

Kohesiivisten jauheiden aerodynaaminen
dispergointi – laitteen mallinnus ja optimointi

Pro Gradu
Turun yliopisto
Fysiikka
Heinäkuu 2024
Fil. yo. Sampo Kalliokoski
Tarkastajat:
Dos. M. Murtomaa
Prof J. Salonen.

Turun yliopiston laatujärjestelmän mukaisesti tämän julkaisun alkuperäisyys on tarkastettu Turnitin OriginalityCheck-järjestelmällä

Kalliokoski, Sampo Kohesiivisten jauheiden aerodynaaminen dispergointi – laitteen mallinnus ja optimointi

Pro Gradu, 52 s.
Fysiikka
Heinäkuu 2024

Pienet jauhepartikkelit kasaantuvat yhteen agglomeraateiksi kohesiivisten voimien, kuten van der Waalsin voiman tai sähköstaattisen vuorovaikutuksen, vaikutuksesta. Näiden agglomeraattien dispergoiminen on tärkeää monilla toimialoilla, jotta niiden kokoa ja muotoa voidaan tutkia. Pienetkin muutokset voivat vaikuttaa lopputuotteen ominaisuuksiin. Aerodynaamisessa dispergoinnissa agglomeraatit hajotetaan paineilman avulla kastelematta jauhetta ja yleensä käyttämättä muita dispergoinnin apuaineita.

Aerodynaamiset dispergointimekanismit voidaan jakaa kolmeen alueeseen: dispergointi äkillisen kiihdyttämisen tai jarruttamisen avulla, törmäys liikkuviin tai paikallaan oleviin esteisiin ja dispergointi muiden mekaanisten voimien avulla. Näitä mekanismeja hyödyntäviä laitteita on kehitetty akateemisiin ja kaupallisiin tarkoituksiin. Yleisimmät laitetypit ovat: eduktorit, venturit, suuttimet, kapillaariputket, aukot, sekoittimet, kiinteät esteet ja leijupedit. Kaupalliset laitteet hyödyntävät yleensä yhtä tai useampaa näistä laitetyypeistä jauheiden dispergoimiseksi.

Aerodynaamisen dispergoinnin tutkimus on kehittynyt viime vuosikymmeninä tietokonesimulaatioiden ansiosta. Esimerkiksi laitteiden dispergointimekanismeja voidaan tutkia yhdistämällä numeerinen virtausdynamiikka (CFD) ja diskreetti elementtimenetelmä. Tässä työssä mallinnettiin dispergointilaitte Comsol Multiphysics -ohjelmalla. Käyttäen sen CFD- ja Particle Tracing -moduuleita simuloitiin partikkeleiden liikettä laitteessa. Simulaatioiden avulla optimoitiin laitteen suuttimen säde, näytekupin syvyys, kammion kannen muoto, kammion säde sekä esikammion koko ja paine.

Lopputuloksena saatiin malli, joka toimii toivotulla tavalla. Suuttimesta lähtee voimakas suihkuvirtaus, joka hajottaa kupissa olevat jauheagglomeraatit partikkeleiksi. Partikkelit sekoittuvat kammiossa, josta ne laskeutuvat kammion pohjalle. Kammion pohjalle laskeutuvasta partikkelijakaumasta pyrittiin saamaan mahdollisimman tasainen, mikä onnistui suhteellisen hyvin optimoinnin avulla. Tuloksiin liittyy monia epävarmuustekijöitä, jotka on tärkeää ottaa huomioon jatkotutkimuksissa ja laitteen valmistuksessa.

Asiasanat: Aerodynaaminen dispergointi, koheesio, mikropartikkelit, dispergointilaitteet, FEM-mallinnus, COMSOL, CFD, optimointi

Sisällys

Johdanto	1
1 Koheesio	3
1.1 Koheesiovoimat	3
1.2 Koheesiomallit	6
2 Aerodynaamiset dispergointimekanismit	10
2.1 Dispergointi äkkinäisen kiihdyttämisen avulla	11
2.1.1 Dispergointi kiihdyttämällä tasaisessa virtauksessa	11
2.1.2 Dispergointi leikkausvirrassa	14
2.2 Dispergointi törmäyttämällä paikallaan olevaan tai liikkuvaan koh- teeseen	16
3 Dispergointilaitteet	18
3.1 Yleisimmät dispergointilaitetyypit	18
3.2 Kaupalliset laitteet	21
4 Menetelmät	25
4.1 Geometria	25
4.2 Turbulenttinen virtaus	26
4.3 Partikkeleiden liike	31
5 Tulokset	33
5.1 Malli 1: Suutin	33
5.2 Malli 2: Kuppi	34
5.3 Malli 3: Kansi	37
5.4 Malli 4: Kammion säde	40
5.5 Malli 5: Esikammion säde ja paine	42

6	Pohdinta	44
7	Yhteenveto	48
	Viitteet	50

Johdanto

Tehokas kiinteiden partikkeleiden dispergointi on tärkeää monilla toimialoilla, kuten lääketeollisuudessa, bulkkikemikaalien valmistuksessa sekä elintarviketeollisuudessa. Suuri osa näiden alojen tuotteista on jauheina, jolloin on tärkeää tutkia partikkelikokoanalyysin avulla partikkeleiden kokoa ja muotoa, koska pienilläkin muutoksilla voi olla vaikutusta lopputuotteen ominaisuuksiin [1].

Kun partikkeleiden koko on mikro- tai nanometrien luokkaa, partikkelit kasaantuvat yhteen muodostaen agglomeraatteja (engl. agglomerates) [2]. Agglomeraatit muodostuvat koheesivoimien eli partikkeleita yhteen vetävien voimien vaikutuksesta. Koheesiota aiheuttavat muun muassa van der Waalsin voima ja sähköstaattinen vuorovaikutus [3]. Lisäksi kapillaarivoimat voivat aiheuttaa koheesiota riippuen ympäristön olosuhteista [4]. Kun partikkeleiden halkaisija on alle 100 μm , agglomeraatteja muodostuu, sillä koheesivoimat ovat silloin voimakkaampia kuin hajottavat voimat, kuten painovoima [5]. Tehokkaan dispergoinnin saavuttamiseksi agglomeraateille tulee aiheuttaa koheesivoimia suurempia hajottavia voimia. Se on kuitenkin vaikeampaa mitä pienempiä partikkelit ovat, sillä koheesion suhteellinen voima kasvaa [2]. Esimerkiksi van der Waalsin voima on noin 100 kertaa voimakkaampi kuin painovoima, kun partikkelikoko on 10 μm [1]. Tarvitaan siis huomattavasti energiaa, että agglomeraatit saadaan dispergoitua. Käytännön sovelluksissa haittapuolena voi olla se, että partikkelit hajoavat, mikä taas vaikeuttaa partikkelikoon määrittämistä [1]. Lisäksi partikkeleiden morfologiset ominaisuudet vaikuttavat dispergointitehokkuuteen. Epäsäännöllisen muotoiset partikkelit dispergoituvat helpommin verrattuna pallomaisiin partikkeleihin [6].

Jauheita voidaan dispergoida kaasui- tai nestefaaseissa [1, 7]. Nestedispergointi on suosittu ja laajasti tutkittu menetelmä, mutta tässä tutkielmassa keskitytään aerodynaamiseen dispergointiin sen käytännöllisyyden vuoksi. Nestedispergoinnin heikkoutena on se, että nestettä ei saada täysin poistettua aineesta, jolloin se voi

muokata aineen ominaisuuksia [8]. Aerodynaamisen dispergoinnin keskeisimpiä mekanismeja ovat kiihdyttäminen, leikkausvirta, törmäys liikkuviin tai paikallaan oleviin kohteisiin, fluidisointi, sekoitus ja värinä [9]. Näitä mekanismeja hyödyntäviä aerodynaamisia dispergointilaitteita on monia eri tyyppisiä, joista yleisimmät ovat eduktori, suutin, kapillaariputki, venturiputki, sekoitin ja leijupeti, joiden pohjalta on valmistettu monia akateemisia sekä kaupallisia sovelluksia [1].

Aerodynaamisia dispergointimekanismeja ja laitteita on tutkittu yhdistämällä diskreetti elementtimenetelmä (engl. discrete element method, DEM) ja numeerinen virtausdynamiikka (engl. computational fluid dynamics, CFD). Menetelmän etuna on sen monipuolisuus ja kyky muokata materiaalin ominaisuuksia vaikuttamatta toisiin ominaisuuksiin [10]. Toinen vaihtoehto partikkeleiden liikkeen määrittämiseen on käyttää Lagrangen partikkeliseurantaa (engl. Lagrangian particle tracking) [11, 12], jota tässä työssä hyödynnetään Comsol Multiphysics -ohjelmiston avulla.

Tutkielma koostuu jauheiden koheesion ja siihen liittyvien mallien sekä aerodynaamisen dispergoinnin ja sen sovellusten teoriasta. Tämän pohjalta mallinnetaan dispergointilaitteita ja simuloinnin avulla optimoidaan sen geometrisia parametreja. Laitteen tarkoitus on dispergoida epähomogeeninen jauhenäyte, joka leviää tasaisesti optisen tai elektronimikroskoopin näytealustalle. Mallia tullaan hyödyntämään dispergointilaitteen valmistuksessa, joka tulee Turun yliopistolle tutkimuskäyttöön.

1 Koheesio

1.1 Koheesivoimat

Koheesiolla tarkoitetaan aineen sisäisiä vetovoimia, jotka pitävät ainetta kasassa ja vastustavat hajottavia voimia. Koheesivoimat vetävät partikkeleita toisiinsa, jolloin muodostuu löyhästi toisiinsa sitoutuneita kasaantumia, agglomeraatteja. Kirjallisuudessa käsitteet agglomeraatti ja aggregaatti (engl. aggregate) usein sekoittuvat ja niillä voidaan tarkoittaa samaa asiaa [13], siksi tässä tutkielmassa käytetään vain termiä agglomeraatti. Koheesivoimia on useita ja ne voidaan järjestää voimakkaimmasta heikoimpaan: kiinteäsiltavoima, nestesiltavoima, van der Waalsin voima, sähköstaattinen voima ja magneettinen voima [3].

Sähköstaattiset voimat syntyvät partikkeleita ympäröivien sähköisten kaksoiskerrosten vuorovaikutuksesta. Pintavaraus syntyy aineelle joko ionien adsorboitumisen tai polaarisen väliaineen kanssa kosketuksissa olevien pintavarautuneiden ryhmien ionisoitumisen vaikutuksesta. Tämä pintavaraus vetää puoleensa väliaineessa olevia ioneita, joiden varaus on vastakkainen. Vastakkaisvarauksellisten ionien keskittymisen partikkelin pinnalle hylkii muita samanmerkkisiä ioneita, jotka ovat kauempana pintavarauksesta, mikä muodostaa kaksoiskerroksen. Liikuttaessa partikkelista pois päin kaksoiskerroksen sähköpotentiaali laskee ensin nopeasti (sisempi ns. Sternin kerros) ja sitten hitaammin (diffuusikerros) kunnes varausjakauma on tasainen [3].

Partikkelit vuorovaikuttavat toistensa kanssa, kun niiden kaksoiskerrokset menevät päällekkäin. Mitä suurempi diffuusikerros niillä on, sitä suuremmalla etäisyydellä kaksoiskerrokset kohtaavat. Samanmerkkiset partikkelit hylkivät toisiaan ja erimerkkiset vetävät toisiaan puoleensa. Jos partikkelit ovat hyvin lähellä toisiaan, van der Waalsin voima voi olla suurempi kuin samanmerkkisten partikkeleiden hylkivä voima, jolloin partikkelit voivat agglomeroitua [3]. Jos partikkeleiden varaukset ovat erimerkkiset, kahden pallomaisen partikkelin välinen voima saadaan Coulombin lain

avulla yhtälöstä

$$F_{el} = \frac{\pi}{4\epsilon_0\epsilon_r} \frac{q_1 q_2 d^2}{(1 + a/d)^2}, \quad (1)$$

missä ϵ_0 on tyhjiön permittiivisyys, ϵ_r on suhteellinen permittiivisyys, q_1 ja q_2 ovat partikkeleiden pintavaraukset, d partikkeleiden halkaisija ja a partikkeleiden pintojen välinen etäisyys [5]. Sähköstaattinen voima kasvaa siis suhteessa partikkeleiden halkaisijan neliöön, jonka takia varsinkin partikkeleilla, joiden halkaisija on pienempi kuin $10 \mu\text{m}$, sähköstaattisen voiman vaikutus kokonaiskoheesiovoimaan on suhteellisen pieni. Lisäksi samaa materiaalia olevat partikkelit saavat todennäköisemmin yhtenäisen varauksen kuin vastakkaisen, jolloin sähköstaattisen voiman merkitys on pieni tai sillä voi olla jopa hylkivä vaikutus koheesioon nähden [5].

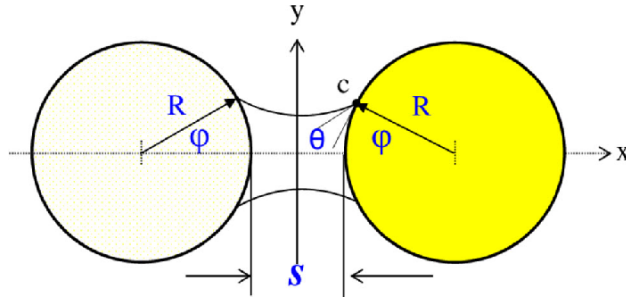
Van der Waalsin voimat johtuvat elektronien satunnaisesta liikkeestä materiaalin pinnalla, mikä synnyttää hetkellisiä dipoleita, jotka saavat aikaan dipoleita myös kosketuksessa olevien partikkeleiden pinnoille [14]. Partikkeleihin van der Waalsin voimilla on aina vetävä vaikutus [5]. Kahden identtisen pallomaisen partikkelin välinen van der Waalsin voima $F_{v,i}$ on

$$F_{v,i} = \frac{Ar}{12a^2}, \quad (2)$$

missä A on Hamakerin vakio ja r on partikkeleiden säde [15]. Jos partikkelit ovat erikokoisia, kaava muuntuu muotoon

$$F_v = \frac{A}{6a^2} \left(\frac{r_1 r_2}{r_1 + r_2} \right), \quad (3)$$

jossa r_1 ja r_2 ovat partikkeleiden säteet [1]. Hamakerin vakion arvo riippuu materiaalista ja sen ominaisuuksista. Orgaanisille aineille se on yleensä noin 7×10^{-21} J ja 2×10^{-19} J välillä [5]. Huomionarvoista on, että van der Waalsin voima laskee



Kuva 1. Nestesiltavoima kahden samankokoisen pallon välillä [16].

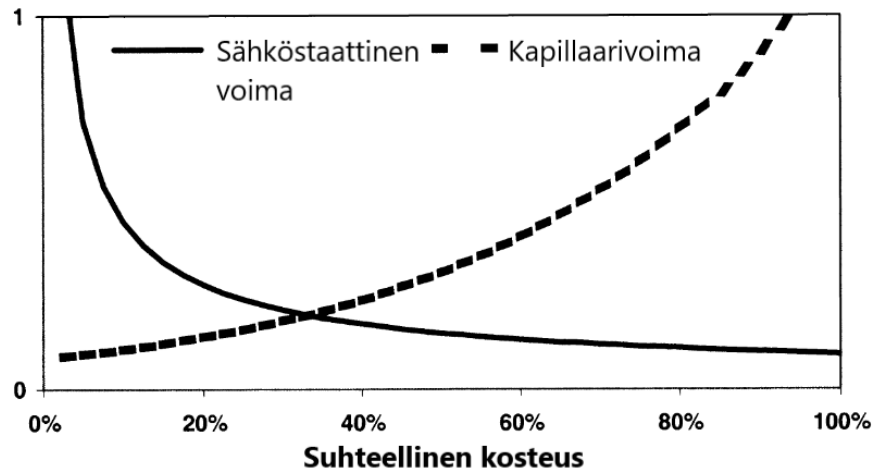
suhteessa pintojen välisen etäisyyden neliöön, joten partikkeleiden etäisyyden a kasvaessa yli 50 nm, van der Waalsin voima voidaan jättää huomiotta [5].

