

3 Beschreibung der kontinuierlichen Phase

3.1 Erhaltungsgleichungen in ihrer allgemeinen Form

Die hier und im Folgenden aufgeführten Erhaltungsgleichungen sind in Gibbsscher Notation im kartesischen Koordinatensystem dargestellt, wobei im Wesentlichen die Notationskonventionen von Bird et al. [24] (eine gute Zusammenstellung der verschiedenen Notationen findet sich z.B. auch bei Sijerčić [288]) übernommen wurden. Auf eine ausführliche Herleitung der Gleichungen wird bei den nachfolgenden Ausführungen verzichtet. Sie kann z.B. bei Bird et al. [24] nachgelesen werden. Analog verhält es sich mit den später benötigten integralen Formen der Erhaltungsgleichungen, welche z.B. von Ferziger & Perić [92] zusammengestellt wurden.

3.1.1 Massenerhaltung

Allgemein gilt für die Massenerhaltung, wenn weder Massenquellen noch -senken vorliegen, die folgende Beziehung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \mathbf{u}) = \frac{D\rho}{Dt} + \rho(\nabla \cdot \mathbf{u}) = 0 \quad (3.1)$$

Die zeitliche Änderung der Dichte entlang der Bahn eines Fluidelements, beschrieben durch das totale Differential (s. Gl. 3.2 für eine beliebige Variable φ), ist somit proportional zur Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes.

$$\frac{D\varphi}{Dt} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \varphi \quad (3.2)$$

Betrachtet man ein inkompressibles Fluid, so reduziert sich Gl. 3.1 zu

$$(\nabla \cdot \mathbf{u}) = 0 \quad (3.3)$$

3.1.2 Impulserhaltung

Die allgemeine Form der Impulserhaltung lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{u} + [\nabla \cdot \rho \{\mathbf{u}\mathbf{u}\}] + \nabla p + [\nabla \cdot \boldsymbol{\mathcal{T}}] - \mathbf{f}_B = 0 \quad (3.4)$$

Mit Hilfe von Gl. 3.1 lässt sich die Beziehung zu

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p - [\nabla \cdot \boldsymbol{\mathcal{T}}] + \mathbf{f}_B \quad (3.5)$$

umformen. Die Impulsänderung eines Fluidelements ist also gleich der Summe aller angreifenden Kräfte (2. Newtonsches Gesetz), welche hier gegeben sind mit der Druckkraft, der viskosen Kraft und den Volumenkräften \mathbf{f}_B . Die Volumenkräfte setzen sich aus der Schwerkraft $\mathbf{f}_G = \rho \mathbf{g}$, ggf. magnetischen Kräften \mathbf{f}_M , der Coriolis- und Zentrifugalkraft \mathbf{f}_Ω (s. Abschnitt 3.4) sowie ggf. weiteren vergleichbaren Kräften zusammen. Zu bemerken ist, dass alle Terme volumenbezogen, d.h. dividiert durch das Volumen des Fluidelements, aufgetragen sind.

Im Falle von Newtonschen Fluiden lässt sich der Spannungstensor $\boldsymbol{\mathcal{T}}$ über Geschwindigkeitsgradienten und die Fluidviskosität ausdrücken (die entsprechenden Ableitungen sind z.B. bei Lamb [165] oder Condon & Odishaw [48] nachzulesen):

$$\boldsymbol{\mathcal{T}} = -2\mu \boldsymbol{\mathcal{D}} + (\mu_B + \frac{2}{3}\mu)(\nabla \cdot \mathbf{u}) \boldsymbol{\mathcal{I}} \quad (3.6)$$

wobei $\boldsymbol{\mathcal{I}}$ für den Einheitstensor steht und für den Deformationstensor $\boldsymbol{\mathcal{D}}$ die folgende Beziehung gilt:

$$\boldsymbol{\mathcal{D}} = \frac{1}{2} \{\nabla \mathbf{u}\} + \frac{1}{2} \{\nabla \mathbf{u}\}^T \quad (3.7)$$

Mit der Stokesschen Hypothese wird die Kompressionsviskosität μ_B zu Null und bei konstanter Dichte entfällt der zweite Term auf der rechten Seite von Gl. 3.6 durch Berücksichtigung von Gl. 3.3 komplett. Nimmt man weiterhin eine konstante Viskosität an, so resultiert aus Gl. 3.5:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}_B \quad (3.8)$$

Diese Beziehung wird aufgrund der ersten Formulierung durch Navier 1822 (unter Berücksichtigung der Arbeiten von Stokes) üblicherweise als Navier-Stokes-Gleichung bezeichnet. Bei reibungsfreien Strömungen, d.h. $[\nabla \cdot \boldsymbol{\mathcal{T}}] = \mathbf{0}$, geht sie in die sogenannte Euler-Gleichung (eine entsprechende Beschreibung wurde bereits von Euler 1755 vorgenommen) über.

Die Erhaltungsgleichungen für Masse und Impuls (Gl. 3.1 und Gl. 3.4 bzw. Gl. 3.3 und Gl. 3.8 bei konstanter Dichte und Viskosität) bilden zusammen ein geschlossenes System von partiellen Differentialgleichungen für die Geschwindigkeit \mathbf{u} und den Druck p . Das Gleichungssystem ist hochgradig nicht-linear und elliptisch, so dass die Lösung normalerweise numerisch erfolgt.

