

9 Ausblick

Selbstverständlich kann ein komplexes Thema wie die Berechnung von gerührten Suspensionen im Rahmen einer Promotionsarbeit nicht in jeder Hinsicht umfassend behandelt werden. Es bleiben auch nach intensiver Bearbeitung des Themas noch immer Punkte offen. So ist es nichts Neues, dass im Laufe von Forschungsarbeiten die Bearbeitung bzw. Beantwortung einer Frage stets zehn neue Fragen aufwirft. Leider verhindert der zeitliche Rahmen allen Ideen und möglichen Ansätzen nachzugehen. So bleibt also viel Raum für weitere Aktivitäten auf dem Gebiet der Berechnung von Mehrphasenströmungen in Rührkesseln.

In der industriellen Praxis sind z.B. Mehrrührersysteme ebenfalls stark verbreitet, so dass diese Systeme bei der numerische Berechnung zukünftig sicher immer stärker in den Fokus rücken werden. Die experimentellen Untersuchungen von Mahmoudi [192] (s. auch Rutherford et al. [273]) können dabei eine gute Basis für die Validierung von numerischen Berechnungen bilden. Erste zweiphasige Simulationen mit dem Euler-Euler-Verfahren wurden z.B. bereits von Montante et al. [206][207] durchgeführt.

Auch begaste Rührsysteme werden in der Industrie häufig eingesetzt. Da die Eigenschaften der dispersen gasförmigen Teilchen in der Regel nicht konstant sind (so können Blasen z.B. koaleszieren oder auch zerfallen), ist bei der Simulation einer gasförmigen dispersen Phase weiterer Modellierungsaufwand nötig. An dieser Stelle ist auch die Messtechnik gefragt, um verlässliche Daten für eine Validierung zu erhalten. So berechneten z.B. Lane et al. [166] ein begastes Rührsystem (Scheibenrührer) mit dem Euler-Euler-Verfahren, zeigten aber keinerlei Vergleiche mit Messungen. Nassar et al. [214] führten bereits Berechnungen mit dem Euler-Lagrange-Verfahren durch, berücksichtigten aber nur einen möglichen Blasenzerfall, nicht aber eine mögliche Koaleszenz. Das Potential des Verfahrens konnte gezeigt werden, aber der Vergleich mit den ebenfalls durchgeführten Experimenten war noch nicht zufriedenstellend. Bezüglich der Modellierung und Berechnung lässt sich die Komplexität noch weiter steigern, indem man dem begasteten System noch feste disperse Teilchen (z.B. Katalysatoren) zufügt.

Sehr oft werden Rührkessel in der chemischen Industrie als Reaktoren verwendet, so dass die Berücksichtigung von Reaktionen wie auch von Stoffübergängen ein sehr wichtiges Thema für zukünftige Forschungen sein wird. In diesem Zusammenhang spielt natürlich auch der Energiehaushalt des Rührbehälters eine zentrale Rolle. Simulationen in der Reaktionstechnik basieren aktuell häufig auf sehr vereinfachten

Modellen für die Rührer-induzierte Strömung. In naher Zukunft wird man hier sicher immer mehr auf detailliertere Modelle für die Strömungssimulation übergehen und diese auch mit komplexen Reaktionsmodellen kombinieren.

Nicht-Newtonsche Fluide sind in der Praxis bei weitem keine Exoten, so dass z.B. in der chemischen Industrie großer Bedarf an Simulationen von Rührkesselströmungen mit nicht-Newtonschen Fluiden besteht. Im Bereich der Rheologie existiert bereits eine Vielzahl von Ansätzen zur Beschreibung dieser Fluide, allerdings treten in der Praxis immer wieder Schwierigkeiten bei der numerischen Stabilität auf. Erste Ansätze und Berechnungen im Rührkessel wurden z.B. bereits von Kaminoyama et al. [144][145] publiziert.

Im Bereich der Turbulenzmodellierung gab es in den letzten Jahrzehnten viele Neu- und Weiterentwicklungen, allerdings sind insbesondere bei einer Anwendung auf Zwei- oder Mehrphasenströmungen noch immer Verbesserungen nötig. Gerade bei der Kopplung der Phasen sind wichtige Fragen, wie z.B. die korrekte Behandlung der Turbulenzproduktion durch Nachlaufeffekte von großen Teilchen, noch weitgehend offen. Auch die Berechnung von Suspensionen mit hoher Teilchenkonzentration kann bzgl. Turbulenz noch nicht zufriedenstellen. Selbst bei einphasiger Strömung ist ein Optimum noch nicht gefunden. So wird z.B. der Benefit eines Übergangs von den aktuell üblichen Zweigleichungsmodellen zu Turbulenzmodellen höherer Ordnung (z.B. *RS*-Modell) in der Literatur sehr unterschiedlich bewertet, wobei das häufigste Statement besagt, dass die Verbesserung nur minimal ausfällt und damit der erhöhte Aufwand nicht gerechtfertigt ist. Bei *LES*-Rechnungen ist ein deutlich größeres Potenzial zu erkennen, während bei *DNS*-Rechnungen der Aufwand bei großen Reynoldszahlen bis auf absehbare Zeit für industrielle Fragestellungen noch viel zu hoch sein wird. Erste Berechnungen einer gerührten Suspension mit *LES* in Kombination mit einem Lagrangeschen Ansatz wurden kürzlich von Derksen [69] vorgestellt. Betrachtet wurde ein Behälter mit einem Volumen von 0.01 m^3 , welcher mit $240^3 = 13.8 \cdot 10^6$ Zellen aufgelöst wurde (d.h. der Gitterabstand betrug etwa 1 mm). Bei Konzentrationen von bis zu $\varphi_P = 0.036$ ($d = 468 \mu\text{m}$) wurden alle physikalischen Teilchen auch bei der Simulation berechnet (d.h. $6.7 \cdot 10^6$ Teilchen). Die Berücksichtigung der Partikel-Partikel-Kollisionen erfolgte dabei analog zum Vorgehen von Chen et al. [42][43]. Neben einem tiefen Einblick in das Partikelverhalten sowie deren Wirkung auf das Fluid wurde als Hauptergebnis die hohe Bedeutung der Partikel-Partikel-Kollisionen erhalten. Zwar lassen *LES*-Berechnungen im Vergleich zu *RANS*-Verfahren weniger Raum für Spekulationen bzgl. der korrekten Abbildung der Turbulenz, aber die Berechnungszeiten sowie die Anforderungen an die Computerausstattung sind für industrielle Anwendungen noch deutlich zu hoch. Bei weiterer Gültigkeit des Mooreschen Gesetzes dürften allerdings *LES*-Berechnungen auch für die chemische Industrie schon bald interessant werden.