Nestesiltavoima tai kapillaarivoima aiheutuu partikkeleiden väliin syntyvän nestesillan vaikutuksesta (kuva 1). Siihen vaikuttavat kolme tekijää, jotka ovat pintajännitys nesteen ja partikkelin rajapinnalla, hydrostaattisen paineen aleneminen nestesillassa ja nosteen aiheuttama voima [3]. Nosteen vaikutus voidaan jättää huomiotta, kun partikkeleiden koko on pienempi kuin 1 mm [3]. Suhteellisen ilman kosteuden ylittäessä tietyn kynnyksen ($\geq 60\%$), partikkeleiden pinnalle tiivistyy nestettä, jolloin nestesiltoja voi muodostua lähellä olevien partikkeleiden välille [14, 15]. Kahden samankokoisen pallon välinen nestesiltavoima on

$$F = 2\pi\gamma r \sin(\phi + \theta) + \pi r^2 \Delta p(r, a, \phi, \theta) \sin^2 \phi, \quad (4)$$

jossa γ on nesteen pintajännitys, ϕ on puolitäyttökulma (engl. half filling angle, kuva 1), θ on nesteen ja partikkelin välinen kulma ja Δp on ilman ja nesteen välinen paine-ero, joka riippuu parametreista r , ϕ , θ ja a (kuvassa 1 merkattu S :llä) [16]. Δp voidaan määrittää Laplace-Youngin yhtälöllä [16]. Kaavan 4 ensimmäinen osa on pintajännityksen aiheuttama voima ja toinen osa hydrostaattisen paineen aiheuttama voima.

Kiinteitä siltoja syntyy lähinnä kuumissa olosuhteissa, joissa kontaktissa olevat partikkelit sintrautuvat yhteen diffuusion vaikutuksesta. Partikkelit voivat kuumen-



Kuva 2. Sähköstaattisen voiman, nestesiltavoiman (kapillaarivoima) ja suhteellisen kosteuden välinen yhteys. Muokattu lähteestä [14].

tua hankautumisen tai paineen vaikutuksesta. Kiinteitä siltoja voi syntyä myös kiertymisen, kemiallisten reaktioiden ja kolloidisen materiaalin laskeutumisen vaikutuksesta. [3]

Ilmankosteudella on vaikutusta sähköstaattiseen voimaan ja nestesiltavoimaan. Etenkin hydrofiilisillä jauheilla nestesiltavoima kasvaa suhteellisen ilmankosteuden kasvaessa, mutta samanaikaisesti sähköstaattinen voima pienenee kun kosteus partikkeleiden pinnalla laskee resistiivisyyttä, jolloin sen varaus vakioituu [14]. Tämän johdosta jauheilla voi olla tietty ilmankosteuden arvo, jolla kohesiivisyys on pienimmillään (kuva 2).

1.2 Koheesiomallit

Edellä esiteltujen partikkeleiden välisten koheesivoimien lisäksi agglomeraattien lujuuteen vaikuttavat partikkeleiden koko, muoto, tiheys, rakenne, huokoisuus ja kontaktipinta-ala [1]. Kahden pallomaisen partikkelin, joiden halkaisijat ovat d_1 ja d_2 , hajottamiseen tarvittavaa voimaa kuvataan yleensä joko Johnson-Kendall-Roberts (F_{JKR}) tai Derjaguin-Muller-Toporov (F_{DMT}) -mallien avulla [5]. JKR-

mallissa erotteluvoima saadaan yhtälöstä [17]

$$F_{JKR} = \frac{3}{2}\pi\gamma_{PE}d_r, \quad (5)$$

jossa γ_{PE} on partikkelin pintaenergia ja d_r saadaan yhtälöstä

$$d_r = \frac{d_1d_2}{d_1 + d_2}. \quad (6)$$

Vastaavasti DMT -mallissa erotteluvoiman yhtälö on [18]

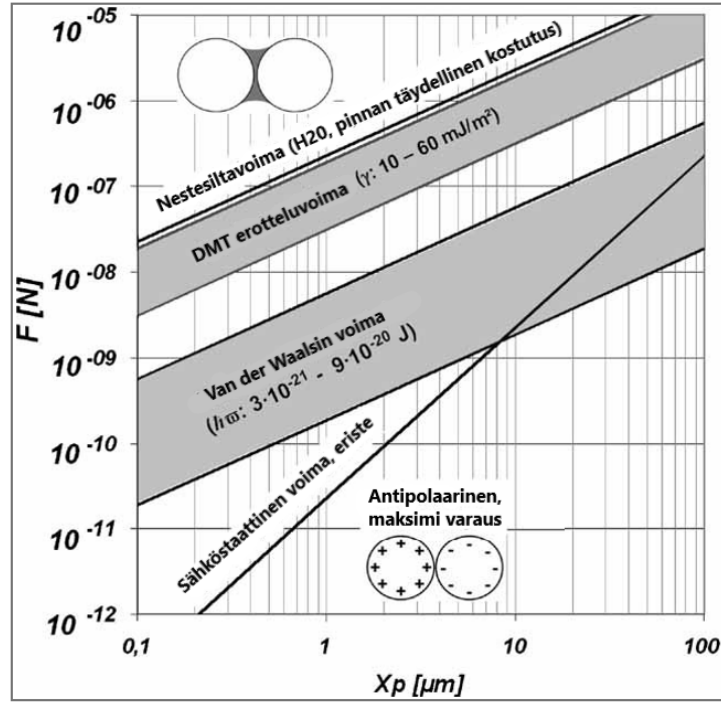
$$F_{DMT} = 2\pi\gamma_{PE}d_r. \quad (7)$$

Molemmat malleista ovat lineaariyhtälöitä partikkeleiden koon ja pintaenergian suhteen. JKR -malli soveltuu suurille ja pehmeille partikkeleille, kun taas DMT soveltuu pienille ja koville partikkeleille [5]. Näillä malleilla koheesivoimaa voidaan arvioida käyttämällä kokeellisesti saatuja pintaenergian arvoja. Täysin kostuneille pallomaisille saman kokoisille partikkeleille pintajännityksestä aiheutunut nestesiltavoima on yhtä suuri kuin DMT -mallin erotteluvoima (kuva 3) [5]. Kuvasta 3 nähdään myös, että pienille alle 10 μm partikkeleille nestesiltavoimat ja van der Waalsin voimat ovat merkittävämpiä kuin sähköstaattiset voimat.

JKR- ja DMT-mallit kuvaavat vain kahden partikkelin välistä voimaa. Jotta voisimme kuvata agglomeraatin hajottamiseen tarvittavia voimia, tarvitaan multipartikkelimalli. Rumpf esitteli mallin, joka kuvaa agglomeraattien mekaanista kestävyyttä. Hän ratkaisi tarvittavan erotteluvoiman, joka tarvitaan hajottamaan agglomeraatti kahteen yhtä suureen osaan. Siitä saatiin yhtälö agglomeraatin murtolujuudelle σ

$$\sigma = \frac{(1 - \epsilon)k_n F_{ad}}{\pi d_p}, \quad (8)$$

missä ϵ on huokoisuus, k_n on koordinaatioluku (primääripartikkeleiden keskimääräinen kontaktien määrä) ja F_{ad} on partikkeleiden välinen koheesivoima, joiden halkaisija on d_p [19]. Partikkeleiden välisen koheesivoiman laskemiseen voidaan käyttää



Kuva 3. Eri koheesivoimien suuruus partikkeleiden halkaisijan funktiona. Muokattu lähteestä [5].

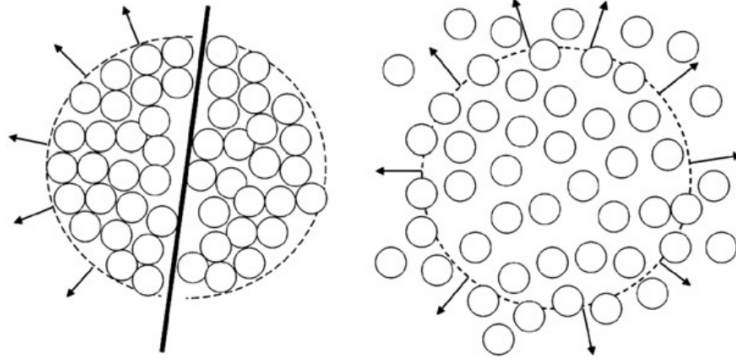
yhtälöä 3, jos oletetaan koheesion johtuvan vain van der Waalsin voimista. Yhtälöä 3 voidaan myös muuntaa ottamaan huomioon partikkeleiden pinnankarheus yhtälön

$$F_{ad} = \frac{A}{6a^2} \left(\frac{rR}{r+R} + \frac{r}{(1+\frac{R}{a})^2} \right) \quad (9)$$

mukaisesti, missä R on pinnankarheuden säde [20].

Rumpfin mallissa oletetaan, että agglomeraatti halkeaa keskeltä, kahdeksi yhtä suureksi kappaleeksi [19]. Weiler ym. esitteli uuden mallin, jossa otetaan huomioon kaikki agglomeraatin partikkeleiden väliset sidokset, joiden avulla määritettiin dispersiolujuus σ_{disp} (engl. dispersion strength) [2]. Malli olettaa, että kaikki partikkeleiden väliset sidokset hajoavat samanaikaisesti (kuva 4). Pallomaisille agglomeraateille, joissa agglomeraattien halkaisija on huomattavasti suurempi kuin partikkeleiden halkaisija, dispersiolujuus saadaan yhtälöstä

$$\sigma_{disp} = \frac{F_{ad}(1-\epsilon)k_n}{2\pi} \cdot \frac{d_{agg}}{d_p^3}, \quad (10)$$



Kuva 4. Agglomeraatin hajoaminen Rumpfin -mallissa (vasemmalla) ja Weilerin -mallissa (oikealla) [2]

missä d_{agg} on agglomeraattien halkaisija [2]. Jos halkaisijoiden suhde $d_{agg}/d_p < 50$, yhtälö 10 muuntuu muotoon [2]

$$\sigma_{disp} = \frac{F_{ad}(1 - \epsilon)k_n}{2\pi d_{agg}^2} \left(\frac{d_{agg}^3}{d_p^3} - \frac{4f}{b^2} \right), \quad (11)$$

missä

$$b = \frac{d_p}{(d_{agg} - d_p)} \quad (12)$$

ja

$$f = 1 - \frac{\arccos(b)}{180^\circ}. \quad (13)$$

Weilerin esittelemässä mallissa oletuksina ovat, että hajottavat voimat vaikuttavat koko agglomeraatin pinta-alalla, agglomeraatin kaikki sidokset hajoavat kokonaisuudessaan ja välittömästi, agglomeraatit ja partikkelit ovat pallomaisia, partikkelit ovat keskenään saman kokoisia, vain välittömässä läheisyydessä vaikuttavat koheesiovoimat huomioidaan sekä Rumpfin mallin mukainen tilavuuden ja pinnan huokoisuuden vastaavuus [2]. Monte Carlo -simulaatioiden mukaan Weilerin malli antaa agglomeraateille suuremman lujuuden kuin Rumpfin malli [21].

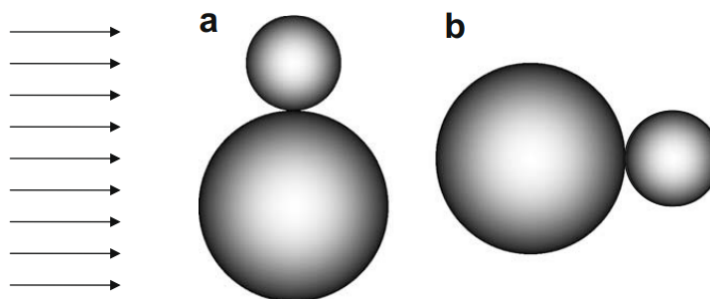
2 Aerodynaamiset dispergointimekanismit

Partikkeleihin kohdistuu samanaikaisesti koheesivoimia ja hajottavia voimia, eli dispersiovoimia. Dispersiovoimia voivat olla esimerkiksi sähköinen vuorovaikutus samanmerkkisesti varautuneilla partikkeleilla tai painovoima, joka on yksi merkittävimmistä hajottavista voimista normaaleissa olosuhteissa. Vaikka koheesivoimat kasvavat partikkelin halkaisijan kasvaessa, dispersiovoimat kasvavat suhteessa halkaisijan toiseen tai kolmanteen potenssiin. Tämän vuoksi alle $10\ \mu\text{m}$ partikkeleille nämä luonnolliset hajottavat voimat ovat pieniä verrattuna koheesivoimiin. Hajottavien voimien vaikutus kasvaa partikkeleiden kasvaessa siten, että halkaisijaltaan satojen mikrometrien kokoihin partikkeleihin niiden vaikutus on suurempi kuin koheesivoimien. Pienien partikkeleiden dispergoimiseksi täytyy niihin kohdistaa ulkoisia voimia, esimerkiksi ilmapirran avulla. [5]

Jauheagglomeraattien dispergoimiseksi hajottavien voimien täytyy olla suurempia kuin kohesiivisten voimien. Dispersioivan fluidin ja jauheagglomeraattien välille syntyy monia eri voimia, joilla tämä voidaan saavuttaa. Voimia aiheuttaa muun muassa nopea kiihdytys, jarrutus ja turbulenssi. Dispergointilaitteissa dispersio voi aiheutua useamman mekanismin summana, mutta yleensä jokin mekanismi selittää suurimman osan dispersiosta. Aerodynaamiset dispergointimekanismit jauheen ja fluidin välillä voidaan jakaa kolmeen ryhmään [9]:

- (1) Dispergointi äkkinäisen kiihdytyksen, jarrutuksen ja/tai leikkausvirtauksen avulla.
- (2) Dispergointi törmäyttämällä jauheagglomeraatit paikallaan olevaan tai liikkuvaan kohteeseen.
- (3) Dispergointi muiden mekaanisten voimien avulla kuten fluidisointi, sekoitus, värinä tai kaavinta.

Tärkeintä jauheiden dispergoinnissa on löytää sopiva ja tehokas sovellus, joka hyödyntää dispergointimekanismeja eikä riko primääripartikkeleita. Sen lisäksi dis-



Kuva 5. Dupletti tasaisessa virtauksessa [1].

pergointitehokkuutta voi parantaa partikkeleiden välisten voimien pienentäminen käyttämällä väliaineena pienempiä partikkeleita. [1]

2.1 Dispergointi äkkinäisen kiihdyttämisen avulla

2.1.1 Dispergointi kiihdyttämällä tasaisessa virtauksessa

Agglomeraattiin kohdistuu suurin rasitus maksimikiihdytyksessä, joka tapahtuu välittömästi, kun jauhe saapuu virtauskenttään [1]. Tasaisessa virtauksessa pallomaisien kappaleiden maksimaalista veto- ja leikkauslujuutta voidaan approksimoida yhtälöllä

$$\sigma_{max}, \tau_{max} = \frac{3\mu u_r}{d_p}, \quad (14)$$

jossa σ_{max} ja τ_{max} ovat veto- ja leikkauslujuuden maksimit, μ on fluidin viskositeetti ja u_r on partikkelin ja fluidin välinen suhteellinen nopeus [22]. Tämä yhtälö 14 on aikaisimpia yrityksiä kuvata agglomeraattien hajoamista aerodynaamisten voimien avulla, mutta se yksinkertaistaa olettamalla, että agglomeraatit ovat yhtenäisiä ja homogeenisiä palloja. Usein dispergointimekanismeja tutkittaessa kuitenkin oletetaan agglomeraattien koostuvan kahdesta dupletin (engl. doublet) tai kolmesta tripletin muodostavasta primääripartikkelista, jotka pysyvät yhdessä koheesiovoimien avulla [1]. Kuvassa 5 on havainnollistettu duplettiin kohdistuvia voimia tasaisessa virtauksessa. Tasaisessa virtauksessa kahta samankokoista partikkeliä ei voida

dispergoida, sillä fluidin kohdistama voima on tällöin yhtä suuri molempiin partikkeleihin [23]. Dupletin hajottamiseen tarvittavaa voimaa tasaisessa virtauksessa voidaan kuvata Newtonin toisen lain mukaisesti yhtälöillä

$$m_A \frac{du_p}{dt} = R_{fA} - F_d \quad (15)$$

$$m_B \frac{du_p}{dt} = R_{fB} + F_d, \quad (16)$$

joissa alaindeksit A ja B viittaavat eri partikkeleihin, m on partikkelin massa, u_p on partikkelin nopeus, R_f fluidin partikkeliä vastustava voima ja F_d kuhunkin partikkeliin kohdistuva voima [6]. Jos oletetaan, että partikkeleiden tiheys on sama, Stokesin lain mukaisesti saadaan yhtälöt vastustaville voimille R_{fA} ja R_{fB}

$$R_{fA} = 3\pi\mu u_r d_{pA} \quad (17)$$

$$R_{fB} = 3\pi\mu u_r d_{pB}, \quad (18)$$

joissa d_{pA} ja d_{pB} ovat partikkeleiden halkaisijat [6]. Sijoittamalla yhtälöt 17 ja 18 yhtälöihin 15 ja 16 saadaan partikkeleiden väliseen kontaktipintaan kohdistuvalle voimalle yhtälö [6]

$$F_d = 3\pi\mu u_r d_{pA} d_{pB} \frac{(d_{pB} - d_{pA})}{(d_{pA}^2 - d_{pA} d_{pB} + d_{pB}^2)}. \quad (19)$$

Jos koheesivoima tiedetään, yhtälön 19 avulla voidaan arvioida, onko voima riittävä dupletin hajottamiseen. Samankaltainen malli, joka ei rajoitu vain kahteen partikkeliin, on myös kehitetty. Kyseinen malli toimii siten, että approksimoidaan agglomeraattia duplettina, joka voi hajota pienemmiksi dupleteiksi. Malli vastaa muuten yhtälöitä 15 ja 16, mutta sisältää korjauskertoimen β , joka huomioi toisen pallon vaikutuksen

$$m_A \frac{du_p}{dt} = 3\pi\beta_A \mu u_r d_{pA} - F_d \quad (20)$$

$$m_B \frac{du_p}{dt} = 3\pi\beta_B \mu u_r d_{pB} + F_d, \quad (21)$$

missä β_A ja β_B ovat korjauskertoimet kummallekin partikkelille [24]. Jos oletetaan van der Waalsin voimien olevan ainoa koheesivoima partikkeleiden välillä, voidaan yhtälöistä 20 ja 21 määrittää populaation tasapainoyhtälö (engl. population balance equation, PBE), joka ennustaa partikkeleiden kokojakauman muutosta kiihdytyksen takia. Useassa tutkimuksessa on todettu partikkeleiden halkaisijan suhdeluvulla

$$Z = \frac{d_{pA}}{d_{pB}} \quad (22)$$

olevan suuri vaikutus partikkeleiden dispergoituvuuteen [1, 6, 24, 25]. Inertian kasvaessa alue, jolla dispergoitumista tapahtuu kasvaa. Tässäkin mallissa on huomattavia yksinkertaistuksia, eikä se pysty täysin kuvaamaan dispergoitumisprosessin monimutkaisuutta [1].

