ligament oz. vezica. [7]

Med razprševanjem je ključno zagotavljati čimbolj optimalne strižne pogoje med plinom in površino kapljevine, kar dosežemo z dovolj visoko relativno hitrostjo plina. Če je curek tekočine dovolj tanek, ga plin pri takšnih pogojih lahko predre in uspešno vrši atomizacijo kapljevine, čim pa debelost curka oz. filma kapljevine preseže optimalno debelino, se atomizacija ne vrši več popolnoma, saj večina kapljevine ostane povezana v središču curka, kar se kaže v precej bolj heterogeni velikostni porazdelitvi kapljic v aerosolu z večjim povprečnim premerom. To pride predvsem do izraza kadar želimo vzpostaviti velike kapljevinske pretoke. Takrat se je tovrstnim pojavom moč izogniti z predhodnim generiranjem slojev oz. kapljevinskih filmov (*'prefilming'*). [7]

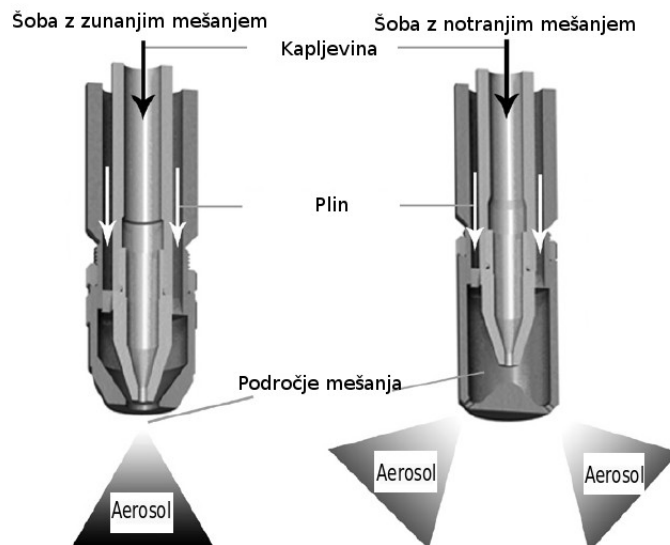
### 2.1.3 Dvokanalne šobe

Pri tehnologiji zvrtničnih plasti atomizacijo kapljevine omogoči šoba. Tip šobe, ki se pri tem uporablja se zaradi dveh kanalov, po katerih se na mesto atomizacije dovajata tekočini, imenuje dvokanalna šoba (dvo-tekočinska šoba - *'two-fluid nozzle'*). [7]

Mnogi avtorji so delovanje dvokanalne šobe označili kot enega najpomembnejših dejavnikov pri procesih granulacije ali oblaganja s tehnologijo zvrtničnih plasti, pri tem so posebej izpostavili distribucijo velikosti kapljic in njihovo povprečno velikost. [7]

Tipi dvokanalnih šob, zanimivi pri tehnologiji z vrtničenjem, padejo v kategorijo 'šob z zračnim sunkom' (*'airblast atomizers'*), pri čemer so najpogosteje uporabljane šobe, ki delujejo po principu *zunanjega mešanja*, kjer pride film kapljevine v stik s plinom na izhodu. Pri nekoliko manj pogostih izvedbah se curek kapljevine vbrižga v curek plina z visoko relativno hitrostjo znotraj šobe (*notranje mešanje*). Šobe z *notranjim* in *zunanjim mešanjem* obstajajo tudi v obliki t.i. šob s predhodnim slojenjem (*'prefilming nozzles'*), pri katerih se pred procesom atomizacije tvori tekočinski film, ki omogoča boljšo kontrolo nad porazdelitvijo velikosti kapljic. Poleg omenjenih tipov šob je vredno izpostaviti še tako-imenovano večfazno tro-kanalno, pri kateri se kapljevina najprej vbrižga v en curek zraka, ta pa nato še v enega. Tovrstna izvedba se v tehnologiji z vrtničenjem ne uporablja pogosto. [7]

Zaradi večjega prenosa energije med plinom in tekočino, šobe z notranjim mešanjem potrebujejo manjši pretok plina za tvorbo kapljic z enakim povprečnim premerom, kot šobe z zunanjim mešanjem. Pri povečevanju pretoka kapljevine se pri šobah z notranjim mešanjem razmerje plin/kapljevina, potrebno za doseganje enakih povprečnih premerov kapljic, bistveno manj spremeni kakor pri šobah z zunanjim mešanjem. Velik problem šob z notranjim mešanjem predstavlja njihova kratka življenjska doba, saj lahko komora, v kateri pride do mešanja tekočin, zelo hitro korodira in tako spremeni hidrodinamske značilnosti aerosola. Medtem ko šobe z zunanjim mešanjem potrebujejo več plina za delovanje, pa je z njimi mogoče atomizirati tudi kapljevine, ki bi drugače izparele v šobi z notranjim mešanjem, poleg tega pa jih odlikuje še daljša življenjska doba. Navadno se pri procesih, ki temeljijo na tehnologiji zvrtničnih plasti, uporabljajo najenostavnejše izvedbe šob z



Slika 3: Shematski prikaz dvokanalne šobe z zunanjim (levo) in notranjim mešanjem (desno). [7]

zunanjim mešanjem, saj omogočajo variiranje velikosti kapljic neodvisno od pretoka kapljevine, ker je možnost da se zamašijo pri njih manjša kakor pri drugih izvedbah in ker omogočajo pršenje v različne smeri. [7]

Na velikost, velikostno porazdelitev, homogenost kapljic v aerosolu in vrednosti kotov pršenja, v glavnem vplivajo tip oz. oblika šobe, pretok tekočine skozi šobo, tlak razprševanja, viskoznost tekočine, njena površinska napetost in njena gostota. Nedvomno ima na velikost kapljic pomemben vpliv hitrost atomizirajočega zraka. Sauterjev povprečni premer kapljic (SMD), je vrednost kvocienta voluma in površine kapljic v aerosolu in se pogosto uporablja za karakterizacijo njihovih velikosti, bo natančneje obravnavan v poglavju 2.4. [7]

## 2.2 Matematično modeliranje procesa oblaganja pelet v Wursterjevi komori

Pomembni parametri, ki karakterizirajo uspešnost procesa oblaganja v Wursterjevi komori so: enakomernost obloge med delci, delež aglomeratov in izkoristek procesa oblaganja. Če so ti parametri izven določenih meja, bo celotna šarža zavržena, zato se zdi vpogled

v dogajanje in mehanizme procesa in mehanizme, ki med njim potekajo, za optimizacijo parametrov uspešnosti oblaganja precej smiselen. Pri je smiselno ugotoviti, kakšni so prispevki, oz. zveze med vhodnimi procesnimi parametri tehnološke operacije oblaganja in parametri uspešnosti. [6]

Eden od pomembnih procesov tekom oblaganja delcev je nastanek aerosola disperzije za oblaganje, ki preko svojih karaktristik vpliva na enakomernost obloge, delež aglomeratov in izkoristek oblaganja. Pri modeliranju aerosolov šob v procesih oblaganja se pogosto poslužujemo analitičnih in empiričnih modelov generiranja kapljic in njihovih trkov z delci. Pri opisovanju teh pojavov se pogosto pojavljajo naslednja brezdimenzijska števila:

- Webrovo število:  $We = \frac{\rho D v^2}{\sigma}$ ,
- Reynoldsovo število:  $Re = \frac{\rho D v}{\mu}$  in
- Ohnesorgevo število:  $Oh = \frac{\mu}{\sqrt{\rho \sigma D}} = \frac{\sqrt{We}}{Re}$ ,

kjer so:  $\rho$  - gostota kapljevine,  $\mu$  - viskoznost kapljevine,  $\sigma$  - površinska napetost kapljevine,  $D$  - karakteristična razdalja (v tem primeru premer kapljice ali odprtine na šobi) in  $\nu$  - karakteristična hitrost. Reynoldsovo število je razmerje inercijskih in viskoznostnih sil in je merilo turbulentnosti, Webrovo število je razmerje inercijskih in površinskih sil na mejnih površinah in se uporablja v analizi večfaznih sistemov (formacija kapljic, mehurčkov), Ohnesorgevo število pa je razmerje korena Webrovega števila z Reynoldsovim številom. Ohnesorgevo število torej obravnava tako prispevke viskoznosti kot inercije in površinskih napetosti med fazami, uporablja pa se pri analizi nalagnja kapljevine na trdne površine in napovedovanju velikosti. [6]

### 2.2.1 Napovedni modeli za velikosti generiranih kapljic

Obstaja več modelov napovedovanja velikosti generiranih kapljic, ki vključujejo različne parametre in so bili dobljeni na podlagi eksperimentov. Enega takih podaja enačba 1, ki opisuje korelacijo za Sauterjev povprečni premer (SMD):

$$SMD = \frac{585 * 10^3}{v_{rel}} \left(\frac{\sigma}{\rho}\right)^{0,5} + 1683 \mu^{0,45} (\sigma \rho)^{-0,225} \left(\frac{1000}{J}\right)^{1,5}, \quad (1)$$

kjer je  $v_{rel}$  - relativna hitrost plina glede na kapljevino na izhodu iz šobe,  $\sigma$  - površinska napetost kapljevine,  $\rho$  - gostota kapljevine,  $\mu$  - viskoznost kapljevine in  $J$  - razmerje volumskih tokov plin/kapljevina.[6]

Drug tak model opiše korelacijo za dejanski povprečni premer kapljic in ga opisuje enačba 2:

$$SMD = \frac{585 * 10^3 \sqrt[3]{\sigma}}{v_{rel} \sqrt{p}} \left(\frac{\sigma}{\rho}\right)^{0,45} + 597 \left(\frac{\mu}{\sqrt{\sigma \rho}}\right)^{0,45} \left(\frac{1000 \dot{Q}_{liq}}{\dot{Q}_{air}}\right)^{1,5}, \quad (2)$$

kjer so:  $p$  - tlak razprševanja,  $\dot{Q}_{liq}$  in  $\dot{Q}_{air}$  pa volumetrična pretoka kapljevine oz. zraka skozi šobo. [6]

Še en tovrsten model, ki za razliko od prejšnjih ni empiričen temveč mehanističen in temelji na Rayleigh-Taylorjevi nestabilnosti, opiše enačba 3:

$$SMD = \frac{0,68 \gamma^{0,5} (\rho \nu)^{1/4} \sigma^{0,5}}{\rho_g^{3/4} [v_g (1 + \sqrt{\rho_g / \rho_l}) - v_l] v_g^{1/4}}, \quad (3)$$

kjer so  $v_{l,g}$  - hitrosti kapljevine in plina,  $\nu$  - kinematična viskoznost,  $\gamma$  - faktor proporcionalnosti in  $\rho_{l,g}$  - gostoti kapljevine in plina. [6]

Izmed do sedaj omenjenih modelov napovedi velikosti kapljice, nobeden ne opiše odvisnosti premera kapljic od velikosti odprtine šobe. Model, dobljen s pomočjo fazne dopplerske anemometrije (ta bo opisana kasneje, v poglavju: 2.4), za ne-Newtonske fluide, pa upošteva tudi ta parameter (enačba 4).

$$SMD/d_1 = C_1 (1 + m_r) \left(\frac{b_g}{D_1}\right)^{1/2} \left(\frac{\rho_1 / \rho_g}{Re_{bg}}\right)^{1/12} \frac{1}{\sqrt{We_{D_1}}} \left[1 + C_2 \left(\frac{D_1}{b_g}\right)^{1/6} \left(\frac{Re_{bg}}{\rho_1 / \rho_g}\right)^{1/12} We_{D_1}^{1/6} Oh^{2/3}\right], \quad (4)$$

kjer sta  $d_1$  in  $D_1$  - premera odprtin na šobi za kapljevino in plin,  $C_{1,2}$  - konstanti modela,  $m_r$  - paramter, ki opiše ti. učinke masne obremenitve 'mass loading effects', v tem primeru je s tem mišljena vsota prispevkov dispergirane kapljevine na turbulentne lastnosti plina na območju kjer poteka atomizacija. V tem modelu se vrednosti brezdimenzijskih števil ( $We$ ,  $Re$  in  $Oh$ ) nanašajo na premere odprtin za kapljevino na šobi. [6]

## 2.3 Numerična analiza tokov

Numerična analiza tokov ('Computational fluid dynamics' - CFD) je veja numerične analize, ki proučuje obnašanje tokov tekočin. V principu gre za to, da kontinuiran tok razdelimo na manjše volumske enote. Tako dobimo računsko mrežo točk, kjer vsaka točka predstavlja eno volumsko enoto. Tok fluida lahko popišemo s kompleksnimi sistemi sklopljenih, nelinearnih parcialnih diferencialnih enačb, ki izhajajo iz zakona o ohranitvi mase, drugega Newtonovega zakona in zakona o ohranitvi energije. Njihovih eksaktnih rešitev, če gre za realen problem, navadno nismo sposobni poiskati analitično, s pojavom računalnikov se je zato uveljavil numerični pristop iskanja njihovih približkov. Tak pristop nam omogoči poenostavitev prej omenjenih sistemov enačb, za katere nato iščemo približke rešitev za vsako volumsko enoto posebej. Programska CFD-orodja olajšajo celoten proces računalniškega modeliranja realnih primerov oz. problemov s področja dinamike tekočin, vse od načrtovanja računske mreže, pa do iskanja približkov rešitve za vsako celico posebej v vsaki časovni enoti. Tovrstna orodja so danes razširjena v avtomobilski, letalski, vesoljski, farmacevtski, kemijski, prehrambeni industriji ter mnogih drugih. [1, 8, 9] CFD-modeliranje nam preko popisa fizike sistema z realnimi enačbami oz. modeli, ki so približki dejanskega stanja, omogoča [1]:

- vpogled v mehanizem delovanja sistema,
- predvidevanje obnašanja sistema,
- predvidevanje dogodkov na obstoječi opremi, pri parametrih, ki nas zanimajo,
- pridobivanje informacij o vplivu procesnih spremenljivk, ki bi jih bilo v realnosti težko pomeriti,
- izvajanje velikega števila poskusov, brez dejanskega eksperimentiranja,
- zvečanje učinkovitosti nekega procesa,
- 'Scale-up' serij iz laboratorijskega do industrijskega nivoja, brez študij s poskusi in napakami.

Kljub uporabnosti modeliranja tokov fluidov s CFD, pa se je predvsem pomembno zavedati omejitev, ki jih prinaša, da smo rezultate zmožni kritično ovrednotiti. Pri tem je smiselno izpostaviti, da se značilnosti večfaznih tokov odražajo na več časovno-krajevni skalah hkrati, mi pa smo zmožni popisati le eno časovno-krajevno domeno naenkrat, ter da pri modeliranju uporabljamo neeksaktne fizikalne enačbe. Ker gre navsezadnje le za *model*, je potrebno rešitve numerične simulacije primerjati z eksperimentalnimi meritvami in potrditi ustreznost izbranih modelov in enačb, ki smo jih uporabili za popis sistema. Za razumevanje, izboljšanje, ter kontrolo tehnološkega procesa lahko na koncu, v industriji, uporabimo le eksperimentalno validiran CFD-model. [1]

### 2.3.1 Postopek reševanja problema s CFD-orodjem

Najprej moramo problem definirati in preučiti, da vemo katere modele uporabiti, kakšne poenostavitve si smemo privoščiti, kakšna mora biti natančnost rezultatov, ter kako hitro te rezultate potrebujemo. [9]

#### Predprocesiranje

Prvi korak reševanja s CFD-orodjem zajema opis geometrije sistema in opredelitev računske domene. Na osnovi geometrije nato generiramo računsko mrežo, ki bo osnova za diskretizacijo enačb, ta mora biti dovolj gosta, da lahko ustrezno popiše gradient polja hitrosti, pritiska, temperature itd. Po drugi strani pa oblika računske mreže vpliva na rešitev simulacije, ter je lahko odločilen faktor, ki določa ali bo rešitev iterativne simulacije dosegla konvergenco ali ne. Dobro računsko mrežo opredeljuje neodvisnost rešitve od manjših spremenb zasnove mreže. Nato se lotimo izbire fizikalnih modelov, ki bodo naš sistem popisali. Tu se moramo zavedati, da na eni strani kompleksnejši model zahteva večjo računsko moč in posledično daljši čas reševanja enačb, po drugi strani pa omogoča večjo točnost rešitve. Določiti moramo še lastnosti snovi, ki v simulaciji nastopajo, pogoje obratovanja, ter robne pogoje (pogoje na mejnih površinah mreže). [1, 9]

#### Procesiranje

V tej stopnji pride do diskretizacije vodilnih enačb po predhodno generirani računski



mreži. Nastali sistemi nelinearnih enačb se rešujejo iterativno. Ker so enačbe sklopljene, simultana rešitev sistema enačb neke lastnosti oz. spremenljivke po celotni domeni ne predstavlja končne rešitve. Do končne rešitve, ki je blizu pravi rešitvi, pridemo s ponavljanjem postopka reševanja in posodabljanjem vrednosti posamezne spremenljivke v vsaki računski celici. Z iterativnim reševanjem enačb prenehamo, ko je razlika predpisanih količin med dvema iteracijama dovolj majhna oz. je dosegla svoj minimum - rešitev je konvergirala. [1]

### **Postprocesiranje**

Postprocesiranje zajema vizualizacijo rezultatov simulacije in postopke, ki pripeljejo do tega, po tem, ko je rešitev že konvergirala. [1, 9]

#### **2.3.2 Model diskretne faze ('Discrete-phase model')**

Pri proučevanju procesov, ki temeljijo na tehnologiji vrtinčnih slojev, se ukvarjamo z večfaznimi sistemi. Za popis teh sistemov se v glavnem uporabljata dva pristopa. [9, 10]

##### ***Euler-Euler* pristop**

Pristop *Euler-Euler* obravnava vsako fazo znotraj volumske celice kot penetrirajoč kontinuum, ker ena faza ne more zavzemati istega volumna kot druga, se tako vpelje koncept volumske frakcije, te pa se obravnavajo kot kontinuirane funkcije časa in prostora katerih vsota je ena. Od tod ime kategorije modelov, ki temeljijo na tem pristopu - '*Volume-of-Fluid models*' - VOF. Ta pristop vključuje modele, ki se uporabljajo za popis sistemov, kjer se volumske frakcije faz uporabijo za popis gibanja večjih mehurčkov, površinske tokove, tokove mešanic tekočina-tekočina. Kompleksnejši modeli, ki izhajajo iz tega pristopa npr. Eulerski model granularne faze, pa so uporabni tudi za sisteme kot so suspenzije delcev in sisteme s fluidizirano fazo. [9]

##### ***Euler-Lagrange* pristop**

Drugi, pristop *Euler-Lagrange*, tretira tekočo ali trdno disperzno fazo kot kontinuum z reševanjem časovno povprečenih Navier-Stokes-ovih enačb, dispergirano fazo pa kot veliko

število diskretnih delcev, mehurčkov ali kapljic, ki si izmenjujejo energijo, gibalno količino in/ali maso s kontinuirano fazo. Za obravnavo sistemov s tem pristopom predpostavimo majhno volumsko frakcijo dispergirane faze. Tako ti modeli niso uporabni za popis sistemov, kjer volumska frakcija dispergirane faze ni bistveno manjša od volumske frakcije kontinuirane faze. Modeli, ki izhajajo iz tega pristopa spadajo v kategorijo modelov diskretne faze '*Discrete-phase models*' - DPM, se uporabljajo za modeliranje npr. sušenja z razprševanjem. [9]

## 2.4 Eksperimentalni pristopi h karakterizaciji aerosolov

Za določanje velikosti in/ali hitrosti kapljic v aerosolih obstaja nabor metod, ki temeljijo na različnih pristopih in so uporabne v različnih okoliščinah glede na danosti posameznega primera. [11]

