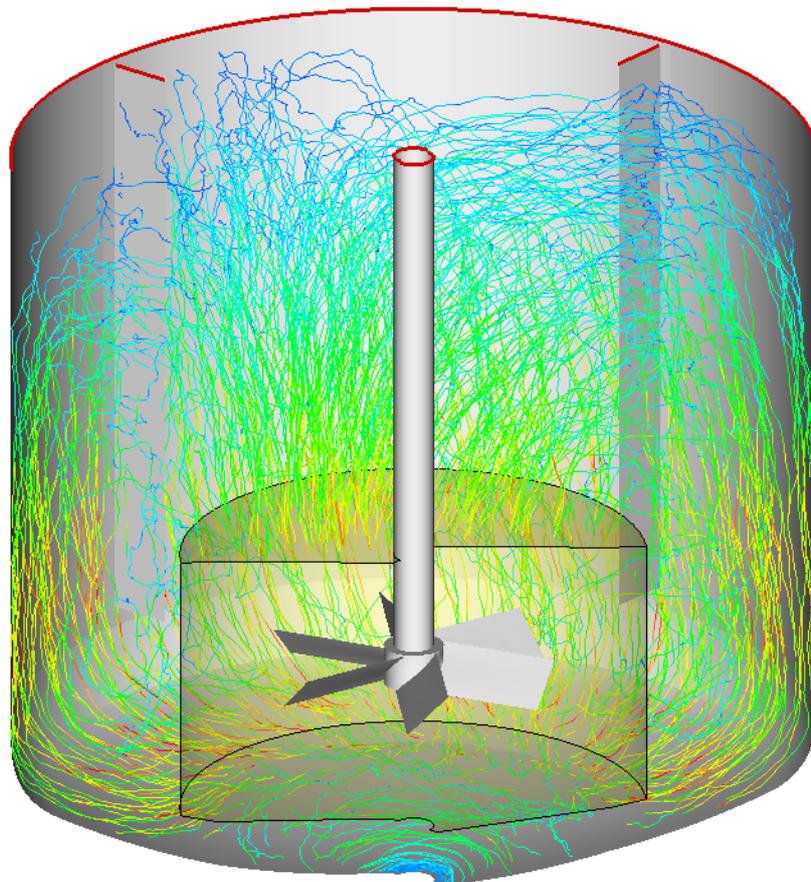


Zur Berechnung von gerührten Suspensionen mit dem Euler-Lagrange-Verfahren



Stefan Decker

urn:nbn:de:gbv:3-000009860

[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=nbn%3Ade%3Agbv%3A3-000009860>]

Zur Berechnung von gerührten Suspensionen mit dem Euler-Lagrange-Verfahren

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

vorgelegt der
Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät
— Fachbereich Ingenieurwissenschaften —
der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

von
Herrn Stefan Decker
geb. am 02.04.1968 in Wilhermsdorf

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. M. Sommerfeld
Prof. Dr. rer. nat. M. Schäfer

Halle (Saale), 15. November 2005

urn:nbn:de:gbv:3-000009860

[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=nbn%3Ade%3Agbv%3A3-000009860>]

So eine Arbeit wird eigentlich nie fertig,
man muss sie für fertig erklären,
wenn man nach Zeit und Umständen
das Möglichste getan hat.

*Johann Wolfgang von Goethe,
Italienische Reise, 16. März 1787*

Für all die Geduldigen ...
... und insbesondere für Kerstin & Anina sowie meine Eltern

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand primär während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Strömungsmechanik der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg und am Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg. Sie wurde finanziell gefördert aus Mitteln des BMWI, wofür ich mich an dieser Stelle bedanken möchte.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. M. Sommerfeld für die Anregung und tatkräftige wissenschaftliche Förderung der Arbeit, seine Offenheit in allen anstehenden Fragen sowie für die Übernahme des Hauptreferates. Herrn Prof. F. Durst danke ich für die Möglichkeit zur wissenschaftlichen Arbeit an seinem Lehrstuhl. Weiterhin möchte ich mich bei Herrn Prof. M. Schäfer für das gezeigte Interesse an der Arbeit sowie die freundliche Bereitschaft zur Übernahme des Koreferates herzlich bedanken.

Natürlich trägt das Umfeld erheblich zum Gelingen einer Arbeit bei, so dass ich mich herzlichst bei allen ehemaligen Kollegen und studentischen Mitarbeitern in Erlangen und Merseburg bedanken möchte, die mich auf vielfache Weise bei meiner Arbeit unterstützt haben. Mein ausdrücklicher Dank gilt meinen Wegbegleitern Herrn Dipl.-Ing. M. Rüger und Herrn Dr.-Ing. G. Kohnen, für die fruchtbare Zusammenarbeit und unzählige Diskussionen.

Nicht zu vergessen sind die Kollegen und Vorgesetzten bei *die Bosch*, welche mir den Freiraum schafften diese Arbeit zu vollenden. Vielen Dank. Für viele wertvolle Hinweise bei den Korrekturen geht ein *muchas gracias* an Herrn Dr.-Ing. G. Urzua.

Auch meinen Freunden gebührt Dank, da sie mir in schwierigen Situationen immer zur Seite standen und eine lange Dürreperiode klaglos erduldeten.

Nicht zuletzt möchte ich meinen Eltern, Wilma und Georg Decker, von ganzen Herzen dafür danken, dass sie mir meine bisherige Laufbahn ermöglicht und mich stets in jeder Hinsicht unterstützt haben.

Meiner Frau Kerstin sowie meiner Tochter Anina, die auf viele gemeinsame Stunden verzichten mussten, kann ich gar nicht genug Dank dafür zollen, dass sie mich mit ihrer Liebe, Toleranz und Geduld durch all die Jahre begleitet haben. Ihrer tatkräftigen Unterstützung ist es zu verdanken, dass ich diesen Marathon bis zum Ende durchgestanden habe.

Gundelsheim, im Juli 2005

Stefan Decker

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|-------------|
| Kurzfassung | xi |
| Abstract | xiii |
| Symbolverzeichnis | xv |
| 1 Einleitung | 1 |
| 2 Charakterisierung von Zweiphasenströmungen | 5 |
| 3 Beschreibung der kontinuierlichen Phase | 11 |
| 3.1 Erhaltungsgleichungen in ihrer allgemeinen Form | 11 |
| 3.1.1 Massenerhaltung | 11 |
| 3.1.2 Impulserhaltung | 12 |
| 3.2 Zeitgemittelte Erhaltungsgleichungen | 13 |
| 3.3 Turbulenzmodellierung | 13 |
| 3.4 Rotation des Koordinatensystems | 19 |
| 3.5 Allgemeine Transportgleichung | 21 |
| 3.6 Randbedingungen | 21 |
| 4 Beschreibung der dispersen Phase | 23 |
| 4.1 Wichtige Kennzahlen und Beziehungen | 23 |
| 4.2 Erhaltungsgleichungen für Teilchen in einer Strömung | 24 |
| 4.2.1 Teilchenort | 24 |
| 4.2.2 Teilchentranslationsgeschwindigkeit | 25 |
| 4.2.3 Teilchenrotationsgeschwindigkeit | 32 |
| 4.3 Partikeldispersionsmodell | 34 |
| 4.3.1 Modell der diskreten Wirbel | 34 |
| 4.3.2 Langevin-Gleichungsmodell | 35 |
| 4.4 Rückwirkung der dispersen Phase auf die kontinuierliche Phase | 39 |
| 4.5 Partikel-Partikel-Kollisionen | 41 |
| 4.5.1 Stochastische Modellierung - Überblick | 43 |
| 4.5.2 Generierung eines möglichen Stoßpartners | 44 |
| 4.5.3 Wahrscheinlichkeit für eine Kollision | 45 |
| 4.5.4 Entscheidung ob Kollision vorliegt oder nicht | 46 |
| 4.5.5 Generierung des Kollisionskontaktpunktes | 46 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 4.5.6 | Kollisionsoperator | 47 |
| 4.6 | Partikel-Wand-Kollisionen | 53 |
| 4.6.1 | Allgemeines | 54 |
| 4.6.2 | Kollisionsoperator | 54 |
| 4.6.3 | Irreguläre Partikel-Wand-Kollisionen | 57 |
| 4.7 | Schwarmeffekte | 60 |
| 5 | Numerische Berechnung von Zweiphasenströmungen | 65 |
| 5.1 | Numerische Berechnung der fluiden Phase | 66 |
| 5.1.1 | Beschreibung des eingesetzten Berechnungsverfahrens | 67 |
| 5.1.2 | Strömungsberechnung im Rührkessel | 69 |
| 5.2 | Numerische Berechnung der dispersen Phase | 75 |
| 5.2.1 | Zeitschrittbestimmung für die Partikelbewegung | 75 |
| 5.2.2 | Wechsel des Bezugssystems während der Bewegung entlang einer Partikeltrajektorie | 76 |
| 5.2.3 | Weitere Unterteilung des Berechnungsgitters für die disperse Phase | 76 |
| 5.2.4 | Berechnung der Mittelwerte der dispersen Phase in den ein- zelnen Kontrollvolumina | 78 |
| 5.2.5 | Abschätzung des statistischen Fehlers | 80 |
| 5.2.6 | Ermittlung einer ausreichenden Anzahl an repräsentativen Teilchen | 82 |
| 5.2.7 | Parallelisierung | 83 |
| 5.3 | Phasenkopplung | 85 |
| 5.4 | Prinzipieller Programmablauf | 86 |
| 6 | Validierung anhand einer zweiphasigen vertikalen Rohrströmung | 91 |
| 6.1 | Beschreibung des Testfalls | 91 |
| 6.2 | Theoretische radiale Profile der axialen Strömungsgeschwindigkeit | 92 |
| 6.3 | Numerische Berechnung und Vergleich mit Experimenten | 93 |
| 6.3.1 | Reine Luftströmung | 93 |
| 6.3.2 | Partikelbeladene Strömung | 96 |
| 7 | Suspendieren im Rührkessel | 105 |
| 7.1 | Grundlegende Kenngrößen für eine Strömung im Rührkessel | 106 |
| 7.2 | Beschreibung des Suspendierzustands | 107 |
| 7.3 | Bisherige Arbeiten | 110 |
| 7.4 | Geometrie und Berechnungsgitter | 140 |
| 7.5 | Vergleichsmessungen | 145 |
| 7.6 | Analyse des dimensionslosen normalen Wandabstands | 148 |
| 7.7 | Analyse der Diskretisierung und der Gitterauflösung | 152 |
| 7.8 | Visualisierung der Strömung | 179 |
| 7.9 | Variation der Rührerdrehzahl | 184 |
| 7.10 | Abschätzung der lokalen Stokeszahl | 191 |
| 7.11 | Berechnung von Partikelbahnen | 193 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 7.12 | Abschätzung des Fehlers durch die Betrachtung von Parcels | 197 |
| 7.13 | Berechnung der Newtonzahl | 206 |
| 7.14 | Konvergenzverhalten der Phasenkopplung | 209 |
| 7.15 | Gegenüberstellung von Fluid- und Partikelströmung | 219 |
| 7.16 | Parametervariationen und deren Effekt auf die Suspension | 227 |
| 7.17 | Bedeutung von Phasenkopplung und Partikel-Partikel-Kollisionen . . | 233 |
| 8 | Zusammenfassung | 239 |
| 9 | Ausblick | 245 |
| A | Anhang | 249 |
| A.1 | Vergleich verschiedener Beziehungen für den Widerstandsbeiwert . . . | 250 |
| A.2 | Unterteilung des Behälters in Höhenschichten | 253 |
| A.3 | Partikeleigenschaften bei Variation der Trajektorienanzahl | 255 |
| A.4 | Bedeutung der einzelnen Geschwindigkeitskomponenten | 259 |
| A.5 | Fluideigenschaften bei Variation der Gitterauflösung | 260 |
| A.6 | Fluideigenschaften bei Variation der Rührerdrehzahl | 265 |
| A.7 | Partikeleigenschaften: Vergleich von Berechnung und Messung | 274 |
| A.8 | Fluideigenschaften mit/ohne Kopplung (PQT, PPK) | 279 |
| | Literaturverzeichnis | 287 |

Kurzfassung

Die vorliegende Dissertation befasst sich mit der numerischen Berechnung von gerührten Suspensionen unter Nutzung des Euler-Lagrange-Verfahrens. Dazu musste aufbauend auf ein vorhandenes 2d-Berechnungsprogramm ein entsprechendes 3d-Programmsystem entwickelt werden, welches auch den speziellen Anforderungen bei der Berechnung von Rührwerksströmungen genügt.

Für ein grundsätzliches Verständnis der Zweiphasenströmung ist es zunächst erforderlich, die physikalischen Zusammenhänge theoretisch zu beleuchten. Insbesondere die Erhaltungsgleichungen, die Turbulenzmodellierung, die Partikeldispersion sowie Zwei- und Vierwegekopplung werden dabei näher diskutiert. Bei der numerischen Umsetzung steht daneben die Erfassung der Rührerbewegung im Fokus. Weitere wichtige Punkte sind Fehlerabschätzungen und Möglichkeiten zur Beschleunigung der Berechnungen.