Stokesin laki kuvaa vastustavaa voimaa fluidissa pienillä Reynoldsin luvuilla. Kousaka ym. [6] laajensi duplettien hajottavan voiman mallia toimimaan huomattavasti suuremmilla Reynoldsin luvuilla kuin Stokesin laki sallii. Tässä mallissa duplettiin kohdistuva dispersiovoima saadaan yhtälöstä

$$F_d = [0, 119\rho_a u_r^2 d_{pB}^2 Z^2 (\kappa_A - Z\kappa_B) + 2, 07(\mu\rho_a u_r^3 d_{pB}^6 Z^3)^{1/2} \cdot (\kappa_A - Z^{3/2}\kappa_B) + 9, 05\mu u_r d_{pB} Z (\kappa_A - Z^2\kappa_B)] (Z^3 + 1)^{-1}, \quad (23)$$

missä κ on dynaaminen muotokerroin [25]. Sen arvo pallomaisille partikkeleille on yksi ja kun $\kappa_A = \kappa_B = 1$ ja $Z = 0,5$ dispersiovoima saavuttaa maksimin.

Calvert ym. [26, 27] tutkivat agglomeraattien dispergoitumismekanismeja simulaatioiden avulla, jonka lisäksi he esittelivät mallin agglomeraatin dispergoimiseksi kiihdytyksen avulla. Mallissa määritellään uudet muuttujat dispersiosuhde DR sekä dispersioindeksi DI . Dispersiosuhde kuvaa pallomaiseen agglomeraattiin kohdistuvan fluidin vastustavan voiman ja partikkeleiden välisten sidosten hajottamiseen tarvittavan voiman suhdetta. Se on dispersioindeksin funktio, joka taas saadaan yhtälöstä

$$DI = \frac{\rho_f d_{agg} u_r^2}{\Gamma} \left(\frac{d_{agg}}{d_p} \right) = We \left(\frac{d_{agg}}{d_p} \right), \quad (24)$$

missä ρ_f on fluidin tiheys, Γ on rajapintaenergia ja We on Weberin luku. Weberin luku kuvaa fluidin dispersiota aiheuttavan kineettisen energian ja kohesiivisten sidosten hajottamiseen tarvittavan työn suhdetta. Tällöin siis dispersiosuhde saadaan yhtälöstä

$$DR = f \left[We \left(\frac{d_{agg}}{d_p} \right) \right]. \quad (25)$$

Dispersiosuhdetta voidaan tutkia DEM-simulaatioilla, jolloin se vastaa myös agglomeraatin hajonneiden sidosten määrän suhdetta alkuperäisten sidosten määrään yhtälön 26 mukaisesti

$$DR = \frac{N_0 - N_t}{N_0}, \quad (26)$$

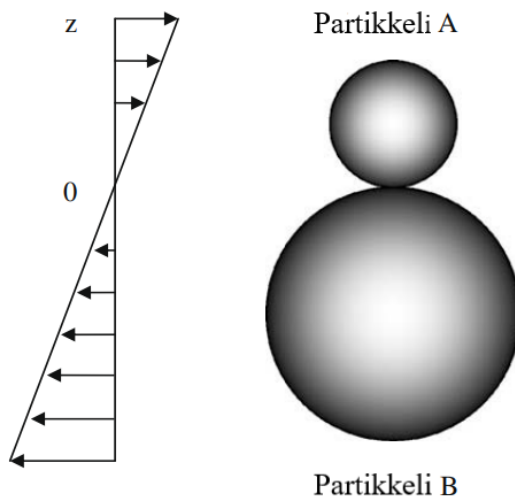
missä N_0 on sidosten määrä aluksi ja N_t sidosten määrä tietyn ajan kuluttua. Calvert ym. huomasi simulaatioissaan [26, 27], että kiihdyttämällä tasaisessa virtauksessa agglomeraatteja dispersiota tapahtuu vasta suhteellisen nopeuden ylitettyä tietyn raja-arvon, jonka jälkeen agglomeraatti lähestyy täysin dispergoitunutta tilaa asymptoottisesti. Suhteellisen nopeuden raja-arvo kasvaa suhteessa sidosten lujuuteen, kun taas agglomeraatin halkaisijan kasvaessa tarvittava suhteellinen nopeus pienenee. Suuret agglomeraatit puolestaan eivät dispergoitu täydellisesti vaan ikään kuin kuoriutuvat kerroksittain.

2.1.2 Dispergointi leikkausvirrassa

Pallomaisten partikkeleiden dispergointia on tutkittu myös yksinkertaisessa leikkausvirtauksessa (kuva 6). Leikkausvirtauksessa pallomaiseen partikkeliin kohdistuva leikkausjännitys on maksimissaan sen keskellä kulkevalla tasolla, jolloin sen arvo on

$$\tau = 8,5\mu\gamma, \quad (27)$$

missä γ on pallon poikki vaikuttava nopeusgradientti [22].



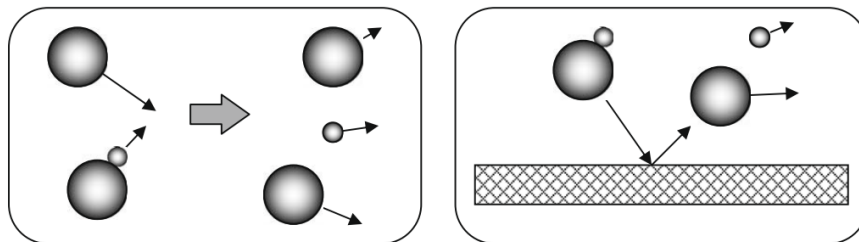
Kuva 6. Dupletti yksinkertaisessa leikkausvirtauksessa. Muokattu lähteestä [1].

Kahden partikkelin muodostaman dubletin tapauksessa olettamalla partikkelin B olevan huomattavasti suurempi kuin partikkeli A (kuva 6), leikkausvirta aiheuttaa taivutusmomentin σ_γ . Taivutusmomenttia voidaan approksimoida yhtälöllä

$$\sigma_\gamma \approx \frac{93\mu\gamma}{\pi c^3}, \quad (28)$$

missä c on ympyrämäisen kontaktialueen halkaisijan suhde partikkelin halkaisijaan [6]. c :n arvo on yleensä pienempi kuin yksi, jonka vuoksi taivutusmomentti on leikkausjännitystä suurempi ja on siis pääasiainen dispergointimekanismi leikkausvirtauksessa [1]. Lisäksi, pienille partikkeleille kiihdyttämällä tasaisessa virtauksessa on suurempi vaikutus dispergointiin kuin leikkausvirtauksen aiheuttama jännitys [6].

Dublettiin kohdistuu maksimijännitys välittömästi, kun se laitetaan leikkausvirtaukseen. Ajan myötä dubletti alkaa pyöriä, joka pienentää yhtälön 28 määrittämää jännitystä. Sen sijaan jännitys aiheutuu pääsääntöisesti keskipakoisvoimasta, jonka vaikutus ei ole kovin merkittävä dispergointimekanismeja tutkittaessa. [6]



Kuva 7. Partikkeleiden keskenäiset törmäykset (vasemmalla) ja partikkeleiden törmäykset seiniin (oikealla) [1].

2.2 Dispergointi törmäyttämällä paikallaan olevaan tai liikkuvaan kohteeseen

Dispergointilaitteissa partikkelit törmäävät toisiinsa, laitteen seinämiin ja mahdollisiin muihin esteisiin, kuten kuvassa 7 on esitetty. Iskusta aiheutunut voima voidaan esittää yhtälöllä

$$F = mv_i/\Delta t, \quad (29)$$

missä v_i on partikkelin törmäysnopeus ja Δt on iskun kesto, joka on hyvin lyhyt pienillä agglomeraateilla. [6]

Iskun aiheuttama pallomaisen agglomeraatin halki leikkaavaan tasoon kohdistuva puristusjännitys voidaan määrittää yhtälöllä

$$\sigma_i = \frac{2}{3}\rho_p d_{agg} \left(\frac{v_i}{\Delta t} \right), \quad (30)$$

missä ρ_p on agglomeraatin tiheys [6]. Yhtälön 30 määrittämä puristuslujuus aliarvioi agglomeraattiin kohdistuvaa jännitystä, sillä agglomeraatin muihin osiin kohdistuu suurempi jännitys, minkä lisäksi taivutusmomentti lisää jännitystä agglomeraatin muodon ollessa epäsäännöllinen. Termin $v_i/\Delta t$ ollessa tarpeeksi suuri yhtälön 30 arvo ylittää agglomeraatin lujuuden, agglomeraatti hajoaa. Tällöin agglomeraatin hajoaminen riippuu törmäyksen todennäköisyydestä η_T , joka saadaan yhtälöstä

$$\eta_T = f(\Psi_c), \text{ jossa } \Psi_c = \frac{\rho_p u_r d_{agg}^2}{18\mu d_s}. \quad (31)$$

Ψ_c on inertia parametri ja d_s on esteen halkaisija, mihin törmäys kohdistuu. Oletetaan Ψ_c :lle tietty arvo, jolla osumatodennäköisyys on 0,5, eli puolet agglomeraateista törmäävät esteeseen. Tällöin vastaava agglomeraattien halkaisija $d_{p\Psi}$ on

$$d_{p\Psi} = \sqrt{\frac{18\mu d_s \Psi_c}{\rho_p u_r}}. \quad (32)$$

Jos siis kokeellisesti havaitaan, että puolet agglomeraateista törmäävät esteeseen, tällöin dispergoituneiden agglomeraattien halkaisija saadaan yhtälöstä 32. Iskuvoima, puristusjännitys ja inertia parametri kasvavat suhteessa agglomeraatin halkaisijaan, minkä vuoksi dispergointi törmäyksen avulla on tehokkaampaa suurille agglomeraateille [1].

3 Dispergointilaitteet

3.1 Yleisimmät dispergointilaitetyypit

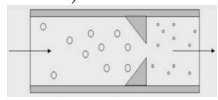

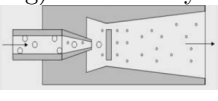
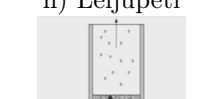
Aerodynaamisia dispergointilaitteita on monen tyyppisiä. Yleisimmät niistä ovat eduktori (engl. eductor), venturi, suutin, kapillaariputki, aukko (engl. orifice), sekoi-
tin ja kiinteä este [1]. Näiden lisäksi on märkädispergointimenetelmiä, mutta niitä ei käsitellä tässä tutkielmassa. Näiden erityyppisten mekanismien dispergointitehokkuus poikkeaa toisistaan ja eri tyypit voivat soveltua paremmin eri käyttötarkoituksiin. Kiinteän esteen sisältävät laitteet hyödyntävät iskusta aiheutuvaa dispersiota, joka on todettu tehokkaimmaksi dispergointimekanismiksi [6]. Toisaalta se on erittäin aggressiivinen tapa ja se voi myös rikkoa partikkeleita hauraissa aineissa [1].

Tyypillinen eduktori sisältää kaksi sisääntuloa, yksi paineilmalle ja toinen dispergoitavalle jauheelle (taulukko Ia). Jauhe voidaan saada laitteen sisälle useammalla eri tavalla, esimerkiksi painovoiman tai olemassa olevan paine-eron avulla [1]. Eduktoreissa dispergointi tapahtuu nopean kiihdytyksen ja leikkauksvirran aiheuttamana. Lisäksi partikkeleiden törmäykset toisiinsa sekä laitteen seinämiin dispergoivat jauhetta [1].

Tang ym. valmistivat yksinkertaisen ja kustannustehokkaan dispergointilaitteen partikkelikokoanalyysiä varten. He käyttivät eduktorimallin dispergointilaitetta, jonka he valmistivat olemassa olleesta osasta, joka on alun perin tarkoitettu tyhjiön tuottamiseen. Laitetta verrattiin TSI:n valmistamaan (SSPD) Model 3433 ja Malvernin Scricco kuivajauhedispergointilaitteisiin. Tutkimuksessa valmistettu laite toimi yhtä tehokkaasti kuin edellä mainitut kaupalliset laitteet. [28]

Venturityypin dispergointilaitteen pääasiallinen dispergointimekanismi perustuu partikkeleiden nopeaan kiihdytykseen tai jarrutukseen, mikä syntyy venturi-ilmiön vaikutuksesta. Toiselta puolelta kapeneva ja toiselta puolelta laajeneva muoto (taulukko Ib) aiheuttaa sen, että fluidin nopeus putken kaventuessa kasvaa ja paine

Taulukko I. Yleisimmät aerodynaamiset dispergointilaitetyypit [1].