Bei der Berechnung von Suspensionen, wie auch bei Mehrphasenströmungen im Allgemeinen, hat man oft das Problem, dass verlässliche experimentelle Daten oft gar nicht oder nur punktuell verfügbar sind, so dass gesicherte Validierungen schwierig sind. Weiterentwicklungen bei der Endoskop-Technik könnten helfen, verlässliche

räumlich aufgelöste Feststoffverteilungen in Rührbehältern zu ermitteln. Verbesserungen bei *PIV*-Verfahren sollten hinsichtlich einer parallelen Messung von Partikel- und Fluidgeschwindigkeiten in Suspensionen forciert werden.

Aber auch bei der Berechnung von Suspendierprozessen werden verschiedene Phänomene bisher nur unzureichend behandelt. So ist es für eine vollständige Beschreibung des Suspendierprozesses notwendig, auch den Anfahprozess zu berücksichtigen. Die Erfassung dieses instationären Aufwirbelprozesses, wie im Übrigen auch der kontinuierlichen Wiederaufwirbelung von temporär sedimentierten Teilchen¹, gestaltet sich aber als nicht trivial. Erste Ansätze zur Berechnung des Aufwirbelns finden sich z.B. bei Sturesson & Rasmuson [313].

Die Verbesserung der Effizienz bestehender Modelle sollte auch in Zukunft nicht aus dem Fokus rücken. So ist z.B. beim Lagrangeschen Partikeltracking die Berechnung von sehr vielen Teilchenbahnen nötig, um aufgrund der zufallsgesteuerten Dispersion eine gesicherte Statistik zu erhalten. Um diese Anzahl zu reduzieren und damit die Rechenzeit zu verringern, verwendeten Chen & Pereira [44] für stationäre verdünnte Zweiphasenströmungen ein um eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion erweitertes Dispersionsmodell (*SPEED: Stochastic-Probabilistic Efficiency Enhanced Dispersion*). Alternativ wurde von Domelevo & Sainsaulieu [73] ein Semi-Fluid-Modell für die Berechnung der Dispersion vorgeschlagen. Beide Ansätze beinhalten interessante Ansätze und sollten nach hinreichender Validierung auf ihre Eignung bzgl. Einsatz im hier entwickelten Programmpaket geprüft werden.

Weiteres Potenzial bietet die Verbesserung der Auflösung von Geschwindigkeitsgradienten an der Wand durch die Verwendung eines logarithmischen Wandgesetzes auch bei der Berechnung der Partikelbahnen. Generell bedarf das Thema der hydrodynamischen Wechselwirkungen weiterer Forschungsaktivitäten, da Effekte in der Regel nur (wenn überhaupt) für sehr idealisierte Bedingungen beschrieben wurden, so dass die Gültigkeit bei komplexeren Gegebenheiten fraglich ist. Eine Verbesserung, die mit überschaubarem Aufwand zu realisieren sein dürfte, ist die Berücksichtigung des Volumeneffekts der dispersen Phase, welcher bei sehr hohen Partikelkonzentrationen nicht mehr vernachlässigt werden kann.

Ein genereller Übergang zu Tetraeder-*KVs* und damit zu vollständig unstrukturierter Gittern würde zu einer deutlich einfacheren Vernetzung von komplexen Geometrien führen. Tetraeder-*KVs* erlauben allerdings nur bedingt gestreckte Kontrollvolumina (d.h. relativ hohe Seitenverhältnisse der *KVs*), da dann die Winkelverhältnisse sehr ungünstig würden. Eine Kombination verschiedener *KV*-Formen und lokal strukturierter bzw. unstrukturierter Zonen lässt sich in Form von hybriden Gittern realisieren, welche es ermöglichen, die Vorteile der einzelnen *KV*-Formen lokal zu nutzen. Da im Partikelteil des in dieser Arbeit verwendeten Programmpakets

¹Dabei sind nach Liepe et al. [179] für die Aufwirbelung von Teilchen am Boden die maximal auftretenden lokalen Geschwindigkeiten (deren Auftreten sporadisch und zufällig ist) entscheidend, nicht die entsprechenden Mittelwerte oder Schwankungen (Resuspension durch sogenannte *Sweeps*).

die meisten Operationen bereits in Tetraedereinheiten erfolgen und damit eine denkbar günstige Ausgangssituation für eine Umstellung gegeben ist, dürfte der weitaus größere Aufwand bei der Umstrukturierung des Fluidteils nötig sein.

Abschließend lässt sich festhalten, dass man kein Prophet sein muss, um zu erkennen, dass die Bedeutung der *CFD* für Rührsysteme, gerade im Bereich von Mehrphasenströmungen, zukünftig noch weiter zunehmen wird und damit eine entsprechende Weiterentwicklung im Bereich Modellierung und Numerik zwingend nötig ist.