3.2 Zeitgemittelte Erhaltungsgleichungen

Bei vielen Anwendungen kann man einen stationären Strömungszustand annehmen, da der zeitlich aufgelöste Verlauf der Strömung, d.h. die zeitlichen Schwankungen um einen Mittelwert, nicht von Interesse ist. In solchen Fällen bietet sich eine zeitliche Mittelung der Erhaltungsgleichungen an.

Üblicherweise wird die Geschwindigkeit in einen Mittelwert und einen Schwankungswert $\mathbf{u} = \mathbf{U} + \mathbf{u}'$ (bzw. allgemein für eine skalare Größe $\varphi = \phi + \varphi'$)¹ aufgeteilt. Ersetzt man nun die momentane Geschwindigkeit in der Massenerhaltungsgleichung (Gl. 3.3) durch die genannte Summe und führt eine zeitliche Mittelung über ein bestimmtes Zeitintervall Δt aus, so erhält man

$$(\nabla \cdot \mathbf{U}) = 0 \quad (3.9)$$

Durch entsprechendes Vorgehen bei der Navier-Stokes-Gleichung (Gl. 3.8) resultiert die Reynolds- bzw. *RANS*-Gleichung (*R*eynolds *A*veraged *N*avier-*S*tokes Equation):

$$\rho \frac{D\mathbf{U}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{U} - \nabla \cdot \{ \rho \overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'} \} + \mathbf{f}_B \quad (3.10)$$

Dabei entsteht ein zusätzlicher Term, welcher durch den Reynoldsspannungstensor $\{ \rho \overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'} \}$ bestimmt wird. Dieser fasst die einzelnen Reynoldsspannungen, welche den turbulenten Impulsaustausch beschreiben, zusammen. Sie stellen neue unbekannte Variablen dar, so dass ein geschlossenes Gleichungssystem mit Gl. 3.9 nur noch im laminaren Fall (hier werden alle Komponenten des Reynoldsspannungstensors zu Null) vorliegt. Bei turbulenten Strömungen, welche bei praktischen Anwendungen überwiegend vorliegen, erfolgt die Schließung üblicherweise durch ein Turbulenzmodell.

3.3 Turbulenzmodellierung

Bei einer turbulenten Strömung wie sie auch im Rührkessel vorliegt, werden generell zunächst große, energiereiche Wirbel erzeugt, welche dann zerfallen und über eine Kaskade ihre kinetische Energie an kleinere Wirbel übertragen. In den kleinsten Wirbelementen dissipiert die Bewegungsenergie schließlich aufgrund von viskosen Kräften in Form von Wärme.

Die Energieverteilung auf die verschiedenen Wirbelskalen lässt sich wie in Abb. 3.1 dargestellt zusammenfassen, wobei die Wirbelenergie E_W über die Wellenzahl k_W (die Wirbelgröße ist dabei proportional zu k_W^{-1}) aufgetragen ist. Der größte Teil der Wirbelenergie ist also in den mittleren Wirbelgrößen gebunden. Der Makromaßstab, d.h. die Ausdehnung der großen Wirbel, wird primär bestimmt durch die

¹Die Aufspaltung in einen Mittelwert und einen Schwankungswert wurde von Reynolds bereits 1895 vorgeschlagen [263].

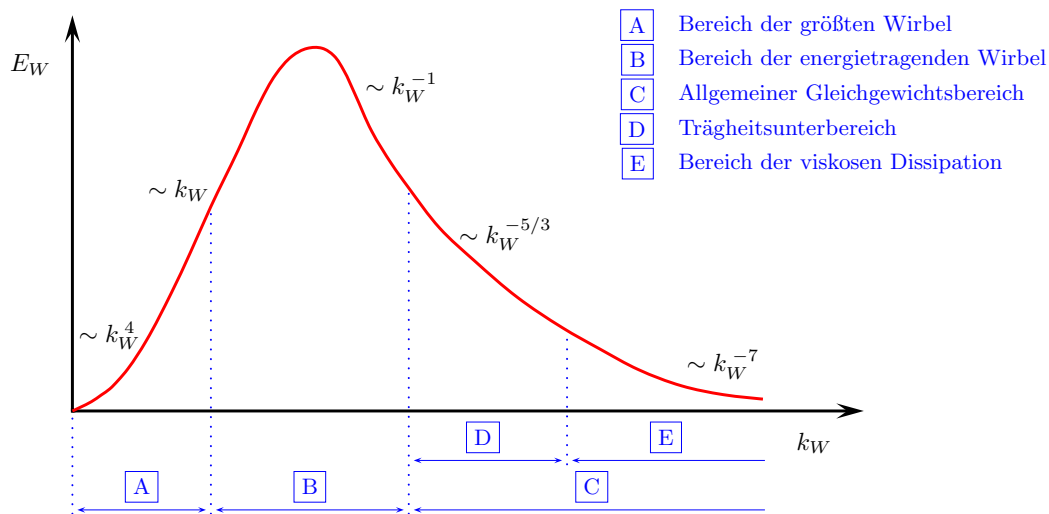


Abbildung 3.1: Energiespektrum einphasiger turbulenter Strömungen (siehe z.B. Kim & Manning [150] oder Hinze [124])

Scherströmung erzeugenden Geometrien, also im Fall von Rührkesselströmungen durch den Rührer und die Stromstörer. Die Abmessungen der dissipativen Wirbel lassen sich durch das Mikromaß nach Kolmogorov [160] $\eta_K = \nu^{3/4} \varepsilon^{-1/4}$, welches die kleinsten noch existenzfähigen Wirbel beschreibt, begrenzen. Bei kleineren Skalen erfolgt der Energieverlust nur noch über viskose Dissipation. Der Ansatz beruht auf der Annahme von lokal isotroper turbulenter Strömung. Das entsprechende Zeitmaß der kleinsten Wirbel berechnet sich mit $\tau_K = \nu^{1/2} \varepsilon^{-1/2}$. Da mit zunehmender Reynoldszahl die Dissipationsenergie ansteigt, werden die kleinsten Strukturen und das entsprechende Zeitmaß kleiner².