Laitetyyppi	Dispergointimekanismi	Kommentit
<p>a) Eduktori</p> 	<ul style="list-style-type: none"> Kiihdyttäminen ja leikkausvirtaus Agglomeraattien keskinäiset törmäykset sekä törmäykset laitteen seiniin 	<ul style="list-style-type: none"> Jauheet dispergoituu kohtuullisen hyvin suuren suhteellisen nopeuden ansiosta. Ei onnistu dispergoimaan joitakin erittäin kohesiivisiä jauheita.
<p>b) Venturi</p> 	<ul style="list-style-type: none"> Kiihdyttäminen ja leikkausvirtaus Agglomeraattien keskinäiset törmäykset sekä törmäykset laitteen seiniin 	<ul style="list-style-type: none"> Suhteellinen nopeus ei mahdollisesti riitä dispergoimaan pienen partikkelikoon kohesiivisiä jauheita.
<p>c) Suutin</p> 	<ul style="list-style-type: none"> Kiihdyttäminen ja leikkausvirtaus Agglomeraattien keskinäiset törmäykset sekä törmäykset laitteen seiniin 	<ul style="list-style-type: none"> Jauhe on jo ilmavirrassa tullessaan suuttimeen, jonka vuoksi suuttimessa ei välttämättä saavuteta tarpeeksi suuria dispersiivoimia.
<p>d) Kapillaariputki</p> 	<ul style="list-style-type: none"> Kiihdyttäminen ja leikkausvirtaus Törmäykset putken sisääntulon reunoihin 	<ul style="list-style-type: none"> Tutkimusten mukaan dispergoituminen tapahtuu heti jauheen tullessa putkeen, eikä putken pituus vaikuta dispersiotehokkuuteen.
<p>e) Aukko</p> 	<ul style="list-style-type: none"> Kiihdyttäminen ja leikkausvirtaus Törmäykset aukon reunoihin 	<ul style="list-style-type: none"> Laite toimii tehokkaasti monille materiaaleille törmäysten ja suurten nopeuden muutosten ansiosta. Voi kuitenkin rikkoa hauraita partikkeleita.
<p>f) Sekoitin</p> 	<ul style="list-style-type: none"> Kiihdyttäminen ja leikkausvirtaus Törmäykset potkurin lapoihin 	<ul style="list-style-type: none"> Sekoitin tyyppin laitteissa pystytään kontrolloimaan hyvin ulostulevien partikkeleiden määrää.
<p>g) Kiinteä levy</p> 	<ul style="list-style-type: none"> Kiihdyttäminen ja leikkausvirtaus suuttimessa Törmäykset kiinteään levyyn 	<ul style="list-style-type: none"> Lisäämällä suuttimen jälkeen levy, johon partikkelit iskeytyvät, voidaan dispergoida erittäin kohesiivisiä materiaaleja. Laite kuitenkin todennäköisesti rikkoo osan partikkeleista.
<p>h) Leijupeti</p> 	<ul style="list-style-type: none"> Kiihdytys fluidisoivan ilman avulla Jauheen ja apuaineiden väliset törmäykset 	<ul style="list-style-type: none"> Leijupeti dispergoi jauheita hyvin, mutta törmäykset tiheiden apuaineiden kanssa voi rikkoa partikkeleita. Lisäksi ilman virtausnopeus rajoittuu siihen pisteeseen, jossa apuaineet nousevat ilmavirran mukana.

pienenee Bernoullin lain mukaisesti [1]. Nopea jauheen kiihdyttäminen ja jarruttaminen toimii tehokkaasti, jos jauheen ja fluidin suhteellinen nopeus on suuri [6]. Venturityypin dispergointilaitteella voi olla haastavaa saavuttaa tarpeeksi suurta suhteellista nopeutta [6].

Suutindispergoija (engl. nozzle disperser) on tyypillinen dispergointilaitte, joka koostuu partikkeleilla ladatusta putkesta (engl. particle laden pipe), jossa on paineilmaa (taulukko Ic. Partikkelit ovat suhteellisen suuressa nopeudessa jo ennen kuin ne saapuvat suuttimen päähän, jossa se kapenee ja kiihdyttää partikkeleja lisää. Suuttimen dispersiotehokkuudesta ei ole paljoa tutkimustietoa. Suutinta voi käyttää myös yhdessä esteen kanssa, johon jauheagglomeraatit voidaan törmäyttää suuttimesta tultuaan (taulukko Ig).

Tyypillinen kapillaariputki on esitetty taulukossa I d. Yleisesti on ajateltu, että nopeusgradientti, joka aiheuttaa leikkausjännityksen on pääasiallinen dispergointimekanismi kapillaariputkessa [1]. Tutkimalla eripituisia kapillaariputkia ja niiden dispergointitehokkuutta on kuitenkin huomattu, että dispersiota tapahtuu jauheen törmätessä kapillaariputken sisääntulon seinämiin. Muuttamalla kapillaariputken pituutta 0,06 metristä 0,5 metriin ei ollut vaikutusta partikkelikokoon [6].

Aukko-dispergointilaitte (engl. orifice disperser) koostuu putkesta, jonka keskellä putken halkaisijaa pienennetään hetkellisesti luoden pienen aukon, josta jauhe pääsee kulkemaan (taulukko Ie). Halkaisijan hetkellinen pienentäminen aiheuttaa aukon kohdalla äkkinäisen kiihdytyksen ja aukon jälkeen nopeus taas laskee nopeasti. Pääasiallinen dispergointimekanismi on kuitenkin iskusta aiheutuva dispersio, kun jauhekasaantumia osuvat aukon reunoihin ja toisiinsa [6].

Sekoitintyyppin dispergointilaitte yhdistää eri dispergointimekanismeja. Laitteen yläosassa on sisääntuloaukko, josta dispergoitava jauhe, sekä paineilma pääsevät kammioon. Kammiossa on siipipyörä, jonka terät hajottavat iskemällä, sekä turbulenttisten ilmavirtojen avulla jauhekasaantumia (taulukko If). Pääasiallinen disper-

gointimekanismi riippuu jauheen tilasta sen tullessa kammioon. Jos jauhe on suhteellisen hyvin eroteltua jo sen tullessa kammioon, kiihdyttäminen toimii pääasiallisena dispergointimekanismina. Jos taas jauhe on suurina kasaantumina, dispersio iskujen avulla dominoi dispergointiprosessia [6]. Yleensä dispergointilaitteen yläosassa sivulla on ulostuloputki. Sekoitintyyppin dispergointilaitteissa etuna on se, että ulostuloputken avulla voidaan kontrolloida ulostulevien partikkeleiden määrää [1].

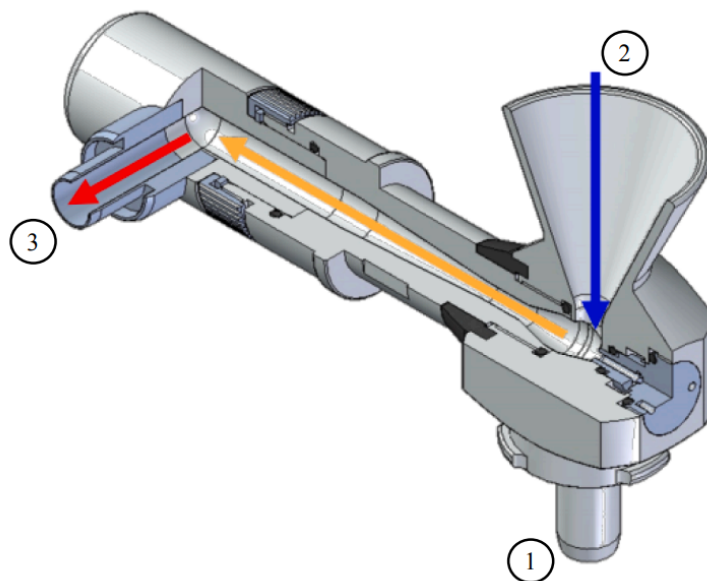
Tyypillinen iskudispergointilaitte koostuu suuttimesta ja kiinteästä levystä (taulukko Ig). Suuttimen avulla jauheagglomeraattien vauhtia kiihdytetään, jolloin ne törmäävät kovalla vauhdilla kiinteään levyyn, joka on kohtisuorassa virtaukseen nähden. Tämä on osoittautunut tehokkaaksi tavaksi dispergoida jauheita, mutta se voi myös rikkoa primääripartikkeleita varsinkin hauraissa aineissa. [1]

Leijupedeillä on useampia käyttötarkoituksia, mutta niillä voidaan myös dispergoida jauheita. Taulukossa Ih) on esitetty normaali leijupeti, jossa syntyy voimia törmäysten johdosta sekä epätoivottuja viereisten fluidisoitujen partikkeleiden koheesivoimia. Kohesiiviset jauheet voidaan fluidisoida käyttämällä suuria dispersion apuaineita eli fluidisoivia partikkeleita, mitkä sekoittavat jauhetta ja törmäävät agglomeraatteihin. Tällöin primääripartikkelit vapautuvat ja pääsevät virtaukseen. [1]

Tehokas jauheiden dispergointi on mahdollista leijupedissä apuaineiden avulla ja sen tehokkuus voi yltää samaan kuin sekoitintyyppin dispergointilaitteella. Dispersion apuaineen määrä on tärkeä parametri leijupedissä. Dispergoitavan jauheen massajakauman mediaanihalkaisija on pienimmillään kun apuaineen kerroksen paksuus on 0,01–0,02 m. [29]

3.2 Kaupalliset laitteet

Useita kaupallisia laitteita eri valmistajilta, jotka hyödyntävät jotakin edellä esiteltyä laitetyyppiä tai niiden yhdistelmää, on kehitetty partikkelikokoanalyysiä varten. Monet näistä laitteista ovat osana tai yhdistettävissä partikkelikokoanalysointilaitteisiin,

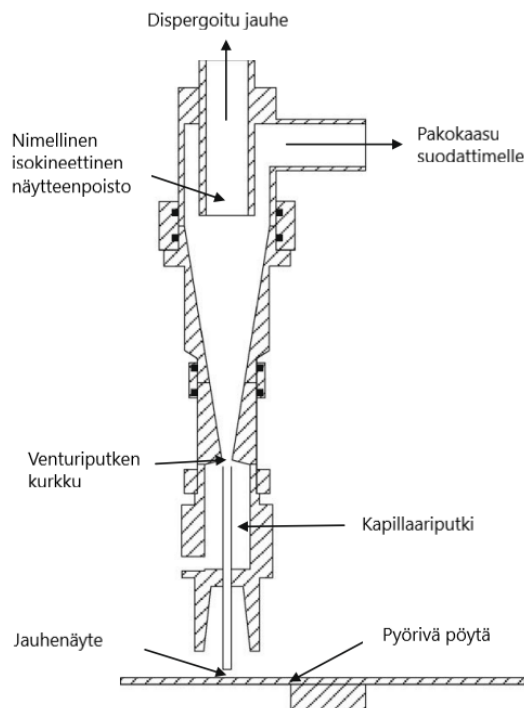


Kuva 8. Malvern Panalytical Aero S -dispergointilaitte [11].

joka käyttää laserdiffraktiota jauhepartikkeleiden kokojakauman määrittämiseen.

Malvern Panalytical valmistaa erilaisia mittauslaitteita kuten partikkelikokoanalysaattoreita. Partikkelikokoanalysaattori Mastersizer 3000:een voidaan yhdistää dispergointilaitteet Aero S tai Aero M. Kuten kuvasta 8 nähdään niin Aero S -dispergointilaitte on tyypiltään venturi, jossa paineilmatulo on laitteen alla (portti 1), jauhe laitetaan laitteeseen portista 2 ja partikkelit poistuvat portista kolme. Venturiputken jälkeen laitteessa on 90 asteen kulma, jonka vuoksi partikkelit törmäävät suurella nopeudella seinään, joka aiheuttaa dispergointia. Aero S -laitteessa dispergointimekanismeja ovat partikkeleihin kohdistuva leikkausjännitys sekä partikkeleiden törmäykset keskenään ja laitteen seinämiin. Paine on säädettävissä 0–4 bar välillä ja laite pystyy dispergoimaan 0,1–3500 μm kokoisia partikkeleita. [30]

Toinen esimerkki kaupallisesta dispergointilaitteesta on TSI:n (Shoreview, Yhdysvallat) valmistama pienen luokan jauhedispergointilaitte (engl. small-scale powder disperser, SSPD). Dispergoitava jauhe asetetaan pyörivälle pöydälle, josta se imaistaan kapillaariputken ja venturi-imulaitteen läpi (kuva 9). Matalan paineen alue syn-



Kuva 9. TSI pienen luokan dispergointilaitte. Muokattu lähteestä [1].

tyy suuren ilmavirran nopeuden takia venturiputken kurkulle, joka vetää jauheen kapillaariputken läpi. Laitteen on todettu toimivan hyvin, kun virtaama ja nopeus venturiputken kurkulla ovat 16,5 l/min ja 310 m/s sekä virtaama ja nopeus kapillaariputkessa ovat 2,0 l/min ja 32,5 m/s [1]. Kirjallisuudesta löytyy myös laitteesta tehty arviointi [31].

Aero-DisperserTM:ä käytetään AerosizerTM-analysointilaitteen yhteydessä hajottamaan agglomeraatit. Laite nostaa agglomeraatit pulssitetun suihkuteknologian avulla ilmaan, josta ne siirtyvät voimakkaaseen leikkausvirtaukseen, missä agglomeraatit hajoavat primääripartikkeleiksi. Laitteen suorituskykyä voidaan parantaa neljän eri muuttujan avulla, jotka ovat: leikkausvoima, syöttönopeus, siirtonopeus leijupedin ja dispersiotapin välillä ja tapin värähtely. Analysointilaitteen avulla on mahdollista mitata 0,2–700 μm kokoisia partikkeleita. [32]

Partikkeleiden kokoa ja muotoa voidaan tutkia mikroskopian avulla. Jotta näy-

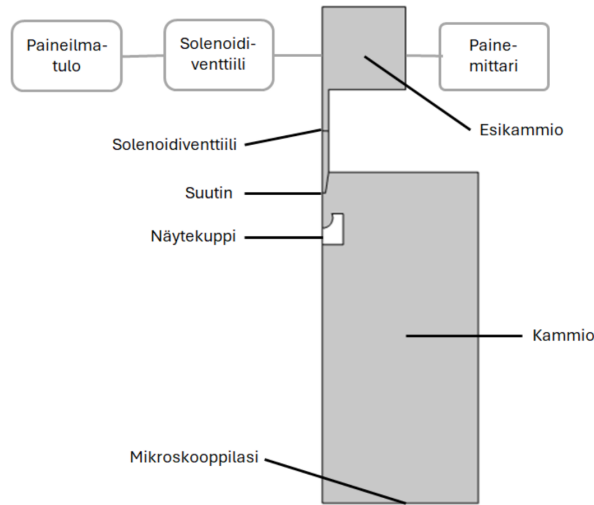
te saadaan dispergoitua näytelasille, käytetään erilaisia laitteita. Esimerkiksi Malvern Panalytical valmistaa Morphologi-sarjaa, jossa on sisäänrakennettu jauhedispergointilaitte. Laitteessa partikkelit ammutaan paineilman avulla metallilevyn, jossa on reikiä, läpi, jonka jälkeen partikkelit laskeutuvat näytelasille. Analysoitavien partikkeleiden koko voi vaihdella 0,5 mikrometrinä yli 1300 mikrometriin [33]. Vastaavia laitteita, jotka dispergoivat jauheen näytelasille, ovat muun muassa Clemexin jauhedispergointilaitte ja Nebula dispergointilaitte. Nämä laitteet eroavat Malvernin laitteesta siten, että ne toimivat alipaineella. Laitteissa kammioon pumpataan alipaine, jonka jälkeen partikkelit laukaistaan sinne erilaisten suutinten läpi. Clemexin jauhedispergointilaitteeseen on saatavilla kolme suutinta eri kokoisille partikkeleille [34]. Nebula dispergointilaitteella voidaan dispergoida 0,15 μm –1,5 mm kokoisia partikkeleita, jotka analysoidaan pyyhkäisyelektronimikroskoopin avulla [35].

4 Menetelmät

4.1 Geometria

Työn tarkoituksena on mallintaa aerodynaaminen dispergointilaitte, joka dispergoi aineen ilmaan, josta se kerätään mikroskooppilasille jatkotutkimuksia varten. Laite siis eroaa useimmista kaupallisista laitteista, joissa dispergoitun jauheen partikkelikokojakaumaa tutkitaan laserdiffraktion avulla. Tällöin myös laitteen suunnittelussa täytyy ottaa huomioon näytteen kerääminen. Ratkaisuksi tähän jauhe täytyy dispergoida suljettuun kammioon, jonka pohjalla olevalle näytelasille jauhe laskeutuu gravitaation ja virtauksen vaikutuksesta. Suljetussa kammiossa paine kasvaa, kun sinne tulee paineilmaa suuttimen läpi. Jotta paine kammiossa ei kasvaisi liian suureksi ja siitä ei tulisi ongelma näytettä poistettaessa kammioista, täytyy kammioon päästettävän ilman määrää rajoittaa. Tämän vuoksi laitteen suunnittelussa päädyttiin siihen, että laitteeseen lisätään esikammio, joka paineistetaan korkeaan paineeseen ja ilma vapautetaan suuttimen läpi suurempaan kammioon, jossa jauhenäyte on suuttimen alla kupissa. Esikammion tilavuuden ollessa huomattavasti pienempi kuin suuremman kammion, paine ei nouse suuremmassa kammiossa merkittävästi normaalia ilmanpainetta suuremmaksi. Sen vuoksi paine voidaan tasata siten, ettei suuria virtauksia ei synny kammioon.

