

# 1 Einleitung

Bei vielen Prozessen laufen die Schlüsseloperationen in Rührkesseln ab, so dass das detaillierte Verständnis des Rührverfahrens (z.B. die effektive Durchmischung, welche oft einen starken Einfluss auf die Produktqualität hat) von fundamentaler Bedeutung für die Effizienz der gesamten Anlage und damit von zentraler Bedeutung für die Wirtschaftlichkeit der Produktion sein kann. Ohne Zweifel sind gerührte Reaktoren besonders in der chemischen Industrie (aber auch im Bereich Pharmazie, Lebensmitteltechnik, Biotechnik, Kosmetik usw.) von enormer Bedeutung. Nach Tatterson et al. [319] wird etwa die Hälfte aller chemischen Produkte<sup>1</sup> mit Hilfe von Rührsystemen hergestellt. Dabei schätzen sie, dass allein in den USA durch ungeeignete Auslegung des jeweiligen Rührprozesses ein Verlust von 1-20 Mrd. US\$ pro Jahr entsteht. Obwohl diese Angaben aus dem Jahr 1991 stammen, hat die Größenordnung sicherlich nach wie vor noch Gültigkeit.

Sehr oft ist beim Rühren auch eine disperse feste Phase beteiligt, so dass der Fall des Suspendierens vorliegt, welcher überwiegend in Rührkesseln realisiert wird. Dies beinhaltet häufig nicht allein das Aufwirbeln oder Verteilen des Feststoffs, sondern darüber hinaus die Durchführung von Wärme- und Stoffaustauschvorgängen. Beispiele hierfür sind die heterogene Katalyse, die Kristallisation, die Polymerisation und das Auflösen von Feststoffen. Diese Austauschvorgänge lassen sich durch ein turbulentes Strömungsfeld, welches in einem Rührkessel relativ leicht darstellbar ist, erheblich verbessern. Über die Behälterwand (oder entsprechende Einbauten) lässt sich Wärme leicht zu- oder abführen. Die Auswahl des Rührorgans erlaubt eine Optimierung des Prozesses in Abhängigkeit von den eingesetzten Stoffen und den verfahrenstechnischen Zielen. Ferner lässt sich die Strömung durch den Einbau eines Leitrohrs führen. Aufgrund der vielen Variationsmöglichkeiten ist eine Optimierung für jeden Anwendungsfall möglich, allerdings erschwert die Vielzahl an Parametern die theoretische Behandlung von Suspensionen.

Traditionell werden die in der Regel hochkomplexen fluid- und thermodynamischen als auch chemischen Prozesse im Rührkessel durch empirische und semi-empirische Korrelationen (wobei üblicherweise keine lokalen Größen berücksichtigt werden) beschrieben und/oder mit Verfahren der Maßstabsübertragung behandelt<sup>2</sup>. Die ex-

---

<sup>1</sup>Tatterson et al. beziehen ihre Angaben rein auf die USA. Allerdings ist anzunehmen, dass diese Aussage auch ohne Einschränkung, d.h. für die weltweite Produktion, Gültigkeit besitzt.

<sup>2</sup>Ein Leitfaden klassischer Prägung (aufbauend auf empirischen Korrelationen) zur Auslegung von Suspendierprozessen wurde z.B. von Shaw [286] zusammengestellt.

perimentelle Auslegung erfolgt somit normalerweise in mehreren Schritten, wobei im Labormaßstab begonnen wird und mit Hilfe von empirisch ermittelten Scale-up-Verfahren die Anlage sukzessiv vergrößert wird. Dabei besteht das Problem, die Ähnlichkeit für verschiedene Phänomene gleichermaßen zu erhalten und gerade bei neuen Prozessen ggf. erforderliche Extrapolationen möglichst zu minimieren. Durch diese Unsicherheiten ist die Größe der Übertragungsschritte also stark limitiert.

Eine detaillierte experimentelle Untersuchung der Strömung im Rührkessel mit Originalmaßstab ist in der Regel nicht möglich, so dass die Auslegungen auf Messergebnisse im Labormaßstab aufbauen<sup>3</sup>. Dabei stimmen die von verschiedenen Autoren berichteten Messungen unter Berücksichtigung der jeweils gewählten Geometrien und ggf. Suspendierkriterien gut überein. Bei der Maßstabsübertragung auf Behälter mit Produktionsmaßstab streuen die Ergebnisse aber erheblich. Allgemein wird bei der Maßstabsübertragung von einer Proportionalität  $P_R/V_{RG} \propto D^x$  ausgegangen, wobei die in der Literatur mitgeteilten Exponenten  $x$  beim Suspendieren im Bereich von -1 bis 0.5 variieren<sup>4</sup>. Bei großen Übertragungsfaktoren ist diese Variationsbreite gleichbedeutend mit der Frage, *ob die erforderliche Rührerleistung mittels eines Hilfsdiesels oder eines Kraftwerks erzeugt werden kann bzw. muss* (Kipke [152]). Ferner ist zu bemerken, dass obwohl die angeführte Proportionalitätsannahme allgemein verwendet wird, ihre Gültigkeit nicht als gesichert gelten darf (Kraume & Zehner [161]). Ein großer Teil der Ungenauigkeiten bei der Auslegung von Rührsystemen ist somit auf die Unzulänglichkeiten bei der Maßstabsübertragung zurück zu führen<sup>5</sup>.