Sehr häufig (wie auch in der vorliegenden Arbeit) kommt bei der Turbulenzmodellierung das Standard k - ε -Turbulenzmodell (Jones & Launder [143] und Launder & Spalding [169]), welches zur Gruppe der Zweigleichungsmodelle gehört, zum Einsatz. Als entscheidender Schritt zur Schließung des Gleichungssystems werden die

²Allgemein gilt für ein charakteristisches turbulentes Längenmaß L , welches mit der (z.B. mittleren) Wirbelgröße korrespondiert eine Proportionalität von $L \propto k^{3/2} \varepsilon^{-1}$. Entsprechend gilt für ein charakteristisches turbulentes Zeitmaß T , welches mit der (z.B. mittleren) Lebenszeit der Wirbel korrespondiert, die Beziehung $T \propto k \varepsilon^{-1}$. Die Proportionalitätsfaktoren sind dabei abhängig von der betrachteten Wirbelgröße und schwanken zusätzlich stark von Autor zu Autor. L und T sind neben der Beurteilung der Strömung wichtig bei der Interpretation von Phänomenen des Mikro- und Mesomischen (während das Mikro- und Mesomischen bestimmt wird durch molekulare bzw. turbulente Diffusion erfolgt im Gegensatz dazu das Makromischen durch die Globalströmung) und bei der Bestimmung von Erträgen chemischer Reaktionen. T ist ein Maß für die Geschwindigkeit, mit der die Intensität der Segregation (s. auch Abschnitt 5.2.6) mittels Turbulenz reduziert werden kann, um lokale Bereiche mit hoher Konzentration einzelner Reaktanten aufzulösen. Solche Zonen haben in der Regel enorme Bedeutung bei unerwünschten Nebenreaktionen!

Reynoldsspannungen durch den Wirbelviskositätsansatz nach Prandtl approximiert:

$$\{\rho \overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'}\} = -\mu_t\{\{\nabla\mathbf{U}\} + \{\nabla\mathbf{U}\}^T\} + \frac{2}{3}\rho k \mathcal{I} \quad (3.11)$$

Die turbulenten Spannungen werden dabei proportional zu den Deformationsgeschwindigkeiten angenommen. Nach dimensionsanalytischen Überlegungen lässt sich die Wirbelviskosität μ_t mit Hilfe der turbulenten kinetischen Energie k und der Dissipationsrate ε bestimmen:

$$\mu_t \propto \rho k^2 \varepsilon^{-1} \quad (3.12)$$

Zu bemerken ist, dass die turbulente oder Wirbelviskosität die molekulare Viskosität um Größenordnungen übersteigen kann.

Die Definitionen für k (Maß für die in der turbulenten Strömung enthaltenen Energie) und ε (Maß für die Dissipation der turbulenten kinetischen Energie, d.h. Vernichtung von k durch Auflösung der kleinsten Wirbel aufgrund molekularer Viskosität) lauten:

$$k = \frac{1}{2} \overline{(\mathbf{u}' \cdot \mathbf{u}')} \quad (3.13)$$

$$\varepsilon = \nu \overline{(\nabla\mathbf{u}' : \nabla\mathbf{u}')} \quad (3.14)$$

Damit liegen zwei weitere Variablen vor, welche aber gut physikalisch interpretierbar sind und deren Zahlenwerte somit sinnvolle Informationen liefern. Analog zur Massen- und Impulserhaltung müssen auch für die turbulente kinetische Energie k und die Dissipationsrate ε Transportgleichungen aufgestellt bzw. modelliert werden. Die entsprechenden Ableitungen lassen sich z.B. bei Ferziger & Perić [92] nachlesen. Eine Zusammenfassung wird später in Abschnitt 3.5 gegeben.

Als zentrale Voraussetzung wurde bei der Ableitung der Modellgleichungen lokale Isotropie angenommen, d.h. die für die Dissipation relevanten Wirbel haben keine Vorzugsrichtung. Dies gilt strenggenommen nur in Bereichen der Kernströmung und für hohe Reynoldszahlen. Besonders bei abgelösten Strömungen ist somit beim Einsatz des k - ε -Turbulenzmodells mit einer gewissen Ungenauigkeit bei der Lage der Ablösezone zu rechnen. Ein starker Bruch mit der Isotropieannahme liegt ferner immer in Wandnähe vor, da hier die turbulente Strömung innerhalb kleiner Abmessungen in eine laminare Grenzschicht übergeht. Somit wird klar, dass bei turbulenten Strömungen eine einfache Hafttrandbedingung die Situation in Wandnähe nicht ausreichend beschreibt und eine gesonderte Behandlung nötig ist. Eine Möglichkeit ist der Einsatz eines low-Reynolds k - ε -Turbulenzmodells, wodurch allerdings eine sehr hohe Auflösung bis weit in die viskose Unterschicht hinein nötig wird, so dass der Einsatz bei dreidimensionalen Strömungen limitiert ist. Bei den vorliegenden Untersuchungen wurde daher zur Überbrückung der laminaren Unterschicht die logarithmische Wandfunktion (Modellierung entsprechend Launder & Sharma [168]) verwendet. Dabei wird die Geschwindigkeit in Wandnähe unter der Annahme eines lokalen Gleichgewichts zwischen Produktion und Dissipation durch die Schubspannungsgeschwindigkeit ausgedrückt³. Eine sehr ausführliche Beschreibung der