Kuvassa 10 on havainnollistettu dispergointisysteemiä ja piirretty ensimmäinen versio laitteen geometriasta. Geometriaa tullaan muokkaamaan simulaatioiden perusteella, jotta saavutetaan dispergoitunut jauhenäyte, joka on levittäytynyt tasaisesti. Systemi koostuu paineilmatulosta, solenoidiventtileistä, painemittarista ja mallinnettavasta laitteesta. Paineilmatulon ja ensimmäisen solenoidiventtiilin avulla hallinnoidaan esikammion painetta, joka voidaan varmentaa painemittarin avulla. Avaamalla toinen solenoidiventtiili, ilmavirta lähtee kohti suutinta, jossa sen nopeus kasvaa. Suuttimesta lähtee voimakas suikuvirta kuppiin, jossa jauhenäytettä pide-



Kuva 10. Dispergointisysteemi, jossa geometria on piirretty 2D-akselisymmetrisenä mallina.

tään. Tämä voimakas ilmavirta ja partikkeleiden törmäykset hajottavat agglomeraatit primääripartikkeleiksi, jotka leviävät kammioon ja laskeutuvat sen pohjalle ja siellä olevalle mikroskooppilasille. Käytännössä näytekuppi tarvitsee myös pidikkeen, mutta sitä ei huomioida mallinnuksessa.

Taulukossa II on esitetty tärkeimmät laitteen geometriset parametrit ja niiden arvot ennen optimointia. Optimoitavia parametrejä ovat r_{ek} , r_{suutin} , c ja r_{kam} , joiden lisäksi esikammion paine p ja kannen muoto optimoidaan. Näytekuppi on pyöreä ja muodostaa puolipallon, kun $c = -1$ cm. Kupin keskikohtaa siirrettäessä alaspäin kupista tulee syvempi ja sen reuna siirtyy sisäänpäin tehden siitä suljetumman.

4.2 Turbulenttinen virtaus

Laite mallinnetaan käyttäen Comsol multiphysics -ohjelmistoa CSC:n Puhti super-tietokoneella. Simulaatiot tehdään 2D -akselisymmetrisen mallin avulla, jolloin laskenta on huomattavasti nopeampaa kuin 3D -malleilla. Piirretty geometria kuvaa laitteen sisällä olevaa ilmaa, jotta sen virtausta voidaan simuloida. Virtaus simuloidaan Comsolin CFD -moduulin avulla.

Taulukko II. Työssä mallinnettavan laitteen geometriset parametrit ennen optimointia.

Parametrin symboli	Nimi	Arvo [cm]
r_{ek}	Esikammion säde	3
h_{ek}	Esikammion korkeus	3
r_{putki}	Esikammion ja suuttimen välisen putken säde	0,3
l_{suutin}	Suuttimen pituus	1
r_{suutin}	Suuttimen säde	0,1
r_{kuppi}	Näytekupin säde	0,5
c	Kupin keskikohdan z-koordinaatti	-1
r_{kam}	Kammion säde	7,5
h_{kam}	Kammion korkeus	15

Virtaukset voivat olla laminaarisia tai turbulenttisia. Virtaus voidaan luokitella Reynoldsin luvun

$$Re = \frac{\rho v D}{\mu} \quad (33)$$

perusteella [36]. Missä ρ ja μ ovat fluidin tiheys ja dynaaminen viskositeetti, v on virtauksen nopeus ja D on virtausta luonnehtiva pituus. Reynoldsin luku on dimensioton suhde inertiaivoimien ja viskositeettivoimien välillä. Selvää rajaa milloin virtaus muuttuu turbulenttiseksi ei ole määritetty, mutta kokeellisesti virtausta putkessa tutkittaessa on määritetty, että virtaus on laminaarista kun $Re < 2300$ ja turbulenttista kun $Re > 2900$ [37]. Putkessa virtausta luonnehtiva pituus on putken halkaisija.

Mallinnettavassa laitteessa Reynoldsin lukua voidaan arvioida suuttimessa, jolloin voidaan soveltaa putkessa määriteltyjä rajoja. Simulaatioissa suuttimen halkaisijaa muutetaan 1–6 mm välillä ja virtauksen nopeus on verrattavissa vastaaviin suuttimiin kirjallisuudessa, joissa nopeus suuttimissa on 200–600 m/s [12, 28, 38]. Työssä käytettävä fluidi on ilmaa, jonka tiheys ja dynaaminen viskositeetti tiede-

tään. Yhtälön 33 avulla voidaan laskea, että suuttimessa $Re > 13000$, eli virtaus on selvästi turbulenttista.

Turbulenttiset virtaukset eroavat laminaarisista siten, että turbulenttisen virtauksen parametrit kuten nopeus ja paine vaihtelevat ajan mukaan. Comsol Multiphysics -ohjelmistosta löytyy useita turbulenttisia malleja, joista suurin osa perustuu Reynolds-keskiarvoistettuihin Navier-Stokesin yhtälöihin (engl. Reynolds-averaged Navier-Stokes equations, RANS). RANS -malleissa turbulenttisen virtauksen muuttujien arvot koostuvat keskiarvoistetusta- ja vaihtelevasta osasta

$$\phi = \bar{\phi} + \phi', \quad (34)$$

jossa ϕ voi esittää mitä tahansa virtauksen skalaarisuuretta. Jakamalla virtauskenttä keskiarvoistettuun- ja vaihtelevaan osaan ja yhdistämällä ne Navier-Stokesin yhtälöihin saadaan Reynolds-keskiarvoistetut Navier-Stokesin yhtälöt:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \rho \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} + \nabla \cdot \overline{(\rho \mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}')} &= -\nabla P + \nabla \cdot \mu (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T) + \mathbf{F} \\ \rho \nabla \cdot \mathbf{U} &= 0, \end{aligned} \quad (35)$$

jossa \mathbf{U} on keskiarvoistettu nopeuskenttä. RANS-yhtälöt eroavat Navier-Stokesin yhtälöistä siten, että ne sisältävät termin $\overline{(\rho \mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}')}$, jota kutsutaan Reynoldsin jännitystensoriksi. Reynoldsin jännitystensori kuvaa vaihtelevien osien ja nopeuskentän vuorovaikutusta. Koska fluidi on kokoonpuristuvaa, saadaan Favre keskiarvoistettu Reynoldsin jännitystensori laskettua yhtälöllä

$$-\overline{\rho u_j'' u_i''} = \mu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\mu_T \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} + \bar{\rho} k \right) \delta_{ij}, \quad (36)$$

jossa nopeus u_i on jaettu massa keskiarvoistettuun osaan \tilde{u}_i ja vaihtelevaan osaan u_i'' , μ_T on turbulenttinen viskositeetti, k on turbulenttinen kineettinen energia ja δ_{ij} on Kroneckerin delta. Jokaisella turbulenttisella mallilla on oma tapa laskea turbulenttinen viskositeetti. [36]

Turbulenttiset virtaukset vaativat huomattavan paljon laskentatehoa ja eri RANS-malleilla laskenta-aika voi erota huomattavasti toisistaan. Laitetta mallinnettaessa

ja sen ominaisuuksia optimoitaessa simulaatiot täytyy suorittaa useita kertoja, joten laskenta-ajan ja mallin tarkkuuden välillä täytyy löytää kompromissi. Tässä työssä käytetään turbulenttisen mallina algebrallista yPlus-mallia, joka vaatii vähiten laskentatehoa turbulenttisista malleista ja soveltuu varsinkin laitteiden sisäisten virtausten mallintamiseen [39]. Lisäksi se sallii harvemman verkon ja simulaatiot menevät useammin läpi. Algebrallinen yPlus-malli perustuu Prandtin sekoituspituusteoriaan, jossa turbulenttinen viskositeetti lasketaan yhtälöllä

$$\mu_T = \rho l_{mix}^2 \frac{\partial U}{\partial y}, \quad (37)$$

jossa l_{mix} sekoituspituus, U on seinän suuntainen nopeus ja y on kohtisuora etäisyys seinästä. Koska algebrallinen yPlus-malli laskee keskimääräisen virtauksen seinästä ulospäin, voidaan yhtälö 37 esittää dimensiottomien suureiden avulla muodossa:

$$\left(1 + l_{mix}^2 \frac{\partial u^+}{\partial y^+}\right) \frac{\partial u^+}{\partial y^+} = 1, \quad (38)$$

jossa $y^+ = \frac{y u_\tau}{\nu}$ ja $u^+ = \frac{U}{u_\tau}$ ja $u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}$, joka on kitkanopeus ja τ_w on seinän leikkausjännitys. Seinän lähellä sekoituspituuden täytyy olla nolla, jotta $u^+ = y^+$. Kaukana seinästä $l_{mix} \approx \kappa y^+$ siten että $u^+ = (1/\kappa)\log(y^+) + B$, missä κ on von Kármánin vakio. Näiden ehtojen avulla sekoituspituudeksi saadaan

$$l_{mix} = \begin{cases} 0, & y^+ \leq y^* \\ \kappa(y^+ - y^*), & y^+ > y^*, \end{cases} \quad (39)$$

jossa y^* on etäisyys seinästä missä sekoituspituus saa arvoja kun turbulenssia alkaa esiintyä. Yhdistämällä yhtälö 38 yhtälöön 39 ja integroimalla saatu yhtälö, saadaan

$$u^+ = \begin{cases} y^+, & y^+ \leq y^* \\ y^* + \frac{1 - \sqrt{1 + 4\kappa^2(y^+ - y^*)^2}}{2\kappa^2(y^+ - y^*)} + \\ \frac{1}{\kappa} \log(\sqrt{1 + 4\kappa^2(y^+ - y^*)^2} + 2\kappa(y^+ - y^*)), & y^+ > y^* \end{cases} \quad (40)$$

y^+ ollessa tarpeeksi suuri $y^+ \gg y^*$ yhtälö 40 supistuu muotoon:

$$u^+ = y^* + \frac{1}{\kappa} \log(y^+) + \frac{1}{\kappa} (\log(4\kappa) - 1). \quad (41)$$

Vertaamalla yhtälöä 41 seinämän logaritmiseen lakiin

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \log(y^+) + B \quad (42)$$

saadaan vakiolle y^* yhtälö

$$y^* = B - \frac{1}{\kappa} (\log(4\kappa) - 1) \quad (43)$$

Muuttujien u^+ , l_{mix} ja μ_T laskemiseksi ja niiden avulla keskivirtausnopeuden määrittämiseksi tarvitaan paikallinen y^+ arvo, joka saadaan Reynoldsin luvun avulla

$$Re = \frac{Uy}{\nu} = \frac{U}{u_\tau} \frac{yu_\tau}{\nu} = u^+ y^+, \quad (44)$$

jossa ν on kinemaattinen viskositeetti. Muuttujat U , y ja ν lasketaan verkon jokaisessa solmussa. Käyttämällä yhtälöä 40 muuttujalle u^+ , saadaan myös y^+ määritettyä.

[40]

Etäisyys seinämään voidaan ratkaista COMSOLissa lisäämällä erillinen tutkimusvaihe ennen aikariippuvaista tutkimusvaihetta. Reunaehtona simulaatioissa käytetään ei luistavaa (engl. No slip) seinäehtoa, jossa oletetaan fluidin ja seinän välisen suhteellisen nopeuden olevan nolla. Seinämämallina käytetään automaattista käsittelyä, jossa oletetaan, että laskenta-alueen ja seinän välillä on pieni rako $\delta_w = h_w/2$, jossa h_w on seinän viereisen verkkosolun korkeus. Automaattinen seinäkäsittely hyödyntää pienen Reynoldsin luvun mallinnusta h_w :n lähestyessä nollaa ja seinäfunktioita, kun viskoosissa yksiköissä laskettu resoluutio Δ_w^+ kasvaa. [40]

Lisäksi malliin määritellään alkuarvot. Tässä tapauksessa esikammio (kuva 10 solenoidiventtiilin yläpuoli) paineistetaan kahdeksan barin paineeseen ja muualla laitteessa on normaali ilmanpaine. Materiaaliksi koko laskenta-alueelle lisätään ilma.

4.3 Partikkeleiden liike

Kun virtauskenttä on laskettu, voidaan partikkelijäljitysmoduulin avulla laskea partikkeleiden liike. Partikkeleiden liike saadaan Newtonin toisen lain avulla yhtälöllä

$$\Sigma \mathbf{F} = \frac{d}{dt} \left(m_p \frac{d\mathbf{q}}{dt} \right), \quad (45)$$

jossa $\Sigma \mathbf{F}$ on partikkeliin vaikuttava kokonaisvoima, m_p partikkelin massa ja \mathbf{q} partikkelin sijainti. Partikkeleihin vaikuttavat voimat, jotka tässä mallissa huomioidaan ovat painovoima ja fluidin vastusvoima. Partikkelit eivät vaikuta virtaukseen, eikä partikkeleiden välistä vuorovaikutusta huomioida. Oletuksena COMSOL laskee fluidin vastusvoiman Stokesin lain mukaan, mutta se toimii vain suhteellisen Reynoldsin luvun ollessa hyvin pieni $Re_s \ll 1$ [41]. Suhteellinen Reynoldsin luku määritetään yhtälöllä

$$Re_s = \frac{\rho |\mathbf{u} - \mathbf{v}| d_p}{\mu}, \quad (46)$$

jossa \mathbf{u} on fluidin nopeus partikkelin kohdalla ja \mathbf{v} on partikkelin nopeus. Reynoldsin luvun ollessa suurempi (0–1000) Schiller-Naumannin yhtälö soveltuu paremmin, missä fluidin vastuskerroin C_D lasketaan yhtälöllä [42]

$$C_D = \frac{24}{Re_s} (1 + 0,15 Re_s^{0,687}). \quad (47)$$

Partikkeleiden materiaalia ei määritellä, mutta niille annetaan tiheys ja halkaisija. Partikkeleiden halkaisijaksi annetaan tasainen jakauma 10–100 μm välillä ja tiheydeksi 800 kg/m^3 . Partikkelit vapautetaan ajan hetkellä nolla pisteestä lähellä kupin pohjaa. [42]

RANS-malleissa lasketaan keskiarvoistettu virtauskenttä, eikä niissä esiinny samalla tavalla pieniä pyörteitä kuin laskennallisesti raskaammissa malleissa. Tämän takia partikkeleihin vaikuttavaan fluidin vastusvoiman laskentaan voidaan käyttää diskreettiä satunnaiskulku -mallia (engl. discrete random walk model, DRW), joka

tekee satunnaisia muutoksia nopeuskenttään

$$\Delta \mathbf{u} = \zeta \sqrt{\frac{2k}{3}}, \quad (48)$$

jossa ζ on dimensioton vektori korreloimattomia Gaussin satunnaislukuja, joiden varianssi on yksi. Satunnaiset nopeuden muutokset summataan keskiarvoistetun nopeuskentän kanssa, jonka jälkeen voidaan laskea partikkeliin vaikuttava fluidin vastusvoima. [42]

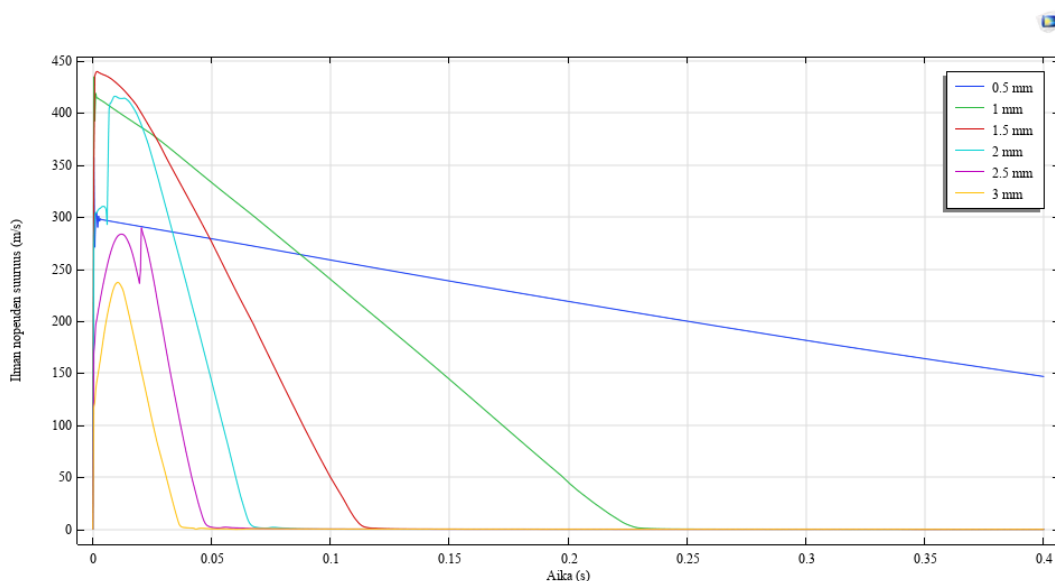
5 Tulokset

Kun mallin fysiikka on saatu toimimaan, voidaan aloittaa laitteen optimointi. Mallin geometria on piirretty käyttäen parametrejä, milloin geometrian muokkaaminen onnistuu helpommin ja optimoinnissa voidaan käyttää COMSOLin parametrien-pyyhkäisytoimintoa, jossa parametreille määritetään etukäteen lista arvoja, joille ohjelma laskee kerralla ratkaisut. Laskuista tulisi kuitenkin liian raskaita, jos kaikki parametrit laskettaisiin ristiin, minkä vuoksi parametrejä muokataan yksitellen.