Im Gegensatz zu experimentellen Untersuchungen lässt sich eine numerische Simulation (*CFD: Computational Fluid Dynamics*)<sup>6</sup> direkt in der Zielgeometrie durchführen, d.h. es werden keine Scale-up-Verfahren benötigt und damit zusammenhängende Fehler vermieden. Während allerdings im Bereich der Aerodynamik (insbesondere Luft- und Raumfahrt) oder der Kernenergie (lange Zeit besonders geförderter Bereich) die numerischen Methoden eine lange Tradition haben und mittlerweile aus der Entwicklung nicht mehr wegzudenken sind, erfolgte die Etablierung der *CFD* als Werkzeug zur Bauteil- und Prozessoptimierung in anderen Bereichen, wie z.B. der Verfahrenstechnik, erst in den letzten Jahren. Dies lag sicherlich auch darin begründet, dass gerade in der Verfahrenstechnik eine sehr große Vielfalt an komplexen und oft sehr speziellen Anwendungen vorliegt, so dass auch leistungsstarke *CFD*-Codes häufig an ihre Grenzen stießen. Lange Zeit war daher in der Industrie die Meinung dominant, dass sich für Rührmaschinen die wichtige globale Strömungsstruktur oder elementare integrale Größen wie die Newtonzahl

<sup>3</sup>Im Bereich der Messtechnik haben optische Verfahren wie *LDA (Laser-Doppler Anemometry)*, *PDA (Phase-Doppler Anemometry)* oder *PIV (Particle Image Velocimetry)* große Fortschritte gebracht, da hiermit eine berührungslose Messung mit hoher Auflösung möglich wurde.

<sup>4</sup>Eine kleine Zusammenstellung bisher vorgeschlagener Proportionalitätsbeziehungen findet sich z.B. bei Kraume & Zehner [161].

<sup>5</sup>Aufgrund der meist rein empirischen Ermittlung der Richtlinien zur Maßstabsübertragung ist es von zentraler Bedeutung, dass die entsprechenden Geltungsbereiche strikt eingehalten werden, da sonst unphysikalische Vorhersagen resultieren können.

<sup>6</sup>Seit etwas mehr als drei Jahrzehnten sind kommerzielle Programme für die numerische Strömungsmechanik verfügbar, welche üblicherweise als *CFD*-Codes bezeichnet werden.

mit *CFD* nicht hinreichend genau berechnen lassen. Viele der unzureichenden Ergebnisse, welche zu dieser Meinung führten, basierten allerdings auf ungeeigneten Modellen und/oder ungenügender Gitterauflösung.

Erste *CFD*-Berechnungen von Rührkesselströmungen erfolgten bereits in den späten 1970er Jahren. Aufgrund der zu dieser Zeit vorhandenen Rechentechnik waren allerdings bei den frühen Untersuchungen noch starke Vereinfachungen (zweidimensionale stationäre Betrachtung mit einfachen Modellierungsansätzen) nötig, welche im Laufe der Jahre durch stetig steigende Rechenleistung<sup>7</sup> immer weiter zurückgefahren werden konnten. Erst durch die parallelen Verbesserungen im Bereich Modellierung und Computertechnik konnte das enorme Potential der numerischen Methoden überzeugend dargelegt werden. Mit den Berechnungen sind Detailinformationen zum System zugänglich, welche über entsprechende Experimente (bei den aktuell verfügbaren Mess- und Berechnungsverfahren) in der Regel nur mit hohem Aufwand (wenn überhaupt) erreichbar sind. Die Simulation trägt daher deutlich zur Reduzierung des Entwicklungs- und Optimierungsaufwands<sup>8</sup> bei. Bereits an dieser Stelle soll aber klargestellt werden, dass ein Ersatz aller Experimente durch Simulationen für den Autor keineswegs erstrebenswert scheint. Vielmehr sollten Experimente und Simulationen als Kombination vorangetrieben werden, um die jeweiligen Stärken voll ausschöpfen zu können. Inzwischen werden z.B. immer häufiger spezielle experimentelle Untersuchungen durch Fragestellungen initiiert, welche sich aus der Simulation heraus ergeben. Ferner ist zu bemerken, dass die Entwicklung und Anwendung leistungsfähiger Messtechniken eine wichtige Voraussetzung für die Etablierung der *CFD* in der Rührtechnik war und ist, da nur diese eine detaillierte Validierung der Berechnungsverfahren ermöglichen.

