

8 Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit beschäftigte sich mit der numerischen Berechnung von gerührten Suspensionen unter Nutzung des Euler-Lagrange-Verfahrens, um einen Beitrag zur Reduzierung der Kosten aufgrund von Fehlinterpretationen und falschen Betriebsparametern zu leisten¹. Dafür musste zunächst auf der Basis eines bestehenden 2d-Berechnungsprogramms ein entsprechendes 3d-Programmsystem² aufgebaut werden. Im Laufe der Arbeiten wurde dieses dann für die speziellen Anforderungen bei der Berechnung von Rührwerksströmungen erweitert. Damit war es möglich, die spezifischen Vorteile des Euler-Lagrange-Verfahrens³ auch bei gerührten Zweiphasenströmungen, welche bisher hauptsächlich mit dem Euler-Euler-Verfahren berechnet wurden, nutzbar zu machen. Nach der Validierung anhand verschiedenster Testfälle kam das Programm schließlich bei der Berechnung einer Vielzahl von Suspendierströmungen im Rührkessel zum Einsatz. Um die Güte der Simulationen bewerten zu können, wurden parallel zu den numerischen Arbeiten entsprechende experimentelle Untersuchungen in einem 0.05 m³ Rührbehälter durchgeführt und die Ergebnisse mit den Berechnungen verglichen.

In Abschnitt 2 wurden zunächst Zweiphasenströmungen grundlegend charakterisiert, wobei sich die Betrachtung in der vorliegenden Arbeit auf disperse Zweiphasenströmungen mit festen Teilchen beschränkte. Wichtige Punkte sind die Beschreibung der Zusammensetzung, der mittlere Teilchenabstand, das Folgevermögen der einzelnen Teilchen sowie die Klassifizierung von verdünnten bzw. dichten Zweiphasenströmungen.

¹Aktuelle Messtechniken erlauben aufgrund des meist sehr hohen Aufwands nur begrenzten Einblick in Bereiche kleiner Skalen. Gerade bei der Betrachtung von Suspensionen sind ferner zuverlässige Detailinformationen nur schwer oder gar nicht zu erhalten. Die numerische Simulation kann als zusätzliches Analysewerkzeug hierbei wertvolle Zusatzinformationen für die Auslegung und die Wahl der optimalen Betriebsparameter liefern.

²Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein multifunktionales dreidimensionales Lagrangesches Berechnungsprogramm für die disperse Phase (*LAG3D*) entwickelt und mit einem bestehenden Löser für das Fluid (*FASTEST3D*) gekoppelt.

³Sind 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 das Euler-Lagrange-Verfahren erhebliche Vorteile, da die Modellierung von Prozessen am Teilchen deutlich einfacher und anschaulicher erfolgen kann als beim Euler-Euler-Verfahren. Ferner ist zu bemerken, dass sich beim Lagrangeschen Ansatz praktisch beliebige Teilchengrößenverteilungen bereits mit minimalem Mehraufwand berücksichtigen lassen.

Die theoretischen Grundlagen zur Beschreibung der kontinuierlichen Phase wurden dann in Abschnitt 3 zusammengestellt. Die Basis bilden hierbei die verschiedenen Erhaltungsgleichungen bei einer stationären Betrachtung. Von zentraler Bedeutung ist aber auch das Thema Turbulenzmodellierung in gerührten Suspensionen, welches an dieser Stelle detailliert diskutiert wurde. Nach entsprechender Abwägung der Vor- und Nachteile (Kosten/Nutzen) der verschiedenen Ansätze wurde sich in dieser Arbeit schließlich für den Einsatz des in vielen Bereichen bewährten k - ε -Turbulenzmodells entschieden. Da die Berechnung teilweise im rotierenden und teilweise im ortsfesten Bezugssystem erfolgte, mussten alle beschreibenden Erhaltungsgleichungen entsprechend transformiert werden.