Aufgrund der zentralen Rolle der Partikel-Partikel-Kollisionen bei den betrachteten Berechnungen, wird die erfolgreiche Validierung der Kollisionsmodellierung anhand des Testfalls einer zweiphasigen vertikalen Rohrströmung stellvertretend für verschiedenste Validierungen an unterschiedlichen Testfällen vorgestellt.

Schließlich wird die Strömung in einem bewehrten Rührkessel mit Schrägblattrührer sowohl numerisch als auch experimentell untersucht, wobei das betrachtete Zweiphasensystem aus Wasser und Glaskügelchen besteht. Vergleiche der Berechnungen mit den ermittelten Messwerten zeigen insgesamt eine gute Übereinstimmung sowohl bei den Fluid- als auch bei den Partikelgeschwindigkeitskomponenten.

Die Rechnungen erfolgen in einem Halbmodell mit einer Auflösung von bis zu 2 Mio. Hexaederzellen. Zur Vermeidung eines signifikanten Fehlers bei der Förderleistung des Rührers, wird zunächst der dimensionslose normale Wandabstand im Zusammenhang mit der logarithmischen Wandfunktion analysiert. Bei der Untersuchung der Diskretisierung der konvektiven Flüsse sowie der Gitterauflösung zeigt sich, dass der Gewichtungsfaktor γ_{CDS} eine zentrale Rolle für die korrekte Berechnung der Strömungsstrukturen spielt. Die Gitterauflösung beeinflusst besonders die turbulenten Größen. Sowohl die berechneten als auch die gemessenen normierten Geschwindigkeiten korrelieren sehr gut mit der Rührerdrehzahl.

Die Anzahl der zu berechnenden Teilchenbahnen ist anhand eines akzeptablen Kompromisses zwischen Genauigkeit und Rechenzeit festzulegen. Eine der wichtigsten

Kennzahlen für gerührte Suspensionen ist die Newtonzahl, deren Berechnung gut mit Literaturdaten übereinstimmt. Von den verschiedenen Kriterien zur Bewertung der Konvergenz einer gekoppelten Zweiphasenströmung erweist sich die Beobachtung der Newtonzahl als beste Variante. Aufgrund von Entkopplungserscheinungen lässt sich das Konvergenzverhalten durch die Einführung innerer Lagrange-Schleifen nicht signifikant beschleunigen.

Insgesamt können die Teilchen der Strömung sehr gut folgen. Deutliche Geschwindigkeitsunterschiede werden lediglich in der Rührerzone und an der Behälterwand beobachtet. Der Rührerstrom verbreitert sich durch die Dispersion der Teilchen. Eine wichtige Erkenntnis ist, dass sich die dreidimensionale Feststoffverteilung bei Parametervariationen (Gitterauflösung, Teilchengröße, mittlere Konzentration) deutlich stärker ändert als die entsprechenden Geschwindigkeiten.

Die Bewertung der Bedeutung von Partikel-Partikel-Kollisionen erfolgt zunächst über eine Abschätzung der lokalen Stokeszahl. Dabei sind Partikel-Partikel-Kollisionen umso wahrscheinlicher, je größere Werte die Stokeszahl annimmt. Die Analyse ergibt, dass eine relevante Kollisionswahrscheinlichkeit nur lokal in einigen Bereichen vorkommt. Trotzdem zeigen die Berechnungen einen großen Effekt der Phasenkopplung sowie der Partikel-Partikel-Kollisionen auch bereits bei relativ kleinen mittleren Konzentrationen. Durch die dispergierende Wirkung der Kollisionen wird die Verteilung tendenziell homogener. Lokale Konzentrationsüberhöhungen, wie z.B. am Behälterboden, werden massiv verringert. Unphysikalische lokale Konzentrationsüberhöhungen werden bei zunehmender Gitterauflösung verstärkt, so dass die Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen noch weiter an Relevanz gewinnt.

Abstract

In this doctoral thesis the numerical simulation of stirred suspensions is investigated using the Euler-Lagrange approach. For this purpose it was necessary to develop a 3d code on the basis of an existing 2d code. The special requirements of flow calculations in stirred tanks had to be taken into account.

In achieving a fundamental understanding of two-phase flows it is essential to deepen in their theoretical background. In particular, the equations of conservation, turbulence modeling, particle dispersion, two- and four-way coupling are discussed in detail. Equally important is the treatment of the impeller action towards the numerical implementation. Furthermore, error estimations and speed-up possibilities are dealt with.

The successful validation of the modeling is accomplished through various test cases. Because of the importance of particle-particle collisions for the considered calculations, the two-phase vertical pipe flow case is chosen for representation.

Finally, the flow in a baffled stirred vessel equipped with a pitched-blade turbine is investigated numerically and experimentally, considering a two-phase system consisting of water and glass beads. The comparison of simulations with gathered measurements showed good overall agreement of the fluid and particle velocities.

For the calculations, up to 2 million control volumes (hexahedrons) are used on a half-model. The dimensionless distance from the wall is analyzed in combination with the logarithmic wall function to prevent significant errors in calculating the pumping capacity of the impeller. The examination of the convective flux discretisation and the grid resolution reveals the significant role of the weighting factor γ_{CDS} in the calculation of reliable flow structures. The grid size mainly affects the turbulent quantities. Normed values of the calculated as well as measured velocities show an excellent correlation with the impeller speed.

The number of calculated particle trajectories is to be defined on the basis of a justifiable compromise between accuracy and calculation time. One of the most important indicators for stirred suspensions is the power number, whose calculation agrees very well with literature data. From the different criteria to estimate coupling convergence, the monitoring of the power number proves to be the best choice. The introduction of inner Lagrange-loops does not accelerate convergence in a significant manner because of de-coupling effects.

In general, the particles follow the fluid flow very well. Significant slip velocities only occur in the impeller region and near the wall. The impeller stream gets broader due to dispersion of the particles. It is important to realize that parameter variations (grid resolution, particle size, mean particle volume fraction) have a larger influence on the three-dimensional distribution of the particles than on the respective velocities.

The local Stokes number is estimated to evaluate the importance of particle-particle collisions, where larger Stokes numbers imply that collisions are more likely. Through this it is shown that relevant collisions occur only in a few delimited areas. Nevertheless, calculations show a large effect of phase coupling and particle-particle collisions even at relatively low mean particle volume fractions. The particle distribution tends to get more homogeneous as a result of collisions. As a matter of fact, high local concentrations, e.g. at the bottom of the vessel, are drastically reduced. Non-physical local concentration peaks are amplified with increased grid resolution and therefore the consideration of particle-particle collisions becomes even more relevant.

Symbolverzeichnis

Lateinische Symbole:

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
|---|----------------|---|
| a_{SS} | m | Abstand der Stromstörer zur Behälterwand |
| A | m ² | Fläche |
| Ac | – | Beschleunigungszahl |
| b_{BL} | m | Breite der Rührerblätter |
| b_{SS} | m | Breite der Stromstörer |
| $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ | m | Basisvektoren |
| c_B | – | Beiwert für die Basset-Kraft |
| c_D | – | Widerstandsbeiwert |
| c_{LM} | – | Beiwert für die Magnus-Kraft |
| c_{LS} | – | Beiwert für die Saffman-Kraft |
| c_R | – | Rotationsbeiwert |
| c_{VM} | – | Beiwert für die Kraft durch die virtuelle Masse |
| C_L | – | Proportionalitätskonstante für das Eulersche integrale Längenmaß der Turbulenz L_E |
| C_T | – | Proportionalitätskonstante für das Lagrangesche integrale Zeitmaß der Turbulenz T_L |
| $C_{\varepsilon,1} \dots C_{\varepsilon,3}$ | – | Konstanten des k - ε -Turbulenzmodells (ε -Gleichung) |
| C_μ | – | Konstante des k - ε -Turbulenzmodells (μ_t -Gleichung) |
| Co | – | Courantzahl |
| d | m | Partikeldurchmesser |
| d_{32} | m | Sauter-Durchmesser |
| d_N | m | Durchmesser der Rührernabe |
| d_R | m | Durchmesser des Rührers |
| d_W | m | Durchmesser der Rührerwelle |
| D | m | Durchmesser des Rührbehälters |

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
|-----------------------------------|----------------------------------|---|
| D_R | m | Durchmesser des Rohres |
| \mathcal{D} | s^{-1} | Deformationstensor |
| $\mathbf{e}_1 \dots \mathbf{e}_3$ | – | Basis- oder Einheitsvektoren eines rechtwinkligen kartesischen Koordinatensystems |
| E | abh. von ϕ | Abbruchfehler der Diskretisierung |
| E_W | $\text{kg m}^2 \text{s}^{-2}$ | Wirbelenergie |
| f | – | Longitudinale Korrelationsfunktion |
| f_D | s^{-1} | Doppler-Frequenz |
| f_K | s^{-1} | Kollisions- bzw. Stoßfrequenz |
| f_{KV} | – | Faktor für die Unterteilung eines Kontrollvolumens in Subkontrollvolumina (bezieht sich auf eine Koordinatenrichtung, d.h. es resultieren f_{KV}^3 Subkontrollvolumina) |
| f_s | – | Faktor für den anteiligen Aufenthalt eines Parcels in einem bestimmten Kontrollvolumen (während eines Zeitschritts) |
| f_{UR} | – | Unterrelaxationsfaktor |
| $f_{\varepsilon_{rel}}$ | – | Skalierungsfaktor für den relativen statistischen Fehler bei einer bestimmten geforderten statistischen Sicherheit |
| \mathbf{f}_B | $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-2}$ | Volumenbezogene Volumenkraft |
| \mathbf{f}_G | $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-2}$ | Volumenbezogene Gewichtskraft |
| \mathbf{f}_M | $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-2}$ | Volumenbezogene magnetische Kraft |
| \mathbf{f}_Ω | $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-2}$ | Volumenbezogene Coriolis- und Zentrifugalkraft |
| \mathbf{F}_B | kg m s^{-2} | Basset-Kraft |
| \mathbf{F}_D | kg m s^{-2} | Widerstandskraft |
| \mathbf{F}_G | kg m s^{-2} | Gewichtskraft |
| \mathbf{F}_{LM} | kg m s^{-2} | Magnus-Kraft (Querkraft durch Partikelrotation) |
| \mathbf{F}_{LS} | kg m s^{-2} | Saffman-Kraft (Querkraft durch Scherströmung) |
| \mathbf{F}_P | kg m s^{-2} | Kraft durch Druckgradienten in der Strömung |
| \mathbf{F}_{VM} | kg m s^{-2} | Kraft durch die virtuelle Masse |
| \mathbf{F}_Ω | kg m s^{-2} | Coriolis- und Zentrifugalkraft |
| Fr | – | Froudezahl |
| g | – | Transversale Korrelationsfunktion |
| \mathbf{g}, g_i | m s^{-2} | Erdbeschleunigung ¹ |
| G | $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-3}$ | Produktionsterm für die turbulente kinetische Energie |
| h_N | m | Höhe der Rührernabe |

¹Notation hier und bei den folgenden Variablen: Vektor (\mathbf{V}) und seine i -te Komponente (V_i) bzw. Tensor (\mathcal{T}) und seine ij -te Komponente (T_{ij})

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
|---------------|----------------------------|---|
| h_R | m | Einbauhöhe des Rührers (Bodenabstand gemessen bis zur Rührermitte) |
| h_{SS} | m | Höhe der Stromstörer (eingetaucht) |
| H | m | Füllhöhe des Rührbehälters |
| H_n | abh. von ϕ | Terme höherer Ordnung |
| \mathcal{I} | – | Einheitstensor |
| I_P | kg m^2 | Massenträgheitsmoment eines Teilchens |
| I_S | – | Intensität der Segregation |
| \mathbf{J} | kg m s^{-1} | Bei Partikel-Kollisionen übertragener Impuls |
| k | $\text{m}^2 \text{s}^{-2}$ | Turbulente kinetische Energie |
| k_W | m^{-1} | Wirbelwellenzahl |
| ℓ | m | Länge |
| ℓ_{KV} | m | Charakteristische Abmessung eines Kontrollvolumens |
| L | m | Längenmaß der Turbulenz |
| L_E | m | Eulersches integrales Längenmaß der Turbulenz |
| L_R | m | Rohrlänge |
| m | kg | Partikelmasse |
| m_{eff} | kg | Effektive Partikelmasse |
| m_{RG} | kg | Masse des Rührguts |
| \dot{m}_F | kg s^{-1} | Fluidmassenstrom |
| \dot{m}_P | kg s^{-1} | Partikelmassenstrom |
| M | – | Massenbeladung: Verhältnis von Partikel- zu Fluidmassenstrom |
| n | – | Stichprobengröße |
| n_{min} | – | Minimale Größe einer Stichprobe, um eine geforderte statistische Sicherheit erreichen |
| n_s | – | kumulierte Anzahl an Parcelzeitschritten in einem Kontrollvolumen |
| n_e | – | kumulierte Anzahl an Parcelzugängen in einem Kontrollvolumen |
| n_{ps} | – | kumulierte Anzahl an Partikelzeitschritten in einem Kontrollvolumen |
| n_{pe} | – | kumulierte Anzahl an Partikelzugängen in einem Kontrollvolumen |
| n_B | – | Brechungsindex |
| n_{BL} | – | Anzahl an Rührerblättern |
| n_P | m^{-3} | Partikelanzahldichte (für alle Größenklassen) |