5.1 Malli 1: Suutin

Ensimmäisenä muutetaan suuttimen sädettä 0,5–3 mm välillä puolen millimetrin välein. Tavoitteena on saada mahdollisimman voimakas ja riittävän pituinen ilmavirta näytettä pitävän pidikkeen kohdalle (noin 1 cm suuttimen kärjestä). Virtauksen nopeuden tulee olla kupin kohdalla suuri, jotta agglomeraatit hajoavat. Simulaatiossa lasketaan ainoastaan virtauskenttä ajallisena tutkimuksena 0,4 sekunnin ajan 0,4 millisekunnin askelin. Paine esikammiossa on 800 kPa ja muiden parametrien arvot löytyvät taulukosta II.

Kuvassa 11 on esitetty ilman nopeus kupin yläosan kohdalla eri suuttimilla ajan funktiona. Pienimmillä suuttimilla nähdään, että nopeuden arvo heittelee voimakkaasti alussa ja laskee sen jälkeen hitaasti. Kuvaajista myös nähdään, että suuttimen koko ja pulssin kesto ovat kääntäen verrannollisia. Kaikista suurin nopeus saavutetaan suuttimen säteen arvolla 1,5 mm, jolloin pulssin kesto on hieman yli 0,1 s. Tämän perusteella seuraavissa simulaatioissa voidaan käyttää suutinta, jonka säde on 1,5 mm, koska sillä saadaan tasainen voimakas pulssi aikaan. Pulssin kestoa voidaan tarvittaessa säätää muuttamalla esikammion kokoa (malli 5), kunhan paine suuremmassa kammiossa ei nouse liian suureksi.

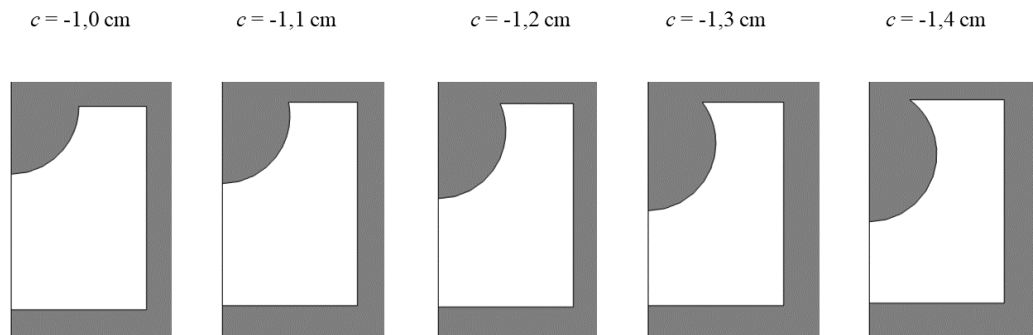


Kuva 11. Ilman nopeuden suuruus kupin yläosan kohdalla ajan funktiona erikokoisilla suuttimilla.

5.2 Malli 2: Kuppi

Alkuperäisessä mallissa jauhe on pidikelevyllä olevassa kupissa, joka on aluksi puolipyöreä muotoinen. Ympyrän keskikohtaa siirtämällä alemmas saadaan ympyrästä syvempi, jolloin jauhepartikkelit voivat pysyä kupin sisällä kovassa virtauksessa hieman kauemmin. CFD-DEM simulaatioissa on huomattu, että agglomeraatit hajoavat tasaisessa virtauksessa kun fluidin ja partikkeleiden suhteellinen nopeus ylittää tietyn raja-arvon [26, 27]. Tämä raja-arvo on kääntäen verrannollinen agglomeraatin kokoon nähden [26]. Lisäksi suuremmat agglomeraatit ikään kuin kuorittuvat kerroksittain, jolloin niiden dispergoituminen kokonaan kestää kauemmin [26, 27]. Jos partikkelit pysyvät kauemmin kupissa myös niiden väliset törmäykset voivat lisääntyä, joka parantaa dispersiotehokkuutta. Tavoite on löytää paras kupin muoto, jolla partikkelit pysyvät mahdollisimman kauan mahdollisimman kovassa virtauksessa siten, että ne kuitenkin poistuvat kupista. Kuvassa 12 on esitetty miten $c:n$ muuttaminen vaikuttaa kupin muotoon.

Kuvassa 13 on esitetty suhteellisen nopeuden suuruus eri ajan hetkillä viidellä



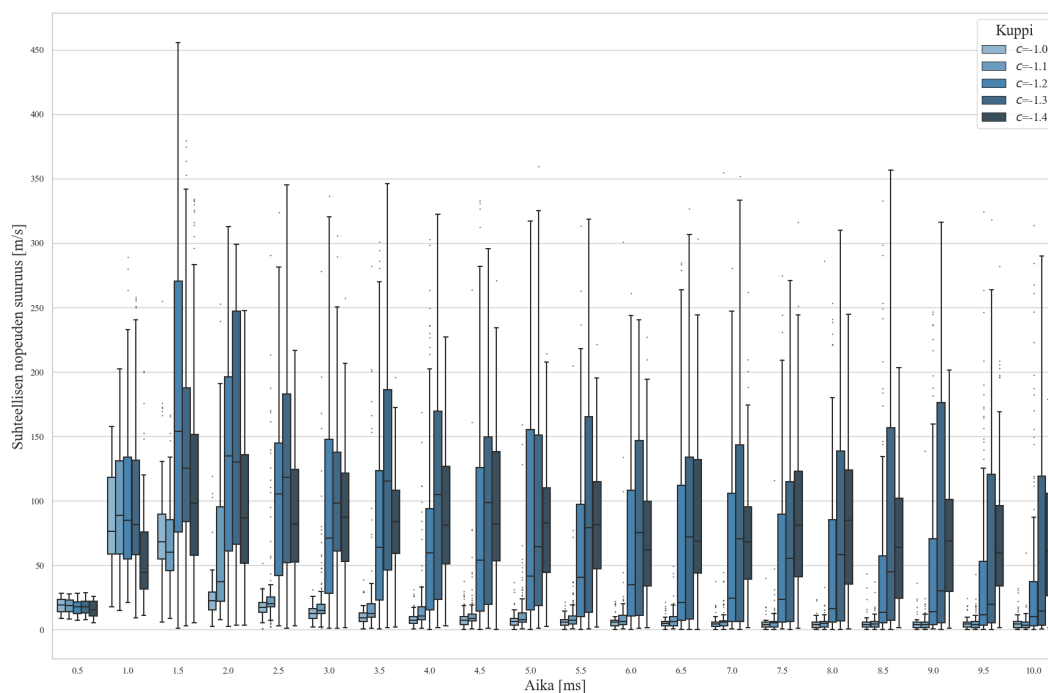
Kuva 12. Näytekupin muoto 2D-akselisymmertisessä mallissa (pyörähdysakseli on kuvien vasen reuna) eri c :n arvoilla.

eri c :n arvolla. Suhteellisen nopeuden suuruus saadaan yhtälöllä

$$u_s = \sqrt{(u_z - v_z)^2 + (u_r - v_r)^2}, \quad (49)$$

jossa u_z ja v_z ovat fluidin ja partikkelin nopeuden z -koordinaatit ja u_r ja v_r ovat vastaavasti fluidin ja partikkelin r -koordinaatit. Simulaatio on laskettu 10 millisekuntiin asti 0,5 millisekunnin askelin. Suuttimen säteenä käytetään edellisessä mallissa optimoitua arvoa 1,5 mm. Paine esikammiossa on 800 kPa ja muut parametrit ovat taulukon II mukaisia. Kuvaajana on käytetty laatikko-janakuviota, jotta partikkelien suhteellisen nopeuden jakaumaa voidaan tarkastella.

Kuvasta 13 nähdään, että suhteellisen nopeuden suuruus kasvaa huomattavasti 0,5–1,0 ms välillä kaikilla c :n arvoilla, kun fluidin nopeus kasvaa ja partikkelit ovat lähes paikallaan ennen kuin lähtevät fluidin vastusvoiman avulla liikkeelle. c :n arvoilla -1,0 cm ja -1,1 cm suhteellinen nopeus lähtee kuitenkin välittömästi laskemaan ja pysyy matalalla tasolla simulaation loppuun asti. Tämä viittaa siihen, että partikkelit poistuvat kupista hyvin nopeasti ja päätyvät kammioon, jossa virtaukset ovat heikompia eivätkä pysty dispergoimaan agglomeraatteja. Kolmella muulla



Kuva 13. Partikkeleiden ja ilman välisen suhteellisen nopeuden suuruus eri c :n arvoilla.

kuppivaihtoehdolla keskimääräinen suhteellinen nopeus kasvaa vielä 1,5 millisekuntiin, jonka jälkeen se pysyy vielä korkealla tasolla lähes simulaation loppuun saakka. Kuitenkin niin, että c :n arvolla $-1,4$ cm suhteellinen nopeus laskee kaikista hitaimmin ja arvolla $-1,2$ cm nopeimmin. Toisaalta suhteellinen nopeus saa näistä kolmesta vaihtoehdosta korkeimmat huippuarvot c :n ollessa $-1,2$ cm ja matalimmat kun $c = -1,4$ cm.

On tärkeää, että suureen osaan partikkeleista kohdistuu riittävän suuri suhteellinen nopeus, joten tarkastellaan vielä eri vaihtoehtojen jakaumia. Vaihtoehtoilla $c = -1,2$ cm ja $c = -1,3$ cm hajonta on suurinta, koska niissä suhteellisen nopeuden maksimi-arvot ovat suurimpia. Jos tarkastellaan jakaumien ensimmäisen kvartaalin (laatikon alaosa) yläpuolelle jäävää osaa, joka kattaa 75 % partikkeleista, nähdään, että c :n ollessa $-1,3$ cm partikkeleiden suhteellinen nopeus on kaikista suurin 1–3 millisekunnin kohdalla, missä suhteellinen nopeus saa suurimmat arvonsa. Tällä kuppilla 75 prosentilla partikkeleista suhteellinen nopeus on yli 50 m/s kolmeen millise-

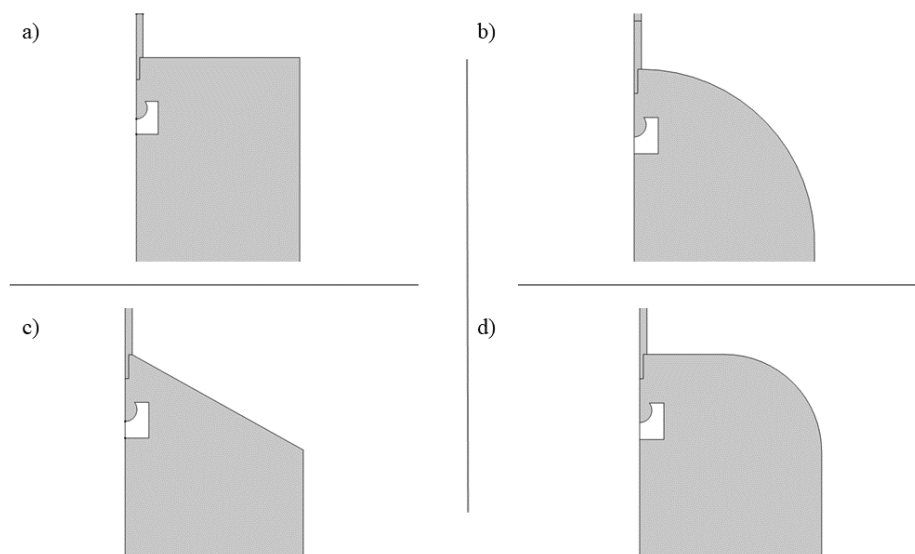
kuntiin asti. Kun $c = -1,4$ cm hajonta on pienempää ja partikkeleiden suhteellinen nopeus pysyy korkealla pidempään, mutta suhteellinen nopeus ei kuitenkaan nouse yhtä suuriin arvoihin kuin c :n ollessa $-1,3$ cm. Lisäksi c :n arvolla $-1,4$ cm simulaation lopussa kaikki partikkelit eivät olleet vielä poistuneet kupista. Käytännössä partikkeleita on huomattavasti enemmän kuin sata ja ne vuorovaikuttavat keskenään, joka voi johtaa siihen, että partikkeleita jää merkittävä määrä kuppiin c :n ollessa $-1,4$ cm ja tämän takia se ei ole järkevä vaihtoehto.

Kupin, jossa $c = -1,3$ cm arvioidaan olevan paras vaihtoehto agglomeraattien hajottamiseksi, sillä se maksimoi kiihdytyksen ja törmäysten avulla tapahtuvan dispergoinnin ilman, että partikkeleita jää kuppiin. Sen vuoksi sitä käytetään myös seuraavissa simulaatioissa.

5.3 Malli 3: Kansi

Edellisissä simulaatioissa pyrittiin varmistamaan agglomeraattien dispergoituminen. Kun agglomeraatit ovat hajonneet, on tärkeää, että ne laskeutuvat mahdollisimman tasaisesti kammion pohjalle. Tässä simulaatioissa testataan neljää eri kammion kannen muotoa, joista tarkastellaan pohjalle syntyvää jakaumaa. Kuvassa 14 on esitetty eri kansivaihtoehdot a) suorakulma b) kokonaan pyöristetty c) suora d) osittain pyöristetty. Kokonaan pyöristetyssä kannessa kannen kulman säde on $7,5$ cm, kun osittain pyöristetyssä kulman säde on 4 cm. Suorakansi laskee lineaarisesti noin 30° kulmassa kammion sivua kohti.

Partikkeleiden liike tulee simuloida kammion pohjalle asti, jonka vuoksi simulaation kesto on pidempi. Fluidin virtaus simuloidaan 60 sekuntiin asti kahdessa osassa. Aluksi kun virtauksen muutokset ovat suurempia tarvitaan pienempiä aika-askeleita ja lopussa voidaan säästää laskenta-ajassa kasvattamalla aika-askelta. Ensimmäisessä osassa simuloidaan $0,3$ sekuntiin asti $0,001$ sekunnin aika-askelin ja toisessa osassa simuloidaan $0,3$ sekunnista 60 sekuntiin $0,2$ sekunnin aika-askelin. Partikkeleiden

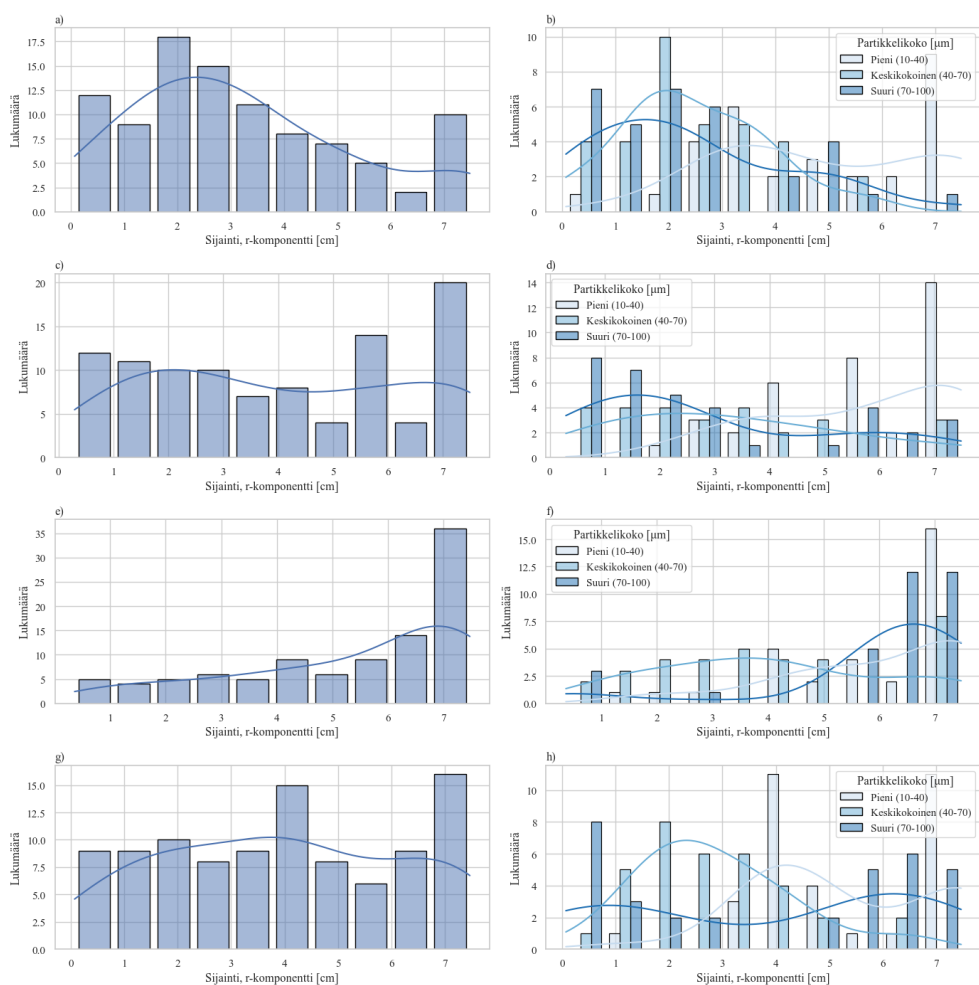


Kuva 14. Mallissa testattavat eri kansivaihtoehdot a) suorakulma b) kokonaan pyöristetty c) suora d) osittain pyöristetty

liikkeen simuloinnissa toimitaan samaan tapaan, mutta toisessa osassa käytetään lyhyempää aika-askelta 0,1 s. Muut parametrit ovat samoja kuin edellisissä malleissa, paitsi suuttimen säteelle ja kupin muodolle käytetään optimoituja arvoja.