³Bei dreidimensionalen Strömungen mit Rezirkulationsgebieten ist beim Einsatz der logarithmischen Wandfunktion prinzipiell zu bedenken, dass die Annahmen nur bedingt erfüllt sind und damit ein gewisses Fehlerpotential vorliegt.

wandnahen Vorgänge findet man z.B. bei Jischa [142], welche im Folgenden kurz zusammengefasst wird.

Bei hinreichender Nähe zur Wand wird die Wandschubspannung τ_W ausschließlich durch die Ableitung der wandparallelen (bzw. tangentialen) mittleren Geschwindigkeitskomponente U_t (die Schwankungsgeschwindigkeiten fallen mit zunehmender Wandnähe schnell auf Null ab) nach der Wandnormalen bestimmt. Damit lässt sich die Wandschubspannungsgeschwindigkeit $u_\tau = (\tau_W \rho^{-1})^{1/2}$ definieren, welche hilfreich bei der Definition des dimensionslosen normalen Wandabstandes y^+ und der dimensionslosen Geschwindigkeit U^+ ist:

$$y^+ = u_\tau \nu^{-1} y_W \quad \text{und} \quad U^+ = U_t u_\tau^{-1} \quad (3.15)$$

wobei y_W der reale normale Wandabstand ist. Häufig wird angenommen, dass sich die Strömung lokal im Gleichgewicht befindet, d.h. die Produktion und die Dissipation an turbulenter kinetischer Energie sind etwa gleich groß. Dann lässt sich die Wandschubspannungsgeschwindigkeit als Funktion der turbulenten kinetischen Energie k und der Konstanten C_μ (s. Abschnitt 3.5) beschreiben: $u_\tau = C_\mu^{1/4} k^{1/2}$.

Damit vereinfacht sich die Beschreibung der Wandvorgänge erheblich. In der viskosen Unterschicht dominiert der laminare bzw. molekulare Transport, da $\mu_t \ll \mu$. In diesem Bereich erhält man eine lineare Abhängigkeit der Fluidgeschwindigkeit vom Wandabstand:

$$U^+ = y^+ \quad \text{für} \quad y^+ \leq 11 \quad (3.16)$$

Dabei lässt sich die Dicke der laminaren Unterschicht wie folgt abschätzen:

$$\delta_\ell \approx 5\nu u_\tau^{-1} \quad (3.17)$$

Im Übergangsbereich, d.h. bei $11 < y^+ \leq 30$, hält sich der laminare und der turbulente Transport die Waage ($\mu_t \approx \mu$). Bei noch größeren Entfernungen von der Wand überwiegt der turbulente Transport und man kommt in den Gültigkeitsbereich des logarithmischen Wandgesetzes:

$$U^+ = \kappa^{-1} \ln y^+ + C \quad \text{für} \quad 30 < y^+ \leq 100 \quad (3.18)$$

κ steht dabei für die von Kármán Konstante mit einem Zahlenwert von 0.41 und C für eine weitere Konstante zur Beschreibung der viskosen Unterschicht, welche experimentell zu 5.2 bestimmt wurde.

Bei rauhen Wänden ändert sich die Situation natürlich erheblich. Bleibt die Rauigkeitshöhe der Wand Δz_R aber kleiner als die Dicke der laminaren Unterschicht δ_ℓ , so spricht man von einer hydraulisch glatten Wand und die Strömung wird durch die Wandrauhigkeit nicht beeinflusst.

Auch die Anwesenheit einer zweiten (dispersen) Phase kann einen Einfluss auf die Wandgrenzschicht haben. Untersuchungen von Zisselmar & Molerus [359] zeigten allerdings, dass bei relativ kleinen Konzentrationen ($\varphi_P < 1\%$) praktisch keine

Änderungen resultieren. Bei den hier vorliegenden Untersuchungen, welche ausschließlich bei moderaten Konzentrationen durchgeführt wurden, blieb der Einfluss daher näherungsweise unberücksichtigt.

Möchte man auf die Modellierung der Turbulenz verzichten, so besteht die Möglichkeit der direkten numerischen Simulation (*DNS*)⁴. Dieses Verfahren ist allerdings prinzipiell immer instationär und erfordert die Auflösung auch der kleinsten turbulenten Zeit- und Längenskalen (d.h. auch der dissipativen kleinsten Wirbel). Das Berechnungsgebiet muss dann erheblich feiner aufgelöst werden, was zu einem erhöhtem Speicherbedarf und einer Vervielfachung der Berechnungszeiten führt. Da mit zunehmender Reynoldszahl die dissipativen Wirbel immer kleiner werden⁵ und damit die benötigte Auflösung immer größer wird, erkennt man schnell, dass das Verfahren für praxisrelevante Berechnungen sehr rasch an seine Grenzen stößt und durch ein modellierendes Verfahren ersetzt werden muss.