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
|---------------------------|----------------------|---|
| n_R | s^{-1} | Rührerdrehzahl |
| $n_{R,1s}$ | s^{-1} | Rührerdrehzahl bei Erfüllung des 1s-Kriteriums |
| $n_{R,90\%}$ | s^{-1} | Rührerdrehzahl bei Erfüllung des 90%-Schichthöhenkriteriums |
| n_{SS} | – | Anzahl an Stromstörern |
| N | – | Anzahl an Partikeltrajektorien |
| N_{max} | – | Maximale Anzahl an zu berechneten Partikeltrajektorien |
| N_{KI} | – | Anzahl an Euler-Lagrange-Kopplungsiterationen |
| N_L | – | Anzahl an Lagrangeschen Zwischeniterationen (inneren Lagrange-Schleifen) |
| N_P | – | Anzahl an realen Teilchen, die durch ein repräsentatives Teilchen (Parcel) erfasst werden |
| Ne | – | Newtonzahl |
| p | $kg\ m^{-1}\ s^{-2}$ | Druck |
| P_R | $kg\ m^2\ s^{-3}$ | Rührerleistung bzw. Leistungseintrag |
| P | – | Wahrscheinlichkeit |
| P_{PPK} | – | Wahrscheinlichkeit für eine Partikel-Partikel-Kollision |
| P_α | – | Irrtumswahrscheinlichkeit |
| P_ε | – | statistische Sicherheit |
| r | m | Radius |
| \mathbf{r}, r_i | m | Ortsvektor |
| R_{AB} | – | Geschwindigkeitskorrelation zwischen zwei kollidierenden Teilchen A und B |
| $\mathcal{R}_E, R_{E,ij}$ | – | Eulerscher Korrelationstensor (auch Orts- bzw. Raumkorrelationstensor genannt) |
| $\mathbf{R}_E, R_{E,i}$ | – | Eulerscher Korrelationsvektor; reduzierte Form von \mathcal{R}_E |
| $\mathcal{R}_L, R_{L,ij}$ | – | Lagrangescher Korrelationstensor (auch Auto- bzw. Zeitkorrelationstensor genannt) |
| $\mathbf{R}_L, R_{L,i}$ | – | Lagrangescher Korrelationsvektor; reduzierte Form von \mathcal{R}_L |
| R_L | – | Lagrangesche Korrelation; reduzierte Form von \mathbf{R}_L |
| $\mathbf{R}_P, R_{P,i}$ | – | Effektiver Korrelationsvektor |
| Re | – | Reynoldszahl |
| Re _P | – | Partikel-Reynoldszahl bzgl. Translation |
| Re _R | – | Partikel-Reynoldszahl bzgl. Rotation |
| Re _S | – | Partikel-Reynoldszahl bzgl. Scherung |

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
|-------------------------|----------------------|---|
| Re_{vt} | – | Grenz-Reynoldszahl, ab der vollausbildete turbulente Strömung vorliegt |
| s | – | Restitutionskoeffizient |
| s_X^2, s_X | abh. von X | Empirische Varianz bzw. Streuung von X |
| s_{BL} | m | Stärke der Rührerblätter |
| s_{SS} | m | Stärke der Stromstörer |
| S_ϕ | abh. von ϕ | Fluidquellterm für Variable ϕ |
| $S_{\phi,P}$ | abh. von ϕ | Partikelquellterm für Variable ϕ |
| S_S | m | Lineares Längenmaß der Segregation |
| St | – | Stokeszahl |
| t | s | Zeit |
| t_{1P} | s | Theoretische Zeit, welche ein einzelnes Parcel zu Erzeugung einer identischen Statistik benötigen würde |
| t_{calc} | s | Berechnungszeit |
| t_{ref} | s | Referenzzeit |
| t_{KV} | $s\,m^{-3}$ | Mittlere Verweilzeit eines Teilchens in einem bestimmten Kontrollvolumen (bezogen auf dessen Volumen) |
| \mathbf{T} | $kg\,m^2\,s^{-2}$ | Drehmoment durch die Strömung |
| T_R | $kg\,m^2\,s^{-2}$ | Rührerdrehmoment |
| \mathbf{T}_Ω | $kg\,m^2\,s^{-2}$ | Zusätzliches Drehmoment durch Transformation auf ein rotierendes Koordinatensystem |
| T | s | Zeitmaß der Turbulenz |
| T_D | s | Zeit, die ein Teilchen zur Wirbeldurchquerung benötigt |
| T_E | s | Wirbellebensdauer |
| $\mathbf{T}_L, T_{L,i}$ | s | Vektor der Lagrangeschen integralen Zeitmaße der Turbulenz für die verschiedenen Koordinatenrichtungen |
| T_L | s | Lagrangesches integrales Zeitmaß der Turbulenz; reduzierte Form von \mathbf{T}_L |
| \mathcal{T} | $kg\,m^{-1}\,s^{-2}$ | Spannungstensor |
| \mathbf{u}, u_i | $m\,s^{-1}$ | Momentane Fluidgeschwindigkeit |
| \mathbf{U}, U_i | $m\,s^{-1}$ | Mittlere Fluidgeschwindigkeit |
| \mathbf{u}', u'_i | $m\,s^{-1}$ | Schwankungsgeschwindigkeit des Fluids |
| u_τ | $m\,s^{-1}$ | Wandschubspannungsgeschwindigkeit |
| U_{RU} | $m\,s^{-1}$ | Rührerumfangsgeschwindigkeit — tangentielle Geschwindigkeit an den Blattspitzen |
| \bar{U} | $m\,s^{-1}$ | Querschnittsgemittelte Fluidgeschwindigkeit |
| U^+ | – | Dimensionslose wandparallele Geschwindigkeit |

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
|-------------------------|-------------------|--|
| \mathbf{v}, v_i | m s^{-1} | Momentane Partikelgeschwindigkeit |
| \mathbf{V}, V_i | m s^{-1} | Mittlere Partikelgeschwindigkeit |
| \mathbf{v}', v'_i | m s^{-1} | Schwankungsgeschwindigkeit der Partikel |
| v_{s1} | m s^{-1} | Stationäre Sinkgeschwindigkeit eines einzelnen Teilchens |
| v_s | m s^{-1} | Stationäre Sinkgeschwindigkeit im Schwarm |
| \mathbf{v}_{AB} | m s^{-1} | Relative Geschwindigkeit zwischen Partikel A und Partikel B |
| V_{KV} | m^3 | Volumen eines Kontrollvolumens |
| V_{RG} | m^3 | Volumen des Rührguts |
| \mathbf{w}, w_i | m s^{-1} | Relative Geschwindigkeit zwischen Fluid und Teilchen |
| \mathbf{x}, x_i | m | Betrachtete Koordinaten |
| $\mathbf{x}_P, x_{i,P}$ | m | Momentane Partikelkoordinaten |
| X | abh. von X | Zufallsgröße |
| x | abh. von x | Merkmal einer Stichprobe |
| \bar{x} | abh. von x | Empirischer Mittelwert des Merkmals x berechnet aus einer Stichprobe |
| y_W | m | Normaler Wandabstand |
| y^+ | – | Dimensionsloser normaler Wandabstand |
| Z_n | – | Stichprobenfunktion |
| z_α | – | Grenze des Konfidenzintervalls für Z_n bei gegebener Irrtumswahrscheinlichkeit |

Griechische Symbole:

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
|----------------|-------------------|--|
| α_{BL} | rad bzw. $^\circ$ | Anstellwinkel der Rührerblätter |
| α | rad bzw. $^\circ$ | Auftreffwinkel bei Partikel-Wand-Kollisionen (der Winkel zwischen Teilchenbahn und Wand) |
| γ_i | – | Linearer Interpolationsfaktor |
| γ_{CDS} | – | Gewichtungsfaktor bei der Diskretisierung der konvektiven Flüsse (Anteil an CDS) |
| γ_R | rad bzw. $^\circ$ | Rauhigkeitswinkel |
| γ_ρ | – | Relative Dichte ρ/ρ_P |
| Γ_ϕ | abh. von ϕ | Diffusionskoeffizient für Variable ϕ |

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
|--------------------------------|----------------------------------|--|
| δ_ℓ | m | Dicke der laminaren Grenzschicht |
| $\Delta\mathbf{r}, \Delta r_i$ | m | Ortsverschiebungsvektor (Differenz zweier Ortsvektoren) |
| Δr | m | Betrag des Ortsverschiebungsvektors $ \Delta\mathbf{r} $ |
| Δt | s | Betrachteter Zeitschritt |
| Δx_S | m | Interferenzstreifenabstand im Messvolumen |
| Δx_R | m | Profiltraganteil |
| Δz_R | m | Mittlere Rauhtiefe |
| ε | $\text{m}^2 \text{s}^{-3}$ | Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie |
| ε_{rel} | – | Relativer statistischer Fehler |
| ζ | – | Gleichverteilte Zufallszahl |
| η_K | m | Kolsche s Mikromaß der Turbulenz |
| θ | rad bzw. ° | Winkelcoordinate im Zylinderkoordinatensystem |
| Θ_L | rad bzw. ° | Halber Kreuzungswinkel der Laserstrahlen |
| ϑ_g | rad bzw. ° | Geometrischer Stoßwinkel |
| ϑ | rad bzw. ° | Wirksamer Stoßwinkel |
| ϑ_0 | rad bzw. ° | Grenzstoßwinkel |
| κ | – | Von Kármán Konstante ($\kappa = 0.41$) |
| λ | m | Wellenlänge |
| λ_M | m | Maxwellsche mittlere freie Weglänge |
| μ | $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ | Dynamische Viskosität des Fluids |
| μ_B | $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ | Kompressionsviskosität |
| μ_d, μ_s | – | Dynamischer und statischer Reibungsbeiwert |
| μ_t | $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ | Turbulente Viskosität |
| μ_X | abh. von X | Erwartungswert (bzw. Mittelwert) von X ² |
| ν | $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ | Kinematische Viskosität des Fluids |
| ν_G | $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ | Mittlere kinematische Viskosität der Suspension |
| ξ | – | Gauß-verteile Zufallszahl mit einem Erwartungswert von 0 und einer Varianz von 1 |
| ρ | kg m^{-3} | Dichte des Fluids |
| ρ_G | kg m^{-3} | Gemischdichte |
| ρ_P | kg m^{-3} | Dichte der Partikel |
| σ_k | – | Konstante für k - ε -Turbulenzmodell (k -Gleichung) |
| σ_ε | – | Konstante für k - ε -Turbulenzmodell (ε -Gleichung) |
| σ_X^2, σ_X | abh. von X | Varianz bzw. Streuung von X ³ |

²Der Erwartungswert μ_X ist das 1. Moment der Verteilung von X

³Die Varianz σ_X ist das 2. zentrale Moment der Verteilung von X

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
|-------------------------------------|----------------------------------|--|
| τ_C | s | Mittlere Zeit zwischen Partikel-Partikel-Kollisionen |
| τ_F | s | Charakteristisches Zeitmaß der Strömung |
| τ_K | s | Zeitmaß der kleinsten Wirbel nach Kolmogorov |
| τ_P | s | Partikelrelaxationszeit |
| τ_W | $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$ | Wandschubspannung |
| Υ_S | – | Verhältnis aus Re_S und Re_P |
| Υ_R | – | Verhältnis aus Re_R und Re_P |
| φ | abh. von φ | Skalare Größe: Momentanwert |
| ϕ | abh. von ϕ | Skalare Größe: Mittelwert |
| φ' | abh. von φ' | Skalare Größe: Schwankungswert |
| φ_F | – | Volumenanteil der fluiden Phase |
| φ_P | – | Volumenanteil der dispersen Phase |
| $\varphi_{P,max}$ | – | Maximal möglicher Volumenanteil der dispersen Phase (abhängig von der Teilchenform und dem Partikelgrößenspektrum) |
| $\varphi_{P,M}$ | – | Mittlerer Volumenanteil der dispersen Phase (bezogen auf das gesamte Strömungsgebiet) |
| ψ | – | Symmetrischer Schiefeparameter der Kollision |
| ψ_0 | – | Grenzschiefeparameter |
| $\omega_{\mathbf{F}}, \omega_{i,F}$ | s^{-1} | Rotation der Fluidströmung |
| $\omega_{\mathbf{P}}, \omega_{i,P}$ | s^{-1} | Momentane Partikelwinkelgeschwindigkeit |
| $\omega_{\mathbf{r}}, \omega_{i,r}$ | s^{-1} | Relative Winkelgeschwindigkeit zwischen Fluid und Teilchen |
| $\Omega_{\mathbf{G}}, \Omega_{i,G}$ | s^{-1} | Winkelgeschwindigkeit des rotierenden Koordinatensystems |
| Ω_G | s^{-1} | Betrag der Winkelgeschwindigkeit des rotierenden Koordinatensystems $ \Omega_{\mathbf{G}} $ |
| Ω_R | s^{-1} | Winkelgeschwindigkeit des Rührers |