### 2.4.1 Mikroskopsko določevanje

Eden starejših pristopov temelji na mikroskopskem določanju velikosti kapljic ujetih v viskozne ne-mešajoče kapljevine. Te metode dajo podatek o absolutni velikosti delcev/kapljic, ne pa tudi o hitrosti potovanja kapljic. Velikost kapljice dobljena na osnovi te metode izhaja iz njenega volumna, saj se njena oblika pri prehodu bariere površinske napetosti kapljevine v katero jo ujamemo, po vsej verjetnosti spremeni. Na prvi pogled enostavna izvedba teh pristopov, postane precej kompleksnejša, če želimo meriti kapljice v realnem času in slediti njihovi evoluciji, ter so zahtevne za uporabo v zaprtih sistemih. [11]

### 2.4.2 Sonda z optično mrežo - ('*Optical array probe*' - OAP)

Pomembno vlogo na področju karakterizacije aerosolov je nekoč imela sonda z optično mrežo ('*Optical array probe*' - OAP). Gre za merjenje površine na detektorskem polju, ki jo kapljica zasenči, ko potuje skozi laserski snop in nam tako priskrbi 2D informacijo o njeni velikosti, nekoliko zahtevnejša izvedba metode pa je zmožna priskrbeti tudi podatek o hitrosti kapljice v smeri ene od koordinatnih osi. Merjenje s tovrstnimi napravami je

omejeno pri gostih sistemih z velikim številom kapljic, ter pri sistemih, kjer pričakujemo večje kapljice. Merjenje s takšno sondo lahko označimo kot precej invazivno, karakterizira pa zgolj 'točko'-manjše območje v volumnu aerosola - kamor je bila postavljena. [11]

### 2.4.3 Laserska dopplerska anemometrija (*'Laser Doppler anemometry'* - LDA)

Laserska Dopplerska velocimetrija je neinvazivna in komercialno dostopna tehnologija za merjenje hitrosti kapljic. Tehnologija deluje na principu Dopplerjevega efekta. Dva koherentna snopa laserske svetlobe sta postavljena tako, da se v žariščni točki križata; ko delec prepotuje to območje, povzroči frekvenčni zamik laserske svetlobe, ki je sorazmeren njegovi hitrosti. Pomembna prednost te tehnike je visoka frekvenca vzorčenja in hitra odzivnost, prav tako gre za neinvazivno metodo, ki naj ne bi vplivala na časovno-prostorske lastnosti aerosola. Po drugi strani pa mora biti aerosol oz. optična pot med izvorom in detektorjem dovolj transparentna, da omogoča meritve, njena točnost je močno odvisna od poravnave laserskih žarkov; pomembna pomanjkljivost metode je tudi relativno visoka cena opreme, ki jo zahteva. [11]

### 2.4.4 Fazna Dopplerska interferometrija (*'Phase Doppler interferometry'* - PDI)

Fazna Dopplerska interferometrija je tehnologija, ki omogoči tako merjenje velikosti, kakor tudi hitrosti kapljic. To poteka z osvetljevanjem delcev in merjenjem signalov sipane svetlobe. Tudi tu imamo dva laserska snopa, ki se križata na določenem območju. Delec, ki preleti snop, sipa svetlobo, pri čemer se formirajo interferenčni vzorci. Prostorske frekvence sipanih interferenčnih vzorcev so povezane s premerom delca, časovne pa z njegovo hitrostjo. Ta tehnologija je uporabna za merjenje sferičnih delcev med 0,5 in 3000  $\mu m$ ; tako kot LDV tudi ta tehnologija temelji na točkovnih meritvah; načeloma imata metodi enake prednosti in slabosti. [11]

#### 2.4.5 Metoda senc (*'Shadowgraph method'*)

Metoda senc omogoča relativno enostavno določanje velikostnih porazdelitev delcev v aerosolu. Z bliskavico osvetljujemo delce in s kamero zajemamo njihove sence. Podatek o porazdelitvi dobimo iz posnetkov, po primerni obdelavi. Metoda je uporabna kadar želimo karakterizirati aerosol, v katerem delci prostorsko niso preblizu skupaj. Pri metodi gre predvsem za merjenje površin projekcij delcev, pri čemer igra pomembno vlogo njihova oddaljenost od objektiva, sicer pa so jo uspešno uporabili za karakterizacijo aerosolov z velikostnimi porazdelitvami med 100 in 2000  $\mu\text{m}$ . Uporabnost metode ni odvisna od oblike kapljic, vendar pa se jih med obdelavo podatkov navadno obravnava kot okrogle. Pri tej metodi je problematična karakterizacija gostih aerosolov, prav tako pa zahteva pogoste posege operaterja. [11]

#### 2.4.6 Merjenje hitrosti s sledenjem delcev (*'Particle tracking velocimetry' - PTV*)

PTV je optična, komercialno dostopna, neinvazivna metoda določevanja hitrosti premikajočih-se delcev. Pri tej metodi z lasersko ravnino osvetlimo območje merjenja z dvema, glede na pričakovano hitrost, zelo kratkima pulzoma, v relativno majhni časovni enoti in preko zajema slike delcev opazujemo, kako daleč so ti pripotovali. To metodo so uspešno uporabili na požarnih aerosolih, ki so pokrivalo območje veliko 0,3 x 0,3 m. Metoda je širom uporabljana v številnih izvedbah. V principu je ta metoda uporabna za karakterizacijo karkšnega koli aerosola. Glavni problem predstavljajo optične omejitve leč in objektivov, ter potreba po izredno natančni sinhronizaciji bliskavice. Te omejitve postanejo relevantne, ko želimo karakterizirati hitrosti aerosolov z relativno (glede na občutljivost metode) majhnimi kapljicami. Metoda da informacijo o hitrosti kapljic v smereh dveh koordinatnih osi prostora (tj. v ravnini laserske svetlobe), ne pa tudi v tretji. [11]

### 2.4.7 Karakterizacija velikosti kapljic s pomočjo laserske ravnine ('*Laser sheet dropsizing*' - LSD)

LSD je metoda za določevanje velikosti kapljic. V principu gre za to, da aerosol osvetlimo z lasersko ravnino, ta po eni strani v kapljicah inducira fluorescenco ('*Laser Induced Fluorescence*' - LIF), po drugi pa kapljice svetlobo sipajo ('*Mie Scattering*'). Osnovno enačbo 5, ki poda zvezo med signalom sipane svetlobe  $S$  in premerom kapljice  $D$ , lahko zapišemo kot:

$$S = C * D^n, \quad (5)$$

kjer  $C$  predstavlja eksperimentalno konstanto,  $n$  pa index odvisnosti. S kamero ob laserskem pulzu zajamemo intenziteto sipane svetlobe kakor tudi intenziteto fluorescence v vsaki točki osvetljene ravnine. Za vsako točko ravnine imamo torej dva signala:  $S_F$  - signal intenzitete fluorescence in  $S_S$  - signal sipane svetlobe. Oba signala sta v zvezi s premerom kapljic iz aerosola, ti zvezi v idealnem primeru, torej v primeru: ena kapljica - ena točka, ilustrirata enačbi 6 in 7 :

$$S_F = C_F * D_V^3 \quad (6)$$

$$S_S = C_S * D_S^2 \quad (7)$$

V realnosti ne vemo, koliko kapljic se pri zajemu slike projicira v eno točko na sliki, zato iz ločenih signalov ne moremo sklepati na njihove premere, lahko pa izračunamo razmerje teh signalov 8:

$$\frac{S_F}{S_S} = \frac{C_F * \sum_i D_V^3}{C_S * \sum_i D_S^2} \propto \frac{\sum_i D_V^3}{\sum_i D_S^2} = SMD, \quad (8)$$

pri čemer SMD pomeni povprečni Sauterjev premer kapljic ('Sauter mean diameter'). Tako za vsako točko ravnine dobimo povprečje premerov kapljic, ki so bile vanjo projicirane ob zajetju. Če zajemanje vršimo v več kot eni časovni enoti, oz. če imamo sekvenco slik, lahko premere kapljic povprečimo še po času. Prednost te metode je predvsem relativno enostavna obdelava podatkov. Tudi ta metoda je v glavnem omejena z optično detekcijo; to lahko pride do izraza, kadar želimo karakterizirati širše območje aerosola, leče pona-

vadi izkazujejo ukrivljeni ravnino fokusa, ki na robovih ne sovpa več z ravnino laserske svetlobe, tako v tem primeru morda ne poda zanesljivega podatka o velikostih. Drugi problem se lahko pokaže ob premajhni intenziteti laserskega izvora glede na velikost kapljic/delcev. V kapljicah npr. vode, ob uporabi komercialno dostopnih in cenovno ugodnih izvorov laserske svetlobe, v območju sobnih pogojev, ne induciramo fluorescence, zato se v tem primeru dodatku fluorescentnega barvila ne moremo izogniti, to pa lahko privede do drugih zapletov, kadar upravljamo z zaprtim sistemom. [13]

#### 2.4.8 Navzkrižno korelacijske tehnike

Funkcija navzkrižne korelacije ('*Cross-correlation function*' - *CCF*,  $C(\tau)$ ) je za dva signala definirana kot:

$$C(\tau) = \sum [S_1(t)S_2(t + \tau)], \quad (9)$$

pri čemer  $S_1$  in  $S_2$  označujeta prvi in drugi signal,  $t$  pomeni časovno točko,  $\tau$  pa časovni zamik. Za določanje hitrosti dvofaznih tokov v reaktorjih so lahko uporabne tehnike, ki temeljijo na navzkrižni korelaciji fluktuirajočih delov signalov iz dveh detektorjev, pozicioniranih na različnih višinah. [14]

Za poenostavitev naj bo naš sistem cev, skozi katero potujejo mehurčki le v eni vrsti. Na določenem segmentu cevi sta na eni strani postavljena dva laserska izvora na znani razdalji  $x$  longitudinalno ena od druge, tako da obsevata detektorja na nasprotni strani cevi. Mehurčki potujejo po cevi s hitrostjo  $v$  (ki jo želimo določiti!), ob vsakem prehodu laserskega snopa, tega za moment prekinejo, kar se na detektorjih kaže s skoki napetosti, ki jih merimo. Vsak mehurček je nekoliko drugačen in drugače prekriva detektor, zato bo vsak mehurček dal drugačen signal, prav tako pa je razdalja med vsakima dvema mehurčkoma nekoliko drugačna. Za določitev njihove hitrosti moramo določiti čas, da en mehurček prepotuje od enega detektorja do drugega oz. v tem primeru čas, ki je potreben, da se podoben napetostni skok, ki smo ga zaznali na prvem detektorju pokaže še na drugem. Ta čas lahko izračunamo iterativno, z uporabo navzkrižno korelacijske funkcije, tako da v vsakem koraku povečamo  $\tau$  za določeno vrednost. Kjer je  $\tau$  enak oz.najbolj podoben tranzicijskemu času mehurčka,  $C(\tau)$  doseže maksimum. V realnosti navadno ne obrav-

navamo sistema, kjer zasenči detektor le posamezen mehurček naenkrat, pač pa je vsak signal superpozicija vseh delcev, ki se pojavijo na optični poti, tako ne govorimo direktno o hitrosti potovanja delca, ampak o hitrosti potovanja motnje signala.

Z zgoraj opisanim pristopom je v najenostavnejši izvedbi moč karakterizirati hitrost kapljic le v eni prostorski dimenziji, nekoliko naprednejše tehnike pa to omogočijo tudi za dve. Med prednosti te metode, bi lahko šteli njeno elegantnost in možnost izvajanja precejšnega števila ponovitev v kratkih časovnih intervalih. [14]

Ta, zadnji od opisanih pristopov, je nekoliko bolj splošen od prej opisanih, in ga je pri nekaterih od le-teh v takšni ali drugačni obliki možno tudi implementirati.

### 3 Namen in načrt dela

Širši cilj dela je razumeti mehanizme pojavov in procesov, ki se dogajajo med oblaganjem pelet v Wursterjevi komori. Da bi cilj dosegli, potrebujemo določeno mero vpogleda v sam sistem. Osredotočili se bomo predvsem na karakterizacijo lastnosti aerosola, v katerem poteka nanos obloge. Pomembne karakteristike aerosola so njegova oblika, velikostna porazdelitev kapljic, ter njihove hitrosti.

Obstajajo številni pristopi za karakterizacijo različnih lastnosti aerosolov, vendar imajo pomanjkljivosti kot so: zahtevna eksperimentalna izvedba, relativno visoka cena, invazivnost ipd. Eden od smiselnih pristopov se zdi CFD-modeliranje, ki omogoči vpogled v dogajanje znotraj sistema in hkratno opazovanje velikega števila dejavnikov, vendar pa še vedno ostaja odprto vprašanje kredibilnosti pri uporabljenih modelih.

S pomočjo CFD-modeliranja bomo popisali lastnosti aerosola v Wursterjevi komori, nato pa bomo z lastnimi implementacijami obstoječih pristopov skušali lastnosti aerosola popisati še eksperimentalno. Merili bomo velikostne porazdelitve kapljic, to bomo skušali izvesti s pomočjo fotografske kamere z makro predlečo. Zaradi omejitve ostrenja makro objektivna in transparentnosti merilnega območja bomo vrednotenje porazdelitve velikosti kapljic izvedli izven komore. Na osnovi navzkrižne korelacije signalov transmitanc bomo skušali karakterizirati hitrost kapljic, z meritvami lokalnih transmitanc pa obliko aerosola. Za izvedbo zadnjih dveh poskusov bomo zasnovali napravo za avtomatski pomik optičnega merilnega sistema, ki bo obdajala transparenten razmejitveni valj in jo postavili v Wursterjevo komoro; radi bi namreč sledili procesom, ki se odvijajo v njej.



## 4 Eksperimentalno delo

### 4.1 Oprema

- Fotoaparat: CASIO, Exilim F1 EX, 6 milijonov točk, Japonska.
- Bliskavica: Yongnuo, YN 460-II, Kitajska.
- Zelen svetlobni filter, LEE FILTERS 736, Anglija.
- Makro predleča: Raynox, DCR-150, Japonska.
- Wursterjeva komora, Glatt GPCG 1, Glatt GmbH, Nemčija.
- CFD-program: Fluent 6.3.26, Ansys, ZDA.
- Program za načrtovanje geometrije in računske mreže: Gambit 2.3.16, Ansys, ZDA.
- Marklar - namensko izdelana naprava za karakterizacijo aerosola v Wursterjevi komori.
- Wolfram Mathematica 9.

### 4.2 CFD-simulacije

Simulirali smo razvoj aerosola dvokanalne šobe znotraj razmejitvenega valja, ki se v realnosti nahaja znotraj Wursterjeve komore. Simulacije smo izvajali s pomočjo programskega paketa Fluent 6.3.26 s 3D modelom ene četrtine valja s šobo, izdelanim v programu Gambit 2.3.16.

Model je konstrukt, ki naj bi ponazarjal stanje nekega sistema pri določenih pogojih. Če želimo z uporabo simulacij prikazati oz. preverjati stopnjo upravičenosti nabora fizikalnih modelov, morajo pogoji simulacije čimbolj ponazarjati eksperimentalno (realno) stanje oz., če želimo ugotavljati veljavnost modela s primerjavo določenega parametra (simulacija-eksperiment) smo omejeni s prostostnimi stopnjami eksperimentalne postavitve na eni strani ter simulacije na drugi. Hitrost kapljic pri standardnih operacijskih pogojih in postavitev šobe znotraj Wursterjeve komore sta onemogočala eksperimentalno vrednotenje

velikostnih porazdelitev kapljic, zato smo bili to primorani izvesti izven komore in pri nižjih tlakih razprševanja kot so navadno v uporabi pri oblaganju pelet. Simulacije smo torej izvajali v dveh nizih. V prvem nizu smo simulirali dogajanje pri nižjih tlakih razprševanja in brez toka zraka skozi odprtine distribucijske plošče, te simulacije naj bi torej ponazarjale eksperimentalne pogoje validacijskega eksperimenta. Rezultate teh simulacij smo primerjali z eksperimentalno zajetimi podatki o velikostnih porazdelitvah kapljic in kotih pršenja, ko je bila šoba postavljena izven komore. Rezultate drugega niza smo želeli primerjati z eksperimentalno zajetimi podatki o hitrostih kapljic in območjih aerosola, zajetimi s pomočjo Marklar merilne naprave postavljene v Wursterjevo komoro. Pogoji (tlak razprševanja, hitrost zraka za fluidizacijo) drugega niza simulacij so primerljivi s standardnimi pogoji pri oblaganju.

V nadaljevanju sta opisana oba postopka.

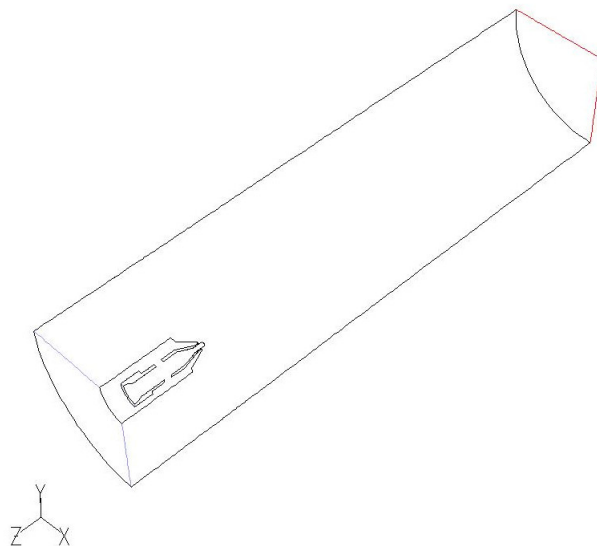
#### 4.2.1 Velikostne porazdelitve kapljic in koti pršenja

Najprej smo simulirali samo pretok zraka (pribl. 2000 iteracij), ko so vrednosti rezidualov padle, pa smo v sistem dodali še izvor diskretne faze (kapljevine) in spet simulirali do ustreznega padca rezidualov, po 2000 iteracijah z izvorom diskretne faze smo za časovni ekvivalent 1 sekunde (1000 iteracij) trenutna stanja vsakega koraka zapisovali v tekstovno datoteko ('default-interior.dpm').

#### Nastavitev simulacije toka zraka

V programskem paketu Fluent smo prebrali mrežo valja s šobo ('soba02\_valj\_inlet.msh'), nastavili velikostno skalo dimenzij, ter preverili ustreznost mreže.

Nastavili smo algoritme za reševanje enačb ('Define→Models→Solver') na 'Steady time' (predpostavka, da rešitev ni funkcija časa), '3D Space' in 'Pressure Based Solver'; pri drugih modulih smo uporabili privzete nastavitve programa. Za modeliranje turbulentnih pojavov ('Define→Models→Viscous: k-epsilon, standard, enhanced wall treatment') smo uporabili standardni 'k-epsilon' model z možnostjo ojačanega tretmaja sten, ki je primeren za modeliranje tokov fluidov z nizkim Reynoldsovim številom (Re). Me-



Slika 4: Shema 1/4 območja znotraj razmejitvenega valja. Tak model smo uporabili v simulacijah.

dij za fludizacijo smo definirali kot mešanico zraka in vode in predvideli, da se obnaša kot idealen nestisljiv plin ('Define→Materials→Material Type→Mixture; Fluent Mixture Materials→carbon-monoxide-air; Mixture Species→Edit→ air, H<sub>2</sub>O'). Da je ta možnost dosegljiva, je potrebno predhodno omogočiti še model komponent in predvideti njihov transport (Define→ Models→Species→ Transport&Reaction→Species Transport). Ostale nastavitve smo pustili na privzetih vrednostih. Vklpili smo model za reševanje energijske enačbe ('Define→ Models→Energy'). Pod obratovalnimi pogoji smo za referenčno točko zunanjega tlaka pripisali točko  $x=0$ ,  $y=0$ ,  $z=-100$ , s tlakom  $101325 \text{ Pa}$  in temperaturo  $298 \text{ K}$ ; vklpili smo tudi gravitacijski model in pospešek nastavili na  $9,8 \text{ m/s}^2$  v nasprotni smeri osi  $z$  (orientacija mreže).