Bei der Large-Eddy Simulation (*LES*) sind im Vergleich zur *DNS* deutlich größere Gitter möglich, da hier nur die größeren Wirbel über das Gitter aufgelöst werden⁶. Die kleinen dissipativen Wirbel werden über ein einfaches Turbulenzmodell (dem sogenannten *SGS*-Modell⁷) erfasst. Ein Filter trennt dann den zu modellierenden Wellenlängenanteil vom explizit berechneten Anteil⁸. Bei der Modellierung (inkl. Filter) existieren inzwischen ähnlich wie bei der klassischen Turbulenzmodellierung eine Vielzahl von Modellen. Als Übersichtsliteratur sei hier Ferziger & Perić [92] bzw. für mehr Details Ferziger [91] aufgeführt. Bei Rührkesselströmungen lassen sich mit der *LES* im Vergleich zur *DNS* bei vergleichbarem Aufwand deutlich höhere Reynoldszahlen realisieren. Bei beiden Verfahren sind aufgrund der instationären Betrachtung aber Berechnungen über einen hinreichend langen Zeitraum nötig, um eine aussagekräftige Statistik zu erhalten. Ferner können Symmetrien bei der Berechnung nicht genutzt werden.

Aufgrund der hohen Effizienz von Turbulenzmodellen zur Schließung der *RANS*-Gleichung (s. auch das oben beschriebene *k-ε*-Turbulenzmodell), konnten sich die *DNS* und die *LES* in der Breite noch nicht durchsetzen. Die Nutzbarkeit von Turbulenzmodellen zeigt auch der Vergleich zwischen *DNS* und *RANS* (auf Basis des

⁴*DNS*-Berechnungen im Rührkessel wurden beispielsweise bereits von Bartels et al. [16], Ertem-Müller [89] und Ertem-Müller & Schäfer [90] vorgestellt (s. Abschnitt 7.3).

⁵Für homogene isotrope Turbulenz konnte von Tennekes & Lumley [322] gezeigt werden, dass η_K/L proportional zu $Re_L^{-3/4}$ ist. Dabei steht L für das integrale Längenmaß und Re_L basiert auf der Fluktuationgeschwindigkeit und L .

⁶*LES*-Berechnungen im Rührkessel wurden z.B. von Eggels [81], Revstedt et al. [262], Derksen & Van den Akker [70], Ertem-Müller [89] und Yeoh et al. [349] vorgestellt (s. Abschnitt 7.3).

⁷*SGS* = SubGrid Scale

⁸Im Gegensatz zu *RANS*-Ansätzen liegt bei der *LES* also eine klare Trennung zwischen aufgelösten (großen) und nichtaufgelösten (kleinen) Skalen vor. Ebenso werden aufgrund des einfachen *SGS*-Modells in der Regel weniger experimentell zu ermittelnde Modellparameter benötigt. Der Einsatz eines einfachen Turbulenzmodells ist allerdings nur dann gerechtfertigt bzw. sinnvoll, wenn der Beitrag der modellierten Wirbel zur Gesamtenergie klein ist, d.h. wenn die Gitterauflösung hinreichend groß ist. Im Vergleich zu *RANS*-Verfahren mit Turbulenzmodellen werden somit immer noch sehr feine Berechnungsgitter benötigt.

k - ε -Turbulenzmodells) von Bartels et al. [16] (s. auch Abschnitt 7.3). Hier wurde eine Rührkesselströmung mit Scheibenrührer berechnet. Die mit den beiden Verfahren berechneten Strömungsfelder sind sehr ähnlich und die Unterschiede bei der berechneten Newtonzahl sind gering. Verbesserungen durch die Nutzung von *DNS* zeigen sich allerdings bei der turbulenten kinetischen Energie, insbesondere in der Nähe der Rührerblätter. Wie zu erwarten war, werden die Spitzenwerte bei der Verwendung des k - ε -Turbulenzmodells unterbestimmt.

Generell wurde die Eignung des Standard k - ε -Turbulenzmodells für Strömungen mit stark gekrümmten Stromlinien bereits von einer Vielzahl von Autoren verneint, so dass verschiedene Modifikationen vorgeschlagen wurden. Die Untersuchungen von Brucato et al. [36] ergaben allerdings, dass die Nutzung modifizierter Koeffizienten die Ergebnisse teilweise verbessern und teilweise verschlechtern, so dass im Ganzen kein Vorteil der modifizierten Koeffizienten herausgearbeitet werden konnte.

Auch Jenne & Reuss [141] untersuchten verschiedene k - ε -Turbulenzmodelle bzgl. ihrer Eignung zur Berechnung von Rührkesselströmungen (Scheibenrührer). Dabei zeigte sich, dass bereits das Standard k - ε -Turbulenzmodell eine akzeptable Übereinstimmung mit entsprechenden Messwerten liefert. Der Einsatz eines modifizierten Chen-Kim k - ε -Turbulenzmodells führte zu einer weiteren (geringfügigen) Verbesserung. Friberg [99] berichtete ebenfalls von einer gewissen Überlegenheit des Chen-Kim k - ε -Turbulenzmodells gegenüber dem Standard k - ε Modell.