Indizes:

| Symbol | Bedeutung |
|--------|--------------------|
| * | Nach der Kollision |

| Symbol | Bedeutung |
|---------|--|
| \perp | Senkrecht zu den Interferenzstreifen im Messvolumen und in der Ebene der sich kreuzenden Laserstrahlen |
| A | Partikel A |
| B | Partikel B |
| BKS | Bewegtes Koordinatensystem (Translation und Rotation) |
| c | Auf der Symmetrielinie / im Zentrum |
| F | Am Ort des Fluidelements |
| K | Am Kontaktpunkt |
| KS | Koordinatensystem |
| m | Räumlicher Mittelwert |
| n | Normale Richtung |
| P | Am Partikelort |
| PPK | Partikel-Partikel-Kollision |
| PWK | Partikel-Wand-Kollision |
| RKS | Ruhendes Koordinatensystem (ortsfest) |
| r | Radiale Richtung |
| t | Tangentiale Richtung |

Abkürzungen:

| Abkürzung | Bedeutung |
|-----------|---|
| $AFFT$ | <i>A</i> daptive <i>F</i> orce- <i>F</i> ield <i>T</i> echnique |
| ASS | <i>A</i> pproximate <i>S</i> teady- <i>S</i> tate |
| BDS | <i>B</i> ackward <i>D</i> ifference <i>S</i> cheme |
| CDS | <i>C</i> entral <i>D</i> ifference <i>S</i> cheme |
| CFD | <i>C</i> omputational <i>F</i> luid <i>D</i> ynamics |
| CM | <i>C</i> licking <i>M</i> esh |
| CS | <i>C</i> omputational <i>S</i> napshot |
| DDD | <i>D</i> ynamic <i>D</i> omain <i>D</i> ecomposition |
| DNS | <i>D</i> irecte <i>N</i> umerical <i>S</i> imulation |
| DRB | <i>D</i> irichlet- <i>R</i> and <i>B</i> edingung |
| FDS | <i>F</i> orward <i>D</i> ifference <i>S</i> cheme |
| FEM | <i>F</i> inite <i>E</i> lements <i>M</i> ethod |

| Abkürzung | Bedeutung |
|---------------|--|
| <i>FMG</i> | <i>F</i> ull <i>M</i> ulti <i>G</i> rid Method |
| <i>FR</i> | <i>F</i> rozen <i>R</i> otor |
| <i>FVM</i> | <i>F</i> inite <i>V</i> olumes <i>M</i> ethod |
| <i>IBC</i> | <i>I</i> mpeller <i>B</i> oundary <i>C</i> ondition |
| <i>ILU</i> | <i>I</i> ncomplete <i>L</i> ower- <i>U</i> pper Decomposition |
| <i>IO</i> | <i>I</i> nnner- <i>O</i> uter |
| <i>KV</i> | <i>K</i> ontroll <i>V</i> olumen |
| <i>LES</i> | <i>L</i> arge <i>E</i> ddy <i>S</i> imulation |
| <i>LDA</i> | <i>L</i> aser- <i>D</i> oppler <i>A</i> nemometry |
| <i>MDM</i> | <i>M</i> oving <i>D</i> eforming <i>M</i> esh |
| <i>MFR</i> | <i>M</i> ultiple <i>F</i> rames of <i>R</i> eference |
| <i>MPI</i> | <i>M</i> essage <i>P</i> assing <i>I</i> nterface |
| <i>NRB</i> | <i>N</i> eumann- <i>R</i> and <i>B</i> edingung |
| <i>PDA</i> | <i>P</i> hase- <i>D</i> oppler <i>A</i> nemometry |
| <i>PISO</i> | <i>P</i> ressure <i>I</i> mplicit with <i>S</i> plitting of <i>O</i> perators |
| <i>PIV</i> | <i>P</i> article <i>I</i> mage <i>V</i> elocimetry |
| <i>PPK</i> | <i>P</i> artikel- <i>P</i> artikel <i>K</i> ollisionen |
| <i>PQT</i> | <i>P</i> artikel <i>Q</i> uell <i>T</i> erme |
| <i>RANS</i> | <i>R</i> eynolds <i>A</i> veraged <i>N</i> avier- <i>S</i> tokes Equation |
| <i>RB</i> | <i>R</i> and <i>B</i> edingung |
| <i>RNG</i> | <i>R</i> e <i>N</i> ormalisation <i>G</i> roup |
| <i>RS</i> | <i>R</i> eynolds <i>S</i> tress |
| <i>SDD</i> | <i>S</i> tatic <i>D</i> omain <i>D</i> ecomposition |
| <i>SGS</i> | <i>S</i> ub <i>G</i> rid <i>S</i> cale |
| <i>SIMPLE</i> | <i>S</i> emi <i>I</i> mplicit <i>M</i> ethod for <i>P</i> ressure <i>L</i> inked <i>E</i> quations |
| <i>SIP</i> | <i>S</i> trongly <i>I</i> mplicit <i>P</i> rocedure |
| <i>SIPSOL</i> | <i>SIP-SOL</i> ver |
| <i>SM</i> | <i>S</i> liding <i>M</i> esh |
| <i>UDS</i> | <i>U</i> pwind <i>D</i> ifference <i>S</i> cheme |

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 Produkte¹ 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 behandelt². Die ex-

¹Tatterson 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.

²Ein 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 aufbauen³. 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 variieren⁴. 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 führen⁵.

Im Gegensatz zu experimentellen Untersuchungen lässt sich eine numerische Simulation (*CFD: Computational Fluid Dynamics*)⁶ 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

³Im 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.

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

⁵Aufgrund 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.

⁶Seit 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 Rechenleistung⁷ 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 Optimierungsaufwands⁸ 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

⁷In 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.

⁸Mittels *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.

2 Charakterisierung von Zweiphasenströmungen

Die in der vorliegenden Arbeit betrachteten Ableitungen beschränken sich auf disperse Zweiphasenströmungen (als grundlegende Literatur zum Thema Mehrphasenströmungen seien hier exemplarisch die Bücher von Crowe et al. [55] und Hetsroni [122] genannt), wobei feste Teilchen mit kugelförmiger Form (chemisch inert, nicht deformierbar und von homogener Dichte) in Gas- oder Flüssigkeitsströmungen betrachtet werden. Im Folgenden werden einige wichtige Größen zur Charakterisierung von Zweiphasenströmungen beschrieben. Je nach Bedeutung für die jeweiligen Untersuchungen wird auf die einzelnen Größen in den entsprechenden Abschnitten noch näher eingegangen.

Beschreibung der Zusammensetzung

Zur Beschreibung der Partikelkonzentration lässt sich die Anzahl an Teilchen pro Volumen, die Partikelanzahldichte n_P , angeben. Es ist zu bemerken, dass die Dichte zwar an jeder beliebigen Stelle im Raum punktförmig definierbar ist, für statistisch abgesicherte Mittelwerte aber ein Mindestvolumen zur Mittelung zu betrachten ist. Eine ausführlichere Beschreibung und Quantifizierung dieser sowohl für die disperse als auch für die fluide Phase relevanten Grenzbetrachtung (besonders bei einer Kontinuumsbetrachtung) findet sich z.B. bei Crowe et al. [55] und Wassen [342].

Die Konzentration kann auch über den Volumenanteil der fluiden und der dispersen Phase φ_F und φ_P beschrieben werden, wobei $\varphi_F + \varphi_P = 1$ gilt. Dabei muss, wie auch bei allen weiteren Größen, zwischen globalen und lokalen Werten unterschieden werden. Im Falle monodisperser kugelförmiger Teilchen gilt folgender Zusammenhang zwischen Partikelvolumenanteil und Partikelanzahldichte:

$$\varphi_P = \frac{1}{6}\pi d^3 n_P \quad (2.1)$$

Je nach Art der Kugelpackung lassen sich die maximal möglichen Volumenanteile der dispersen Phase bestimmen. Bei monodispersen Teilchen und kubisch einfacher Packung ist ein maximaler Volumenanteil von $\varphi_P = 0.52$ erreichbar. Liegt in der Schüttung eine kubisch innenzentrierte Anordnung vor, so ist ein Volumenanteil von $\varphi_P = 0.68$ realisierbar, während bei hexagonal oder kubisch dichtester Packung

jeweils ein Wert von $\varphi_P = 0.74$ möglich ist. In der Realität ist allerdings mit einer Zufallsschüttung zu rechnen, in welcher ein maximaler Partikelvolumenanteil von $\varphi_P \approx 0.63$ erreicht wird.

Durch Kombination der Volumenanteile der beiden Phasen mit der jeweiligen Dichte lassen sich die Gemischdichte der fluiden und der dispersen Phase berechnen. Aus der Summe der beiden Gemischdichten der einzelnen Phasen berechnet sich dann die Dichte des Gemisches ρ_G .

$$\rho_G = (1 - \varphi_P) \rho + \varphi_P \rho_P \quad (2.2)$$

Die mittlere kinematische Viskosität einer Suspension ν_G wird nur geringfügig durch die Feststoffbeladung verändert. Sie lässt sich nach einem Ansatz von Eilers [82] für Gemische mit $\varphi_P \leq 0.4$ wie folgt bestimmen:

$$\nu_G = \frac{\mu}{\rho_G} \left(1 + \frac{5}{4} \frac{\varphi_P \varphi_{P,max}}{\varphi_{P,max} - \varphi_P} \right)^2 \quad (2.3)$$

Der maximale Partikelvolumenanteil $\varphi_{P,max}$ bezieht sich dabei auf den Feststoffgehalt in der sedimentierten Bodenschicht, d.h. der Wert ist abhängig von der Partikelform und dem Partikelgrößenspektrum.

Neben den Volumenanteilen lassen sich auch Massenanteile definieren. Verbreiteter ist allerdings die Angabe einer (globalen) Massenbeladung M . Dabei wird der Massenstrom der dispersen Phase \dot{m}_P mit dem der Fluidphase¹ \dot{m}_F ins Verhältnis gesetzt.

$$M = \frac{\dot{m}_P}{\dot{m}_F} = \frac{\rho_{GP} |\mathbf{V}|}{\rho_{GF} |\mathbf{U}|} = \frac{\varphi_P \rho_P |\mathbf{V}|}{(1 - \varphi_P) \rho |\mathbf{U}|} \quad (2.4)$$

Teilchenabstand

Der Abstand der Teilchen lässt sich unter Zuhilfenahme der kinetischen Gastheorie (s. z.B. Wedler [344]) in Form einer mittleren freien Weglänge beschreiben. Für diese gilt unter Berücksichtigung der Bewegung der gestoßenen Teilchen (\rightarrow Maxwell'sche mittlere freie Weglänge):

$$\lambda_M = \frac{1}{\sqrt{2}} \pi^{-1} n_P^{-1} d^{-2} = \frac{1}{6\sqrt{2}} d \varphi_P^{-1} \quad (2.5)$$

Das mittlere Volumen, welches einem Teilchen zur Verfügung steht, beträgt n_P^{-1} . Dies entspricht einem Würfel mit einer Kantenlänge von $\ell = n_P^{-1/3}$. Bei monodispersen Teilchen gilt dann entsprechend

$$\ell = d \left(\frac{1}{6} \pi \varphi_P^{-1} \right)^{1/3} \quad (2.6)$$

Beispielhaft berechnet sich somit für Teilchen mit $d = 100 \mu\text{m}$ und einem Partikelvolumenanteil von $\varphi_P = 0.02$ eine Teilchenkonzentration von $n_P \approx 38 \cdot 10^9 \text{ m}^{-3}$, eine Würfelkantenlänge von $\ell \approx 300 \mu\text{m}$ und eine mittlere freie Weglänge von $\lambda_M \approx 590 \mu\text{m}$.

¹Die fluide Phase wird in diesem Zusammenhang auch oft als Trägerphase bezeichnet.

Folgevermögen der einzelnen Teilchen

Die Partikelrelaxationszeit τ_P beschreibt die Reaktionszeit eines Teilchens auf eine Änderung der Geschwindigkeit des umgebenden Fluids. Im Stokesschen Bereich gilt dann

$$\tau_P = \frac{1}{18} \rho_P d^2 \mu^{-1} \quad (2.7)$$

Betrachtet man außer der Widerstandskraft keine weiteren Kräfte, so reduziert sich die Partikelbewegungsgleichung auf

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \tau_P^{-1} (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \quad (2.8)$$

Bei konstanter Fluidgeschwindigkeit \mathbf{v} und einem ruhenden Teilchen zum Startzeitpunkt $t = 0$ s ergibt sich für den Zeitpunkt t die folgende Lösung:

$$\mathbf{v} = [1 - \exp(-t \tau_P^{-1})] \mathbf{u} \quad (2.9)$$

Die Partikelrelaxationszeit τ_P ist dann die Zeit, die ein Teilchen benötigt, um aus dem Ruhezustand auf 63% ($= 1 - e^{-1}$) der Fluidgeschwindigkeit beschleunigt zu werden.