Kuvassa 15 on esitetty partikkeleiden jakauma laitteen pohjalla eri kansivaihtoehdoilla. Vasemmanpuoleiset kuvat esittävät kokonaisjakaumaa, kun taas oikeanpuoleisissa kuvissa partikkelit on jaettu kolmeen eri luokkaan niiden koon perusteella. 10–40 μm kokoiset ovat pieniä, 40–70 μm keskikokoisia ja 70–100 μm suuria. Tasaisen kokonaisjakauman lisäksi on tärkeää, että myös erikokoiset partikkelit jakautuvat tasaisesti.

Partikkelijakaumia tarkasteltaessa nähdään, että kaikilla kansivaihtoehdoilla pienistä partikkeleista syntyy piikki kuvaaajien oikeaan reunaan, mikä näkyy niin vasemman- kuin oikeanpuoleisissa kuvaaajissa. Suoralla kannella (kuva 15 e) ja f)) nähdään, että jakauma on selvästi vasemmalle vino, jossa varsinkin pieniä ja suuria partikkeleita on kertynyt kuvaaajien oikeaan laitaan. Suorakulmaisella kannella (kuvat 15 a) ja b)) jakauma on kokonaisuudessa oikealle vino, vaikka pienet partikkelit aiheuttavat pii-



Kuva 15. Partikkelijakauma kammion pohjalla eri kansivaihtoehdoilla. Vasemmalla kokonaisjakaumat ja oikealla partikkelit on jaettu kolmeen luokkaan partikkelikoon mukaan. a) ja b) esittävät partikkelijakaumaa, kun kansi on suorakulmainen, c) ja d) kokonaan pyöristetty, e) ja f) suora ja g) ja h) osittain pyöristetty.

kin kuvaajan oikeaan reunaan. Suurten ja keskikokoisten partikkeleiden jakaumat ovat hyvin samankaltaiset.

Kuvaajista 15 c) ja d) nähdään, että kokonaan pyöristetyllä kannella kokonaisjakauma on suhteellisen tasainen, mutta erikokoiset partikkelit laskeutuvat eri puolille kammion pohjaa. Suuria partikkeleita on enemmän kuvaajan vasemmassa reunassa ja pieniä oikeassa. Keskikokoiset partikkelit painottuvat hieman suurten partikkeleiden mukaisesti vasempaan reunaan.

Kuvasta 15 g) nähdään, että partikkeleiden jakumaa kammion pohjalla on tasai-

sin osittain pyöristetyllä kannella. Toisaalta erikokoisten partikkeleiden jakaumien huiput ovat eri kohdissa kammion pohjaa (kuva 15 h)). Pieniä partikkeleita kertyy eniten keskelle ja oikeaan reunaan, keskikokoisia vasempaan reunaan ja suuria molempiin reunoihin. Jakaumat eivät kuitenkaan ole täysin päinvastaisissa reunoissa ja kaiken kokoisia partikkeleita löytyy lähes joka puolelta pohjaa. Koska kokonaisjakautuma on tasaisin, sekä erikokoisten partikkeleiden jakaumat ovat osittain päällekkäin, osittain pyöristettyä kantta käytetään seuraavissa malleissa.

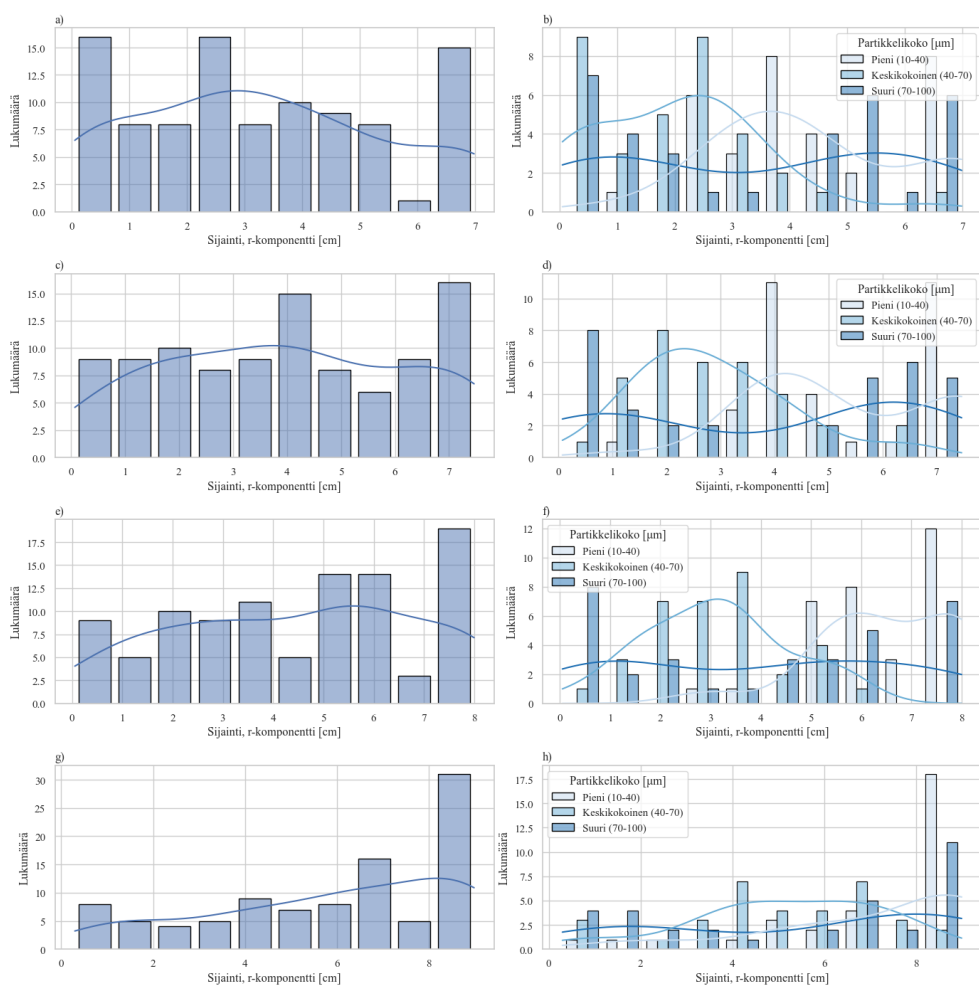
5.4 Malli 4: Kammion säde

Kammion säde r_{kam} on ollut 7,5 cm edellisissä simulaatioissa. Alkuperäinen leveys arvioitiin suuruusluokkalaskelman avulla, jossa oletettiin 20 milligramman jauhenäytteen levittyvän tasaisesti 10 μm välein, partikkelikoon ollessa myös 10 μm . Nyt kammion sädettä muutetaan parametrinen pyyhkäisyn avulla niin, että se saa arvot 7, 8 ja 9 cm. Näillä arvoilla partikkeleiden välille jää vielä sopivasti tilaa, jos ne jakautuvat tasaisesti. Kannen muotona käytetään osittain pyöristettyä kantta. Mallin tutkimuksen asetukset ja muut parametrit ovat samat kuin edellisessä mallissa.

Kuvassa 16 on esitetty partikkeleiden jakaumat samaan tapaan kuin mallissa 3. Kammion säde on kuvan 16 ylimmällä rivillä (a ja b) 7 cm, toisella rivillä (c ja d) 7,5 cm, kolmannella (e ja f) 8 cm ja alimmalla (g ja h) 9 cm. Kuvan 16 toinen rivi (säde on 7,5 cm) saatiin edellisen mallin tuloksista.

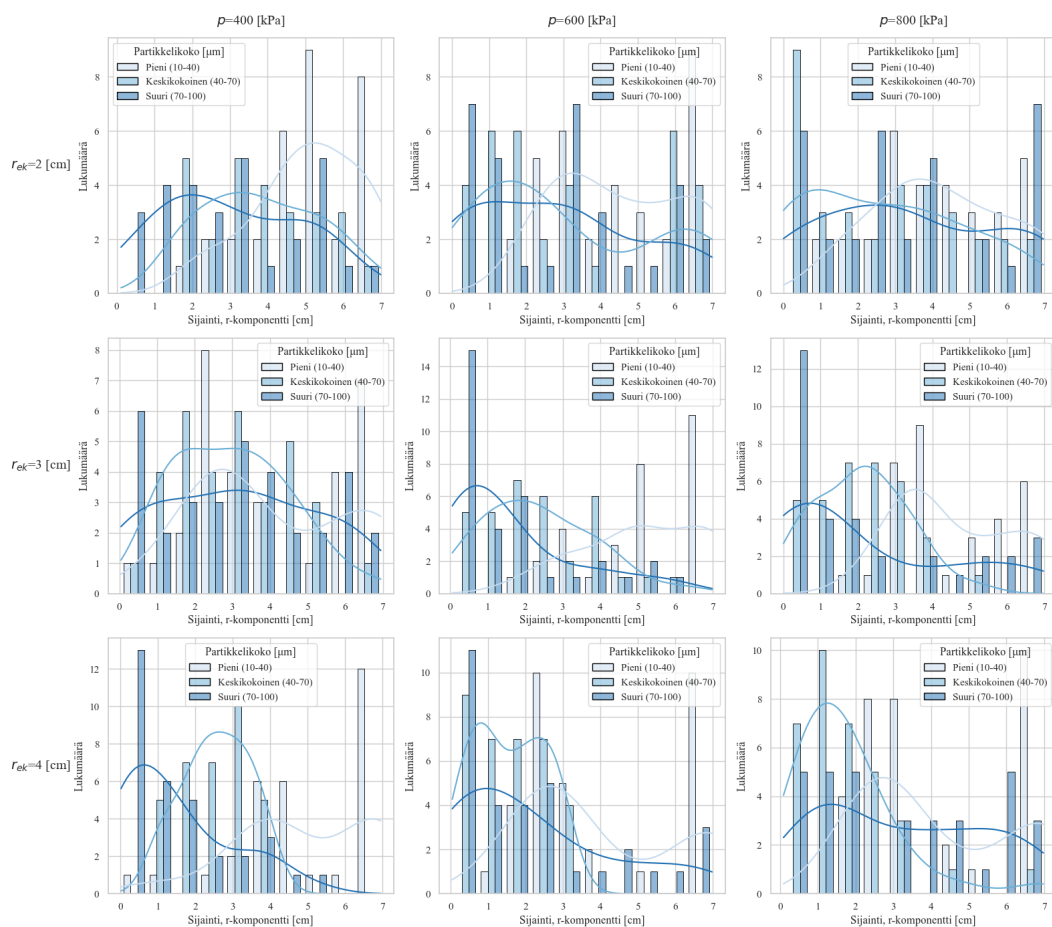
Kuvasta 16 nähdään, että oikeassa reunassa esiintyy vieläkin piikki partikkeleiden määrässä, joka on korkein kammion säteen ollessa 9 cm. Erityisesti suurin osa pienistä ja keskikokoisista partikkeleista on kertynyt kuvaajan oikeaan reunaan (16 h)). Säteen ollessa 8 cm, partikkelit ovat jakautuneet kokonaisuudessaan hieman tasaisemmin, mutta pienet ja keskikokoiset partikkelit ovat jakautuneet eri puolille kuvaajaa.

Tasaisimmat jakaumat saadaan kammion säteillä 7 ja 7,5 cm. Vertailemalla eri-



Kuva 16. Partikkelijakauma kammion pohjalla eri kammion säteen arvoilla. Vasemmassa kokonaisjakaumat ja oikealla partikkelit on jaettu kolmeen luokkaan partikkelikoon mukaan. Jokainen rivi vastaa yhtä säteen arvoa järjestyksessä (7, 7,5, 8, 9) cm.

kokoisten partikkeleiden jakaumia, nähdään, että kammion säteellä 7 cm jakaumat ovat lähempänä toisiaan ja siten, joka kohdasta löytyy todennäköisemmin kaiken kokoisia partikkeleita, poikkeuksena kuvaajan oikea laita. Jos mietitään kuitenkin laitteen toimintaa käytännössä niin kammion pohjalle tuleva mikroskooppilasi voidaan asettaa niin, ettei se tule aivan kammion reunaan, jolloin reunan poikkeama ei haittaa laitteen toimintaa. Tämän perusteella kammion säteen arvona käytetään 7 cm seuraavissa simulaatioissa.



Kuva 17. Partikkelijakauma kammion pohjalla eri esikammion säteen ja paineen arvoilla. Partikkelit on jaettu kolmeen luokkaan partikkelikoon mukaan.

5.5 Malli 5: Esikammion säde ja paine

Mallissa 5 tutkitaan miten esikammion koko ja paine vaikuttavat partikkeleiden jakaumaan. Esikammion kokoa säädetään sen säteen r_{ek} avulla. Edellisissä malleissa r_{ek} :n arvo oli 3 cm ja paineen 800 kPa. Muutetaan esikammion sädettä ja painetta käyttämällä parametrienpyyhkäisyä siten, että r_{ek} saa arvot (2, 3, 4) cm ja jokaisella r_{ek} :n arvolla painelle p annetaan arvot (400, 600, 800) kPa. Tutkimuksen aika-askeleet ja muut parametrit ovat edellisten mallien mukaisia.

Kuvassa 17 on esitetty partikkelijakauma kammion pohjalla jaoteltuna partikkelikoon mukaan eri kammion säteen ja paineen arvoilla. Kuvasta nähdään, että esikammion säteen kasvaessa jakauma vinoutuu vasemmalle. Myös painetta nostet-

taessa suuremmilla säteen arvoilla (3 ja 4 cm) voidaan havaita samaa ilmiötä. Kun $r_{ek} = 4$ cm, kuvaajien oikeaan laitaan kertyy huomattava määrä pieniä partikkeleita, joka on ollut ongelma myös aiemmissa malleissa.

Kaikista tasaisimmat jakaumat saavutetaan r_{ek} :n arvolla 2 cm. Paineen muutoksilla on pientä vaikutusta jakaumaan kyseisellä säteen arvolla siten, että tasaisin jakauma saavutetaan suurimmalla paineen arvolla $p = 800$ kPa ja epätasaisin pienimmällä $p = 400$ kPa. Paineen muutokset vaikuttavat eniten pieniin partikkeleihin, joka näkyy edellä mainituissa kuvaajissa.

6 Pohdinta

Simulaatioiden kahden ensimmäisen mallin tarkoitus oli varmistaa, että agglomeraatit dispergoituvat. Tätä varten suuttimen sädettä muokattiin niin, että ilmavirran nopeus maksimoitiin kupin kohdalla. Suuttimen säteen arvolla 1,5 mm nopeus ylitti 400 m/s useamman sekunnin sadasosan ajan, jossa ajassa suurin osa partikkeleista on jo ehtinyt poistua kupista. Monissa toimivissa aerodynaamisissa dispergointilaitteissa nopeus suuttimen nokan lähellä on samaa suuruusluokkaa [11, 12, 28]. Nopeuden ollessa pienempi noin 100 m/s, kiihdytyksestä aiheutuvat dispersiovoimat eivät riitä hajottamaan lujimpia agglomeraatteja [43]. Tämän työn laite eroaa myös edellä mainituista laitteista siten, että jauhenäyte on kupissa keskellä suuttimesta tulevaa ilmavirtaa, eikä jauhetta vapauteta ilmavirran sivusta kuten eduktorityypin laitteissa. Tarkastelemalla partikkeleiden ja fluidin suhteellista nopeutta pystytään paremmin arvioimaan dispergointimekanismeja ja -tehokkuutta.