Ähnliche Vergleichsrechnungen führten auch Jaworski & Zakrzewska [140] durch, allerdings unter Einsatz des *ASS*-Verfahrens⁹. Im Zentrum ihrer Untersuchungen¹⁰ stand allerdings der durch den Rührer erzeugte Wandstrahl entlang der vertikalen Behälterwand, so dass ein Vergleich mit *LDA*-Messungen¹¹ (axiale und tangentiale Geschwindigkeitskomponente) nur in der Nähe der Wand erfolgte. Es wurden folgende Turbulenzmodelle untersucht: Standard k - ε , *RNG* k - ε ¹², *realizable* k - ε , Chen-Kim k - ε , optimiertes Chen-Kim k - ε sowie ein *RS*-Modell¹³.

Im Gegensatz zu den Berechnungen von Jenne & Reuss [141] resultierte aus den Untersuchungen von Jaworski & Zakrzewska eine Präferenz für das Standard k - ε -Turbulenzmodell, welches insgesamt die beste Übereinstimmung mit den Messungen lieferte¹⁴. Dabei war die Genauigkeit bei den mittleren Geschwindigkeiten sehr gut, während die turbulente kinetische Energie (insbesondere in Wandnähe) signifikant zu

⁹*ASS* = Approximate Steady-State (s. Abschnitt 5.1.2)

¹⁰Behälter mit Flachboden, $D = H = 0.2$ m, $d_R/D = 0.336$, $h_R = D/3$, $n_{SS} = 4$, $Re = 2.25 \cdot 10^4$ berechnet mit $1.13 \cdot 10^5$ Zellen.

¹¹Der mittlere Gesamtmessfehler bei den *LDA*-Messungen wurde mit $0.015U_{RU}$ abgeschätzt.

¹²*RNG* = *Re*Normalisation Group

¹³*RS* = Reynolds Stress

¹⁴Montante et al. [204] kamen bei ihren Untersuchungen zum gleichen Ergebnis. Eine Variation des Turbulenzmodells (*RNG* k - ε , *RS*-Modell) brachte praktisch keine Verbesserung gegenüber dem Standard k - ε -Turbulenzmodell. Vergleiche von Bakker et al. [10] zeigten ebenfalls nur geringe Unterschiede bei der Variation der Turbulenzmodelle. Die Berechnungen von Kohonen [156] zeigten gar ein deutlich schlechteres Verhalten des *RS*-Modells im Vergleich zum k - ε -Turbulenzmodell.

klein berechnet wurde. Die Unterschiede zu den Ergebnissen von Jenne & Reuss [141] könnten durch deren einfachere Modellierung (*IBC*-Verfahren¹⁵) entstanden sein.

Beim Vergleich eines *RS*-Modells mit dem Standard *k-ε*-Turbulenzmodell resultierte bei den Berechnungen von Kohnen [156] ein erheblich größerer Fehler bei der Leistungsberechnung mit dem *RS*-Modell. Die einhergehende höhere Instabilität und Rechenzeit war somit nicht gerechtfertigt und Kohnen favorisierte das *k-ε*-Turbulenzmodell. Das *RS*-Modell stuft er als ungeeignet für Rührwerksströmungen ein.

3.4 Rotation des Koordinatensystems

Bisher wurde für alle Betrachtungen ein ruhendes Koordinatensystem angenommen. Bei verschiedenen Anwendungen, wie z.B. der Berechnung von Rührkesselströmungen, ist es aber sinnvoll die Erhaltungsgleichungen in einem bewegten Koordinatensystem zu betrachten, so dass entsprechende Transformationen (s. z.B. Vanyo [336]) durchgeführt werden müssen, um die Fluideigenschaften im ruhenden Koordinatensystem ϕ_{RKS} durch diejenigen im bewegten Koordinatensystem ϕ_{BKS} zu ersetzen.