Analog wurden in Abschnitt 4 die Erhaltungsgleichungen für die disperse Phase besprochen, wobei den verschiedenen Kräften, welche auf die Teilchen wirken, eine bedeutsame Rolle zukommt. Bei einer Bewegung im rotierenden Koordinatensystem müssen die Gleichungen zur Berechnung des Teilchenorts, der Translation sowie der Rotation ebenfalls transformiert werden. Wegen der stationären Berechnung des Fluids sowie der Annahme von Isotropie bei der Turbulenzmodellierung ist eine Modellierung der Partikeldispersion nötig. Nach einer Diskussion der verschiedenen Möglichkeiten wurde sich für den Einsatz des Langevin-Gleichungsmodells entschieden, welches verschiedenste Geschwindigkeitskorrelationen berücksichtigt. Die Rückwirkung der dispersen Phase auf das Fluid wurde mit Hilfe von Partikelquelltermen entsprechend einer modifizierten Version des *Particle-Source-in-Cell*-Verfahrens von Crowe et al. [54] erfasst. Die Berechnung von Partikel-Partikel-Kollisionen erfolgte nach einer Abschätzung des Aufwand/Nutzen-Verhältnisses verschiedener Ansätze mit Hilfe einer stochastischen Modellierung. Dabei wird für jeden Zeitschritt zufallsgesteuert ein Stoßpartner mit bestimmten Eigenschaften generiert und entsprechend die Wahrscheinlichkeit für eine Kollision berechnet. Kommt es zu einem Zusammenstoß, so werden die relevanten Impulserhaltungsgleichungen gelöst und die Teilchenbewegung entsprechend korrigiert. Ganz ähnlich verhält es sich bei der Berechnung von Partikel-Wand-Kollisionen, nur dass eine zufällige Komponente nur noch bei der Berücksichtigung von Wandrauhigkeiten auftaucht. Da die Widerstandskraft eines Teilchens erheblich von der Existenz benachbarter Teilchen abhängt (hydrodynamische Wechselwirkungen zwischen Teilchen mit hinreichend kleinem Abstand), wurde dieses Thema unter dem Begriff Schwarmeffekte näher beleuchtet und die verschiedenen Ansätze diskutiert.

Eine detaillierte Beschreibung der numerischen Umsetzungen für die Berechnung einer Zweiphasenströmung erfolgte dann in Abschnitt 5. Hier wurden insbesondere die verschiedenen Möglichkeiten zur Erfassung bzw. Modellierung des Rührers diskutiert. Nach einer eingehenden Analyse bzgl. Genauigkeit und Kosten (Zeitaufwand) wurde für die vorliegenden Untersuchungen schließlich das *ASS*-Verfahren⁴ gewählt. Wichtige Themen im Partikelteil sind die lokale Zeitschrittbestimmung (diese beeinflusst die Gesamtrechnzeit erheblich), der Übergang zwischen rotieren-

⁴Häufig wird das *ASS*-Verfahren (*ASS* = *A*pproximate *S*teady-*S*tate) auch als *MFR*-Verfahren (*MFR* = *M*ultiple *F*rames of *R*eference) oder *FR*-Verfahren (*FR* = *F*rozen *R*otor) bezeichnet.

den und ortsfesten Berechnungszonen, die Ermittlung von zeitlichen Mittelwerten in den einzelnen Kontrollvolumina (z.B. der Konzentration), die Abschätzung des statistischen Fehlers durch die Betrachtung von repräsentativen Teilchen und die Möglichkeit der Rechenbeschleunigung durch die Nutzung paralleler Architekturen. Schließlich wurde in Abschnitt 5.4 der gesamte Ablauf der Berechnung in einer Übersicht zusammengestellt und erläutert.