Pod robnimi pogoji ('Define→Boundary Conditions→') smo za površino 'inlet\_main' (spodnja površina valja, vhod za zrak okrog šobe) nastavili način določitve hitrosti ('Velocity Specification Method' na 'Magnitude, Normal to Boundary', referenčni okvir (Reference Frame) na 'Absolute'. Parameter 'Velocity Magnitude' je bil, v seriji simulacij uporabljenih za validacijo premerov kapljic, nastavljen na  $2 \text{ m/s}$ . (červno smo dejanske poskuse izvajali izven komore brez pretoka zraka skozi distribucijsko ploščo, smo bili tukaj primorani definirati nizek pretok zraka zaradi funkcionalnosti simulacije). Metodo popisa

turbulence smo nastavili na 'Intensity and Hydraulic Diameter' s parametrom 'Turbulent intensity' na vrednosti 10 % in hidravličnim premerom 72 mm. Tudi tu smo temperaturo hodnega zraka nastavili na 298 K, masni delež vode pa na 0,005 ('→Thermal; →Species'). Površino 'perioda' smo nastavili na 'Roatational', pri površini 'valj\_zgoraj' smo 'Turbulence Specification Method' nastavili na 'Intensity and Hydraulic Diameter' in 'Backflow Hydraulic Diameter' na 72 mm in 'Backflow Turbulent Intensity' na 10 %. Na površini 'vhod\_soba' smo spreminjali vrednosti tlaka ('Gauge total pressure'). Iz predhodno narejene validacijske datoteke smo ekstrapolirali, kakšen tlak nad šobo dobimo z določeno nastavitvijo tlaka na kontrolni plošči.

Tabela 1: Spremenljivka 'x' označuje tlak na kontrolnem elementu šobe, 'p' pa izmerjeni statični tlak v dovodni cevi pred samo šobo..

x [bar]	0,5	0,75	1	1,25	1,5	2	2,5	3
p [Pa]	14275	26762	41800	59072	78500	118900	161000	201967

Simulacije smo izvajali za tabelirane vrednosti tlaka na šobi (Tabela 1). Parameter 'Supersonic/Initial Gauge Pressure' smo pustili na '0'; 'Direction specification method' smo nastavili na 'Normal to Boundary'. Kot specifikacijsko metodo za turbulentni model smo zopet določili 'Intensity and hydraulic diameter' s hidravličnim premerom 1,5 mm in intenziteto turbulence 10 %. Temperaturo vhodnega zraka smo na tej površini nastavili na 298 K, z masnim deležem vode 0,005. Rigidne površine računske domene smo definirali kot stacionarno steno ('stationary wall') s strižnim pogojem ('shear condition'): 'no slip'. Po definicijah robnih pogojev smo začetne vrednosti tlaka in hitrosti zraka za celotno računsko mrežo nastavili na '0' z ukazom 'Solve→Initialize→Initialize', ostale vrednosti so bile konstante oz. definirane s poprejšnjimi nastavitvami; tip diskretizacije smo za tlak nastavili na 'PRESTO!', za ostale spremenljivke pa na 'First Order Upwind'. Določili smo še prikaz rezidualov, ki smo jih želeli spremljati, ter število računskih korakov in z ukazom 'Solve→Iterate→Iterate' zagnali reševanje enačb za enofazni sistem.

### Nastavitev simulacije toka zraka z diskretno fazo

Po 2000 iteracijah, ko so se reziduali simulacije toka mešanice zraka in vlage ustalili,

smo vklopili model diskretne faze ('Define→Models→DiscretePhase...'), vklopili smo interakcije s kontinuirano fazo (→Interaction with Continuous Phase) in 'Unsteady Particle Tracking'. Model smo nastavili tako, da se je za vsakih 10 iteracij kontinuirane faze izvedla 1 iteracija diskretne faze. Časovni korak vsake iteracije je bil velik 1 ms. Za uporovni zakon za kapljice smo izbrali 'dynamic-drag' oz. model dinamičnega upora, ki sproti določuje uporovni koeфициent, pri čemer upošteva tudi variacije v oblikah kapljic. Vklpili smo obravnavo kolizije kapljic, obravnavo razpada kapljic, pri čemer smo za slednjo uporabili tako imenovani 'Taylor Analogy Breakup Model', ki dobro popiše aerosole z nizkim Webrovim številom. Konstanto razpada 'y0' smo nastavili na 0, razpadne paketke ('Breakup Parcels') pa na 3 (Physical Models:→Droplet collision; →Droplet breakup; →TAB). Definirali smo nov material ('Define→Materials'), tipa 'droplet-particle' in mu iz Fluentove knjižnice določili lastnosti kondenzirane vode.

Definirali smo izvor diskretne faze ('Define→Injections') s koordinatami 0; 0; 50,1 (x;y;z) in orientacijo -1 glede na smer osi z. Tip injektorja smo nastavili na 'air-blast-atomizer', ki se je glede na dokumentacijo programskega paketa Fluent izkazal kot najprimernejši. Število tokovnic delcev ('Number of Particle Streams') smo nastavili na vrednost 2. Za tip delcev smo izbrali 'Droplet', za material smo določili tekočo vodo ('water-liquid'), za evaporirajočo zvrst pa 'h2o' (tudi vodo). Temperaturo vsotpajoče tekočine smo nastavili na 300 K, notranji in zunanji premer odprtine na šobi pa na 0,7999999 in 0,95; polkot pršenja smo nastavili na 20 stopinj. V tem segmentu smo spreminjali masne pretoke ('Flow rate') kot prikazuje tabela 2, vrednosti parametra 'relative velocity' pa so bile določene kot vrednosti hitrosti zraka na poziciji injektorja izračunane v simulaciji enofaznega sistema, njihove vrednosti prikazuje tabela 3. Ostale parametre smo pustili na privzetih vrednostih. [9]

Ko so bile vrednosti nastavljenе, smo zagnali reševanje enačb.

Tabela 2: Vrednosti masnega pretoka kapljevine skozi šobo.

Masni pretok tekočine skozi šobo [g/min]	4	6	8	10	12
Masni pretok v simulaciji injektorja [kg/s]	1,67e-5	2,5e-5	3,33e-5	4,17e-5	5e-5

Tabela 3: Vrednosti relativnih hitrosti zraka (glede na kapljevino), ki izstopa iz šobe pri različnih napajalnih tlakih.

Kompresorski tlak[ <i>bar</i> ]	0,5	0,75	1	1,25
Rel. hitrost v simulaciji injektorja [ <i>m/s</i> ]	105	145	182	217

#### 4.2.2 Območje aerosola in hitrosti kapljic

Da bi ugotovili, kako se obnaša aerosol pri dejanskih pogojih oblaganja v Wursterjevi komori, t.j. v toku medija za fluidizacijo, smo izvedli novo serijo simulacij. Tudi rezultate te serije smo kasneje primerjali z eksperimentalno pridobljenimi podatki. Načeloma smo postopali enako kot prej, le da smo pri tej seriji vstopno površino zraka za fluidizacijo ('inlet\_main') namesto kot 'velocity\_inlet', definirali kot 'mass\_flow\_inlet', kar pomeni, da namesto hitrosti zraka skozi distribucijsko ploščo, definiramo masni pretok in sicer le za razmejitveni valj. Vrednosti masnega pretoka so podane v tabeli 4 :

Tabela 4: Masne pretoki zraka za fluidizacijo skozi notranje odprtine distribucijske plošče, za izbrane nazivne hitrosti zraka. (1)

Nazivna hitrost [ <i>m/s</i> ]	3	4	5
Masni pretok [ <i>kg/s</i> ]	1,5652	2,0898	2,7262

Pri tej seriji smo najprej izvedli simulacije tokov zraka (ki vstopa skozi distribucijsko ploščo) s temperaturo  $40^{\circ}\text{C}$  in hitrostjo  $4\text{ m/s}$  za napajalne tlake 1, 1'5, 2, 2'5 in 3 *bar* oz. tlake na šobi 41800, 78500, 118900, 161000, 201967 *Pa*, nato pa še za vse možne kombinacije temperatur in hitrosti zraka (vrednosti parametrov so navedene v tabeli 5):

Tabela 5: Vrednosti hitrosti in temperature zraka vstopajočega skozi distribucijsko ploščo, za katere so bile izvedene dodatne simulacije.

Kompresorski tlak, (tlak na šobi) [ <i>bar</i> , ( <i>Pa</i> )]	2, (118900)	/	/
Temperatura vhodnega zraka [ $^{\circ}\text{C}$ ]	30	40	50
Hitrost vhodnega zraka [ <i>m/s</i> ]	3	4	5

V tej seriji smo za vsako simulacijo tokov zraka zvedli 2500 iteracij, nato smo kot pri prejšnji seriji v simulirani sistem dodali izvor diskretne faze. Pri nastavitvah injektorja

smo pri tej seriji za parametr 'Relative velocity' prav tako uporabili ekstrapolirane vrednosti hitrosti zraka na izstopu iz injektorja, ki izvirajo iz simulacije tokov zraka; te vrednosti so predstavljene v tabeli 6. Za vsako od variacij simulacij tokov zraka smo še z različnimi pretoki kapljevine skozi šobo, tj. 4, 8 in 12  $g/min$  (dejanske vrednosti parametrov simulacije so za te pretoke tabelirane v tabeli 2), izvedli še nadaljnjih 8000 ponovitev, pri čemer je bila vsaka ponovitev ekvivalentna časovnemu koraku 0,5  $ms$ . Ker so se reziduali rezultatov simulacije v vseh primerih relativno ustalili (pod  $1e-3$ ) v največ 6000 ponovitvah, smo rezultate simulacije diskretne faze beležili za zadnjih 2000 ponovitev.

Tabela 6: Nastavitvene vrednosti relativne hitrosti zraka v simulaciji injektorja za različne napajalne tlake šobe.

Kompresorski tlak [ $bar$ ]	1	1,5	2	2,5	3
Rel. hitrost v sim. injekt. [ $m/s$ ]	174,7854	242,4024	300,1533	350,6897	393,9418

#### 4.2.3 Obdelava rezultatov simulacij modela diskretne faze

Programski paket Fluent 6.3.26, nam kot nadalje uporaben rezultat simulacije modela diskretne faze - DPM, v obliki datoteke vrne veliko tabelo z lastnostmi vseh kontrolnih volumnov: pozicijo v treh koordinatnih oseh, povprečne hitrosti kapljic v treh koordinatnih oseh, povprečne premere kapljic, povprečno temperaturo kapljic, masni pretok diskretne faze skozi kontrolni volumen in čas obstoja diskretne faze v kontrolnem volumnu. Ta datoteka vsebuje podatke o lastnostih kontrolnih volumnov za celoten časovni potek simulacije diskretne faze, ali drugače: vsaka vrednost izračunana s pomočjo teh tabel predstavlja časovno povprečje stanja v izbranem kontrolne volumnu v obdobju 1  $s$ , to je bila namreč časovna domena pri vseh simulacijah diskretne faze, ki smo jih opravili (!). Generirali smo mrežo celic razsežnosti 74 X 404 (74 se nanaša na polmer valja, 404 pa na njegovo višino), ki preko preslikave z aksialno rotacijo predstavlja 2D projekcijo 3D prostora znotraj omejenе četrtine valja, z resolucijo 0,5 X 0,5  $mm$ . V te celice smo nato s pomočjo izračunov na osnovi vrednosti v tabeli vmeščali izračunane podatke o npr. številu kapljic v celici, o njihovih premerih, o njihovih hitrostih, ter o masnem deležu vode v njih. Te mreže so

predstavljale osnovo za nadaljno, bolj klasično obdelavo in vizualizacijo rezultatov. V grobem smo podatke v mreže vmeščali na dva načina, odvisno od namena, s katerim smo mrežo generirali. **Če je bil namen prikazati simulirano stanje sistema, smo v vsako celico vnašali vrednosti določenega parametra kapljic, ki so bile 'enako' radialno oddaljene od osi šobe (radialna 2D projekcija prostora), če pa smo želeli napraviti mrežo za kasnejšo primerjavo z eksperimentom, pa je ta koordinatna os predstavljala oddaljenost celic od osi šobe v presečni 2D projekciji prostora.**

Tabele, iz katerih smo si generirali omenjene mreže, so razsežnosti, ki presegajo zmogljivosti programskih paketov kakor je denimo MS Excel, tako smo bili primorani poseči po drugih pristopih. Kot najbolj optimalna (predvsem časovno gledano), se je izkazala obdelava podatkov z lastnimi programi, napisanimi v jeziku C.

### 4.3 Eksperimentalno vrednotenje velikosti kapljic in kotov pršenja

Velikosti kapljic smo ovrednotili eksperimentalno, s pomočjo digitalnega fotoaparata, makro predleče, bliskavice in različnih svetlobnih filtrov. Slike smo nato obdelali s pomočjo odprtokodnega programa ImageJ oz. Fiji. Te eksperimentalne meritve smo izvajali pri napajalnih tlakih 0'5, 0'75 in 1 *bar*. Te poskuse smo izvajali, ko šoba NI bila postavljena znotraj Wursterjeve komore.

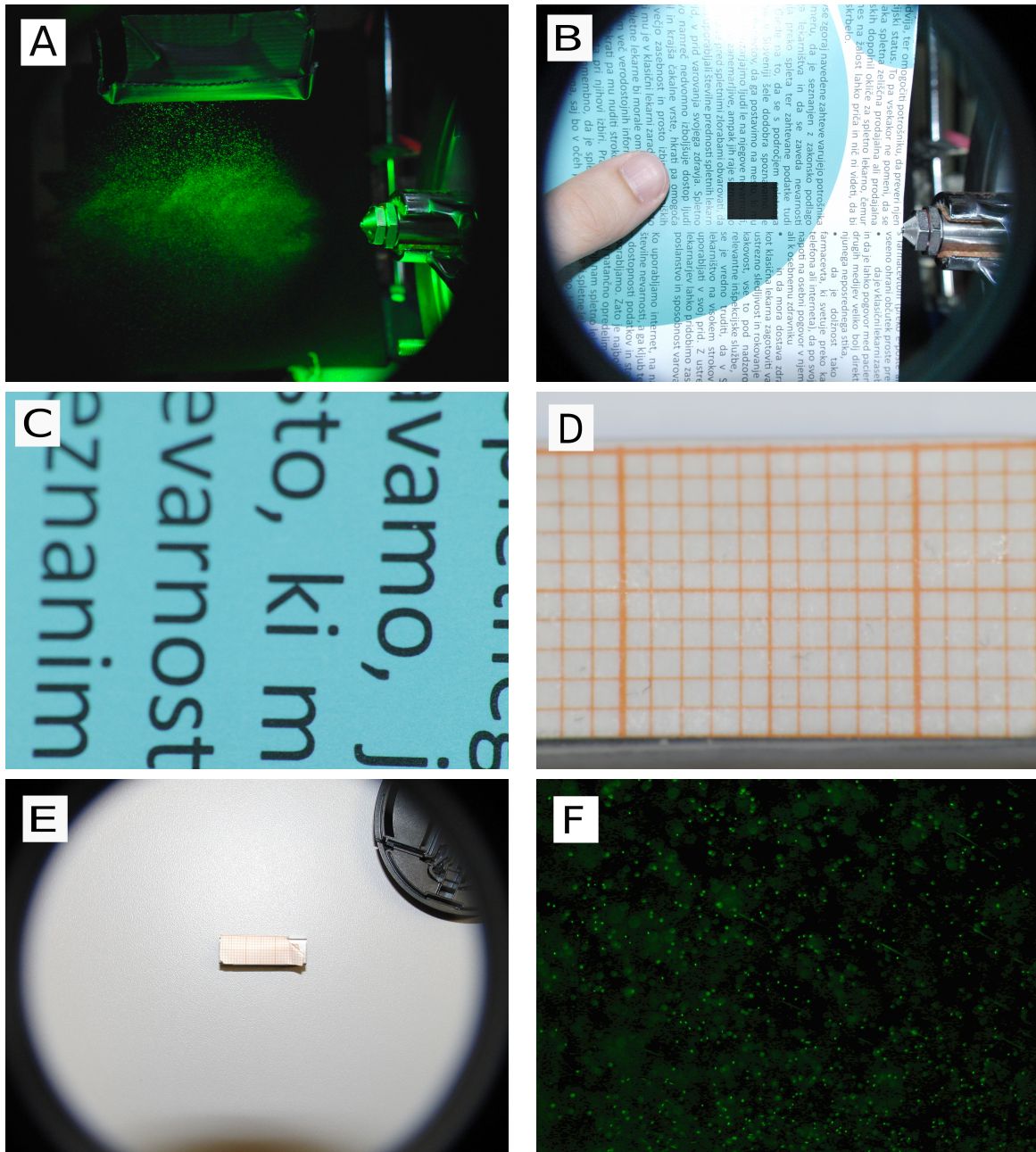
Želeli smo izmeriti velikosti kapljic za dva različna pretoka tekočine (4 in 12 *g/min*). Uporabili smo bliskavico z zelenim filtrom, makro predlečo, ISO nastavitvev na fotografskem aparatu je bila nastavljena na 200, odprtost zaslonke je znašala F 4.6, čas zaslonke pa je bil 1/800 *s*. Kapljice smo osvetljevali od zgoraj z bliskavico skozi zelen filter, saj so se na ta način fotografije pokazale kot najbolj ciljno-ustrezne. Fotografski aparat smo postavili na stojalo, tako da je bilo tekom eksperimenta na konstantni razdalji, horizontalno gledano, od šobe, tako da je bila ravnina ostrenja v osrednjem delu aerosola. To smo določili kot prikazujeta sliki 5 B in C. Točkovno skalo smo za obe povečavi (0.04X pri merjenju kotov in 0.4X pri merjenju velikosti kapljic) umerili s pomočjo milimetrskega papirja na



osnovi slik 5 D in E. Umeritve in merjenje smo izvedli s pomočjo programa ImageJ, primer fotografije s katere smo merili velikosti kapljic kaže slika 5 F. Za vsako nastavitev tlaka in pretoka mobilne faze smo posneli 10 fotografij, na katerih je bilo najprej potrebno nekoliko izostriti robove kapljic in na nek način 'odfiltrirati' tiste, ki so preveč odstopale od goriščne ravnine in so bile preveč 'zabrisane'. To smo dosegli s primernimi modifikacijami kontrasta, ki smo jih izvajali na vseh slikah iz serije na popolnoma enak način. Porazdelitve premerov kapljic smo računali iz njihove površine, izmerjene na slikah, ter jih primerjali z porazdelitvami velikosti, izračunanimi iz zabeleženih vrednosti 1-sekundnega časovnega povprečja simulacij, za korespondenčne vrednosti tlakov in pretokov. Za primerjavo velikostnih porazdelitev z rezultati simulacije smo iz prej opisanih tabel, (poglavje 4.2.3) izluščili informacijo o velikosti kapljic in njihovem številu za vsak kontrolni volumen, ki je glede na podatke o svoji poziciji sovpadel z območjem s katerega smo eksperimentalno zajemali slike, ter na osnovi tega generirali histograme.