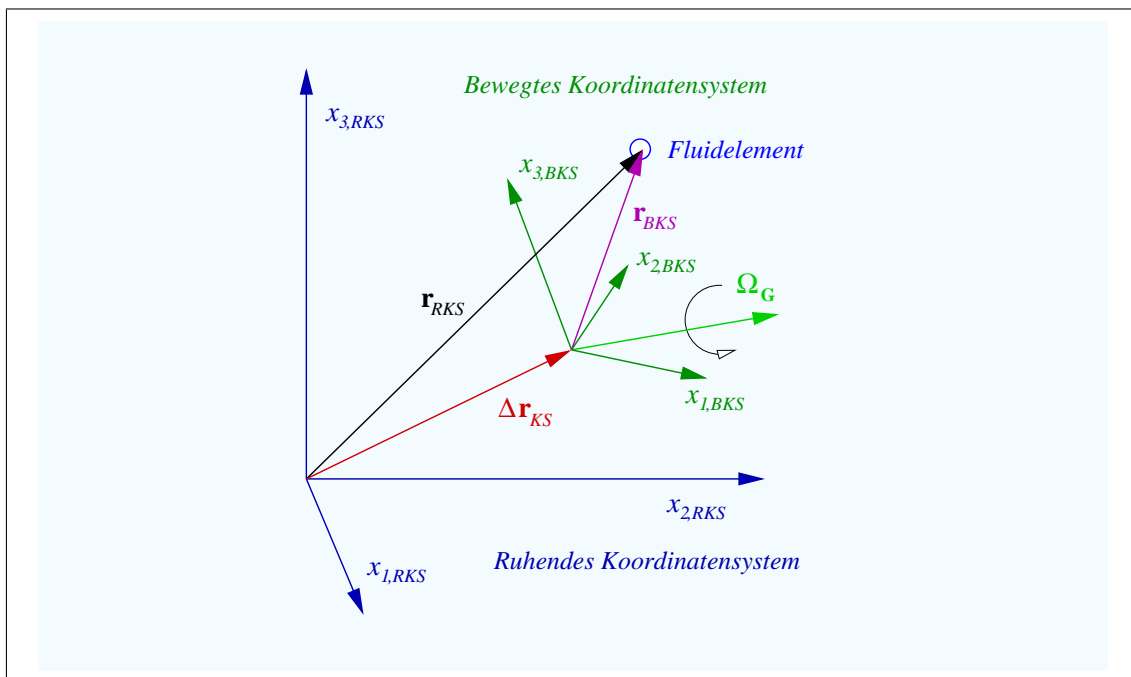


Abbildung 3.2: Beziehung zwischen einem ruhenden und einem bewegten kartesischen Koordinatensystem (*RKS* bzw. *BKS*)

¹⁵*IBC* = Impeller Boundary Condition (s. Abschnitt 5.1.2)

Im allgemeinen Fall einer relativen Translations- und Rotationsbewegung zwischen einem ruhenden und einem bewegten kartesischen Koordinatensystem gilt folgende Beziehung zwischen den jeweiligen Ortsvektoren eines Fluidelements:

$$\mathbf{r}_{RKS} = \Delta\mathbf{r}_{KS} + \mathbf{r}_{BKS} \quad (3.19)$$

wobei $\Delta\mathbf{r}_{KS}$ die Position des bewegten Koordinatensystems relativ zum ruhenden repräsentiert. In Abb. 3.2 ist dies schematisch verdeutlicht.

Rotiert das bewegte Koordinatensystem (BKS) mit $\Omega_{\mathbf{G}}$, so erhält man bei einer zeitlichen Ableitung von Gl. 3.19 eine Beziehung zwischen den gemittelten Geschwindigkeiten des Fluidelements:

$$\mathbf{U}_{RKS} = \mathbf{U}_{BKS} + \frac{D\Delta\mathbf{r}_{KS}}{Dt} + [\Omega_{\mathbf{G}} \times \mathbf{r}_{BKS}] \quad (3.20)$$

Analog ergibt sich für die Beschleunigung des Fluidelements:

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{U}_{RKS}}{Dt} &= \frac{D\mathbf{U}_{BKS}}{Dt} + \frac{D^2\Delta\mathbf{r}_{KS}}{Dt^2} + \left[\frac{D\Omega_{\mathbf{G}}}{Dt} \times \mathbf{r}_{BKS} \right] \\ &\quad + 2[\Omega_{\mathbf{G}} \times \mathbf{U}_{BKS}] + [\Omega_{\mathbf{G}} \times [\Omega_{\mathbf{G}} \times \mathbf{r}_{BKS}]] \end{aligned} \quad (3.21)$$

Bei einer konstanten Rotationsgeschwindigkeit entfällt der dritte Term auf der rechten Seite von Gl. 3.21 (zeitliche Ableitung von $\Omega_{\mathbf{G}}$). Liegt weiterhin keine relative Translationsgeschwindigkeit zwischen den betrachteten Koordinatensystemen vor, so wird auch der zweite Term zu Null (zeitliche Ableitung von $\Delta\mathbf{r}_{KS}$). In einem rotierenden Koordinatensystem ergibt sich somit durch Einsetzen von Gl. 3.21 in Gl. 3.10 für die Volumenkraft \mathbf{f}_{Ω} :

$$\mathbf{f}_{\Omega} = -2\rho[\Omega_{\mathbf{G}} \times \mathbf{U}] - \rho[\Omega_{\mathbf{G}} \times [\Omega_{\mathbf{G}} \times \mathbf{r}]] \quad (3.22)$$

Dabei repräsentiert der erste Term auf der rechten Seite die Corioliskraft und der zweite Term die Zentrifugalkraft.

Im Falle einer Rotation um die x_3 -Achse, d.h. $\Omega_{\mathbf{G}} \parallel \mathbf{e}_3$ ($\Omega_{1,G} = \Omega_{2,G} = 0$) und $\Omega_G = |\Omega_{\mathbf{G}}| = \Omega_{3,G}$, vereinfacht sich Gl. 3.22 zu:

$$\mathbf{f}_{\Omega} = \rho\Omega_G \begin{pmatrix} \Omega_G x_1 + 2U_2 \\ \Omega_G x_2 - 2U_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

Zum gleichen Ergebnis kommt man durch direktes Einsetzen von Gl. 3.20 in die Erhaltungsgleichungen. Mit entsprechender Umformung zeigt sich auch, dass außer bei der Impulserhaltungsgleichung keine zusätzlichen Terme aufgrund der Transformation in ein bewegtes Koordinatensystem resultieren.