Zur Charakterisierung des Folgevermögens in einer turbulenten Strömung wird die Stokeszahl St herangezogen. Diese setzt die Partikelrelaxationszeit τ_P in Beziehung zu einer charakteristischen Zeit der Strömung τ_F^2 :

$$St = \tau_P / \tau_F \quad (2.10)$$

Ist $St \ll 1$, so ist die Partikelrelaxationszeit relativ klein im Vergleich zum Fluidzeitmaß und die Teilchen haben ausreichend Zeit für eine Angleichung ihrer Geschwindigkeit an die des Fluids. Die Schlupfgeschwindigkeit wird klein sein und die Teilchen können den Wirbelstrukturen folgen. Die Dispersion der dispersen Phase ist somit etwa von gleicher Größe wie die Dispersion des Fluids. Im Fall von $St \gg 1$ haben die Teilchen praktisch keine Möglichkeit auf Änderungen der Fluidgeschwindigkeit zu reagieren, da die zeitliche Abfolge im Vergleich zur Partikelrelaxationszeit zu schnell erfolgt. Die Teilchenbahnen werden daher nur wenig durch Änderungen der Fluidgeschwindigkeit beeinflusst, d.h. die Teilchen durchqueren Wirbelstrukturen ohne auf diese zu reagieren. Die Dispersion des Fluids wird somit größer sein als die Dispersion der dispersen Phase. Sind die Zeitmaße von gleicher Größenordnung, so sind größere Wirbelstrukturen in der Lage die Teilchen für eine gewisse Zeit einzufangen. Dadurch kann es zu einer lokalen Konzentrationserhöhung kommen (s. z.B. Eaton & Fessler [80]). Es ist aber auch möglich, dass die Teilchen aus der Scherschicht herausgeschleudert werden, so dass die Dispersion der Partikelphase größer als die der Fluidphase sein kann. Diese Zusammenhänge konnten z.B. von Chung & Troutt [45] durch experimentelle und numerische Arbeiten bestätigt werden.

²Nach Nouri & Whitelaw [221] lässt sich das charakteristische Zeitmaß einer turbulenten Rührkesselströmung vereinfachend mit dem Quotienten aus der Rührerblattbreite und der Rührerumfangsgeschwindigkeit abschätzen.

Verdünnte bzw. dichte Zweiphasenströmungen

Verdünnte Zweiphasenströmungen sind durch die lokalen fluiddynamischen Kräfte dominiert, während bei dichten Zweiphasenströmungen die Partikelbewegungen durch Kollisionen bestimmt werden. Eine qualitative Unterteilung lässt sich anhand des Verhältnisses von der Partikelrelaxationszeit τ_P zu τ_C vornehmen (s. Crowe [51][52] bzw. Crowe et al. [55]), wobei τ_C die mittlere Zeit zwischen Partikel-Partikel-Kollisionen beschreibt³. Bei $\tau_P/\tau_C < 1$ spricht man von verdünnten Strömungen (Kollisionen treten hier relativ selten auf und τ_C ist somit sehr groß, d.h. die Teilchen haben zwischen den Kollisionen ausreichend Zeit um auf lokale Fluidkräfte zu reagieren) und bei $\tau_P/\tau_C > 1$ entsprechend von dichten Zweiphasenströmungen (zwischen den Kollisionen bleibt kaum Reaktionszeit). Im Bereich von $\tau_P/\tau_C \approx 1$ liegt keine klare Dominanz vor, so dass sowohl Fluidkräfte als auch Kollisionen für die Ausbildung der Strömung von Bedeutung sind.

Als Abschätzung für τ_C sollen hier die Ergebnisse einer ausführlichen Analyse von Sommerfeld [294] dienen. Dieser hatte die Stoßfrequenz f_K (wobei $f_K = \tau_C^{-1}$ gilt) mit Hilfe der kinetischen Gastheorie sowie der Annahme von Isotropie abgeleitet. Bei monodispersen Teilchen ergibt sich somit für die Stoßfrequenz:

$$f_K = 24\pi^{-1/2} \varphi_P d^{-1} \sigma_v \quad (2.11)$$

Dabei lässt sich die Standardabweichung der Partikelfluktuationsgeschwindigkeit σ_v in etwa von gleicher Größenordnung wie die mittlere Fluidfluktuationsgeschwindigkeit σ_u ansetzen. Für diese gilt bei Kenntnis der turbulenten kinetischen Energie k und isotroper Turbulenz $\sigma_u = (\frac{2}{3}k)^{1/2}$. Nimmt man vereinfachend die Partikelrelaxationszeit für Stokessche Bedingungen ($\tau_P = \frac{1}{18} \rho_P d^2 \mu^{-1}$) an, so resultiert die folgende Bedingung für verdünnte Zweiphasenströmungen:

$$\tau_P/\tau_C = \frac{4}{3}\pi^{-1/2} d \rho_P \varphi_P \mu^{-1} \sigma_v < 1 \quad (2.12)$$

$$\text{bzw.} \quad \varphi_P < \frac{3}{4}\pi^{1/2} d^{-1} \rho_P^{-1} \mu \sigma_v^{-1} \approx \frac{3}{4}\pi^{1/2} d^{-1} \rho_P^{-1} \mu \left(\frac{2}{3}k\right)^{-1/2} \quad (2.13)$$

Die Bedeutung von Partikel-Partikel-Kollisionen ist also umso größer, je schwerer und größer die Teilchen sind und je stärker ihre Geschwindigkeit schwankt. Eine

³Elghobashi [84] unterscheidet zwischen verdünnter und dichter Zweiphasenströmung auf Basis des Partikelvolumenanteils sowie dem Verhältnis von Partikelrelaxationszeit zum turbulenten Zeitmaß. Er spricht bereits ab einem Partikelvolumenanteil von 0.001 von einer dichten Zweiphasenströmung. Einen anderen Ansatz legen Lun et al. [186][184] zu Grunde. Sie argumentieren bei der Abgrenzung von verdünnter zu dichter Zweiphasenströmung über den dominanten Mechanismus für die Energie- und Impulsübertragung bei granularen Strömungen. Danach liegt eine dichte Zweiphasenströmung ab einem Partikelvolumenanteil von ca. 0.1 vor, da dann die Übertragung nicht mehr durch die Kinetik, sondern durch die Kollisionen bestimmt wird. Bei Berechnungen einer turbulenten Zweiphasenströmung (Gas/Feststoff) im horizontalen Kanal zeigten Lun & Liu [185] allerdings, dass Partikel-Partikel-Kollisionen auch bei Strömungen mit Partikelvolumenanteilen der Größenordnung 0.001 eine sehr wichtige Rolle für das Erreichen einer vollentwickelten stationären Suspension spielen. Aus ihrer Sicht sollte der Effekt daher nicht vernachlässigt werden.

Erhöhung der Fluidviskosität reduziert die Bedeutung der Kollisionen. Betrachtet man Glaskügelchen ($\rho_P = 2500 \text{ kg m}^{-3}$) in einer turbulenten Wasser-Strömung ($\mu = 10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$) mit $k \approx 0.03 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$ (dies entspricht $\sigma_u = 0.14 \text{ m s}^{-1}$), so errechnen sich Grenzpartikelvolumenanteile von 0.038 bei $d = 100 \mu\text{m}$, 0.019 bei $d = 200 \mu\text{m}$ und 0.0076 bei $d = 500 \mu\text{m}$. Je nach Anwendungsfall sind somit bei gerührten Partikelsuspensionen der Übergangsbereich und/oder der kollisionsdominierte Bereich von Relevanz, wobei im Rührkessel in verschiedenen Zonen unterschiedliche Gewichtungen der Bedeutung von Kollisionen und Fluidkräften vorliegen können.

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].

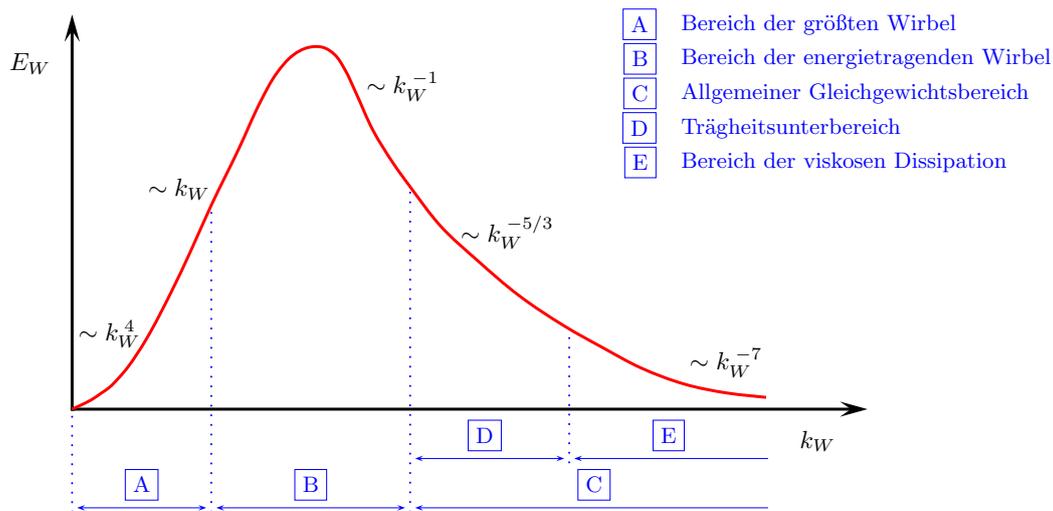


Abbildung 3.1: Energiespektrum einphasiger turbulenter Strömungen (siehe z.B. Kim & Manning [150] oder Hinze [124])

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 gröbere 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.

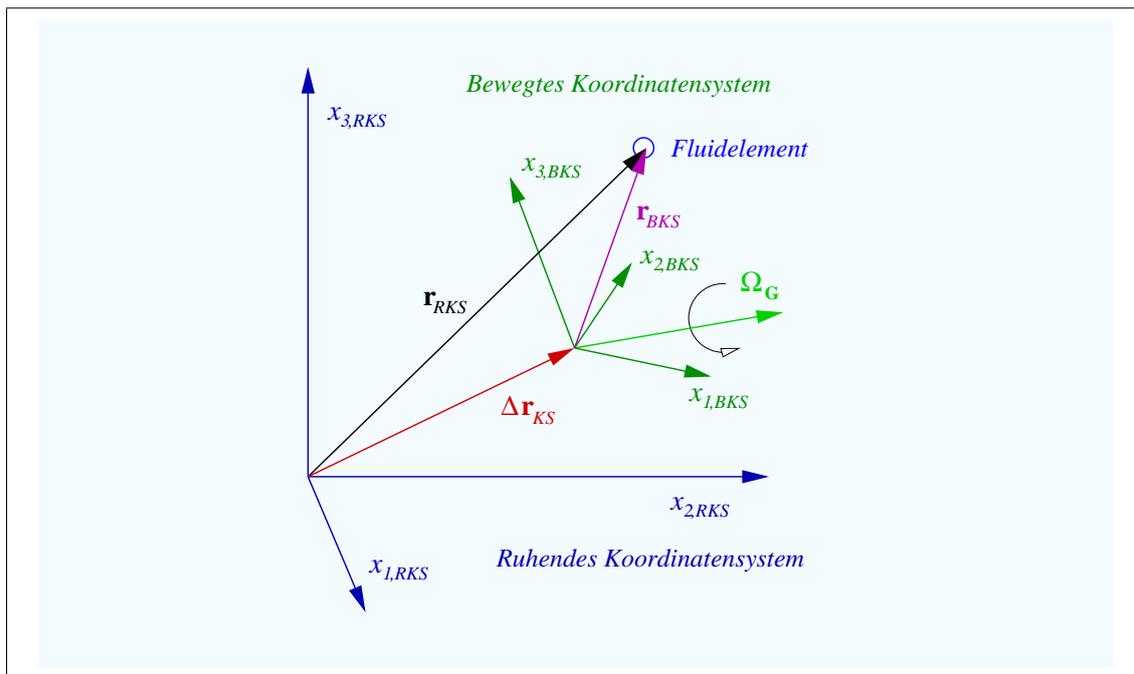


Abbildung 3.2: Beziehung zwischen einem ruhenden und einem bewegten kartesischen Koordinatensystem (*RKS* bzw. *BKS*)

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:

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

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.

4 Beschreibung der dispersen Phase

Die in diesem Abschnitt zusammengestellten Beschreibungen für die disperse Phase können den Anspruch einer umfassenden Behandlung natürlich nicht erfüllen, da bei der Zusammenstellung nur die für die nachfolgenden Berechnungen benötigten Beziehungen berücksichtigt wurden. Für eine allgemeine Beschreibung von dispersen Phasen sei auf die Arbeiten von Crowe et al. [55], Sommerfeld [294][297] aber auch z.B. Loth [182] verwiesen.

4.1 Wichtige Kennzahlen und Beziehungen

Für die Beschreibung der Partikelbewegung werden eine Reihe von Kennzahlen benötigt. Von zentraler Bedeutung ist dabei die Partikel-Reynoldszahl. Diese ist je nach Anwendungsfall unterschiedlich definiert.

Die Partikel-Reynoldszahl bzgl. Translation hat die folgende Form:

$$\text{Re}_P = d |\mathbf{w}| \nu^{-1} \quad (4.1)$$

Die verwendete Differenzgeschwindigkeit zwischen Fluid und Partikel (auch Schlupfgeschwindigkeit genannt) lautet dabei:

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} - \mathbf{v} \quad (4.2)$$

Ferner wird der Partikeldurchmesser d sowie die kinematische Viskosität der fluiden Phase ν benutzt.