Za merjenje kotov smo uporabili fotografije, katere primer kaže slika 5 A. V programskem orodju Fiji, smo izmerili kot z vrhom na konici šobe, enim krakom kot podaljškom vzdolžne osi šobe in drugim krakom usmerjenim proti področju kjer še vidimo zadnje kapljice, ki jih še lahko pripišemo enotnemu aerosolu. Te meritve so sila nezanesljive za dejansko karakterizacijo kotov, dajo pa nam občutek v katerem območju smo. Merjenje kotov smo izvajali na 5-ih zaporednih posnetkih aerosola, za vsako nastavitev pršenja.

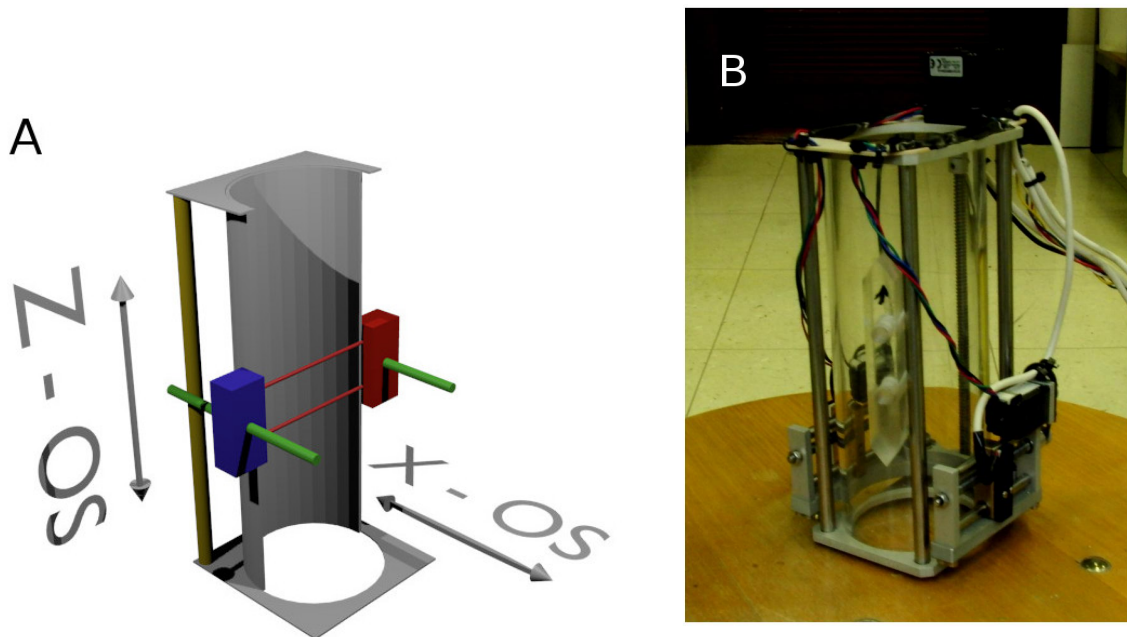
Za primerjavo vrednosti kotov pršenja z rezultati simulacije smo uporabili prej opisan postopek obdelave in predstavitve rezultatov (glej poglavje 4.2.3). V tem primeru smo v vsako celico mreže, ki je predstavljala presečno 2D projekcijo, nanašali masni delež vode. Na tak način smo dobili aproksimacijo, ki bi jo lahko primerjali z fotografijo. V programskem okolju Wolfram Mathematica smo nato, na osnovi kotnih funkcij, izračunali kotov pršenja.



Slika 5: A - Eksperimentalna postavitve šobe. B, C - Določanje območja zajetega za ovrednotenje velikosti kapljic. Zatamnjeni pravokotnik na sliki B in slika C prikazujeta področje od koder smo slike zajemali. D, E - Umeritev z milimetrskim papirjem. F - Primer slike za vrednotenje velikosti kapljic.

#### 4.4 Vrednotenje območja pršenja in hitrosti kapljic

Za te serije eksperimentalnih meritev smo izdelali in uporabili napravo poimenovano 'Marklar 1.0'. Napravo smo izdelali tako, da od zunaj obda razmejitveni valj; na eni strani ima blok, v katerem sta dva laserska izvora, postavljena eden nad drugim v razmaku 5 mm, na nasprotni strani pa je na enak način postavljen blok z dvema foto-diodama. Oba bloka sta premična v osi valja (os z) in v eni od glede na valj prečnih osi (os x). Shema naprave in valja prikazujeta sliki 6 A in B. Premike obeh blokov lahko nadziramo neodvisno



Slika 6: A - 3D shematski prikaz naprave 'Marklar'. Modri kvader predstavlja detektorski blok, rdeči pa laserski blok. Bloka se premikata v osi x po zelenih 'vodilih' in po osi z po rumenih 'vodilih'. Tanki, rdeči črti med blokoma predstavljata laserska snopa. B - Fotografija naprave 'Marklar 1.0', nameščene na razmejitveni valj.

z osebnim računalnikom, s pomočjo programske opreme, 'Marklar Control Module 2.6', ki smo jo napisali sami. S programsko opremo nadzorujemo tudi beleženje signalov, ter kalibracijo pozicije senzorja, ki je potrebna zaradi loma laserskih žarkov na optični poti. Pri premikanju omenjenih blokov po x osi, prihaja, predvsem zaradi tolerance jermena, ki povezuje koračni motor s trapezno gredjo, ki blok premika, do določenih zamikov. Tudi to kompenziramo s pomočjo programske opreme.

Vsak izmerjeni signal je funkcija superpozicije vseh motenj na poti laserskega žarka, dobljeni rezultati so torej 2D projekcija 3D prostora, notranjost razmejitvenega valja smo tako razčlenili v 2D mrežo točk z izhodiščem na vrhu šobe.

Protokol snemanja sestavlja:

- Preden namestimo razmejitveni valj je smiselno pomeriti zgoraj omenjene 'tolerance' jermena, ki jih moramo kompenzirati pri spremembah smeri, in s tem zagotoviti čimvečjo točnost pri nastavitvah pozicij merilnega sklopa.
- Iskanje maksimuma transmitance, približno v sredinski poziciji valja. Ta del lahko izvajamo iterativno dokler maksimuma dejansko ne najdemo. - S tem korakom zagotovimo da sta laserski in senzorski blok v središčnih pozicijah poravnana.
- Iskanje ničelne pozicije (konica šobe). (Za tem je smiselno ponoviti prejšnji korak.)
- Kalibracija zamikov pozicij detektorskega bloka glede na laserski blok, do katerih prihaja zaradi loma laserskih žarkov, v ne-središčnih pozicijah.
- Snemanje ozadja - posnetek stanja, ko šoba ne obratuje. Ta korak je bistven pri karakterizaciji območja aerosola, pri meritvah hitrosti pa služi bolj ali manj le kot del validacije.
- Snemanje - šoba obratuje. Laserski in detektorski blok se premikata po naprej določenih koordinatah. V vsaki merilni točki izvedeta 1 sekundno meritev signala pri visoki frekvenci vzorčenja.

#### 4.4.1 Vrednotenje območja aerosola

Naprava 'Marklar' nam pri merjenju območja aerosola vrača vsoto in vsoto kvadratov ene sekunde točkovnih meritev signala pri frekvenci zajemanja 1.400.000 /s. Vrednosti signala smo beležili v vsaki točki merilne mreže, ter na osnovi aritmetičnih sredin 1 sekundnih signalov generirali sliko časovnih povprečij transmitance. Aritmetične sredine in standardne deviacije smo iz podatkov o vsoti in vsoti kvadratov časovnih točk računali z enačbama:  $\bar{x} = \frac{\sum x_n}{n}$  in  $\sigma(x) = \sqrt{\frac{\sum x_n^2}{n} - \bar{x}^2}$ ; pri čemer je vrednost  $n$  znašala 1.400.000. V

vsako celico mreže smo nato nanesli vrednost izračunane aritmetične sredine. V tej fazi so nam vrednosti standardnih deviacij služile bolj kot pomoč in usmeritev pri kritičnem vrenotenju kvalitete posnetka.

Vsako vrednost mreži časovnih povprečij transmitanc, ki je bila rezultat vrednotenja poskusa, smo delili z mrežo slepega poskusa (ko aerosol ni bil prisoten oz., ko šoba ni delovala). Čeprav so se v večini točk standardni odmiki transmitanc gibali v območju med 1 in 10 % vrednosti povprečja signala, smo opazili, da iz slik zaradi različnih artefaktov še vedno nismo sposobni dobiti zanesljive ideje o območju aerosola. Artefakte smo poskusili kompenzirati z uporabo različnih filtrov - algoritmov za obdelavo slike. V vseh primerih slik smo v okolju Wolfram Mathematica z najprej z uporabo algoritma *Median Filter*, vsaki celici priredili vrednost mediane celic v oddaljenosti dveh celic, nato pa tem vrednostim z uporabo algoritma *Wiener Filter*, ob predpostavki normalne porazdelitve povprečenih vrednosti odfiltrirali šum slike. Enaki algoritmi se uporabljajo pri obdelavi vesoljskih fotografij.

Po takšni obdelavi dajo slike boljši občutek o obliki aerosola, a so še vedno daleč od idelanih, s katerimi bi bilo možno izvesti dejansko karakterizacijo območja aerosola. Pri teh meritvah je bila ponovljivost precej problematična, k temu verjetno v precejšnji meri prispevajo sistematske napake v nastavitvah koordinat merilnih točk in napake na valju in pleksi steklu.

#### 4.4.2 Vrednotenje hitrosti potovanja kapljic

Pri merjenju vertikalne komponente hitrosti smo na dveh višinah hkrati zajemali po eno sekundo signala transmitance na obeh senzorjih. Tudi tu je bila frekvenca zajemanja 1.400.000 /s. Oba signala smo najprej normalizirali glede na lastno aritmetično sredino in standardno deviacijo. Na osnovi normaliziranih signalov smo nato s pomočjo navzkrižne korelacije ugotavljali časovni zamik med njima. Pri tem smo oba signala razdelili na krajše časovne odseke (10 000 točkovnih meritev), in za vsakega od njih izračunali hitrost. Na tak način smo iz ene meritve dobili vzorec hitrosti motnje. Razdalja med senzorjema znaša 5 mm.

Smiselno je še pripomniti da na tak način ne merimo dejanske vertikalne komponente hitrosti kapljic, pač pa hitrost potovanja motnje, ki jo te povzročijo ko prepotujejo optično pot laserskega žarka. Prav tako gre za povprečne meritve: vsaka meritev je časovno povprečena, za njen izračun namreč uporabimo del signala (konkretno znaša časovni interval vsake meritve nekoliko več kot  $7\text{ ms}$ ; prav tako pa k vrednosti hitrosti prispevajo vse kapljice, ki v tem obdobju prepotujejo optično pot laserja, tako je v meritev v nekem smislu tudi prostorsko povprečena).

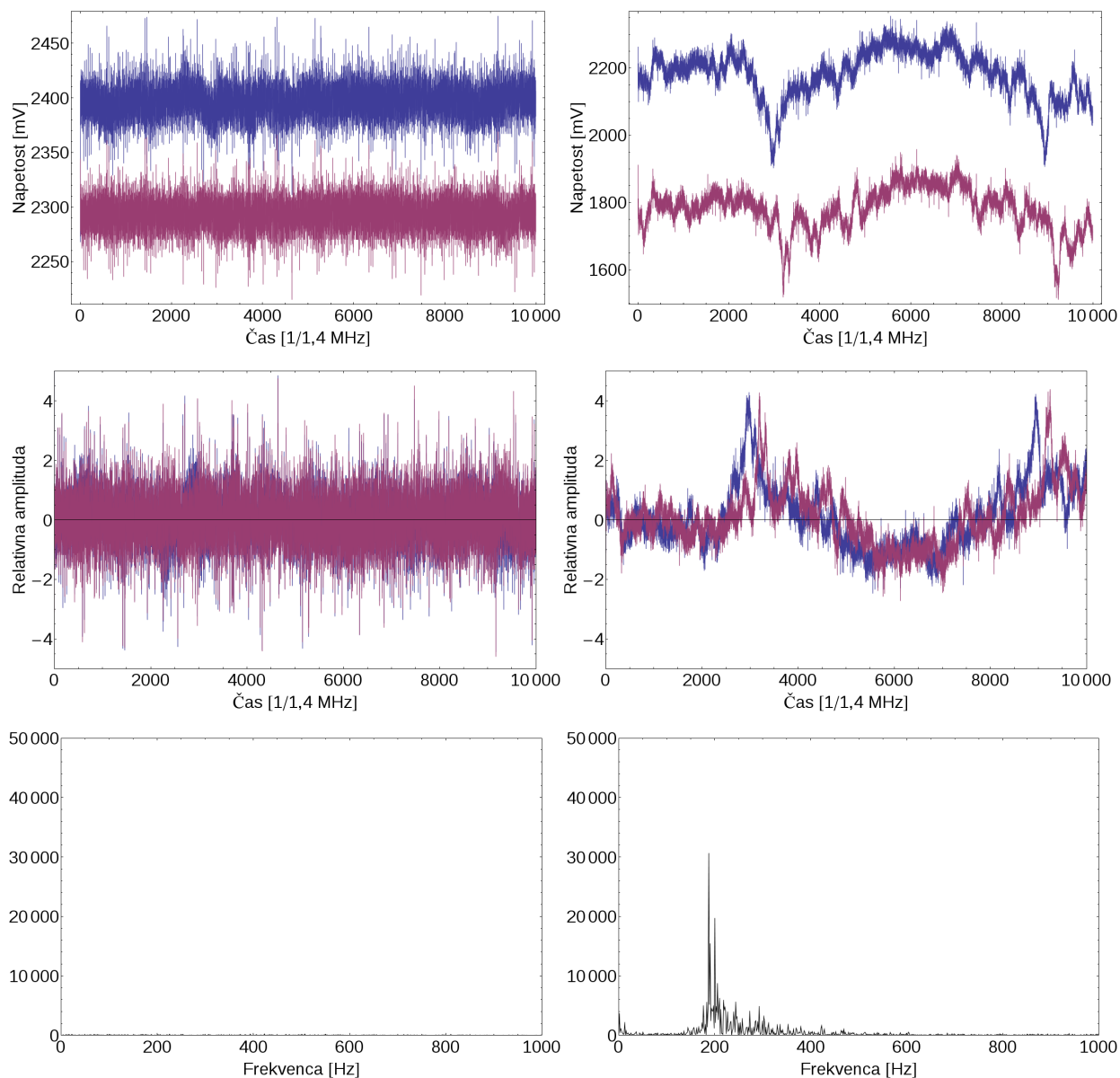
### Validacija pristopa in izvedbe

Za začetek pokažimo, da smo s svojim pristopom in izvedbo sposobni slediti motnjam v signalu transmitanc, ter da te motnje v našem sistemu povzroči aerosol. V komori, smo ob vklopljeni napravi Glatt GPCG 1, zajemali signale na različnih pozicijah. Na sliki 7 vidimo frekvenčna spektra signalov z ene pozicije vertikalno nad šobo, ko je bila ta izklopljena in ko je bila vklopljena. Iz slike 8 je razvidno, da se lastnosti signalov spremenijo, ko bodisi spremenimo pogoje obratovanja komore, bodisi se oddaljujemo od izvora kapljic. Do sem smo v neki meri ilustrirali odzivnost naprave 'Marklar', s stališča zajemanja signalov. Od tu dalje lahko pričnemo razpravljati o hitrosti.

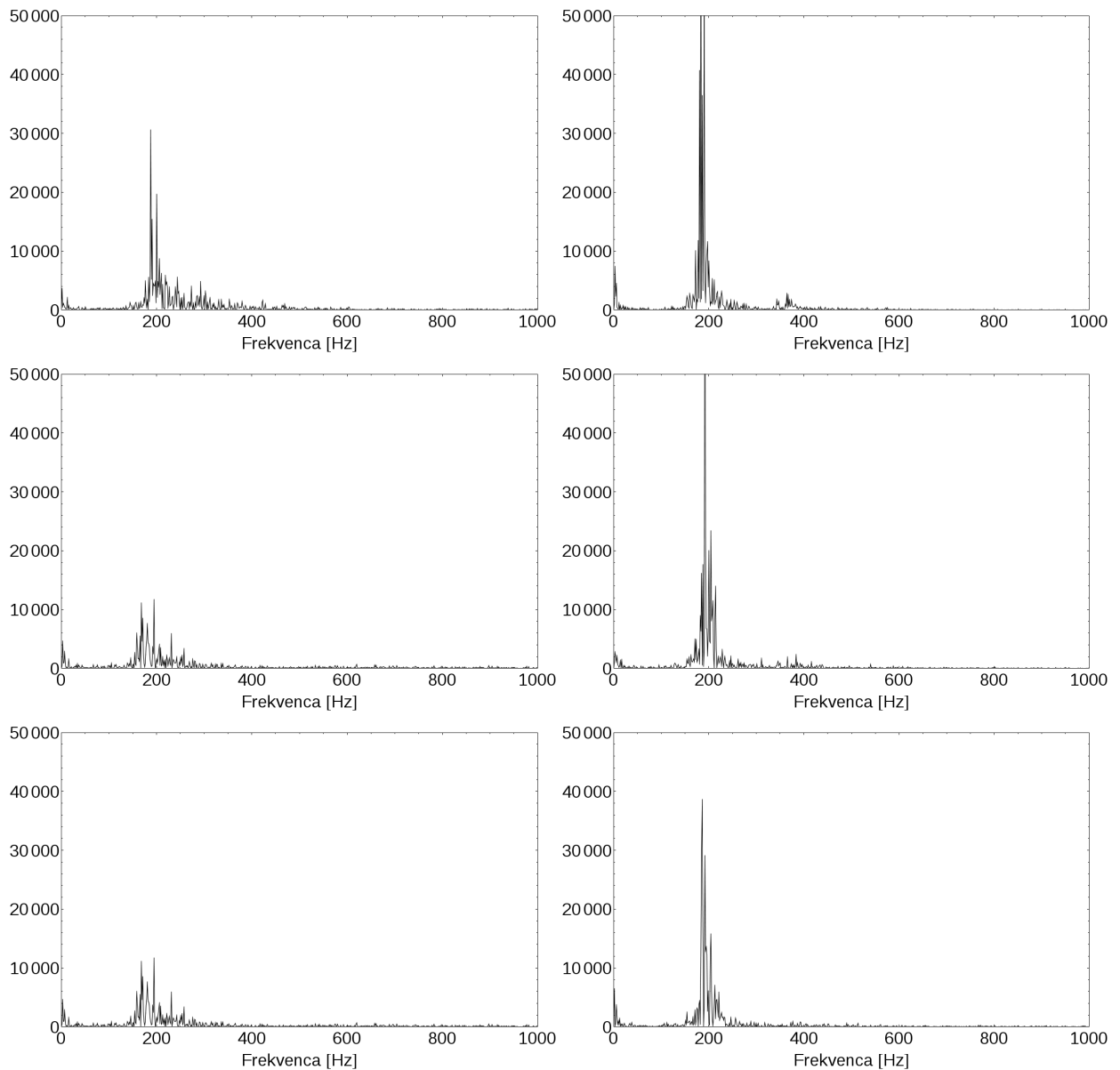
Slika 13 (Poglavje o rezultatih) kaže odvisnost izmerjene vertikalne komponente hitrosti od oddaljenosti od ravnine šobe pri različnih treh tlakih.