3.5 Allgemeine Transportgleichung

Das aus den bisherigen Betrachtungen resultierende Gleichungssystem kann in einer allgemeinen Erhaltungsgleichung zusammengefasst werden und lautet im Fall einer stationären Strömung mit Newtonschem Fluid für die gemittelte skalare bzw. vektorielle Größe ϕ :

$$\underbrace{(\nabla \cdot \rho \mathbf{U} \phi)}_{\text{Konvektionsterm}} - \underbrace{(\nabla \cdot [\Gamma_\phi \nabla \phi])}_{\text{Diffusionsterm}} = \underbrace{S_\phi}_{\text{Fluidquellterm}} + \underbrace{S_{\phi,P}}_{\text{Partikelquellterm}} \quad (3.24)$$

Dabei gilt für die Kontinuitätsgleichung $\phi = 1$ und für die Impulserhaltung wird \mathbf{U} eingesetzt. Die Erhaltungsgleichungen der turbulenten kinetischen Energie k und der Dissipationsrate ε ergeben sich entsprechend mit $\phi = k$ und $\phi = \varepsilon$. Der Diffusionskoeffizient Γ_ϕ ist in den einzelnen Gleichungen durch die effektive Viskosität gegeben. Ferner werden die Fluidichte ρ und die molekulare dynamische Viskosität des Fluids μ als konstant angenommen. Die Fluidquellterme S_ϕ ergeben sich durch die Gravitation, Druckgradienten usw. und die Partikelquellterme $S_{\phi,P}$ (diese werden in Abschnitt 4.4 noch genau beschrieben) berücksichtigen die Wirkung der dispersen Phase auf das Fluid.

Die einzelnen Terme der fluiden Phase sowie die benötigten empirischen Konstanten¹⁶ für das Turbulenzmodell (Launder & Sharma [168]) sind in Tab. 3.1 zusammengefasst. Bei der Impulsgleichung werden dabei außer der Schwerkraft sowie der Coriolis- und Zentrifugalkraft keine weiteren Volumenkräfte berücksichtigt.

In der k -Gleichung ist G der Produktionsterm (s. Tab. 3.1) und der Term $\rho\varepsilon$ steht für die Dissipation. Die Terme $C_{\varepsilon,1} G \varepsilon k^{-1}$ und $C_{\varepsilon,2} \rho \varepsilon^2 k^{-1}$ in der ε -Gleichung beschreiben Quelle und Senke der Dissipationsrate.

3.6 Randbedingungen

Zur Lösung des Systems nichtlinearer partieller Differentialgleichungen müssen geeignete Randbedingungen (RB) definiert bzw. gesetzt werden. Diese können in zwei Hauptgruppen unterschieden werden: man spricht von einer Dirichlet-Randbedingung (DRB), wenn der Randwert explizit gesetzt wird und von einer Neumann-Randbedingung (NRB) im Falle eines gegebenen normalen Gradienten der betrachteten Variablen am Berechnungsrand [246].

In Tab. 3.2 sind die elementaren Randbedingungen sowie ihre Behandlung zusammengefasst. Die Normale n bezieht sich dabei auf die KV -Fläche mit der entsprechenden Randbedingung.

¹⁶Die empirischen Konstanten wurden durch eine Vielzahl von numerischen Berechnungen verschiedenster Wissenschaftler auf Allgemeingültigkeit hin optimiert.

ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
1	–	0
\mathbf{U}	$\mu + \mu_t$	$[\nabla \cdot \Gamma_{\mathbf{U}} \{ \nabla \mathbf{U} \}^T] - \nabla p + \mathbf{f}_B$
k	$\mu + \mu_t \sigma_k^{-1}$	$G - \rho \varepsilon$
ε	$\mu + \mu_t \sigma_\varepsilon^{-1}$	$(C_{\varepsilon,1} G - C_{\varepsilon,2} \rho \varepsilon) \varepsilon k^{-1}$

$$\mu_t = C_\mu \rho k^2 \varepsilon^{-1} \quad G = (\mu_t \{ \{ \nabla \mathbf{U} \} + \{ \nabla \mathbf{U} \}^T \} : \nabla \mathbf{U})$$

$$\mathbf{f}_B = \rho \mathbf{g} - 2\rho [\boldsymbol{\Omega}_G \times \mathbf{U}] - \rho [\boldsymbol{\Omega}_G \times [\boldsymbol{\Omega}_G \times \mathbf{r}]]$$

$$C_\mu = 0.09; \quad C_{\varepsilon,1} = 1.44; \quad C_{\varepsilon,2} = 1.92; \quad \sigma_k = 1.0; \quad \sigma_\varepsilon = 1.3$$

Tabelle 3.1: Zusammenfassung der einzelnen Terme für die fluide Phase sowie der benötigten empirischen Konstanten für das Turbulenzmodell (Die Modellkonstanten σ_k und σ_ε sind dabei als turbulente Prandtlzahlen zu deuten)

RB	RB -Art	Behandlung
Einlass	DRB	zu spezifizierende Profile
Auslass	NRB	$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \quad \forall \phi = \mathbf{U}, k, \varepsilon$
Wand	DRB	$\phi = 0 \quad \forall \phi = \mathbf{U}, k, \varepsilon$
Symmetrie	NRB	$U_n = 0; \quad \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \quad \forall \phi = U_t, k, \varepsilon$

Tabelle 3.2: Zusammenfassung der elementaren Randbedingungen

Die in der vorliegenden Arbeit verwendeten genauen Randbedingungen sind bei den jeweiligen Berechnungen spezifiziert.