Aufgrund der zentralen Rolle der Partikel-Partikel-Kollisionen bei den durchgeführten Berechnungen, wurde die Kollisionsmodellierung (sowie auch die Phasenkopplung) in Abschnitt 6 anhand einer zweiphasigen vertikalen Rohrströmung erfolgreich validiert. Experimente von Tsuji et al. [327] lieferten dabei die benötigten Vergleichsdaten.

In Abschnitt 7 erfolgte schließlich die Anwendung des entwickelten Programms auf gerührte Suspensionen. Nach einer Spezifikation grundlegender Kenngrößen erfolgte eine Beschreibung der möglichen Suspendierzustände. Die im Wesentlichen historisch gewachsenen Kriterien zur Charakterisierung des Zustands können allerdings nur eine limitierte Genauigkeit liefern, da sie primär von der subjektiven Bewertung eines Beobachters abhängen. Im Anschluss wurde dann eine Auswahl relevanter bisheriger Arbeiten auf dem Gebiet der Rührtechnik, insbesondere der Simulation von Rührkesselströmungen sowie der Untersuchung von Suspensionen ausgewertet, um entsprechende Vorgehensweisen bei den eigenen Untersuchungen zu optimieren.

Im Folgenden wurde die betrachtete Geometrie (Rührkessel mit $D = 400$ mm, Klöpferboden & 4 Stromstörern und $6 \times 45^\circ$ -Schrägblattrührer mit $d_R = 0.36 D$) detailliert beschrieben und die Umsetzung in ein Berechnungsgitter erläutert. Unter Ausnutzung der Symmetrie wurde ein 180° -Segment mit bis zu 2 Mio. Hexaederelementen aufgelöst. Das betrachtete Zweiphasensystem bestand aus Wasser und Glaskügelchen.

Danach erfolgte die Beschreibung der parallel zu den Berechnungen mit einem LDA/PDA-Messsystem durchgeführten Vergleichsmessungen. Im Versuchsaufbau wurde eine Dreiwegetraversierung realisiert, so dass jeder beliebige Punkt im Rührbehälter vermessen werden konnte. Der Rührbehälter wurde für eine Brechungsindexanpassung in einem rechteckigen Becken positioniert. Sowohl der Rührbehälter als auch das Becken waren mit DMSO gefüllt, so dass bei wasserähnlichen Bedingungen leicht praxisrelevante Reynoldszahlen realisierbar waren. Die Handhabung von DMSO erwies sich allerdings aufgrund seiner extrem guten Lösungseigenschaften (*to* Dichtungsprobleme) als sehr schwierig, so dass Messungen für die Validierung auch mit Wasser durchgeführt wurden.

Da die Turbulenzmodellierung bei Rührkesselströmungen ein wichtiges Thema ist und dabei gerade die Behandlung der Wandgrenzschicht auf den Rührerblättern große Bedeutung hat, wurde zunächst der dimensionslose normale Wandabstand für verschiedene Gitterauflösungen analysiert. Dadurch konnte sichergestellt werden, dass eine Verkleinerung der Wandzellen am Rührer nicht über eine massive Verletzung der Grenzen des logarithmischen Wandgesetzes die Förderleistung des Rührers

beeinflusst. Im Anschluss folgte eine Analyse der Diskretisierung der konvektiven Flüsse sowie eine Bewertung der Gitterauflösung. Hier konnte gezeigt werden, dass der Gewichtungsfaktor γ_{CDS} eine zentrale Rolle für die korrekte Berechnung der Strömungsstrukturen darstellt. Erst ab einem Wert von $\gamma_{CDS} = 0.95$ brachte eine weitere Erhöhung, welche mit einer Reduzierung der numerischen Stabilität einhergeht, nur noch wenig Verbesserung. Die Variation der Gitterauflösung wirkte sich besonders in Bereichen kleinerer Strukturen sowie bei den turbulenten Größen aus, wobei der Effekt kleiner ausfiel als bei der Variation von γ_{CDS} . Vergleiche mit entsprechenden Messwerten zeigten insgesamt eine gute Übereinstimmung, besonders bei der Verwendung einer hohen Gitterauflösung und hohen γ_{CDS} -Werten. Die größten Abweichungen wurden dabei im oberen Bereich des Rührkessels gefunden. Eine Vorstellung der verschiedenen Möglichkeiten zur Visualisierung der Strömung erfolgte dann im Anschluss.