Ugotovili smo, da smo pri meritvah hitrosti omejeni do približno višine  $70\text{ mm}$  nad šobo in do nekje  $1\text{ cm}$  lateralno od osi šobe. Meritve izven tega območja ne dajo več zanesljivih rezultatov. Razlogov za to je več, npr.:

- Bolj ko se pomikamo lateralno od šobe, manjši bo prispevek vertikalne komponente hitrosti, tako lahko hitro pademo v območja pod pragom občutljivosti.
- Bolje ko se pomikamo lateralno od šobe, manj so trajektorije kapljic vertikalne, tako na obeh senzorjih morda ne bomo zaznali motnje, ki jo je povzročila ista populacija kapljic.
- Bolj ko se oddaljujemo od šobe v njeni osi, manjše bodo amplitude signalov oz. nižje bo razmerje signal/šum (to je med drugim razvidno tudi iz slike 8). Na neki



Slika 7: Zgoraj vidimo 7 ms izseka dveh parov neobdelanih signalov, v sredini vidimo normalizaciji teh parov signalov (vsakemu smo odšteli lastno aritmetično sredino in ga delili z lastno standardno deviacijo), spodaj pa še njuna spektra moči. Oba para signalov sta bila zajeta med obratovanjem komore 40 mm nad konico šobe. Slike na levi prikazujejo stanje, ko šoba ne obratuje, na desni pa, ko ta obratuje. Frekvenca fluktuacije, ki jo opazimo na sliki zgoraj-desno sovpade z vrhom, ki ga vidimo na frekvenčnem spektru (spodaj desno).



Slika 8: Spektri s pozicij 70, 55 in 40 mm nad šobo (od zgoraj navzdol). Signali so bili zajeti ob obratovanju šobe, levo pri napajalnem tlaku 2 bara in desno pri tlaku 3 bare, hitrost zraka za fluidizacijo je bila 4 m/s, njegova temperatura pa 40 °C.



točki bomo padli pod občutljivostni prag.

Rezultate smo obdelovali s pomočjo programskega paketa 'Wolfram Mathematica 9', katerega za nas pomembna karakteristika v tem primeru je, da se vsi sezname, kamor vnašamo serije vrednosti začnejo z indeksom 1. Ko pri meritvi pademo izven območja občutljivosti, bomo z omenjenim programskim paketom izračunali nenavadno visoko vrednost hitrosti. To je posledica prej omenjene lastnosti, saj najdemo maksimum navzkrižno-korelacijske funkcije signalov, ki si nista izrazito podobna ali ne izkazujejo izrazitega časovnega zamika, eden glede na drugega, že v prvi točki omenjene funkcije. Če je naš izračunani časovni zamik 1, razdalja med senzorjema 5 mm in frekvenca vzorčenja 1 400 000 Hz, bo vrednost hitrosti znašala 7000 m/s. Omenjene rezultate je treba torej obravnavati z določeno mero zdravega razuma, če izračunamo hitrost kapljic v npr. nadzvočnem območju, lahko rezultat mirno označimo kot 'outlier' in ga pri nadaljni analizi ne upoštevamo. Signale smo torej zajemali v točkah oddaljenih 0, 2, 4 in 6 mm lateralno od osi šobe, na območju med 5 in 70 mm vertikalno nad šobo, s korakom 5 mm (če bi vzeli manjši korak, bi dvakrat vzorčili isto območje, saj znaša razdalja med senzorjema ravno 5 mm). Izračunane vrednosti vertikalne komponente hitrosti v odvisnosti od vertikalne oddaljenosti od konice šobe smo za izbrano laterlano koordinato prilegali na enačbo:

$$v = ae^{-bx} + c, \quad (10)$$

ki po obliki sovpada s kvadratnim zakonom upora. To nam lahko služi za validacijo točnosti metode. Glede na serijo poskusov z zajemanjem signalov v točkah oddaljenih od konice šobe 10, 35, 60 in 110 mm, s prečnimi oddaljenostmi od šobine vzdolžne osi 0, 3, 8 in 13 mm, nam je na osnovi analize varianc in 'Tukeyevega' testa, s 95 % zanesljivosti uspelo pokazati ponovljivost rezultatov le v nekaterih točkah, oddaljenih od šobe manj kot 8 mm prečno glede na njeno vzdolžno os in manj kot 35 mm glede na oddaljenost od konice šobe v njeni vzdolžni osi. Ponovljivost je tudi tu zaenkrat še slaba, vzrok temu verjetno tiči v tem da je merilni sistem iz dveh komponent (izvor, detektor), ter da sta oba premična, ob premikih, pa zaenkrat lahko prihaja do minimalnih zamikov, ki lahko ob

večkratnih meritvah celotnega območja zrastejo v večje, ter vplivajo na kakovost rezultata.

## 5 Rezultati z razpravo

V vseh primerih eksperimentalnih meritev je bila razprševana tekočina/raztopina destilirana voda, plin za atomizacijo je bil zrak in plin za fluidizacijo prav tako.

### 5.1 Velikost kapljic

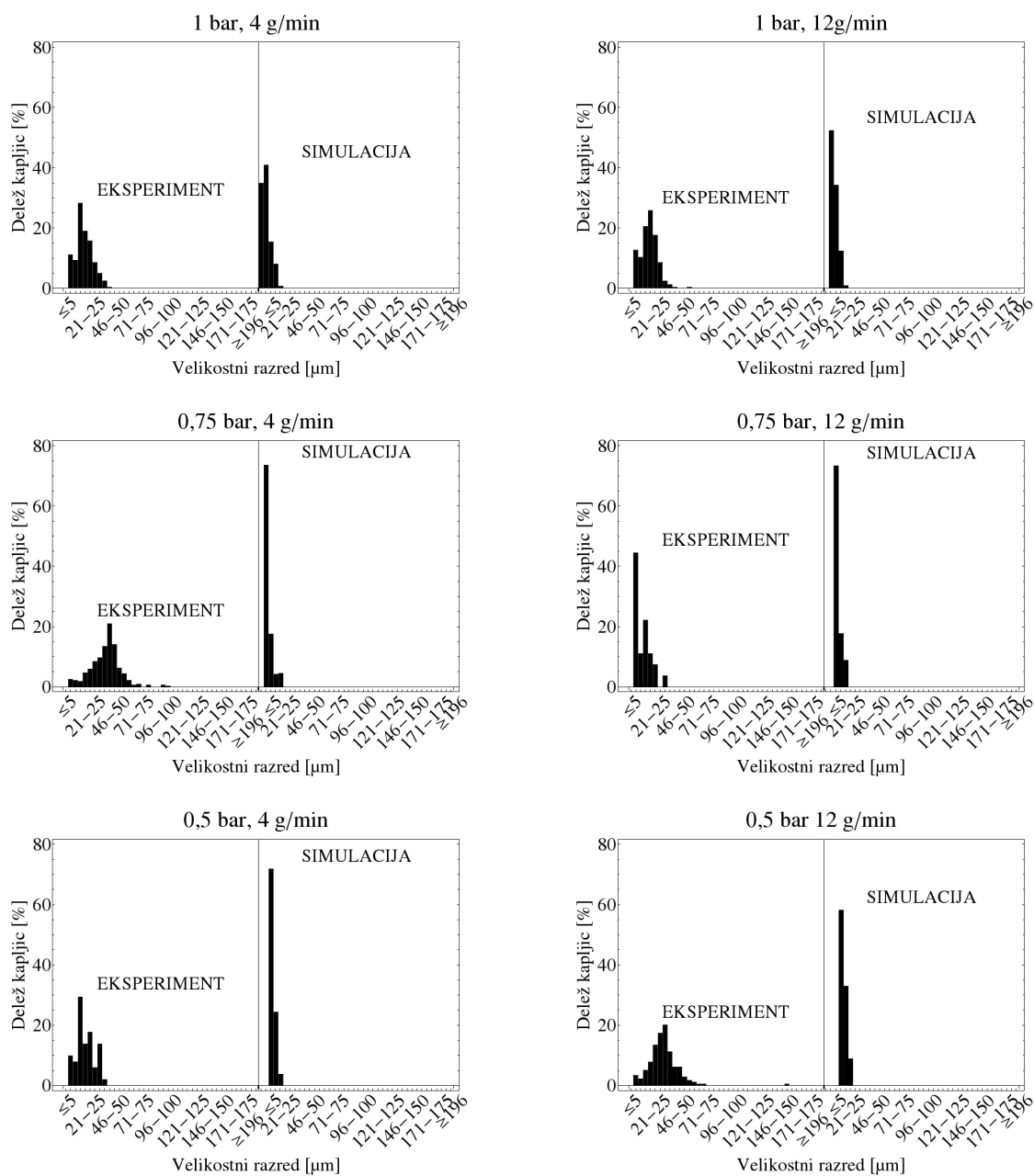
#### 5.1.1 Primerjava velikostnih porazdelitev kapljic: Eksperiment - simulacija

V poglavju o 4.2.1 je predstavljena serija simulacij, izvedenih z namenom primerjave velikostnih porazdelitev kapljic in kotov, pri pogojih, kjer smo jih sposobni izmeriti tudi eksperimentalno. Velikostne porazdelitve premerov kapljic dobljene iz rezultatov te serije simulacij, so v tem podpoglavju primerjane z eksperimentalno izmerjenimi. Rezultate te primerjave povzame slika 9.

Iz slike ugotovimo, da tako vrednosti dobljene iz simulacij, kakor tudi eksperimentalno ugotovljene vrednosti padejo v isti velikostni razred, nikakor pa si niso enake. Predvsem je očitno, da pri manjših tlakih in manjših pretokih izračunamo iz rezultatov simulacije manjše peme kapljic, kot jih kažejo eksperimenti. Rezultat eksperimenta, prikazan na sliki 9, spodaj levo, je glede na zmanjšanje tlaka razprševanja nepričakovan. Poleg tega, da je velikostni razred kapljic simulacije in eksperimenta podoben, je pomembno tudi, da se rezultati simulacije odzivajo na spremembe v tlaku razprševanja tako, da se distribucija pomika v desno. Pri eksperimentu imamo namreč opravka z realno šobo, pri kateri se lahko zaradi obrabe distribucija velikosti kapljic razširi, numerični pristop pa takšnih anomalij ne popiše.

#### 5.1.2 Premeri kapljic - simulacija

Iz rezultatov simulacije aerosola znotraj ene četrtine razmejitvenega valja pri pogojih obratovanja naprave Glatt GPCG 1, smo računali vrednosti premerov kapljic glede na njihovo oddaljenost od šobe in jih skušali prikazati na čimbolj strnjen, a še vseeno razumljiv način. Kot najbolj razumljiv in integralen način prikaza so se izkazale kar slike generirane iz mrež omenjenih v poglavju o obdelavi rezultatov simulacij, obarvanih glede na vrednost

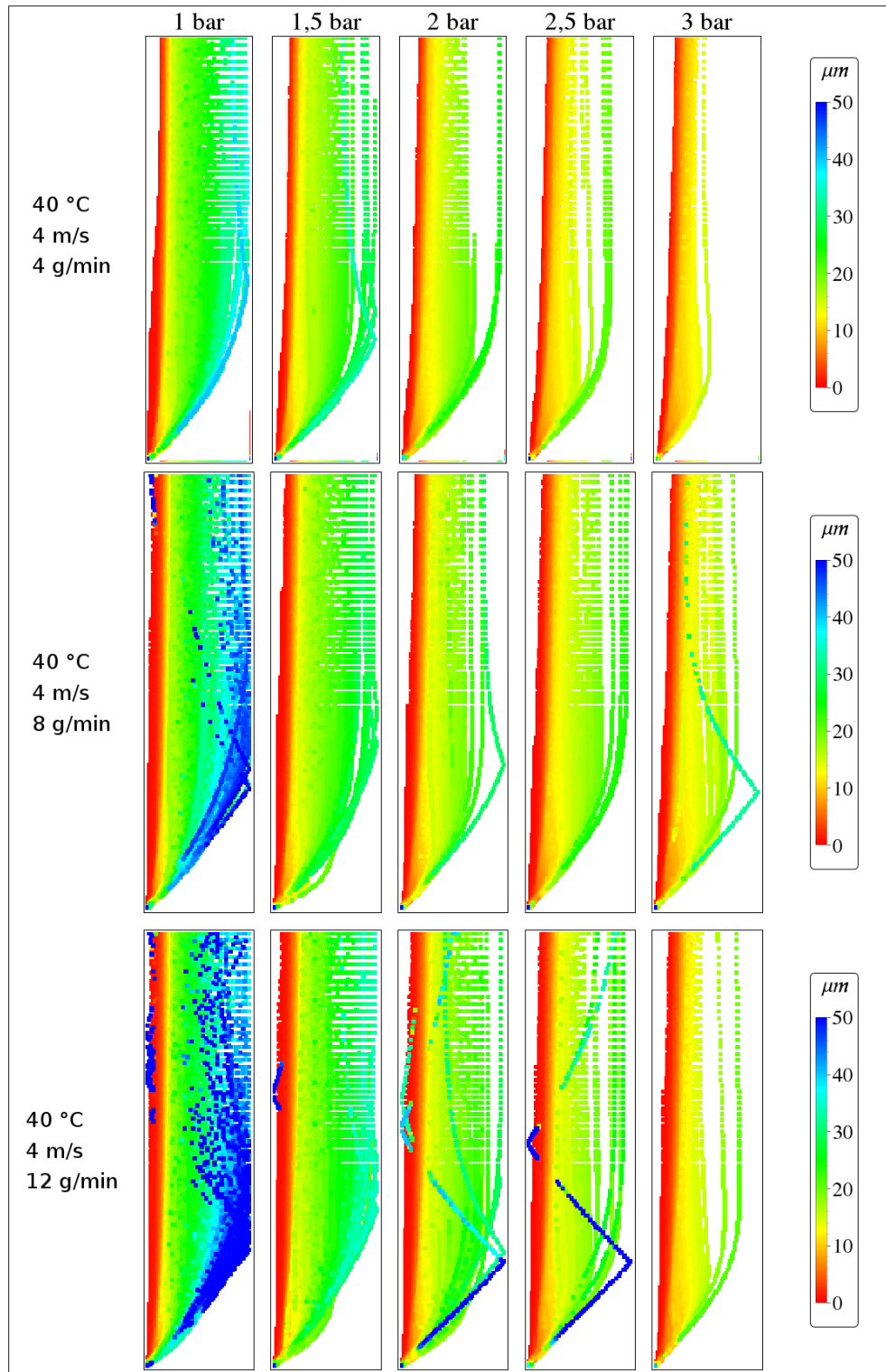


Slika 9: Histogrami eksperimentalno določenih velikostnih porazdelitev premerov kapljic, in velikostnih porazdelitev premerov kapljic izračunanih iz rezultatov simulacij, pri treh različnih napajalnih tlakih šobe in dveh različnih pretokih razprševanja tekočine.

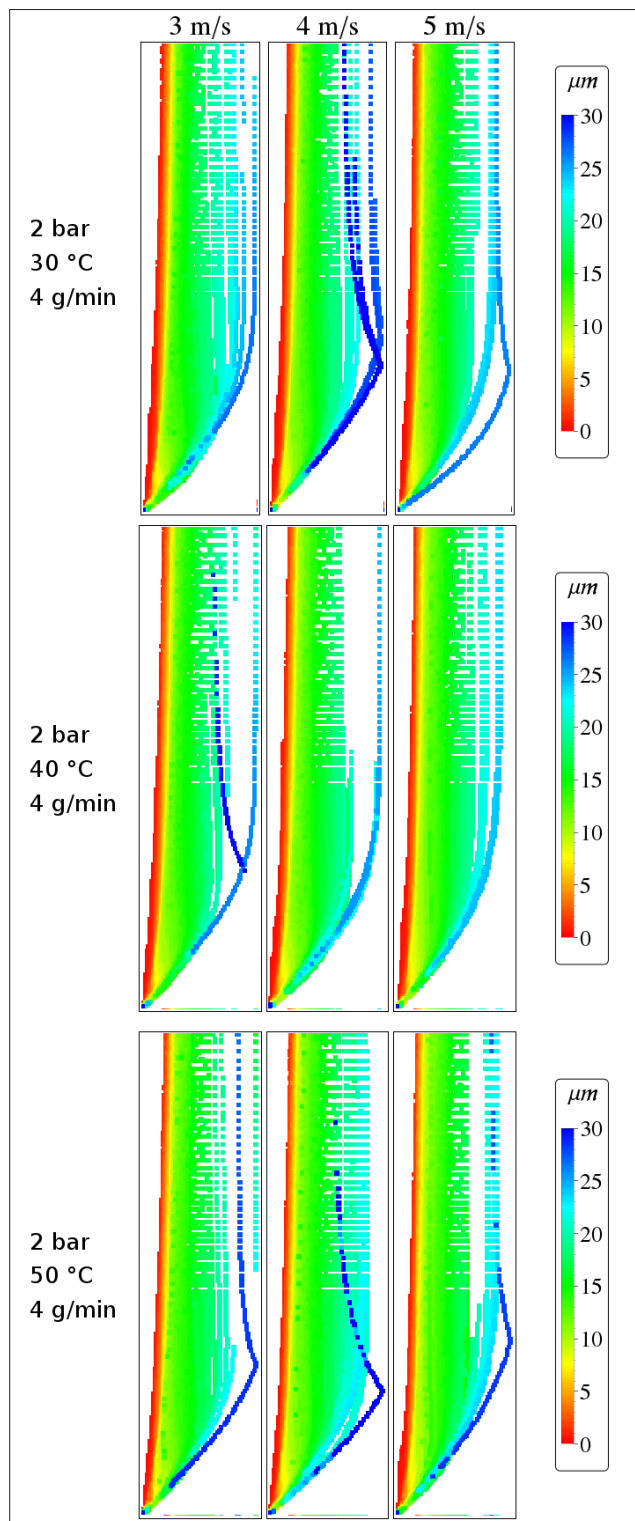
velikosti kapljice v vsaki celici. Tako prikazani rezultati so zbrani v slikah 10 in 11. Iz omenjenih slik lahko razberemo, da ima na velikost kapljic največji vpliv tlak razprševanja, ter da so premeri kapljic največji na robovih aerosola. Iz slik so vidna območja aerosola kjer prevladuje določena velikost dlcev, vidi pa se tudi anomalijo, ki je posledica napake pri upoštevanju modela tipa stene valja. To anomalijo vidimo kot odboj delcev od stranskih mejnih površin valja.