Bei der Betrachtung der Partikelrotation verwendet man die Partikel-Reynoldszahl bzgl. Rotation:

$$\text{Re}_R = d^2 |\boldsymbol{\omega}_r| \nu^{-1} \quad (4.3)$$

Analog zu Gl. 4.1 bezeichnet $\boldsymbol{\omega}_r$ die relative Rotation zwischen Fluid und Partikel. Sie ist definiert als

$$\boldsymbol{\omega}_r = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}_F - \boldsymbol{\omega}_P = \frac{1}{2} [\nabla \times \mathbf{u}] - \boldsymbol{\omega}_P \quad (4.4)$$

In Scherströmungen definiert man entsprechend eine Partikel-Reynoldszahl bzgl. der Scherung:

$$\text{Re}_S = d^2 |\boldsymbol{\omega}_F| \nu^{-1} \quad (4.5)$$

Dabei wird als Geschwindigkeit die Rotation der Strömung $\boldsymbol{\omega}_F = [\nabla \times \mathbf{u}]$ angesetzt.

Die Partikelrelaxationszeit τ_P ist ein Maß für die Zeit, die ein Teilchen benötigt, um sich der Geschwindigkeit des umgebenden Fluids anzupassen. Für den Stokesschen Bereich, d.h. für $\text{Re}_P < 1$, berechnet sich τ_P zu

$$\tau_P = \frac{1}{18} \rho_P d^2 \mu^{-1} = \frac{1}{18} d^2 \gamma_\rho^{-1} \nu^{-1} \quad (4.6)$$

Dabei steht ρ_P für die Dichte des Partikelmaterials und μ für die dynamische Viskosität des Fluids. Ferner wird das Dichteverhältnis zwischen Fluid und Partikelmaterial mit $\gamma_\rho = \rho/\rho_P$ bezeichnet.

Die zeitlichen Ableitungen der Fluid- und der Partikelgeschwindigkeit sind prinzipiell verschieden, da das Fluid im Eulerschen Koordinatensystem, d.h. ortsfest (die Variablen liegen als Feldgrößen vor), und die disperse Phase im Lagrangeschen Bezugssystem, d.h. entlang der Partikelbahn, betrachtet wird. Um die Geschwindigkeitsänderung des Fluids entlang der Bahn eines Fluidelements zu erfassen, muss das totale Differential verwendet werden:

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \quad (4.7)$$

4.2 Erhaltungsgleichungen für Teilchen in einer Strömung

Die Bewegungsgleichungen für ein bestimmtes Teilchen (wobei jedes Teilchen der dispersen Phase andere Teilcheneigenschaften, wie z.B. Größe d , Dichte ρ_P und damit Teilchenmasse m , aufweisen kann) erfassen den Impulsübergang von der kontinuierlichen Phase auf die disperse Phase und haben die folgende Form:

$$\frac{d\mathbf{x}_P}{dt} = \mathbf{v} \quad (4.8)$$

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}_\Omega + \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_G + \mathbf{F}_P + \mathbf{F}_{VM} + \mathbf{F}_B + \mathbf{F}_{LS} + \mathbf{F}_{LM} \quad (4.9)$$

$$I_P \frac{d\boldsymbol{\omega}_P}{dt} = \mathbf{T}_\Omega + \mathbf{T} \quad (4.10)$$

Dabei berechnet sich das Massenträgheitsmoment I_P eines kugelförmigen Teilchens bei einer Rotation um die eigene Achse durch Integration über das Volumen des Teilchens zu $I_P = \frac{1}{10} m d^2$.

4.2.1 Teilchenort

Die Ortsänderung eines Teilchens $d\mathbf{x}_P/dt$ ist nichts anderes als die Partikelgeschwindigkeit \mathbf{v} (Gl. 4.8). Durch Integration über den jeweils betrachteten Zeitschritt Δt berechnet sich die entsprechende Ortsänderung.

4.2.2 Teilchentranslationsgeschwindigkeit

Die Partikelbewegungsgleichung für die Translation (Gl. 4.9) basiert im Wesentlichen auf Arbeiten von Basset [18] [17], Boussinesq [28][29] und Oseen [231][232][233] und wird daher üblicherweise Basset-Boussinesq-Oseen-Gleichung (BBO-Gleichung) genannt¹. Sie wurde bereits in einer Vielzahl von wissenschaftlichen Arbeiten (z.B. Tchen [321], Riley [266] oder Maxey & Riley [195]) diskutiert. Ferner sind eine Reihe von Einschränkungen bzgl. der Gültigkeit der Gleichung zu nennen, welche ausführlich z.B. von Sommerfeld [294], Kohnen [157] und Magnaudet [191] diskutiert wurden. Bemerkenswert ist, dass auch in jüngerer Zeit die Partikelbewegungsgleichung noch immer Modifikationen erfährt, wie z.B. die Arbeiten von Mei & Adrian [198] und Kim et al. [149] zeigen.

Die Trägheitskraft $m dv/dt$ steht dabei im Gleichgewicht mit einer Reihe von Kräften, die auf ein Teilchen entlang seiner Flugbahn wirken. Im folgenden sollen diese kurz beschrieben werden.

Coriolis- und Zentrifugalkraft F_{Ω}

Wie beim Fluid wird auch bei der Partikelbewegungsgleichung bei einem rotierenden Koordinatensystem eine Transformation der Erhaltungsgleichung nötig. Durch die Transformation der Trägheitskraft $m dv/dt$ erhält man im rotierenden Koordinatensystem zusätzliche Terme für die Coriolis- und die Zentrifugalkraft.

$$\mathbf{F}_{\Omega} = -m (2[\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{G}} \times \mathbf{v}] + [\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{G}} \times [\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{G}} \times \mathbf{x}_{\mathbf{P}}]]) \quad (4.11)$$

Bei einer Rotation um die x_3 -Achse mit einer Winkelgeschwindigkeit von $\Omega_G = |\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{G}}| = \Omega_{3,G}$ reduziert sich Gl. 4.11 zu:

$$\mathbf{F}_{\Omega} = m \Omega_G \begin{pmatrix} \Omega_G x_{1,P} + 2 v_2 \\ \Omega_G x_{2,P} - 2 v_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Die Zentrifugalkraft ist dabei proportional zu Ω_G^2 und die Corioliskraft proportional zu Ω_G . Bei der Betrachtung auf einem stationären Gitter, d.h. $\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{G}} = \mathbf{0}$, wird auch \mathbf{F}_{Ω} zu Null.

Widerstandskraft $F_{\mathbf{D}}$

Die Widerstandskraft ist in aller Regel die dominierende Kraft auf ein Teilchen in einer Strömung und setzt sich zusammen aus Reibungs- und Formwiderstand eines

¹Die erste Formulierung der Partikelbewegungsgleichung geht aber bereits zurück auf Arbeiten von Stokes [309]. Dieser spezifizierte die Kraft, welche auf ein fixiertes kleines Teilchen bei gleichmäßiger Anströmung wirkt, und lieferte damit die Pionierarbeiten für die Untersuchungen von Partikelbewegungen in viskosen Fluiden.

Teilchens. Sie ergibt sich durch Integration der Reibungs- und Druckkräfte über die Teilchenoberfläche. Für den Stokesschen Bereich (d.h. bei einer schleichenden Strömung mit $\text{Re}_P < 1$) erhält man so unter Vernachlässigung der Trägheitskräfte bei einem kugelförmigen Teilchen die beiden Anteile zur Widerstandskraft. Es wird dabei eine gleichmäßige Strömung um das Teilchen sowie eine konstante Relativgeschwindigkeit angenommen.

$$\mathbf{F}_D = \mathbf{F}_D^F + \mathbf{F}_D^R = 3\pi \mu d \mathbf{w} = 18 m \frac{\mu}{\rho_P d^2} \mathbf{w} \quad (4.13)$$

$$\mathbf{F}_D^F = \frac{1}{3} \mathbf{F}_D \quad (\text{Formwiderstand})$$

$$\mathbf{F}_D^R = \frac{2}{3} \mathbf{F}_D \quad (\text{Reibungswiderstand})$$

Unter Verwendung der Definitionsgleichung für die Partikelrelaxationszeit (Gl. 4.6) resultiert somit vereinfachend:

$$\mathbf{F}_D = m \tau_P^{-1} \mathbf{w} \quad (4.14)$$

Bei höheren Reynoldszahlen nimmt die Bedeutung der Trägheitskräfte zu. Eine analytische Lösung für die Widerstandskraft steht dann nicht mehr zur Verfügung. Daher wird zur Korrektur der Widerstandsbeiwert c_D eingeführt, für welchen im Stokesschen Bereich $c_D = 24 \text{Re}_P^{-1}$ gilt. Die auf höhere Reynoldszahlen angepasste Partikelrelaxationszeit lautet dann:

$$\tau_P = \frac{\rho_P d^2}{18 \mu} \frac{24}{c_D \text{Re}_P} \quad (4.15)$$

Für $\text{Re}_P < 1$ geht Gl. 4.15 also in Gl. 4.6 über. Entsprechend ergibt sich für die Widerstandskraft:

$$\mathbf{F}_D = m \tau_P^{-1} \mathbf{w} = \frac{3}{4} m \gamma_\rho d^{-1} c_D |\mathbf{w}| \mathbf{w} \quad (4.16)$$

Der Widerstandsbeiwert hängt von sehr vielen Faktoren ab, wobei die Reynoldszahl für die vorliegenden Betrachtungen den größten Einfluss hat. Nimmt die Reynoldszahl zu, so steigt c_D im Vergleich zum c_D -Wert im Stokesschen Bereich. Steigt die Reynoldszahl weiter, so bilden sich Wirbel hinter dem kugelförmigen Teilchen. Damit ändert sich die Druckverteilung an der Oberfläche und der Formwiderstand erhöht sich. Im Newtonschen Bereich (ca. $750 < \text{Re}_P < 3.5 \cdot 10^5 = \text{kritische Reynoldszahl}$) spielt der Anteil der Reibung kaum noch eine Rolle und es liegt ein nahezu konstanter Widerstandsbeiwert von $c_D = 0.445 (\pm 13\%)$ vor. Höhere Reynoldszahlen sind in der Regel bei der Berechnung von partikelbeladenen Strömungen nicht relevant.

Für die experimentell zu ermittelnde Beziehung zwischen Widerstandsbeiwert c_D und Reynoldszahl Re_P sind in der Vergangenheit bereits eine Vielzahl von Funktionen veröffentlicht worden. Eine Auswahl an Korrelationen zur Berechnung von c_D ist in Anhang A.1 vergleichend zusammengestellt und diskutiert. Die bereits 1933 von Schiller & Naumann [284] vorgeschlagene Funktion (Gl. 4.17) hat dabei in der Literatur eine Art Standard-Status, so dass sie auch in der vorliegenden Arbeit (im Falle von sehr verdünnten Zweiphasenströmungen) verwendet wird.

$$c_D = 24 \text{Re}_P^{-1} \left(1 + 0.15 \text{Re}_P^{0.687} \right) \quad \forall \text{Re}_P < 800 \quad (4.17)$$

Mit einer Abweichung von $\pm 5\%$ im betrachteten Bereich hat sie eine ausreichende Genauigkeit. Außerhalb des Bereichs, d.h. für $Re_P > 800$, wird der Widerstandsbeiwert aufgrund der oben beschriebenen Gegebenheiten zu $c_D = 0.445$ gesetzt.

Da bei der Widerstandskraft nur Relativgeschwindigkeiten auftreten, gilt die Kraft in unveränderter Form auch bzgl. eines rotierenden Koordinatensystems. Das gleiche gilt für die Partikel-Reynoldszahl Re_P und den Widerstandsbeiwert c_D .

Schwerkraft \mathbf{F}_G

Die Schwerkraft ergibt sich durch die Gravitationsbeschleunigung \mathbf{g} und hat die folgende einfache Form:

$$\mathbf{F}_G = m \mathbf{g} \quad (4.18)$$

Bei der Transformation auf ein mit $\boldsymbol{\Omega}_G$ rotierendes Koordinatensystem erhält man:

$$\mathbf{F}_G = m (2 [\boldsymbol{\Omega}_G \times \mathbf{u}_g] + [\boldsymbol{\Omega}_G \times [\boldsymbol{\Omega}_G \times \mathbf{x}_g]]) \quad (4.19)$$

Im Fall von $\mathbf{g} \parallel \boldsymbol{\Omega}_G$ bleibt die Kraft bei der Transformation auf ein rotierendes Koordinatensystem unverändert, da dann auch die durch die Gravitation resultierende Geschwindigkeit \mathbf{u}_g mit $d\mathbf{u}_g/dt = \mathbf{g}$ als auch der resultierende Weg mit $d\mathbf{x}_g/dt = \mathbf{u}_g$ parallel zu $\boldsymbol{\Omega}_G$ verlaufen und sich somit die Vektorprodukte zu Null berechnen.

Bei den vorliegenden Untersuchungen wurden ausschließlich Systeme betrachtet, bei welchen sich das rotierende Koordinatensystem um die x_3 -Achse des entsprechenden stationären Koordinatensystems dreht und die Gravitation in die negative x_3 -Koordinate gerichtet ist.

Kraft durch den Druckgradienten \mathbf{F}_P

Durch einen Druckgradienten in der Strömung resultiert eine weitere Kraft auf das Teilchen. Mit der Annahme eines konstanten Druckgradienten über das Partikel ergibt sich durch Integration über die Teilchenoberfläche:

$$\mathbf{F}_P = -\nabla p m / \rho_P \quad (4.20)$$

Betrachtet man die Navier-Stokes-Gleichung (vgl. Gl. 3.8, wobei als Volumenkraft hier zunächst nur die Schwerkraft berücksichtigt wird)

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \quad (4.21)$$

so lässt sich der Druckgradient wie folgt ausdrücken:

$$-\nabla p = \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \rho \mathbf{g} \quad (4.22)$$

Unter Annahme von konstanter Scherung über das Teilchen wird der Term $\mu \nabla^2 \mathbf{u}$ zu Null und es ergibt sich für die Kraft durch den Druckgradienten:

$$\mathbf{F}_P = m \gamma_\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - m \gamma_\rho \mathbf{g} \quad (4.23)$$

Die Bedeutung der Kraft ist somit direkt proportional zum Dichteverhältnis γ_ρ und steigt mit zunehmendem Druckgradienten.