Zur Bewertung der Skalierbarkeit der Strömung wurde die Rührerdrehzahl variiert. Dabei zeigte sich, dass die Rechnungen im Bereich $n_R = 200 \dots 400 \text{ min}^{-1}$ bei einer Normierung mit U_{RU} und d_R nahezu unabhängig von der Rührerdrehzahl sind und auch die entsprechenden experimentellen Ergebnisse nur wenig streuen. Durch eine Abschätzung der lokalen Stokeszahl wurde im Folgenden das Partikelverhalten analysiert und die Bedeutung von Partikel-Partikel-Kollisionen bewertet. Relativ hohe Stokeszahlen liegen im Bereich des Rührers, der Welle sowie an den Behälterwänden vor, in den restlichen Bereichen sind die Werte relativ klein. Mit zunehmender Gitterauflösung nehmen die Stokeszahl-Überhöhungen durch die verbesserte Auflösung von Scherschichten zu. Partikel-Partikel-Kollisionen sind dabei generell umso wahrscheinlicher, je größere Werte die Stokeszahl annimmt und je unkorrelierter sich die Teilchen bewegen. Im Zuge der Analyse konnte gezeigt werden, dass die angesetzte Korrelation zwischen zwei möglicherweise kollidierenden Teilchen in Bereichen mit kollisionskontrollierter Dispersion zu stark ausfällt und damit im betrachteten Zweiphasensystem nicht verwendet werden sollte.

Für einen ersten Eindruck der Bewegung der Teilchen im Rührbehälter wurden exemplarisch einige Partikelbahnen untersucht. Im Anschluss wurde der statistische Fehler bewertet, der sich bei einer Reduzierung der Betrachtung auf repräsentative Teilchen errechnet. Hier galt es eine akzeptable Anzahl an zu betrachtenden Teilchen zu finden, d.h. einen sinnvollen Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenzeit. Die Newtonzahl ist eine wichtige Kenngröße für gerührte Systeme, daher wurde sie auch in der vorliegenden Arbeit sowohl aus der Energiedissipation als auch aus dem Rührerdrehmoment berechnet. Die Berechnungen mit Hilfe des Drehmoments lieferten eine sehr gute Übereinstimmung mit Literaturdaten. Die aus der Energiedissipation berechneten Werte waren dagegen bei allen betrachteten Gitterauflösungen zu niedrig.

Für die Bewertung der Konvergenz einer gekoppelten Zweiphasenströmung im Rührkessel lassen sich verschiedenste Kriterien heranziehen. Bei den vorliegenden Untersuchungen erwies sich aber die Beobachtung der Newtonzahl als das geeignetste Verfahren. Durch die Einführung innerer Lagrange-Schleifen lies sich das

Konvergenzverhalten je nach Anwendungsfall mehr oder weniger verbessern. Insgesamt erwies sich das Potenzial wegen einer Vergrößerung der Entkopplung aber als gering.