## 5.2 Koti pršenja

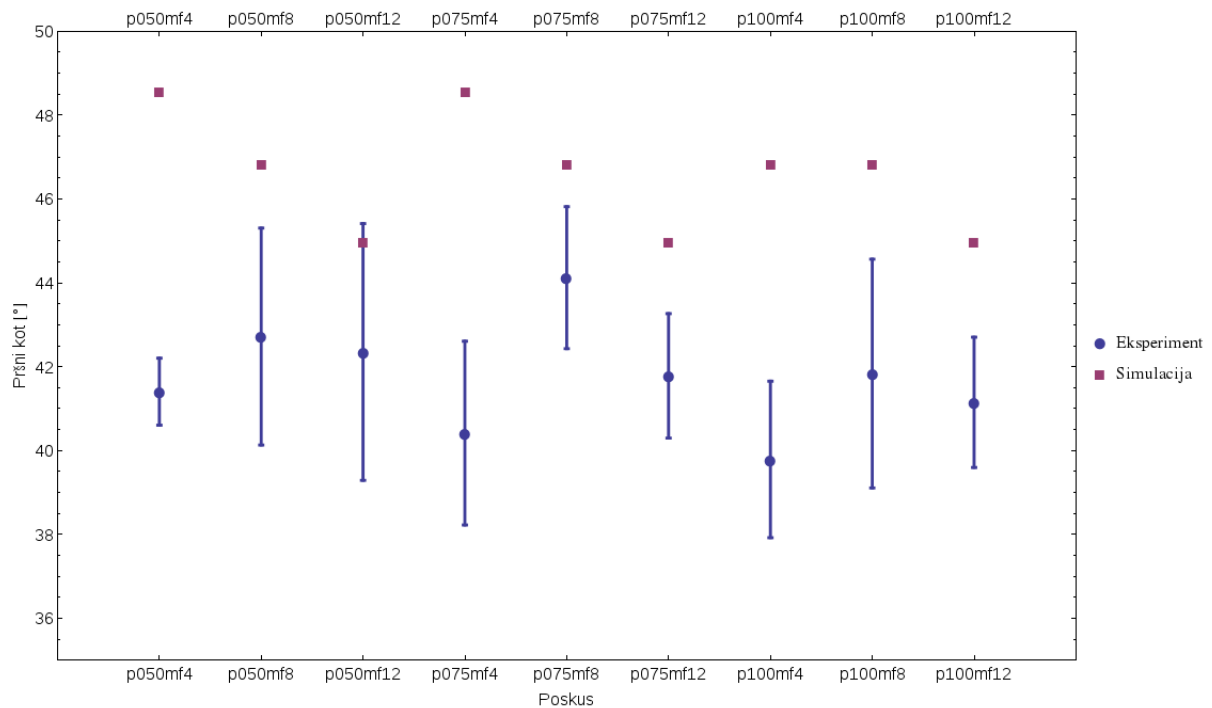
Kote smo vrednotili pri enakih pogojih kot pri meritvah velikosti kapljic, Rezultati pa so zbrani na sliki 12. Kot je že bilo omenjeno v poglavju o eksperimentalnem delu, so eksperimentalne meritve kotov, kot smo jih izvajali sila nezanesljive in nenatančne, dajo pa nam občutek o ustreznosti simulacije. Na sliki, vidimo rezultate simulacij, ki bi jim lahko celo pripisali linearno zvezo (kot v odvisnosti od pretoka razprševane tekočine), eksperimentalne meritve, pa tega spoznanja ne podprejo. Prav tako, je tukaj pomembno opozoriti, da so spoznanja tega podpoglavja omejena izključno na pogoje pri katerih, smo izvajali bodisi eksperimentalne meritve, bodisi simulacije. V poglavju o karakterizaciji območja aerosola namreč opazimo ravno nasprotno povezanost med vrednostmi pršnih kotov in pretoki razprševane tekočine. Zdi se mi pomembno izpostaviti, da s postopkom merjenja kotov, opisanim v poglavju 4, ne merimo celotnega kota pršenja, temveč njegov polkot.



Slika 10: Radialne 2D projekcije aerosola, za hitrost zraka za fluidizacijo 4 m/s in temperaturo 40 °C, pri različnih tlakih razprševanja in različnih pretokih razprševane tekočine. Vrednosti premerov kapljic so ilustrirane z barvno skalo.



Slika 11: Radialne 2D projekcije aerosola, pri tlaku napajalnem tlaku 2 *bar*, pretoku razprševane tekočine 4 *g/min*, pri različnih temperaturah in hitrostih vpihanega zrak za fluidizacijo. Vrednosti premerov kapljic so ilustrirane z barvno skalo.



Slika 12: Zbrani rezultati vrednosti kotov pršenja iz simulacij, in tistih dobljenih na podlagi eksperimentalne karakterizacije. V oznakah poskusov ("pXXXmfX"), "p" pomeni tlak v barih kejer so številke nanizane po vzorcu X,XX; "mf" pa hitrost pretoka razprševane tekočine.

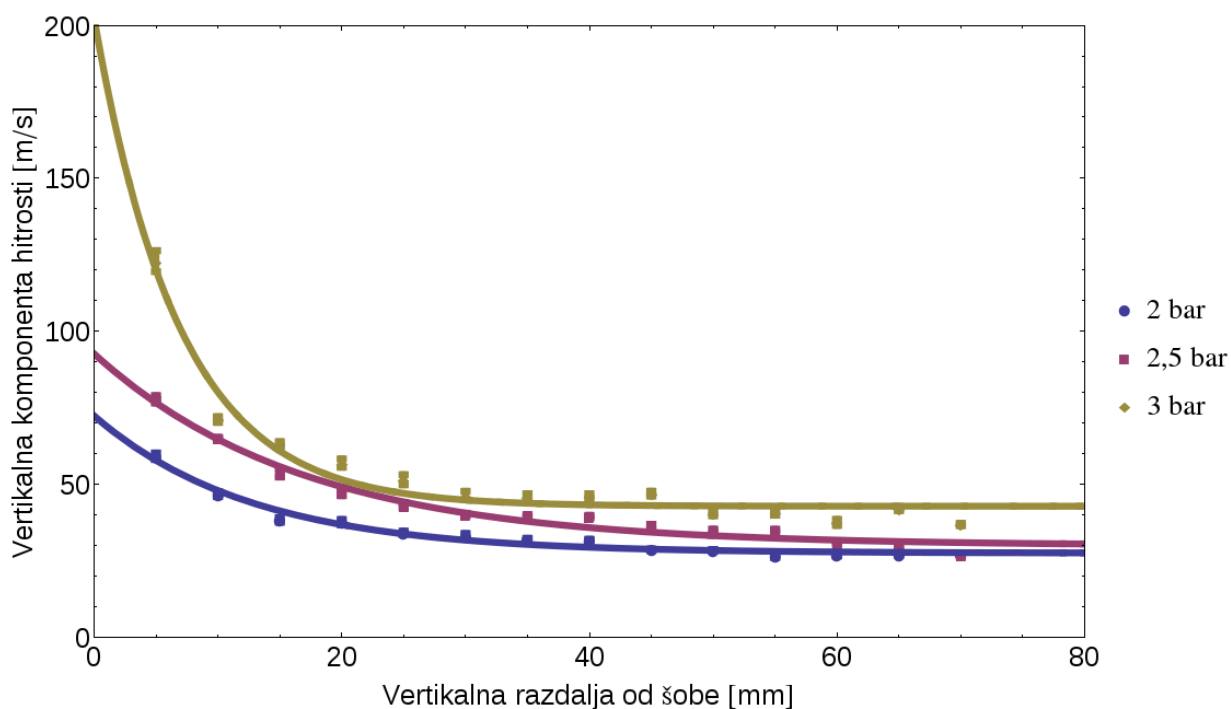


## 5.3 Hitrost kapljic

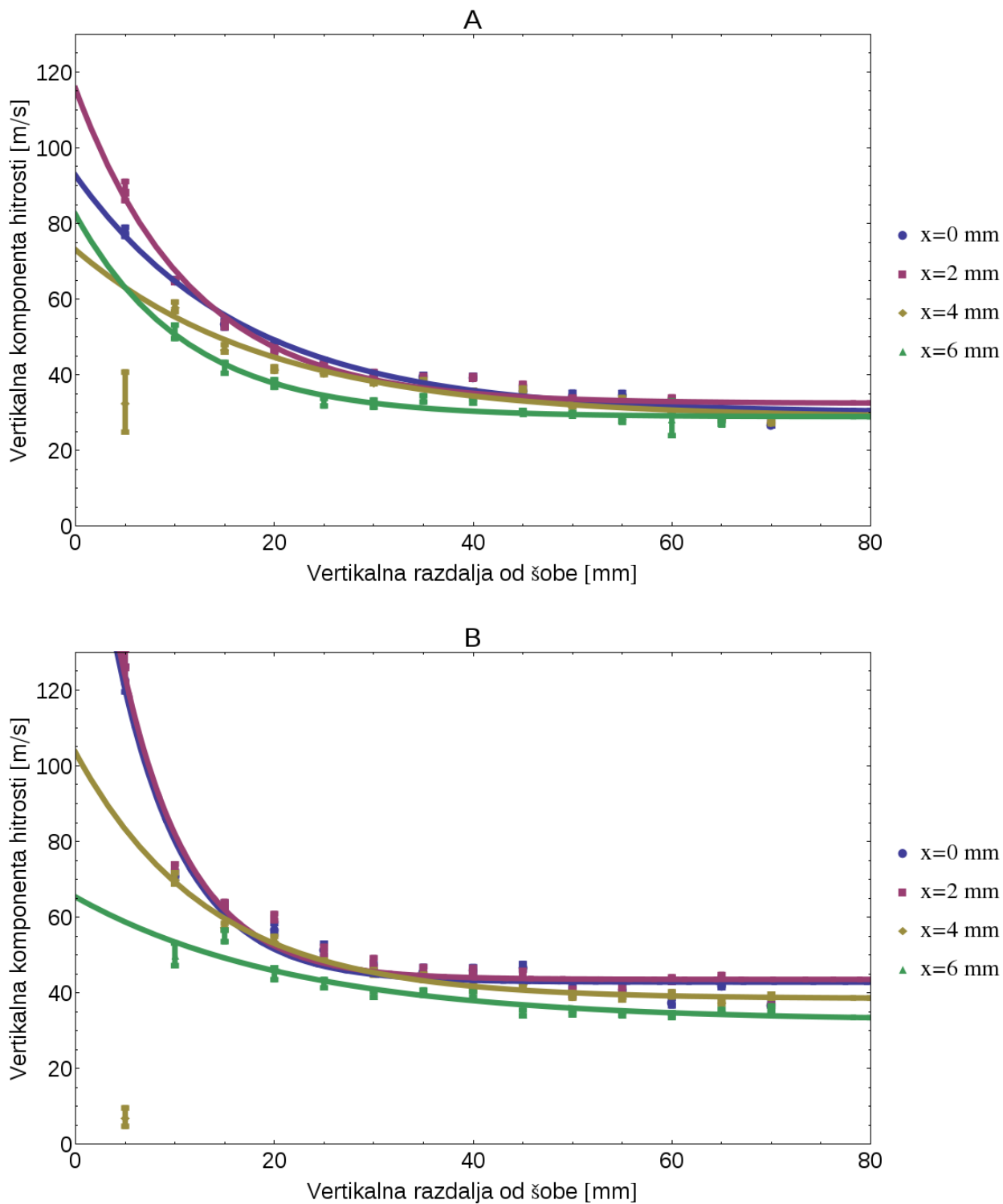
### 5.3.1 Eksperimentalno vrednotenje hitrosti

Kot je že bilo omenjeno v poglavju o eksperimentalnem delu, na kontrolni plošči komore nastavimo tlak obratovanja šobe - napajalni tlak. Ta tlak ni enak atomizacijskemu tlaku oz. tlaku razprševanja, je pa z njim bolj ali manj linearno povezan.

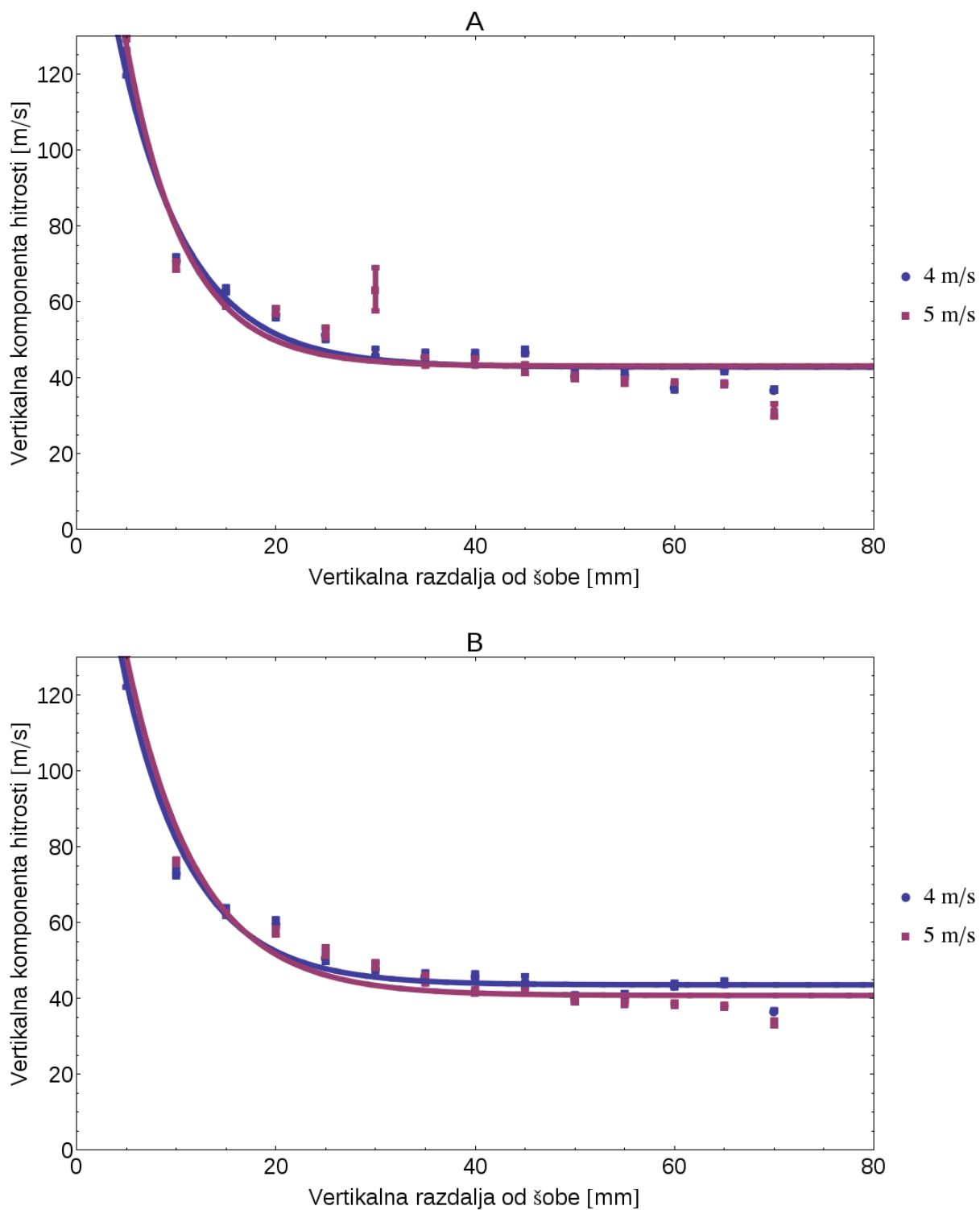
Merili smo hitrosti kapljic na 54-ih pozicijah nad šobo (0, 2, 4, 6 mm lateralno na vzdolžno os šobe in med 5 in 70 mm nad šobo s korakom 5 mm), pri treh različnih napajalnih tlakih (2, 2,5 in 3 bar) ter pri dveh hitrostih vpihanega zraka za fluidizacijo (4 in 5 m/s), pri pretoku razprševane tekočine 7,3 g/min in temperaturi 40 °C. Naše rezultate ilustrirajo slike 13, 14, 15 in 16.



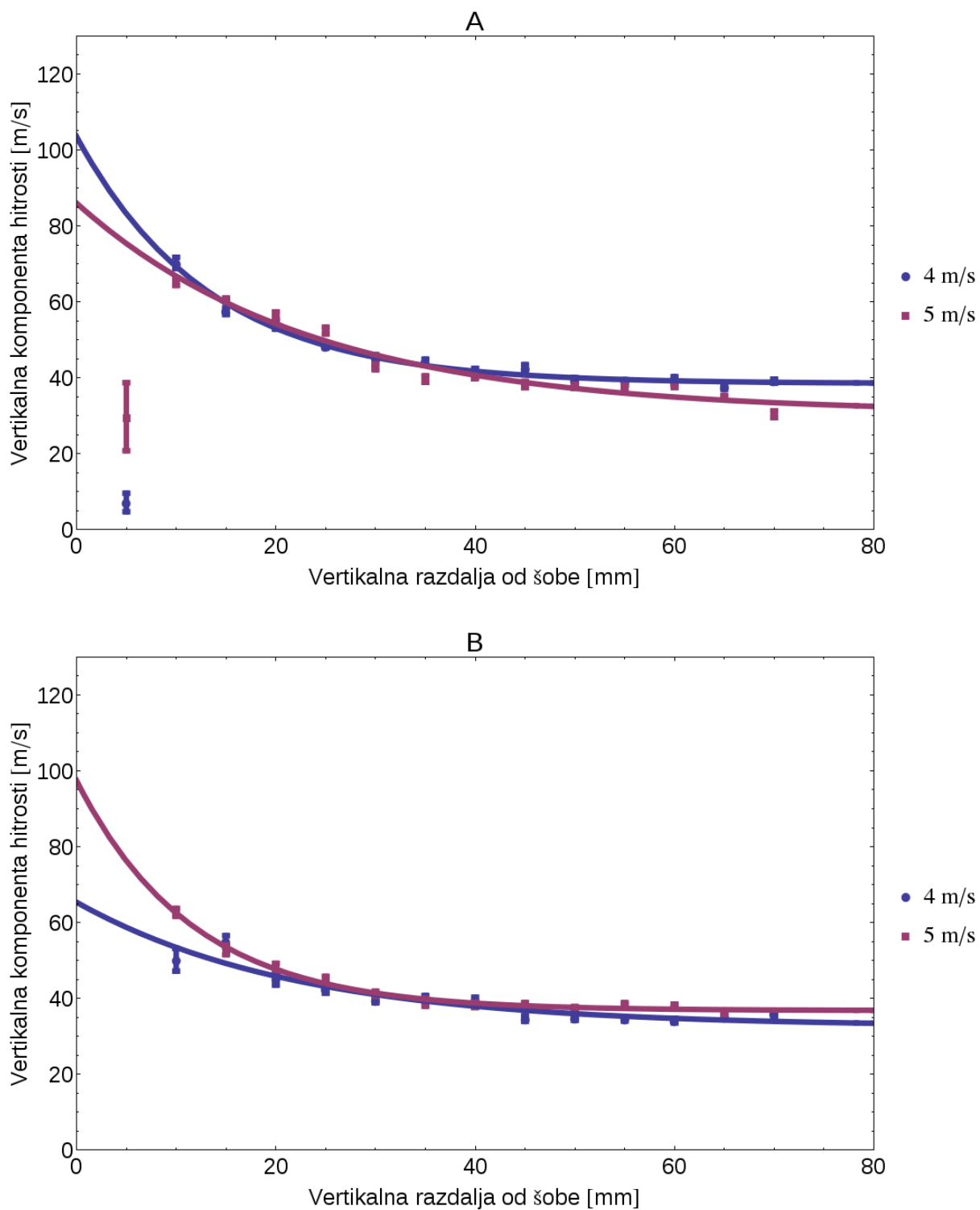
Slika 13: Na sliki vidimo izmerjene vrednosti vertikalnih komponent hitrosti motnje kapljic v odvisnosti od navpične oddaljenosti od konice šobe, pri tlakih 2, 2,5 in 3 bare. Na vsako točko je dodana tudi škatla s standardno napako. Meritve so bile izvedene pri temperaturi 40 °C, hitrosti vpihanega zraka za fluidizacijo 4 m/s in pretoku razprševane tekočine 7,3 g/min.



Slika 14: Sliki prikazujeta odvisnost hitrosti motnje kapljic od oddaljenosti od ravnine konice šobe, na različnih lateralnih pozicijah: direktno nad šobo, ter 2, 4 in 6 mm od njene vzdolžne osi. Slika A kaže omenjeno odvisnost pri napajalnem tlaku 2,5 bara, slika B pa pri 3 barih. Ostali pogoji so enaki kot pri sliki 13.



Slika 15: Odvisnost hitrosti motnje kapljice od vertikalne oddaljenosti od šobe, pri dveh hitrostih vpuhanega zraka za fluidizacijo (4 in 5  $m/s$ ) in napajalnem tlaku 3  $bar$ . Ostali pogoji so enaki kot pri sliki 13. A - v osi šobe; B - 2  $mm$  od osi šobe.



Slika 16: Odvisnost hitrosti motnje kapljic od vertikalne oddaljenosti od šobe, pri dveh hitrostih vpuhanega zraka za fluidizacijo (4 in 5  $m/s$ ) in napajalnem tlaku 3  $bar$ . Ostali pogoji so enaki kot pri sliki 13. A - 4  $mm$  od osi šobe; B - 6  $mm$  od osi šobe.