Häufig werden die beiden Teilterme getrennt voneinander betrachtet und der erste Term als Druckkraft und der zweite Term als Auftriebskraft bezeichnet. Die Auftriebskraft wird dann in der Regel mit der Gewichtskraft zusammengefasst.

Analog zur Schwerkraft ändert sich auch die Auftriebskraft im Fall von $\mathbf{g} \parallel \boldsymbol{\Omega}_G$ bei der Transformation auf ein rotierendes Koordinatensystem nicht. Bei der Druckkraft entstehen allerdings wie bei der Trägheitskraft durch die Transformation zusätzliche Terme. Allgemein lässt sich die Kraft durch einen Druckgradienten dann wie folgt schreiben:

$$\mathbf{F}_P = m \gamma_\rho \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} + 2 [\boldsymbol{\Omega}_G \times \mathbf{u}] + [\boldsymbol{\Omega}_G \times [\boldsymbol{\Omega}_G \times \mathbf{x}_P]] - \mathbf{g} \right) \quad (4.24)$$

Bei einer Rotation um die x_3 -Achse mit einer Winkelgeschwindigkeit von Ω_G und einer Gravitationsbeschleunigung von $\mathbf{g} = g_3 \mathbf{e}_3$ ergibt sich somit:

$$\mathbf{F}_P = m \gamma_\rho \left[\frac{D\mathbf{u}}{Dt} + \begin{pmatrix} -\Omega_G^2 x_{1,P} - 2 \Omega_G u_2 \\ -\Omega_G^2 x_{2,P} + 2 \Omega_G u_1 \\ -g_3 \end{pmatrix} \right] \quad (4.25)$$

Kraft durch die virtuelle Masse \mathbf{F}_{VM}

Bei der Beschleunigung eines Teilchens muss auch das Fluid in der direkten Umgebung des Teilchens mitbeschleunigt werden, so dass sich ein zusätzlicher Formwiderstand ergibt. Dieser ist proportional zum Dichteverhältnis γ_ρ , d.h. die Bedeutung der massenbezogenen Kraft nimmt mit γ_ρ zu. Die effektive Masse eines Teilchens erscheint also durch diesen Term größer als die reale.

Über die Betrachtung der kinetischen Energie des umgebenden Fluids und entsprechende Integration (s. z.B. Crowe, Sommerfeld und Tsuji [55]) erhält man für die Kraft durch die virtuelle Masse die folgende Beziehung:

$$\mathbf{F}_{VM} = m c_{VM} \gamma_\rho \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right) \quad (4.26)$$

Der Koeffizient c_{VM} wurde eingeführt, um die Gültigkeit der Beziehung auch für höhere Reynoldszahlen zu erweitern. Nach Odar & Hamilton [224] lässt sich c_{VM} in Abhängigkeit von der Partikel-Reynoldszahl Re_P und der Beschleunigungszahl

Ac bestimmen. Neuere Untersuchungen (Rivero et al. [267], Mei et al. [199] und Chang & Maxey [40][41]) zeigen aber, dass für einen großen Bereich von Re_P und Ac der Koeffizient $c_{VM} = 0.5$, welcher sich bei kriechender Umströmung berechnet, nach wie vor Gültigkeit besitzt. Bei den durchgeführten Berechnungen wurde daher $c_{VM} = 0.5$ verwendet.

Im rotierenden Koordinatensystem ergeben sich durch die Transformation der Geschwindigkeitsableitungen analog zur Trägheitskraft und zur Druckkraft zusätzliche Terme:

$$\mathbf{F}_{VM} = m c_{VM} \gamma_\rho \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \frac{d\mathbf{v}}{dt} + 2[\boldsymbol{\Omega}_G \times \mathbf{w}] \right) \quad (4.27)$$

Unter Verwendung von $\boldsymbol{\Omega}_G = \Omega_G \mathbf{e}_3$ vereinfacht sich Gl. 4.27 zu

$$\mathbf{F}_{VM} = m c_{VM} \gamma_\rho \left[\frac{D\mathbf{u}}{Dt} + \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \begin{pmatrix} -2\Omega_G(u_2 - v_2) \\ 2\Omega_G(u_1 - v_1) \\ 0 \end{pmatrix} \right] \quad (4.28)$$

Basset-Kraft \mathbf{F}_B :

Diese Kraft beschreibt den Einfluss der Vorgeschichte auf die Teilchenbewegung und ergibt sich durch die Berücksichtigung von viskosen Effekten durch die instationäre, relative Beschleunigung des Teilchens zum Fluid. Die von Basset [18] beschriebene Widerstandskraft, erweitert durch einen von Odar & Hamilton [224][223] vorgeschlagenen Korrekturfaktor c_B für höhere Reynoldszahlen (welcher von ihnen in Abhängigkeit von der Beschleunigungszahl Ac angegeben wurde) sowie die Modifikation durch Reeks & McKee [261] zur Berücksichtigung der Anfangsgeschwindigkeiten $(\mathbf{u} - \mathbf{v})_0$, hat die folgende Form:

$$\mathbf{F}_B = \frac{3}{2} d^2 c_B \sqrt{\pi \rho \mu} \left[\int_{-\infty}^t \frac{1}{\sqrt{t-t'}} \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt'} - \frac{d\mathbf{v}}{dt'} \right) dt' + \frac{(\mathbf{u} - \mathbf{v})_0}{\sqrt{t}} \right] \quad (4.29)$$

Die massenbezogene Kraft ist also proportional zu $\sqrt{\rho}/\rho_P$ und wurde daher bei den vorliegenden Untersuchungen vernachlässigt². Eine weiterführende Diskussion der Basset-Kraft findet sich z.B. bei Crowe et al. [55].

²Hjelmfelt & Mockros [126] haben zur Untersuchung der Partikeldispersion in einer turbulenten Strömung die Partikelbewegungsgleichung in den Frequenzbereich transformiert. Dadurch konnte anschaulich die Relevanz der einzelnen Terme der Bewegungsgleichung dargestellt werden. Als Kräfte wurden neben der Widerstandskraft \mathbf{F}_D die Kraft durch den Druckgradienten \mathbf{F}_P , die Kraft durch die virtuelle Masse \mathbf{F}_{VM} und die Basset-Kraft \mathbf{F}_B berücksichtigt. Bei den betrachteten Fällen wurde nacheinander \mathbf{F}_B , dann \mathbf{F}_{VM} und schließlich \mathbf{F}_P vernachlässigt. Durch entsprechende Vergleiche konnte gezeigt werden, dass die vernachlässigten Kräfte im Falle von sehr kleinen Dichteverhältnissen γ_ρ und kleinen Teilchen unbedeutend werden. Liang & Michaelides [176] zeigten z.B., dass die Basset-Kraft bei Gas-Feststoff Strömungen für $\gamma_\rho < 0.002$ vernachlässigbar ist. Besonders bei Blasenströmungen ist eine Vernachlässigung somit nicht sinnvoll. Es ist zu bemerken, dass aufgrund der Ergebnisse von Hjelmfelt & Mockros die Vernachlässigung der Basset-Kraft bei der Berechnung von festen Teilchen in Fluiden im

Saffman-Kraft \mathbf{F}_{LS}

Befindet sich ein Teilchen in einer Scherströmung, so stellt sich eine ungleichmäßige Druckverteilung über die Teilchenoberfläche ein und es resultiert eine Querkraft senkrecht zur Strömung, welche hin zur größeren Relativgeschwindigkeit \mathbf{w} ausgerichtet ist. In Abb. 4.1 ist dies schematisch verdeutlicht.

Nach Arbeiten von Saffman [275][276] (er konnte eine analytische Beziehung für die nach ihm benannte Querkraft herleiten) und Mei [197] ergibt sich die folgende verallgemeinerte Form der Querkraft:

$$\mathbf{F}_{LS} = 1.615 d^2 (\rho\mu)^{1/2} c_{LS} |\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{F}}|^{-1/2} [\mathbf{w} \times \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{F}}] \quad (4.30)$$

bzw. unter Einbeziehung der Reynoldszahl bzgl. Scherung Re_S :

$$\mathbf{F}_{LS} = 1.615 d \mu Re_S^{1/2} c_{LS} [\mathbf{w} \times \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{F}}] \quad (4.31)$$

Die Rotation des Fluids wird dabei durch $\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{F}} = [\nabla \times \mathbf{u}]$ beschrieben und der von Mei [197] vorgeschlagene Korrekturterm c_{LS} für höhere Reynoldszahlen ermittelt sich aus dessen empirischer Korrelation in Abhängigkeit von den Partikel-Reynoldszahlen bzgl. Translation Re_P und Scherung Re_S .

$$c_{LS} = \begin{cases} (1 - 0.3314 \Upsilon_S^{1/2}) \exp(-0.1 Re_P) + 0.3314 \Upsilon_S^{1/2} & \forall Re_P \leq 40 \\ 0.0371 Re_S^{1/2} & \forall Re_P > 40 \end{cases} \quad (4.32)$$

$$\text{mit } \Upsilon_S = \frac{1}{2} Re_S Re_P^{-1} \text{ im Bereich } 0.005 < \Upsilon_S < 0.4$$

Die Basis für die Beziehung bildeten die numerischen Ergebnisse von Dandy & Dwyer [59]. Später konnte gezeigt werden, dass die Ergebnisse von McLaughlin [196] mit der Korrelation ebenfalls richtig wiedergegeben werden.

Durch die Transformation auf ein rotierendes Koordinatensystem ergeben sich zusätzliche Terme. Ferner ist zu beachten, dass Re_S im Gegensatz zu Re_P nicht invariant bzgl. einer Rotation des Koordinatensystems ist. Allgemein lässt sich für die Saffman-Kraft also schreiben:

$$\mathbf{F}_{LS} = 1.615 d^2 (\rho\mu)^{1/2} c_{LS} |\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{F}} + 2\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{G}}|^{-1/2} [\mathbf{w} \times (\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{F}} + 2\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{G}})] \quad (4.33)$$

Gegensatz zu den Berechnungen von festen Teilchen in Luft nicht eindeutig möglich ist. Wegen des überproportional hohen Berechnungsaufwands für die Erfassung dieser Kraft wird diese Unschärfe aber in Kauf genommen.

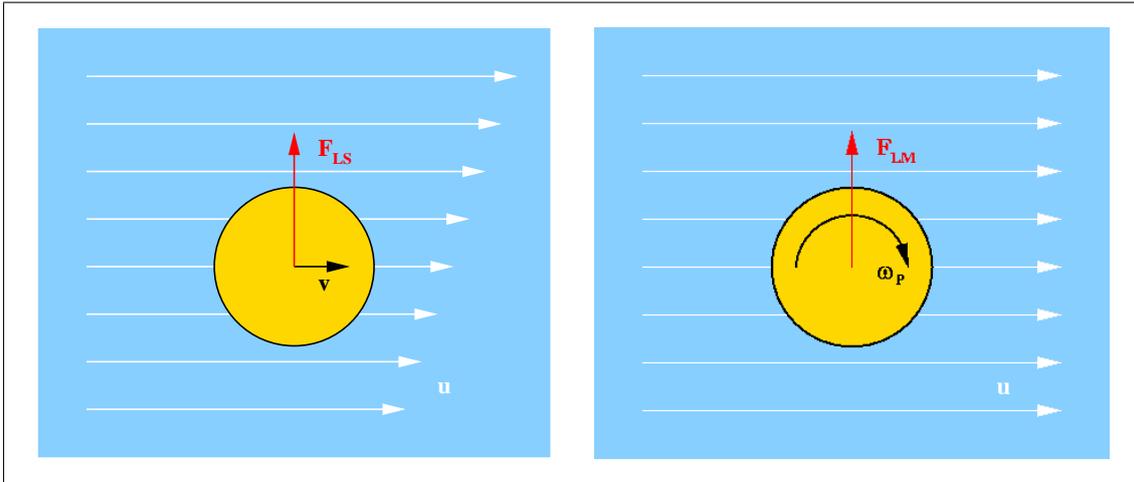


Abbildung 4.1: Querkraft auf ein Partikel in einer Scherströmung (Saffman-Kraft \mathbf{F}_{LS} , links) bzw. aufgrund der Eigenrotation des Teilchens (Magnus-Kraft \mathbf{F}_{LM} , rechts)

Magnus-Kraft \mathbf{F}_{LM}

Die auf Arbeiten von Magnus zurückgehende Kraft resultiert aus der Eigenrotation eines Teilchens in einer parallelen Fluidströmung. Aufgrund der durch die Rotation und die Haftbedingung bestimmten Relativgeschwindigkeiten an der Teilchenoberfläche stellt sich eine ungleichmäßige Druckverteilung über die Oberfläche ein. (Bewegt sich die Teilchenoberfläche entgegen der Strömungsrichtung, so wird das Fluid in der direkten Umgebung des Teilchens verzögert und es resultiert eine lokale Druckerhöhung. Entsprechend entsteht eine lokale Druckreduzierung bei einer Bewegung in Strömungsrichtung.) Dadurch erhält man eine Querkraft/Auftriebskraft (s. Abb. 4.1), die in allgemeinen als Magnus-Effekt bezeichnet wird. Bei hohen Rotationsgeschwindigkeiten der Teilchen kann die Magnus-Kraft deren Bewegung signifikant beeinflussen. Besonders bei Strömungen mit vielen Wandkollisionen, welche große Rotationsgeschwindigkeiten induzieren können, ist mit einer großen Bedeutung zu rechnen (s. z.B. Untersuchungen von Matsumoto & Saito [194] zum pneumatischen Transport in einem rechteckigen Kanal).