Schließlich wurden die Fluid- und Teilcheneigenschaften einer Zweiphasenströmung einander gegenübergestellt. Insgesamt zeigte sich erwartungsgemäß, dass die Teilchen der Strömung gut folgen können. Deutliche Geschwindigkeitsunterschiede wurden lediglich an der Behälterwand und im Bereich des Rührers beobachtet. Interessant ist das Phänomen, dass Teilchen durch Dispersion höheren Impuls in benachbarte Zonen transportieren können. Dieser Effekt wird umso bedeutsamer, je schwerer bzw. größer die Teilchen sind. Änderungen bei der Gitterauflösung wirkten sich bei der dispersen Phase analog wie bei der fluiden Phase aus. Ein Vergleich der Geschwindigkeitskomponenten der Teilchenphase mit entsprechenden experimentellen Daten führte bzgl. der Berechnungsqualität zu analogen Aussagen wie bei der Fluidphase. Obwohl die Geschwindigkeitsunterschiede bei einer Gittervariation eher gering waren, änderte sich die dreidimensionale Verteilung der Teilchen allerdings merklich. Das Konzentrationsfeld zeigte sich bei Änderungen der Randbedingungen also deutlich sensibler als die entsprechenden Geschwindigkeitskomponenten.

Der Effekt von verschiedenen Parametervariationen, insbesondere auf die Feststoffverteilung im Rührkessel, wurde anschließend im Detail analysiert. Größere Teilchen waren in aufwärts gerichteten Strömungen tendenziell langsamer und bei abwärts gerichteter Strömung schneller. Auch bei der Variation der Teilchengröße musste festgestellt werden, dass die Konzentrationsverteilung deutlich stärker reagiert als die entsprechenden Geschwindigkeiten. Die Feststoffverteilung über die Behälterhöhe wich mit zunehmender Teilchengröße immer stärker von einer homogenen Verteilung ab und auch die Streuungen nahmen zu. Die Zone geringer Konzentration im oberen Behälterbereich nahm in gleichem Maße zu. Die Newtonzahl zeigte nur eine minimale Abhängigkeit von der Teilchengröße. Eine Erhöhung des mittleren Partikelvolumenanteils bewirkte eine Verstärkung des Konzentrationsmaximums im oberen Behälterdrittel und eine Vergrößerung der Zone geringer Konzentration darüber. Die einhergehende Erhöhung der Newtonzahl wurde richtig wiedergegeben.

Schließlich wurde die große Bedeutung von Phasenkopplung und Partikel-Partikel-Kollisionen für gerührte Suspensionen räumlich aufgelöst quantifiziert. Durch die Berücksichtigung der Phasenkopplung wurde die Feststoffverteilung über die Höhe zunächst ungleichmäßiger und die Konzentrationsüberhöhungen, insbesondere am Boden des Behälters, wurden verstärkt. Auch die Zone geringer Konzentration im oberen Behälterbereich nahm zu. Durch eine zusätzliche Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen wurde die vertikale Verteilung wieder homogener, wobei vor allem die hohen Konzentrationen am Behälterboden aufgelöst wurden. Mit zunehmender Gitterauflösung verstärkten sich unphysikalische lokale Konzentrationsüberhöhungen, so dass die Notwendigkeit einer Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen noch weiter steigt. Auch wenn der Effekt der Partikel-Partikel-Kollisionen insgesamt kleiner ist als der Effekt der Phasenkopplung, so sind doch beide Mechanismen von zentraler Bedeutung für die korrekte Berechnung von gerührten

Suspensionen. Eine Vernachlässigung ist daher auch bei relativ geringen Konzentrationen nicht ratsam.

Insgesamt lässt sich zusammenfassen, dass das vorgestellte Verfahren die Berechnung von turbulenten Zweiphasenströmungen im Rührkessel ohne geometrische Vereinfachungen mit guter Genauigkeit erlaubt. Es eignet sich somit zur Analyse von bestehenden Prozessen als auch zur Unterstützung bei der Auslegung für neue Anforderungen. Der größte Benefit ist dabei in Kombination mit Experimenten, d.h. der Nutzung der jeweils spezifischen Stärken, zu erwarten.

Berechnungen mit *CFD* haben inzwischen einen respektablen Standard erreicht und werden auch in den folgenden Jahren mit Sicherheit noch viele Weiterentwicklungen erfahren. Einen kleinen Beitrag im Bereich gerührter Zweiphasenströmungen sollte diese Arbeit leisten.