Izmerjene odvisnosti smo prilegali na enačbo 10, ki predstavlja nekoliko prirejeno izpeljanko kvadratnega uporovnega zakona za gibanje delcev v tekočini, kjer  $a$ ,  $c$  in  $b$  pa izhajajo iz uporovnega zakona, pri čemer konstanta, da konstanta  $b$  informacijo o lastnostih sistema:

$$b = \frac{c_u * S * \rho}{2}, \quad (11)$$

kjer  $c_u$  predstavlja koeficient upora,  $S$  presek, ki se giblje skozi tekočino in  $\rho$  gostoto tekočine. Ob predpostavki, da se gostota zraka v sistemu ne spreminja, lahko rečemo da je ta konstanta odvisna od oblike in velikosti kapljic. Obliko kapljic določa med drugim tudi njihova velikost oz. ravnotežje površinskih sil in sil trenja, ko kapljica potuje skozi medij. Vsota konstant  $a$  in  $c$  nam lahko v našem primeru služi kot aproksimacija začetne vrednosti hitrosti kapljic. V vseh primerih prileganj so bili koeficienti determinacije ( $R^2$ ) med 0,99 in 0,999, kar govori o kakovosti meritev, prav tako pa so bile standardne napake vseh meritev izjemno nizke, kar navkljub odprtemu vprašanju glede razmerja signal/šum pri večjih oddaljenostih od šobe, govori v prid natančnosti eksperimentalne tehnike.

Iz slike 13, ki prikazuje odvisnosti hitrosti motnje kapljic od vertikalne oddaljenosti od konice šobe, vidimo, da ima tlak razprševanja vpliv predvsem na začetno hitrost kapljic, kasneje pa hitrosti konvergiranje proti podobnim vrednostim, ki pa jih še vedno lahko rangiramo glede na velikost napajalnega tlaka. Sliki 15 A in B sugerirata, da hitrost vpihanega zraka za fluidizacijo, vsaj v območju blizu šobe ne vpliva bistveno na hitrostni profil kapljic, po drugi strani pa kažeta sliki 16 A in B ravno to povezavo, čeravno v majhni meri. Ta informacija je zanimiva saj podobnega pojava pri tlakih razprševanja pod 3 *bar* nismo opazili. Pri tlaku 3 *bar* so kapljice dovolj majhne, da tok zraka vpliva na njihovo hitrost in trajektorijo gibanja. Sliki 14 A in B potrđita naš zaključek iz prejšnje misli: Očitno ima prispevek vpihanega zraka za fluidizacijo, k hitrosti kapljic večjo težo, bolj ko smo lateralno oddaljeni od šobe in večji ko je tlak razprševanja. Prvi od teh zaključkov se zdi trivialen, in ga ne bomo razlagali, drugi pa je bolj zanimiv. Zdi se smiselno da bodo kapljice manjše če bomo uporabili višji atomizacijski tlak. Če bo populacija kapljic manjša, kot pri nižnjih tlakih razprševanja, bo tudi njihova inercija manjša in bodo bolj sledile tokovnicam zraka za fluidizacijo. Prav tako pa manjše kapljice med gibanjem skozi

medij bolj pogosto zavzemajo obliko, ki je bližje krogli, saj se prej omenjeno ravnotežje prevesi na stran površinskih sil; tako bodo njihovi koefficienti upora višji in spet bo kapljica bolj sledila tokovnicam okoliškega zraka.

Če si še enkrat ogledamo enačbo 10, da v njej nastopata dva člena, ki govorita o hitrosti ( $a$  in  $c$ ), ter ( $b$ ), ki definira dinamiko njene spremembe. Ta slednji vsebuje predvsem prispevke oblike in velikosti kapljic. Iz tega lahko zaključimo, da je vrednost konstante  $b$  odvisna predvsem od produkta *oblika kapljice*  $\times$  *velikost kapljice*. Če torej predpostavimo da so kapljice okrogle, bi lahko teoretično iz meritev hitrosti na osnovi parametra  $b$ , sklepali tudi na velikost kapljic, po drugi strani, pa bi lahko s kombinacijo tega pristopa in meritev velikosti z drugim, neodvisnim pristopom, dobili tudi neko informacijo o njihovih oblikah.

### 5.3.2 Simulacije in hitrost kapljic

Od opazovanih parametrov (hitrost vpihanega zraka za fluidizacijo, pretok razprševane tekočine, tlak razprševanja in temperatura) imata na vertikalno hitrost kapljic, glede na rezultate simulacij, opazen vpliv tlak razprševanja in hitrost vhodnega zraka. Tlak razprševanja ima največji vpliv na hitrost kapljic v neposredni bližini šobe, njegov vpliv se najbolj opazno manjša, ko se od vzdolžne osi šobe oddaljujemo lateralno. Drugi parameter, hitrost vpihanega zraka za fluidizacijo ima na hitrosti kapljic precej šibkejši vpliv kakor tlak. Bolj ko smo od šobe oddaljeni (vertikalno), bolj je opazen njegov vpliv, to pa se najbolj kaže v lateralno bolj oddaljenih območjih glede na šobino vzdolžno os. Temperatura vhodnega zraka, in pretok tekočine za razprševanje nista imela opaznega vpliva na hitrost kapljic.

### 5.3.3 Primerjava rezultatov: Simulacija - eksperiment

Rezultati eksperimentalnih meritev in simulacij so se do neke mere izkazali kot primerljivi. Tako pri simulacijah, kakor pri ekperimentalno izmerjenih hitrostih so bile hitrosti kapljic v enaki zvezi z njihovo oddaljenostjo od šobe. To ilustrirajo slike 17 A, B in C levo in desno, na njih vidimo med drugim tudi vsakemu setu podatkov prilegajoče krivulje, te smo kakor poprej dobili s prileganjem na enačbo 10, le da smo v tem primeru najprej

izračunali koeficiente krivulje eksperimentalnih meritev, nato pa s konstantnim, eksperimentalno pridobljenim parametrom  $a$  (ta poseg upravičimo z namenom lažje primerjave in s predhodno ugotovitvijo, da se parameter  $a$  pri prilegajočih krivuljah razlikuje glede na ostala dva le za minimalne vrednosti, prilegali še hitrosti iz simulacije. S tem pri prileganju rezultatov simulacije nismo bistveno izgubili na moči korelacije (Determinacijski koeficienti,  $R^2$ , so bili v vseh primerih še vedno med 0,960 in 0,999). Nato smo primerjali simulirana in eksperimentalno določena koeficienta  $b$  in  $c$ . Koeficienta  $c$  sta se pri tlaku pršenja 1,18900 *bar* razlikovala vsakič za vrednost blizu 15 *m/s*, v primeru tlaka pršenja 2,01967 *bar* pa sta bili njuni razliki ( $c(\text{eksperiment}) - c(\text{simulacija})$ ) vedno med vrednostima 15 in 19 *m/s*. Kar se tiče tega koeficienta oz. hitrosti kapljic daleč od šobe smo se s simulacijo očitno bolj približali realnemu stanju pri nižjih atomizacijskih tlakih (enako velja za začetne vrednosti hitrosti:  $v_0 = c + a$ ). Eksperimentalna in simulacijska koeficienta  $b$  sta bila v vseh primerih v razmerju med 0,8 in 1,3. V vseh primerih smo torej padli v isti velikostni razred, tako pri primerjavi parametrov  $b$  in  $c$ , kakor pri primerjavi hitrosti. Omenjeni parametri prileganja so zbrani v tabeli 7.

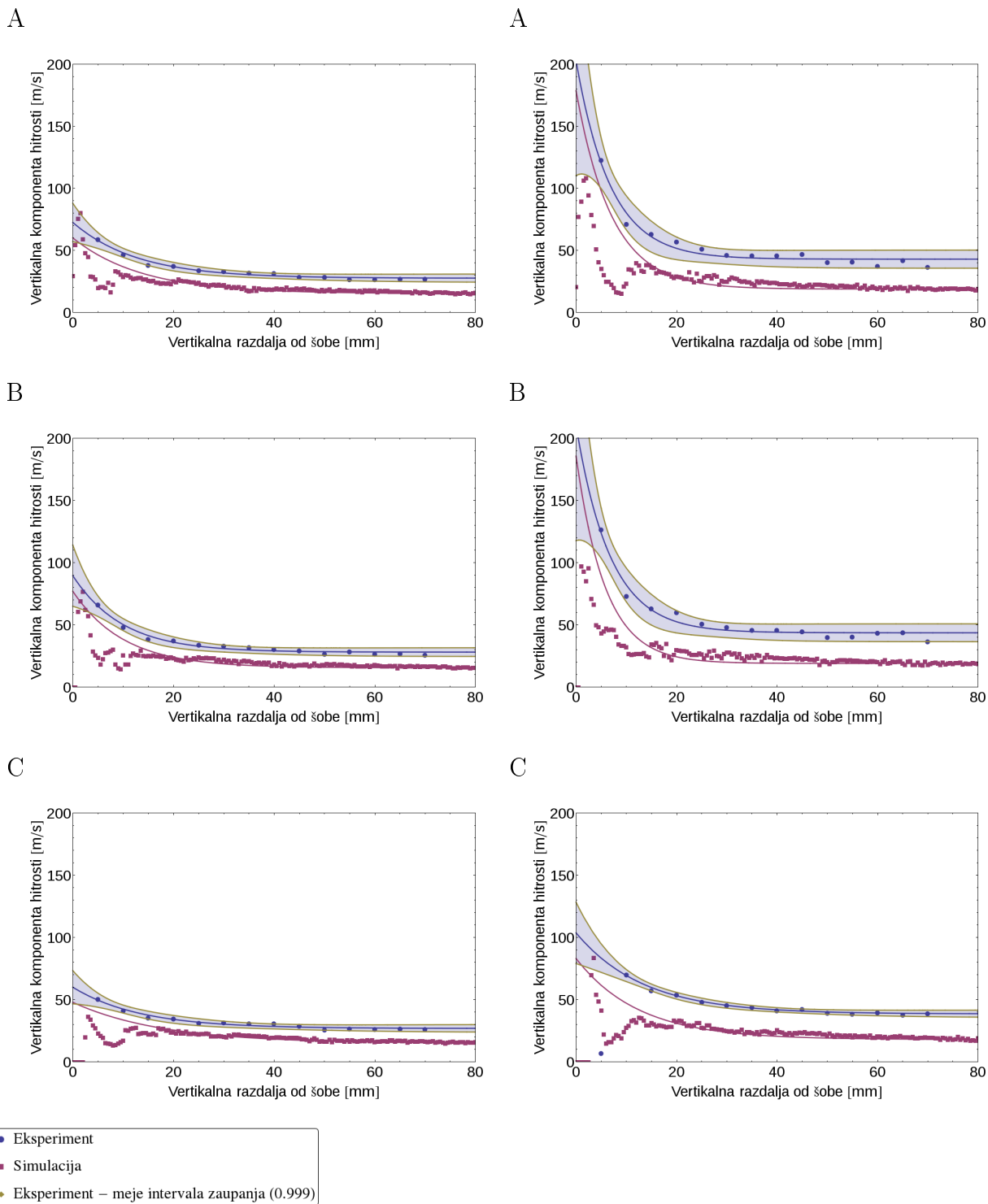
Tabela 7: Vrednosti parametrov ( $a$ ,  $b$  in  $c$ ) prilegajočih krivulj za eksperimentalno izmerjene (- exp) vertikalne profile hitrosti in vertikalne profile hitrosti, izračunane iz rezultatov simulacij (- sim), ter njihove pripadajoče korelacijske koeficiente ( $R^2$ ). Zbrane vrednosti so bile pridobljene pri temperaturi 40 °C, hitrosti vpihanega zraka za fluidizacijo 4 *m/s* in pretoku razprševane tekočine 7,3 *g/min* v primeru eksperimentalnih meritev in 8 *g/min* v primeru simulacij. Vrednosti napajalnih tlakov in lateralnih pozicij (x# [*mm*]) so navedene v prvem stolpcu tebele.

	$a$	$b$ - exp	$c$ - exp	$b$ - sim	$c$ - sim	$R^2$ - exp	$R^2$ - sim
3 <i>bar</i> - x0	159.798	0.14536	42.7998	0.140812	18.7061	0.994729	0.978568
3 <i>bar</i> - x2	166.555	0.146599	43.5308	0.171965	18.9005	0.99507	0.968159
3 <i>bar</i> - x4	65.0972	0.0748214	38.4428	0.0802907	17.8368	0.999524	0.983967
2 <i>bar</i> - x0	44.9123	0.0786397	27.4727	0.0729015	15.0151	0.998405	0.990801
2 <i>bar</i> - x2	61.4239	0.102179	27.9841	0.0990572	15.4239	0.99767	0.985852
2 <i>bar</i> - x4	33.0927	0.0756215	26.7661	0.0559433	14.6368	0.998687	0.990934

Pri zaključni misli iz prvega odstavka, nas predvsem motijo vrednosti hitrosti, pridobljenih iz simulacij, za območje nekje do 15 *mm* od šobe. Tam vidimo padec v hitrostih

kapljic, ki ga pri eksperimentalno pridobljenih podatkih ne uspemo zaznati. Ta in druge poprej omenjene razlike, bi lahko pripisali slabi primerljivosti vhodnih parametrov za simulacije z tistimi vhodnimi parametri naprave Glatt GPCG 1, ki smo jih zmožni opisati (npr. velikost odprtine šobe, dejanska hitrost zraka za fluidizacijo na območju razmejitvenega valja, robni pogoji, ipd). Pri tem je verjetno pomenljivo tudi to, da smo v simulaciji predpisali zrak kot nestisljiv idealen plin, zaradi česar prihaja v rezultatih simulacije do anomalij.





Slika 17: Hitrosti motnje kapljic so bile eksperimentalno izmerjene pri hitrosti vpihanega zraka za fluidizacijo  $4 \text{ m/s}$ , temperaturi  $40 \text{ }^\circ\text{C}$  in pretoku razprševane tekočine  $7,3 \text{ g/min}$  ( $8 \text{ g/min}$  v simulaciji). Levo: Napajalni tlak šobe  $2 \text{ bar}$ ; in desno:  $3 \text{ bar}$ . Slike: A - merjeno v vertikalni osi šobe; B -  $2 \text{ mm}$  od osi šobe; C -  $4 \text{ mm}$  od osi šobe. Hitrosti vpihanega zraka za fluidizacijo  $4 \text{ m/s}$  in njegova temperatura  $40 \text{ }^\circ\text{C}$ .

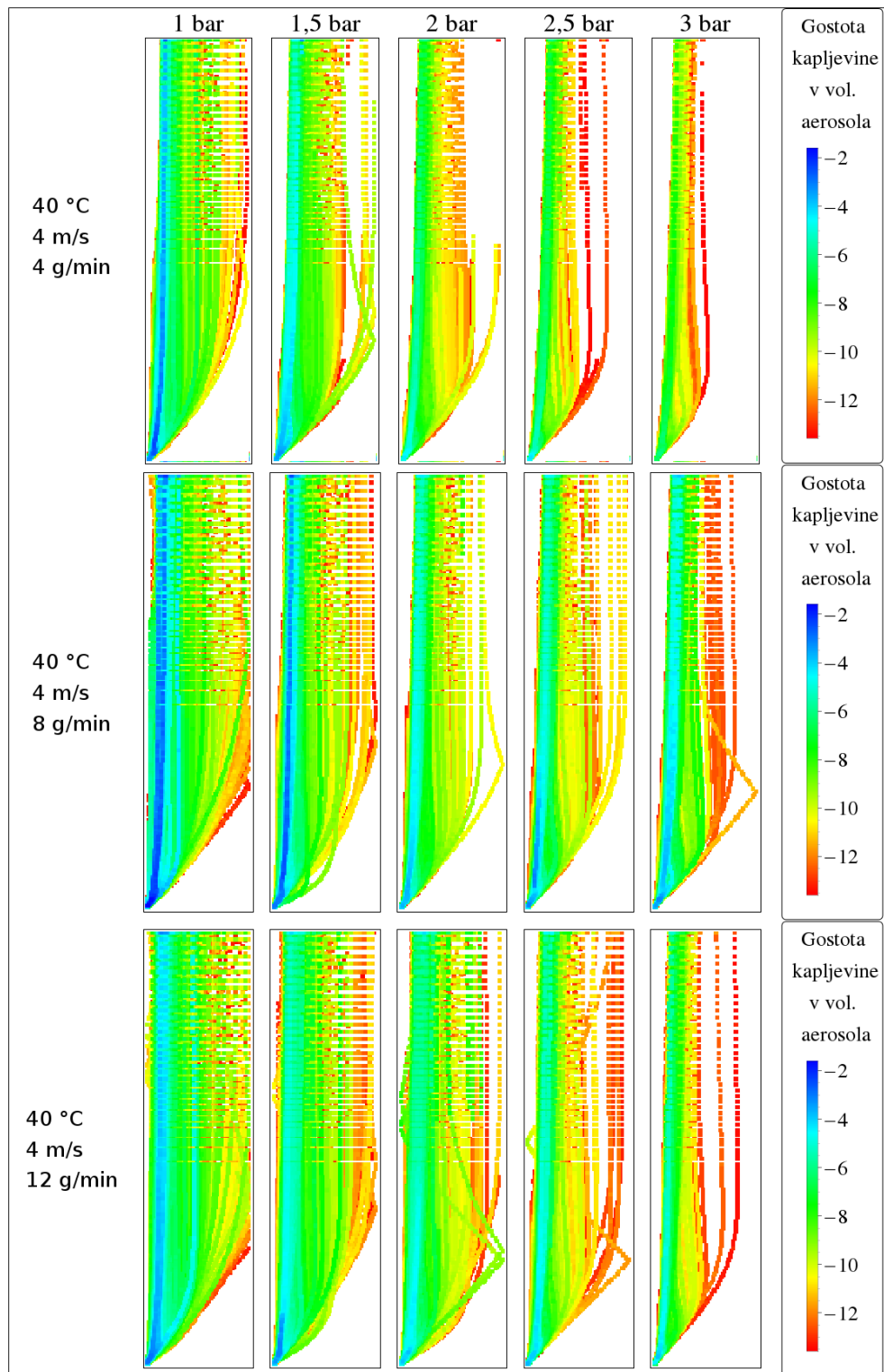
## 5.4 Karakterizacija območja aerosola

### 5.4.1 Simulacije območja aerosola

Kot pri podpoglavju o velikostih kapljic, smo tudi tu kot najbolj optimalen način prikaza izbrali radialno 2D mrežo gostot kapljevine v volumnu aerosola. To prikazuje slika 18.

Na slikah lahko poleg območij, kjer ima aerosol večjo in manjšo gostoto, ter kako se to spreminja s tlakom, pretokom razprševane raztopine in hitrosti zraka za fluidizacijo, in poleg zunanjega pršnega kota, opazimo še notranji pršni kot. Proizvajalec šobe trdi, da bo aerosol v obliki votlega stožca (*'hollow cone'*), tega nam eksperimentalno žal ni uspelo potrditi, je pa očitno numerični model dovolj dovršen, da lahko s pomočjo simulacije zaznamo tudi to. Notranji kot pršenja je glede na sliki odvisen v največji meri od tlaka razprševanja, ter od masnega pretoka kapljevine. Večji kot je tlak razprševanja in manjši kot je pretok kapljevine, večji je notranji kot pršenja.