Mallissa 2 tarkasteltiin partikkeleiden ja fluidin suhteellista nopeutta eri kuppi-vaihtoehtoilla. Suhteellisen nopeuden suuruus ei ole täysin vertailtavissa kirjallisuudesta löytyvien simulaatioiden kanssa, sillä tässä simulaatiossa tarkasteltiin suhteellista nopeutta yksittäisiin partikkeleihin suurempien agglomeraattien sijaan. Samassa virtauksessa suhteellinen nopeus on kuitenkin verrannollinen partikkelin kokoon nähden inertian vuoksi. Simulaatioissa raja-arvo, jossa agglomeraatit hajosivat on 20–50 m/s riippuen agglomeraatin koosta (0,766–2,37 mm) ja dispergoituminen tapahtuu lähes välittömästi [26, 27]. Voidaan siis olettaa, että laitteessa syntyy tarpeeksi kova virtaus edellä mainitun kokoisten agglomeraattien dispergoimiseksi, kun $c:n$ arvolla -1,3 cm suurimman osan partikkeleista suhteellinen nopeus ylitti 50 m/s. Agglomeraatin koon pienentyessä dispergoimisesta tulee vaikeampaa, jonka vuoksi tämän simulaation perusteella ei voida varmistaa, että kaikista pienimmät agglomeraatit hajoavat.

Simulaatiossa partikkelit eivät vaikuta toisiinsa, jonka vuoksi niiden välisiä tör-

mäyksiä ei voida mallintaa. Törmäykset ovat useissa laitteissa tärkeä dispergointimekanismi, sillä törmäyksen aiheuttamat voimat ovat jo suhteellisen pienissä nopeuksissa riittäviä hajottamaan agglomeraatteja [6, 44]. Jos oletetaan, että kupissa syntyvät törmäykset riittävät hajottamaan agglomeraatteja niin tällöin dispersiotehokkuus riippuu törmäysten todennäköisyydestä yhtälön 31 mukaisesti. Törmäysten todennäköisyys kasvaa mitä kauemmin agglomeraatit ovat kupissa. Tämän vuoksi törmäysten aiheuttama dispersio on tehokkainta kun $c = -1,3$ tai $-1,4$ cm.

Malleissa 3 ja 4 muokattiin kammion muotoja, jotta partikkelit levittäytyisivät tasaisesti kammion pohjalle. Mallissa 3 testattiin neljää erilaista kansivaihtoehtoa, joiden välillä oli huomattavia eroja partikkelijakaumia tarkasteltaessa. Kaikista pienimpien partikkeleiden kerääntymistä laitteen reunaan ei pystytty täysin eliminimaan yhdelläkään kansivaihtoehdolla. Osittain pyöristetyllä kannella saatiin tasaisin partikkelijakauma. Suuret eroavaisuudet eri kansivaihtoehtojen välillä tarkoittaa, että partikkelijakauma on herkkä kannen muutoksille ja täten vielä optimaalisempi kannenmuoto voitaisiin saavuttaa lisäsimulaatioilla, joissa tehtäisiin pieniä muutoksia osittain pyöristettyyn kanteen.

Mallissa 4 muutettiin kammion sädettä, josta parhaaksi vaihtoehdoksi valittiin $r_{kammio} = 7$ cm. Kuvasta 16 on havaittavissa trendi, jossa sädettä kasvatettaessa jakauman huippu siirtyy oikealle. Kammion säteen arvoilla 7 ja 7,5 cm huippu on lähellä keskikohtaa, kun taas arvoilla 8 ja 9 cm huippu on jo selvästi oikeassa reunassa. Kammion sädettä arvosta 7 cm, ei voida juurikaan pienentää, etteivät partikkelit ole liian lähekkäin tai päällekkäin. Sädetä vaihdettaessa 7 cm:stä 7,5 cm:in partikkelijakauma ei muutu paljoa, joten 7 cm voidaan todeta olevan hyvin lähellä optimaalista sädettä tälle laitteelle.

Mallissa 5 testattiin esikammion säteelle ja paineelle kolmea arvoa. Esikammion tilavuuden ja paineen muutokset vaikuttavat suuttimesta tulevan suihkuvirran nopeuteen ja keston, mikä puolestaan vaikuttaa kammion turbulenttisiin virtauksiin.

Taulukko III. Optimaaliset parametrien arvot.

Parametri	Arvo
r_{suutin}	1,5 [mm]
c	-1,3 [cm]
Kansi	Osittain pyöristetty
r_{kam}	7 [cm]
r_{ek}	2 [cm]
p	800 [kPa]

Suurilla kammion säteen arvoilla partikkelijakauma vinoutui oikealle. Koska esikammion koon suurentaminen vaikuttaa suihkuvirran keston, kammioon voi syntyä voimakkaampia virtauksia, jotka ohjaavat partikkeleita tiettyyn kohtaan. Kammion säteeksi valikoitui 2 cm, jolla saatiin tasaisin partikkelijakauma. Paineen kasvattaminen ei aiheuttanut yhtä selvää muutosta, mutta sillä oli vaikutusta erityisesti pienten partikkeleiden jakaumaan. Säteen ollessa 2 cm, tasaisin jakauma saatiin suurimmalla paineen arvolla $p = 800$ kPa.

Lopputulokset valituista parametrien arvoista löytyvät taulukosta III. Simulaatioilla pystyttiin tyydyttävästi osoittamaan agglomeraattien hajoaminen ja huomattavasti parantamaan kammion pohjalle laskeutuvaa partikkelijakaumaa. Agglomeraattien hajoamiseen liittyvät epävarmuustekijät johtuvat lähinnä mallin yksinkertaistuksista, jossa agglomeraattien lujuutta eikä partikkeleiden välisiä voimia voitu mallintaa. Simulaatiot kuitenkin osoittivat, että laitteessa partikkeleihin kohdistuu vastaavia voimia kuin osassa toimivista laitteista. Tämän vuoksi voidaan olettaa, että laite dispergoi agglomeraatteja vastaavalla tehokkuudella. Simulaatioissa käytettiin 10–100 μm :n kokoisia partikkeleita. Laite todennäköisesti soveltuu vastaavan kokoisista partikkeleista koostuvien agglomeraattien dispergointiin. Tarkempi analyysi kuinka pieniin partikkeleihin laite soveltuu, vaatii kuitenkin lisätutkimuksia. Partikkelijakaumaan saatiin selviä muutoksia optimoinnin avulla ja lopuksi jakau-

masta saatiin lähes tasainen. Simulaatiot olivat laskennallisesti hyvin raskaita, joka rajoitti testattujen parametrien arvojen määrää. Vaikka tulos on jo hyvä, on lisäoptimoinnille vielä varaa.

Kokeelliset tulokset voivat poiketa simulaatioista, sillä simulaatioissa on useita epävarmuustekijöitä. Mallissa tehdyt yksinkertaistukset kuten partikkeleiden välisen vuorovaikutuksen puute ja partikkeleiden alhainen määrä ovat yksi esimerkki. Lisäksi turbulenttisen mallin tarkkuus vaikuttaa fluidin virtaukseen ja siten partikkelijakaumaan. Laite kannattaa valmistaa osista, jotka ovat helposti vaihdettavissa, mikäli kokeelliset tulokset eroavat selvästi simulaatioista.

7 Yhteenveto

Työn teoriaosuudessa käsiteltiin koheesivoimia ja -malleja, dispergointimekanismeja ja dispergointilaitteita. Osittain näiden pohjalta suunniteltiin aerodynaaminen dispergointilaitelaite, joka hajottaa agglomeraatit paineilman avulla kammioon, josta ne laskeutuvat mikroskooppilasille.

Laitteen parametrien optimoimiseksi luotiin COMSOLin CFD ja Particle tracing-moduuleiden avulla malli, jolla voidaan analysoida partikkeleiden liikkeitä laitteessa. Optimoitavia parametrejä olivat suuttimen säde, näytekupin syvyys, kammion kansi ja säde sekä esikammion säde ja paine. Näiden parametrien optimoimiseksi luotiin viisi mallia, joissa parametrejä muokattiin yksitellen edellä luetellussa järjestyksessä, poikkeuksena esikammion säde ja paine, joita muokattiin samanaikaisesti.

Suuttimen säteen ja kupin syvyyden avulla pyrittiin varmistamaan agglomeraattien dispergoituminen. Valituilla parametreillä laitteeseen syntyy voimakkaita virtauksia, jotka hajottavat varmasti agglomeraatteja, joilla on pieni lujuus. Simulaatioiden yksinkertaistuksien sekä tulosten verrattavuuden takia, ei voida kuitenkaan tietää tarkasti minkä lujuiset ja kuinka suuri osa agglomeraateista hajoaa. Tämä vaatii siis lisätutkimuksia joko simulaatioiden avulla tai kokeellisesti.

Kammion kannen ja säteen muutoksilla optimoitiin partikkelijakaumaa kammion pohjalla mahdollisimman tasaiseksi. Kannen muutoksilla huomattiin olevan suuria vaikutuksia jakaumaan. Kannen muodolle on niin monia mahdollisuuksia, että sen muotoa on todennäköisesti mahdollista muokata vielä optimaalisemmaksi. Kammion säteen kasvattaminen siirsi jakauman huippua oikealle, jonka vuoksi optimaalisin arvo oli pienin testatuista. Lopuksi esikammion sädettä ja painetta muuttamalla tarkasteltiin partikkelijakaumaa. Suuremmilla säteen arvoilla partikkelit kasaantuivat vasemmalle ja pienimmällä säteen arvolla saatiin tasaisin jakauma. Paineen muutokset vaikuttivat eniten pieniin partikkeleihin.

Parametrien muutoksilla pystyttiin vaikuttamaan laitteen toimintaan ja lopulta

kammion pohjalle saatiin lähes tasainen jakauma. Simulaatioihin liittyy kuitenkin monia epävarmuustekijöitä, jonka vuoksi joko simulaatioiden tai kokeellisten jatkotutkimuksien avulla tuloksien tarkkuutta voitaisiin paremmin arvioida.

Viitteet

- [1] G. Calvert, M. Ghadiri ja R. Tweedie, *Advanced Powder Technology* **20**, 4 (2009).
- [2] C. Weiler, M. Wolkenhauer, M. Trunk ja P. Langguth, *Powder Technology* **203**, 248 (2010).
- [3] S. J. Simons, *Powder Technology* **87**, 29 (1996).
- [4] F. Podczeck, J. M. Newton ja M. B. James, *Journal of Colloid and Interface Science* **187**, 484 (1997).
- [5] C. Weiler, M. Egen, M. Trunk ja P. Langguth, *Journal of Pharmaceutical Sciences* **99**, 303 (2010).
- [6] Y. Kousaka, K. Okuyama, A. Shimizu ja T. Yoshida, *JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING OF JAPAN* **12**, 152 (1979).
- [7] G. D. Parfitt, *Powder Technology* **17**, 157 (1977).
- [8] F. Yuan, C. Tu, J. Yu ja Z. Cui, *Applied Nanoscience (Switzerland)* **9**, 1857 (2019).
- [9] K. Gotoh, H. Masuda ja K. Higashitani, *Journal of Thermal Spray Technology* **10**, 10 (2001).
- [10] Z. B. Tong, B. Zheng, R. Y. Yang, A. B. Yu ja H. K. Chan, *Powder Technology* **240**, 19 (2013).
- [11] T. Bonakdar, M. Ali ja M. Ghadiri, *International Journal of Pharmaceutics* **597**, 120365 (2021).
- [12] M. Ali, T. Bonakdar, M. Ghadiri ja A. Tinke, *Powder Technology* **285**, 138 (2015).
- [13] G. Nichols, S. Byard, M. J. Bloxham, J. Botterill, N. J. Dawson, A. Dennis, V. Diart, N. C. North ja J. D. Sherwood, *Journal of Pharmaceutical Sciences* **91**, 2103 (2002).
- [14] C. U. Yurteri, M. K. Mazumder, N. Grable, G. Ahuja, S. Trigwell, A. S. Biris, R. Sharma ja R. A. Sims, *Particulate Science and Technology* **20**, 59 (2002).
- [15] J. Visser, *Powder Technology* **58**, 1 (1989).
- [16] Y. T. Feng ja D. R. Owen, *Computational Particle Mechanics* **1**, 159 (2014).
- [17] K. L. Johnson, K. Kendall, A. D. Roberts ja D. Tabor, *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **324**, 301 (1971).

- [18] B. V. Derjaguin, V. M. Muller ja Y. P. Toporov, *Journal of Colloid and Interface Science* **53**, 314 (1975).
- [19] H. C. Rumpf, *Chemie Ingenieur Technik* **42**, 538 (1970).
- [20] H. Rumpf, K. Sommer ja K. Steier, *Chemie Ingenieur Technik* **48**, 300 (1976).
- [21] X. Deng, Z. Huang, W. Wang ja R. N. Davé, *Advanced Powder Technology* **27**, 1971 (2016).
- [22] D. F. Bagster ja D. Tomi, *Chemical Engineering Science* **29**, 1773 (1974).
- [23] H. Masuda, *Advanced Powder Technology* **20**, 113 (2009).
- [24] S. Yuu ja T. Oda, *AIChE Journal* **29**, 191 (1983).
- [25] E. Yoshivuki, K. Yasuo ja F. Susumu, *kagaku kogaku ronbunshu* **19**, 698 (1993).
- [26] G. Calvert, A. Hassanpour ja M. Ghadiri, *Chemical Engineering Research and Design* **89**, 519 (2011).
- [27] G. Calvert, A. Hassanpour ja M. Ghadiri, *Chemical Engineering Science* **86**, 146 (2013).
- [28] P. Tang, D. F. Fletcher, H. K. Chan ja J. A. Raper, *Powder Technology* **187**, 27 (2008).
- [29] H. Masuda, S. Fushiro ja K. Iinoya, *Journal of the Research Association of Powder Technology, Japan* **14**, 3 (1977).
- [30] Aero S - Dry Powder Dispersion Unit, <https://www.malvernpanalytical.com/en/products/product-range/mastersizer-range/accessories/aero-s>, viitattu 27.6.2024.
- [31] B. T. Chen, H. C. Yeh ja B. J. Fan, *Journal of Aerosol Science* **26**, 1303 (1995).
- [32] T. B. Fields, *Journal of dispersion science and technology* **23**, 726 (2002).
- [33] Morphologi 4 - Morphological Image Analyzer, <https://www.malvernpanalytical.com/en/products/product-range/morphologi-range/morphologi-4>, viitattu 27.6.2024.
- [34] Powder Disperser - Clemex, <https://clemex.com/hardware/clemex-powder-disperser/>, viitattu 27.6.2024.
- [35] Nebula Powder Disperser, <https://www.nanoscience.com/products/phenom-desktop-sem/nebula-powder-disperser/>, viitattu 27.6.2024.
- [36] D. C. Wilcox, *Turbulence Modeling for CFD, Volume 1* (DCW industries La Canada, 2006), p. 522.

- [37] H. Schlichting ja K. Gersten, *Boundary-Layer Theory* (Springer Berlin Heidelberg, 2016), pp. 416–419.
- [38] T. Bonakdar, M. Ali ja M. Ghadiri, *International Journal of Pharmaceutics* **597**, 120365 (2021).
- [39] M. K. Mahek, M. Alkhedher, M. Ghazal, M. A. Abdelkareem, M. Ramadan ja A. G. Olabi, *International Journal of Thermofluids* **19**, 100373 (2023).
- [40] Comsol, *The CFD module user's guide*, version 6.2, 2023.
- [41] O. Visuri, G. A. Wierink ja V. Alopaeus, *International Journal of Mineral Processing* **104-105**, 58 (2012).
- [42] Comsol, *Particle Tracing Module user's guide*, version 6.2, 2023.
- [43] N. Silin, J. Tarrío ja T. Guozden, *Powder Technology* **318**, 151 (2017).
- [44] Z. B. Tong, R. Y. Yang, K. W. Chu, A. B. Yu, S. Adi ja H. K. Chan, *Chemical Engineering Journal* **164**, 432 (2010).