Ein kleiner Überblick über die verschiedenen Berechnungen der vergangenen Jahre wurde in Abschnitt 7.3 zusammengetragen. Eine umfassende Zusammenstellung der bisherigen Arbeiten auf dem Gebiet der Rührtechnik oder auch nur zum Thema Suspendieren im gerührten Behälter würde aufgrund der Vielzahl an Veröffentlichungen den Rahmen der vorliegenden Arbeit sprengen. Daher sei an dieser Stelle lediglich auf einige zusammenfassende Werke verwiesen (z.B. Brodkey [33], Harnby et al. [114], Hentrich [120], Herndl [121], Kneule [155], Liepe et al. [177][179], Nagata [213], Oldshue [228], Uhl & Gray [333], Zlokarnik [360] usw.), welche die verschiedenen Aspekte

---

<sup>7</sup>In den letzten 50 Jahren hat sich die Leistung der Spitzenhochleistungsrechner statistisch alle fünf Jahre um eine Größenordnung erhöht. Diese Entwicklung deckt sich sehr gut mit der Prognose des Intel-Mitbegründers G. E. Moore, welche oft auch als Mooresches Gesetz bezeichnet wird. Bereits 1965 prophezeite er, dass sich die Anzahl an Transistoren, welche auf einem Chip untergebracht werden können, alle zwei Jahre verdoppelt. 1975 hat Moore seine Prognose präzisiert: *Die Dichte der Schaltkreise eines Halbleiter-Bausteins verdoppelt sich alle 18 Monate*. Diese Aussage zur Steigerung der Leistungsfähigkeit von PCs hat sich bis Heute als gültig erwiesen.

<sup>8</sup>Mittels *CFD* lassen sich inzwischen Aussagen über die Wirkungsweise eines bestimmten Designs treffen, bevor teure Prototypen gebaut und vermessen werden müssen. Wenn es um Parameterstudien geht, so ist generell die numerische Simulation der experimentellen Untersuchung hinsichtlich Zeit und Kosten in der Regel deutlich überlegen. Dies setzt allerdings voraus, dass die vorliegenden physikalischen Gegebenheiten hinreichend genau abgebildet werden können.

des Rührens und Suspendierens sehr ausführlich beschreiben. Trotz der Vielzahl von Arbeiten zum Thema Rührkesselströmungen ist der Kenntnisstand in vielen Teilbereichen für das Verständnis der Strömung noch immer nicht ausreichend. Einer dieser Teilbereiche ist das Suspendieren. Dabei nimmt die Komplexität noch weiter zu, wenn neben der fluiddynamischen Betrachtung noch die Berücksichtigung von chemischen Reaktionen und/oder Wärme- und Stofftransport nötig ist.

Die Berechnung des Suspendierprozesses erfolgt in der Regel mit dem Euler-Euler-Verfahren. Dies ist normalerweise auch sinnvoll, da beim Suspendieren häufig hohe Teilchenkonzentrationen vorliegen und damit die Annahme eines Kontinuums nahe liegt. Sind aber Mikroprozesse (wie z.B. Wechselwirkungen mit der turbulenten Strömung, chemische Oberflächenreaktionen an den Teilchen mit entsprechender Änderung der Teilchenmasse usw.) oder Elementarprozesse wie Partikel-Partikel-Kollisionen oder Partikel-Wand-Kollisionen von Bedeutung, so bietet sich das Euler-Lagrange-Verfahren an, da hier die Modellierung von Prozessen am Teilchen deutlich einfacher und anschaulicher erfolgen kann. Um die Basis für derartige Untersuchungen zu schaffen, wurde bei den folgenden Untersuchungen das Euler-Lagrange-Verfahren verwendet. Aufbauend auf ein bestehendes zweidimensionales Berechnungsprogramm wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit ein multifunktionales dreidimensionales Lagrangesches Berechnungsprogramm für die disperse Phase (*LAG3D*) entwickelt, mit einem bestehenden Löser für das Fluid (*FASTEST3D*) gekoppelt und auf gerührte Suspendierprozesse angewandt.

Im Folgenden wird zunächst eine allgemeine Charakterisierung von Zweiphasenströmungen vorgenommen (Abschnitt 2), um dann im Anschluss die kontinuierliche Phase zu beschreiben (Abschnitt 3). Dazu werden zunächst die Erhaltungsgleichungen aufgeführt und im Anschluss die Turbulenzmodellierung diskutiert. Analog werden in Abschnitt 4 die Erhaltungsgleichungen für die disperse Phase besprochen und verschiedene Modelle für die Partikeldispersion, die Rückwirkung auf das Fluid, Partikel-Partikel-Kollisionen, Partikel-Wand-Kollisionen und Schwarmeffekte analysiert. Eine Beschreibung der numerischen Umsetzungen folgt dann in Abschnitt 5. Aufgrund der zentralen Rolle der Partikel-Partikel-Kollisionen bei den Berechnungen wird die Kollisionsmodellierung in Abschnitt 6 anhand einer zweiphasigen vertikalen Rohrströmung validiert. In Abschnitt 7 erfolgt schließlich die Anwendung des entwickelten Programms auf zweiphasige Rührkesselströmungen. Den Abschluss bildet eine Zusammenfassung sowie ein Ausblick auf weiterführende Arbeiten.