Iz slik lahko razberemo, da ima aerosol največjo masno gostoto v od centra šobe radialno razmeroma malo oddaljenem področju največjo gostoto. To območje, če pogledamo sliko 10 opazimo da to območje ravno sovпада s tistim, kjer so kapljice najmanjše. Očitno bomo z manjšimi premeri kapljic dosegli višjo masno gostoto aerosola. Če se še nekoliko bolj poglobimo v sliko 18 lahko opazimo, da je masna gostota na tem območju največja pri pretoku razprševane tekočine  $8 \text{ g/min}$ . Iz tega lahko sklepamo, da so za naš model in tlake pri katerih smo sistem proučevali, očitno optimalni pogoji atomizacije tekočine ravno pri tem pretoku razprševane tekočine.

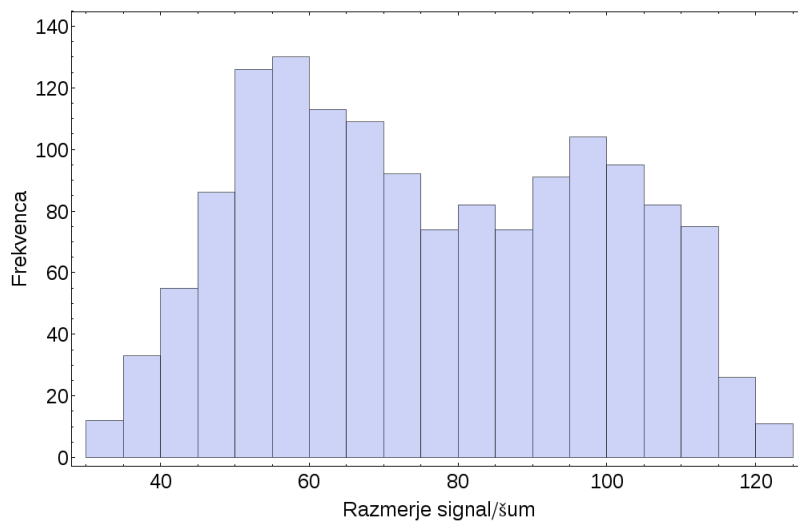


Slika 18: Radialne 2D projekcije aerosola, za hitrost zraka za fluidizacijo 4 m/s in temperaturo 40 °C, pri različnih napajalnih tlakih razprševanja in različnih pretokih razprševane tekočine. Vrednosti logaritmiranih vrednosti gostot kapljevine v volumnu aerosola so ilustrirane z barvno skalo.

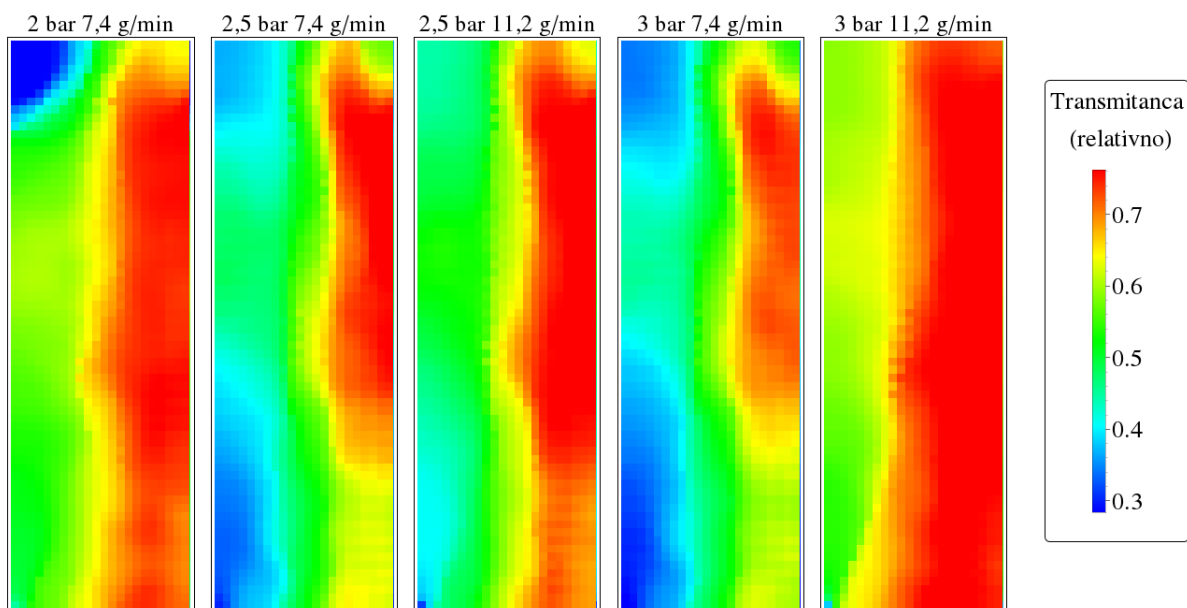
### 5.4.2 Eksperimentalno vrednotenje območja aerosola

Eksperimentalno vrednotenje območja aerosola, z napravo 'Marklar' se je na tej stopnji izkazalo kot težavno in relativno slabo ponovljivo. Vzrok temu tiči predvsem v variabilnosti razmerja signal/šum (Slika 19), ta se spreminja predvsem v odvisnosti od različnih pozicij merilnega sklopa, ter v dejstvu da šoba pulzira (to lahko zaznamo že s prostim očesom). Težavam navkljub nam je vseeno uspelo narediti nekaj posnetkov, tekom njihove obdelave pa se je zavoljo prikaza, izkazalo smiselno vsakega deliti še z lastnim maksimumom, tako so posnetki na slikah 20, 21 in 22 (levo) obdelani še na ta način. Iz slik 20 in 21 je moč v grobem razbrati, kje je aerosol bolj in kje je manj optično gost, slika 22 pa kaže primerjavo med eksperimentalno karakteriziranimi območji aerosola in rezultati simulacije za masne gostote na enakem območju glede na šobo, ter pri primerljivih pogojih. Transmitanca, ki jo eksperimentalno izmerimo v vsaki poziciji, je v teoriji obratno sorazmerna optični gostoti na poti laserskega žarka, ta pa v neki meri korelira z masno gostoto na njej. Vzrok temu najverjetneje ne tiči v sami absorpciji, pač pa v sipanju svetlobe na kapljicah. S tega stališča naj bi torej naši posnetki bili primerljivi z presečnimi 2D projekcijami za logaritmirane vrednosti masnih gostot izračunanih iz rezultatov simulacij. Na slikah 20, 21 in 22 so primeri najboljših narejenih posnetkov, tudi ti pa so še daleč od idealnih. Na vseh od teh posnetkov lahko sicer vidimo spremembe pri spremembah eksperimentalnih pogojev, nekatere od teh celo sovpadajo s pričakovanji, vendar pa preveč variirajo od primera do primera, da bi lahko podali kakšne resnejše zaključke.

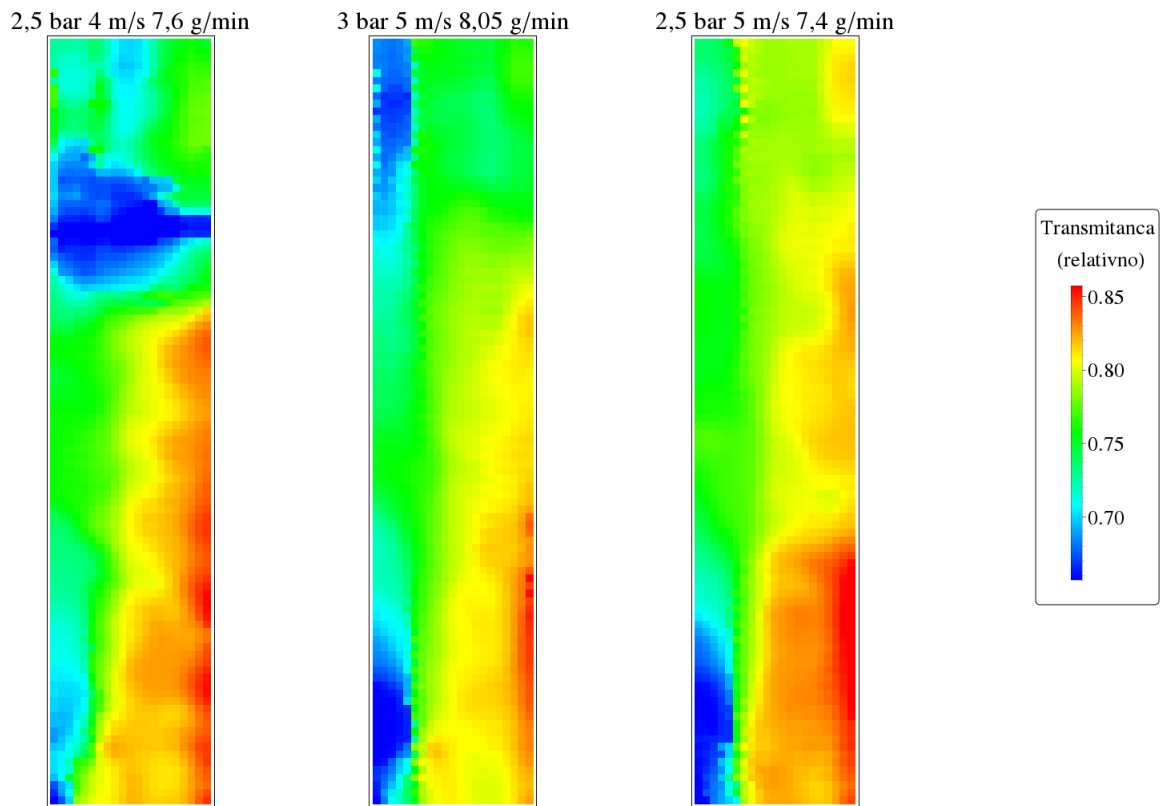
Z napravo 'Marklar 1.0', kot je opisano v poglavju o eksperimentalnem delu, pri meritvah območja zaznavamo povprečja vrednosti transmitanc v časovnem intervalu ene sekunde, če med tem pride do pulzacije šobe, bomo to zaznali kot lokalno višjo vrednost transmitance. Pozicija na kateri merimo ni absolutna, pač pa relativna na pozicijo šobe. Mikrokontroler NE vrne povratne informacije o poziciji (senzorja za to namreč nimamo), pač pa o tem, da je premik izvedel, vrednost premika pa se nato v krmilnem programu prišteje prejšnji poziciji. Iz tega izhaja, da z vsako ponovitvijo ne merimo v dejanski isti poziciji, je pa tej glede na dimenzije merilnega območja izredno blizu. Velik problem pri meritvah območja predstavljajo tudi nepravilnosti in poškodbe valja in pleksi stekla.



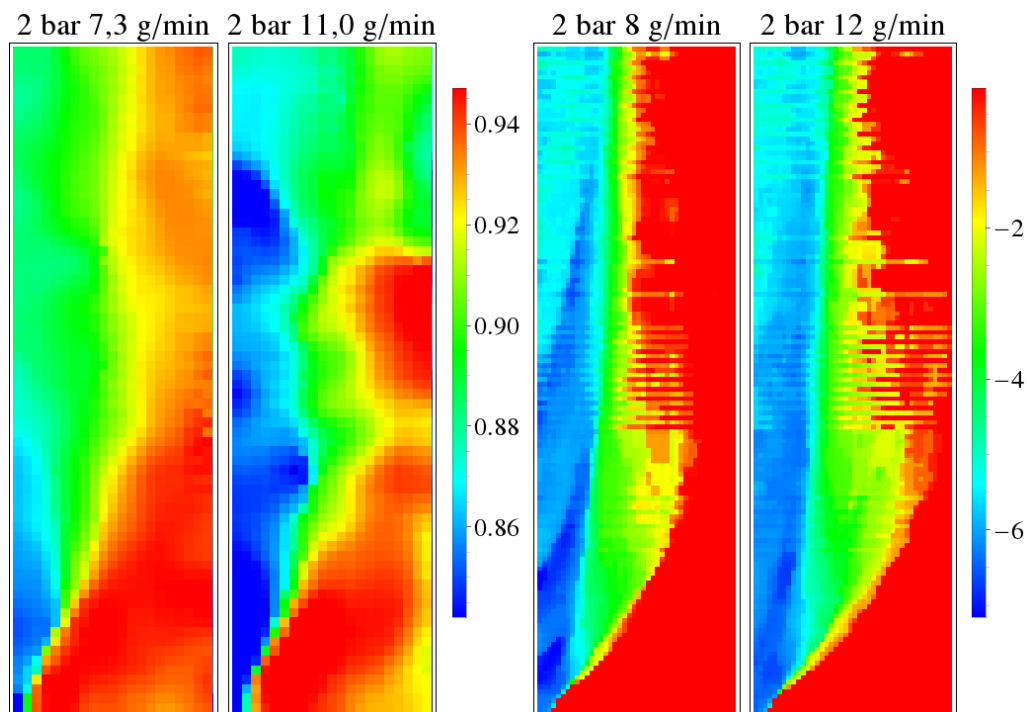
Slika 19: Histogram razmerij signal/šum, za primer posnetka ozadja definiranega merilnega območja. Posnetek je bil narejen z napravo 'Marklar 1.0'.



Slika 20: Posnetki območja aerosola so bili narejeni pri pogojih navedenih na vrhu vsake od slik (napajalni tlak in pretok razprševane tekočine), hitrosti vpihanega zraka za fluidizacijo  $4 \text{ m/s}$  in temperaturi  $40 \text{ }^\circ\text{C}$ , in sicer do višine  $70 \text{ mm}$  nad vrhom šobe in lateralno do  $20 \text{ mm}$  od njene osi.



Slika 21: Posnetki območja aerosola so bili narejeni pri pogojih navedenih na vrhu vsake posebej (napajalni tlak, hitrost vpihanega zraka za fluidizacijo in pretok razprševane tekočine) in temperaturi  $40\text{ }^{\circ}\text{C}$ , do višine  $100\text{ mm}$  nad vrhom šobe in lateralno do  $20\text{ mm}$  od njene osi.



Slika 22: Slika kaže primerjavo dveh posnetkov območja aerosola pridobljenega za napravo 'Marklar' (levo), obarvana glede na transmitance v naravni skali in dveh mrež generiranih iz rezultatov simulacije, ki sta obarvana glede na masno gostoto aerosola v logaritemski skali. Ilustracije kažejo stanje pri primerljivih pogojih (hitrost vpuhanega zraka za fluidizacijo  $4 \text{ m/s}$ , temperatura  $40 \text{ }^\circ\text{C}$ , napajalni tlak in pretok razprševane tekočine pa sta navedena navrh vsakega posnetka posebej).

## 6 Sklep

Ugotovili smo, da s pomočjo numeričnih simulacij dinamike tekočin, zaenkrat večinoma še ne dosegamo točnosti pri napovedovanju vrednosti parametrov aerosola, večinoma pa napovemo njihove velikostne razrede. Podobno kot drugi raziskovalci smo se dokopali do ugotovitve, da lahko numerične simulacije dinamike tekočin igrajo pomembno vlogo v razvoju in analizi procesov, ki se dogajajo pri tehnoloških operacijah s tehnologijo zvrtničenih plasti. Čeravno se rezultatni parametri simulacij ne ujema povsem z izmerjenimi, dajo pomembno informacijo o njihovem velikostnem razredu. To trditev lahko utemeljimo že samo na primeru našega raziskovalnega dela. Brez predhodnega podatka o hitrostih kapljic v aerosolu, ki smo ga dobili iz predhodnih simulacij, bi bili primorani več ali manj ugibati o njihovih hitrostih, tako bi bilo za dejanski razvoj eksperimentalne tehnike za meritve hitrosti motnje kapljic na našem sistemu potrebno bistveno več vloženega truda. S tega stališča lahko zaključimo, da so numerične simulacije tudi v farmacevtski tehnologiji lahko pomembno gornilo razvoja tako tehnologije kot take kakor tudi eksperimentalnih analitskih metod, ki lahko igrajo vlogo pri kontroli kakovosti in pristopu procesno analizi teh tehnologij.

Ugotovili smo, da so rezultati izračunani s pomočjo simulacij in tisti pridobljeni eksperimentalno, v našem primeru, znotraj istih razredov in medsebojno primerljivi. V primeru meritev hitrosti kapljic so rezultati obeh pristopov, v območju eksperimentalnih pogojev naših poskusov korelirali med sabo. Pri simulacijah velikosti kapljic so se kot zanimive izkazale anomalije, ki so bile plod naših napak pri nastavitvah simulacij, saj so bile s tem opazna področja večje koalescence kapljic, ki jih drugače morda ne bi zaznali. Meritve kotov pršenja, so se z našim pristopom zaenkrat izkazale kot nezanesljive, vseeno po so bili rezultati rangovno primerljivi z rezultati simulacij. Čeprav so rezultati eksperimentalnega segmenta karakterizacije območja aerosola v tej fazi še slabo ponovljivi, pa nam je vseeno uspelo zajeti nekaj slik, ki predstavljajo stanje v aerosolu in so hkrati primerljive s tistimi, ki jih generiramo iz rezultatov simulacije, kar priča o ustreznosti merilnega pristopa in tehnike.

Do eksperimentalnih problemov smo pristopali na osnovi novih izvedb več ali manj ob-



stoječih metod. Čeprav so rezultati naših izvedb v tej fazi še le bolj ali manj točni in natančni, pa bi ob vpeljavah dodatnih izboljšav npr. izboljšav optičnega sistema in vpeljave meritev s pulzirajočo lasersko ravnino pri meritvah velikostnih porazdelitev kapljic ali z zvečanjem razmerja signal/šum pri napravi 'Marklar' in dodatnimi programskimi optimizacijami, lahko dosegali še bistveno boljše in bolj ponovljive eksperimentalne rezultate.

## 7 Literatura

1. Dreu R.: Izdelava pelet z različnimi granulacijskimi tekočinami in vpliv hidrodinamskih razmer v Wursterjevi komori na učinkovitost filmskega oblaganja, doktorska disertacija, Ljubljana, 2004.
2. Teunou E., Poncelet D.: Batch and continuous fluid bed coating - review and state of the art. *Journal of Food Engineering* 53, 2002, 325-340.
3. Aulton M.: *Pharmaceutics*, 3rd edition, Elsevier, 2007: 410-514.
4. Dewettinck K., Huyghebaert A.: Fluidized bed coating in food technology. *Trends in Food Science & Technology* 10, 1999, 163-168.
5. Dreu R., Srčič S.: Vaje iz industrijske farmacije, skripta za vaje, Ljubljana, 2005.
6. Toschkoff G., Khinast J. G.: Mathematical modeling of the coating process. *International Journal of Pharmaceutics* 457, 2013, 407-422.
7. Dybadhl Hede P., Bach P., Jensen A. D.: Two-fluid spray atomisation and pneumatic nozzles for fluid bed coating/agglomeration purposes: A review. *Chemical Engineering Science* 63, 2008, 3821-3842.
8. Wendt J.: *Computational Fluid Dynamics: An introduction*, 3rd Edition, Springer, Berlin, 2009.
9. Dokumentacija programskega paketa Ansys Fluent: <http://www.ansys.com>. Zadnji dostop: 9.12.2013.
10. Deen N. G., Van Sint Annaland M., Van der Hoef M. A., Kuipers J. A. M.: Review of discrete particle modeling of fluidized beds. *Chemical Engineering Science* 62, 2007, 28-44.
11. Putorti A. D.: Simultaneous Measurements of Drop Size and Velocity in Large-Scale Sprinkler Flows Using Particle Tracking and Laser-Induced Fluorescence, doktorska disertacija, Gaithersburg, 2004.

12. Feldman O., Mayinger F.: Optical Measurements, 2nd edition, Springer, 2001:139-141.
13. Le Gal P., Farrugia N., Greenhalgh D. A.: Laser Sheet Dropsizing of dense sprays. Optics & Laser Technology 31, 1999, 75-83.
14. Thomson O., Pazsit I.: The crossed beam correlation technique for two-phase flow measurements. Progress in Nuclear Energy 29, 1995, 337-346.