Nach Arbeiten von Rubinow & Keller [272] und entsprechender Verallgemeinerung (s. Crowe et al. [55]) kann die Magnus-Kraft wie folgt beschrieben werden:

$$\mathbf{F}_{LM} = \frac{1}{8} \pi \rho d^2 c_{LM} |\mathbf{w}| |\boldsymbol{\omega}_r|^{-1} [\boldsymbol{\omega}_r \times \mathbf{w}] \quad (4.34)$$

bzw. unter Verwendung der Partikel-Reynoldszahlen bzgl. Translation Re_P und Rotation Re_R :

$$\mathbf{F}_{LM} = \frac{1}{8} \pi \rho d^3 Re_P Re_R^{-1} c_{LM} [\boldsymbol{\omega}_r \times \mathbf{w}] \quad (4.35)$$

Für kleine Partikel-Reynoldszahlen ($Re_P < 1$) gilt für den Auftriebsbeiwert nach

theoretischen Ableitungen von Rubinow & Keller [272]:

$$c_{LM} = d |\boldsymbol{\omega}_r| |\mathbf{w}|^{-1} = \text{Re}_R \text{Re}_P^{-1} \quad (4.36)$$

Bei höheren Partikel-Reynoldszahlen (d.h. für $\text{Re}_P < 140$) lässt sich der Beiwert nach Oesterlé & Bui Dinh [225] wie folgt approximieren:

$$c_{LM} = 0.45 + (\text{Re}_R \text{Re}_P^{-1} - 0.45) \exp(-0.05684 \text{Re}_R^{0.4} \text{Re}_P^{0.3}) \quad (4.37)$$

Alternativ lässt sich der Beiwert mit der Beziehung von Lun & Liu [185]³ für Partikel-Reynoldszahlen bis $\text{Re}_P = 1000$ beschreiben:

$$c_{LM} = \text{Re}_R \text{Re}_P^{-1} (0.178 + 0.822 \text{Re}_P^{-0.552}) \quad (4.38)$$

Andere Autoren (z.B. Frank [95] und Wassen [342]) verwenden bei ihren Simulationen eine einfachere Beziehung für c_{LM} , welche auf den experimentellen Untersuchungen von Tsuji et al. [326] basiert.

$$c_{LM} = \begin{cases} (0.4 \pm 0.1) \Upsilon_R & \forall \Upsilon_R < 1 \\ (0.4 \pm 0.1) & \forall \Upsilon_R \geq 1 \end{cases} \quad \text{mit } \Upsilon_R = \frac{1}{2} \text{Re}_R \text{Re}_P^{-1} \quad (4.39)$$

Hier wird eine abschnittsweise lineare Abhängigkeit des Beiwerts vom Reynoldszahlenverhältnis (dieses entspricht einer dimensionslosen Rotationsgeschwindigkeit) angenommen, welche z.B. auch bei der Umströmung eines rotierenden Zylinders gefunden wurde. Eine ausführlichere Diskussion zu den Abhängigkeiten des Auftriebsbeiwertes findet sich z.B. bei Sommerfeld [294] oder Crowe et al. [55].

Da bei der Magnus-Kraft nur Relativgeschwindigkeiten auftreten, behält die Kraft in unveränderter Form auch bzgl. eines rotierenden Koordinatensystems ihre Gültigkeit. Gleiches gilt für die verwendeten Reynoldszahlen sowie dem Auftriebsbeiwert.

4.2.3 Teilchenrotationsgeschwindigkeit

Analog zur Partikelbewegungsgleichung gilt für die Drehimpulsänderung eines Teilchens, dass die Änderung im Gleichgewicht mit den angreifenden Drehmomenten stehen muss, welche entlang der Flugbahn eines Teilchens wirken. Durch Integration von Gl. 4.10 über einen betrachteten Zeitschritt Δt berechnet sich die entsprechende Änderung der Partikelrotationsgeschwindigkeit.

Drehmoment durch Transformation auf ein rotierendes Bezugssystem \mathbf{T}_Ω

Die Transformation der zeitlichen Ableitung der Partikelrotation (linke Seite von Gl. 4.10) führt ähnlich wie bei der Transformation der Partikelbewegungsgleichung

³Die Korrelation baut auf den Arbeiten von Rubinow & Keller [272], Oesterlé et al. [226] sowie Tsuji et al. [326] auf.

zu Zentrifugal- und die Corioliskraft in der Erhaltungsgleichung für den Drehimpuls zu einem zusätzlichen Term:

$$\mathbf{T}_\Omega = I_P [\boldsymbol{\Omega}_G \times \boldsymbol{\omega}_P] \quad (4.40)$$

Bei einer Rotation des Koordinatensystems um die x_3 -Achse (d.h. mit $\boldsymbol{\Omega}_G = \Omega_G \mathbf{e}_3$) ergibt sich somit:

$$\mathbf{T}_\Omega = I_P \begin{pmatrix} -\Omega_G \omega_{2,P} \\ \Omega_G \omega_{1,P} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

Wirrendes Drehmoment durch die Strömung \mathbf{T}

Die Erhaltungsgleichung für das Drehmoment eines Teilchens (Gl. 4.10) geht auf Arbeiten von Rubinow & Keller [272] sowie Happel & Brenner [112] zurück. Das auf ein rotierendes kugelförmiges Teilchen wirkende Drehmoment \mathbf{T} (dieses beschreibt die Dissipation an Rotationsenergie des Teilchens aufgrund der viskosen Reibung des Fluids) ergibt sich durch Lösung der Navier-Stokes-Gleichung und Integration über die Teilchenoberfläche.

$$\mathbf{T} = \frac{1}{2} \rho \left(\frac{1}{2}d\right)^5 c_R |\boldsymbol{\omega}_r| \boldsymbol{\omega}_r = \frac{1}{8} \mu \left(\frac{1}{2}d\right)^3 \text{Re}_R c_R \boldsymbol{\omega}_r \quad (4.42)$$

Zur Erweiterung auf höhere Reynoldszahlen wurde in Gl. 4.42 bereits der Rotationsbeiwert c_R eingeführt, welcher sich für kleine Reynoldszahlen ($\text{Re}_R < 40$) auf den theoretischen Wert von $c_R = 64\pi \text{Re}_R^{-1}$ (s. z.B. Lamb [165]) reduziert. Er kann über eine empirische Korrelation basierend auf numerischen Untersuchungen von Dennis et al. [68] und experimentellen Ergebnissen von Sawatzki [277][278] als Funktion von der Partikel-Reynoldszahl bzgl. Rotation Re_R bestimmt werden:

$$c_R = 12.9 \text{Re}_R^{-1/2} + 128.4 \text{Re}_R^{-1} \quad \forall \quad 40 < \text{Re}_R < 4000 \quad (4.43)$$

Die Korrelation liefert eine ausgezeichnete Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen von Sawatzki bis $\text{Re}_R \approx 4000$, aber auch bis $\text{Re}_R \approx 1.6 \cdot 10^5$ ist die Genauigkeit noch mit gut zu bezeichnen (s. Dennis et al. [68]). Bei höheren Reynoldszahlen nähert sich Gl. 4.43 den theoretischen Ableitungen von Banks [13] und Howarth [129] an, welche den Grenzfall sehr hoher Reynoldszahlen mit Hilfe der Grenzschichttheorie betrachteten.

Frank [95] unterteilte den Reynoldszahlenbereich bis $4 \cdot 10^7$ in mehrere Intervalle, um die Messdaten von Sawatzki möglichst genau zu treffen. Eine derartige Unterteilung wird für die vorliegende Arbeit allerdings nicht benötigt, da bereits im mit Gl. 4.43 sehr gut abgebildeten Bereich von $\text{Re}_R < 4000$ relative Winkelgeschwindigkeiten von $|\boldsymbol{\omega}_r| = 1.5 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ (Luft, $d = 200 \mu\text{m}$), 10^5 s^{-1} (Wasser, $d = 200 \mu\text{m}$) bzw. $1.6 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1}$ (Wasser, $d = 500 \mu\text{m}$) möglich sind, welche als hinreichend hoch erachtet werden.

Da beim angreifenden Drehmoment nur relative Rotationsgeschwindigkeiten auftreten, verhält es sich, wie auch die Partikel-Reynoldszahl bzgl. Rotation und der Rotationsbeiwert, inert bzgl. einer Transformation auf ein rotierendes Koordinatensystem.

4.3 Partikeldispersionsmodell

Bei der Berechnung des Fluidgeschwindigkeitsfeldes mit einem Turbulenzmodell liegt die momentane Fluidgeschwindigkeit, welche an einem bestimmten Ort auf ein Teilchen wirkt, nicht direkt vor. Für die korrekte Berechnung der Teilchenbahnen und die daraus resultierende Dispersion kann die Fluidturbulenz nicht vernachlässigt werden. Die momentane Geschwindigkeit muss daher mit Hilfe der gegebenen Daten (z.B. k und ε bei Verwendung des k - ε -Turbulenzmodells) sowie eines geeigneten Teilchendispersionsmodells⁴ bestimmt werden. In der Literatur finden sich diverse Modelle unterschiedlichster Komplexität zur Berechnung der Partikeldispersion. Eine Übersicht wurde z.B. von Crowe et al. [55] zusammengestellt. Bei den vorliegenden Untersuchungen wurde zur Bestimmung der aktuellen Fluktuationsgeschwindigkeiten des Fluids am Partikelort ein Langevin-Gleichungsmodell eingesetzt. Ein relativ einfacher aber sehr verbreiteter Modellansatz ist die Betrachtung von diskreten Wirbeln (s. z.B. Durst et al. [79]). Dieses Modell soll zunächst kurz beschrieben werden, da es bereits die wesentlichen Modellierungsgedanken enthält.

4.3.1 Modell der diskreten Wirbel

Die aktuelle Schwankungsgeschwindigkeit des Fluids am Partikelort wird bei diesem Modell als Zufallsgröße betrachtet und direkt aus der turbulenten kinetischen Energie k bestimmt. Mit der Annahme von isotroper Turbulenz und einer Gauß-Verteilung der Komponenten der Fluidschwankungsgeschwindigkeit berechnen sich diese Komponenten als Gauß-verteilte Zufallszahlen mit einem Mittelwert von Null und einer Varianz von $\sigma_u^2 = \frac{2}{3}k$.

Die so bestimmte Fluktuationsgeschwindigkeit gilt dann für den aktuellen Wirbel, d.h. es muss eine neue Schwankungsgeschwindigkeit generiert werden, sobald der vorliegende Wirbel dissipiert ist oder das Teilchen den Wirbel durchquert hat. Sowohl für das Dissipationszeitmaß T_E (bzw. die Wirbellebendauer) als auch für die charakteristische Wirbelgröße L_E sind in der Literatur unterschiedliche Ansätze zu

⁴Die Grundlage für die Entwicklung von Partikeldispersionsmodellen (siehe z.B. Yudine [354], Csánady [56] usw.) bildete die Theorie der turbulenten Diffusion von Taylor [320], welche ebenfalls auf Lagrangeschen Korrelationen basiert. Diese wird oft auch als die wichtigste und fundamentalste Theorie in der Geschichte der Turbulenz bezeichnet. In der Folgejahre der Pionierarbeiten von Taylor war die turbulente Diffusion Gegenstand einer Vielzahl von wissenschaftlichen Untersuchungen, welche z.B. von Sommerfeld [294] in einer Übersicht zusammengetragen wurden.

finden. Üblicherweise wird aber die allgemeine Formulierung nach Milojević [203] verwendet und die Wirbellebendauer proportional zu $k \varepsilon^{-1}$ (wobei die Proportionalitätskonstante nach einer Zusammenstellung von Sommerfeld [294] je nach Autor und Verifikationsexperimenten im Bereich von 0.12 bis 0.46 liegt⁵) angenommen und die charakteristische Wirbelgröße mit $L_E = T_E \sigma_u$ berechnet. Die zur Durchquerung des Wirbels benötigte Zeit T_D kann nun mit $T_D = L_E |\mathbf{w}|^{-1}$ abgeschätzt werden. Der maximale Wechselwirkungszeitraum zwischen Wirbel und Teilchen ergibt sich also aus dem Minimum von T_E und T_D . Es bleibt zu erwähnen, dass in der Literatur eine Vielzahl von Varianten dieses Modells zu finden sind.

4.3.2 Langevin-Gleichungsmodell

Die Langevin-Gleichung wurde ursprünglich bei der Untersuchung der Brownschen Molekularbewegung (z.B. Wang & Uhlenbeck [341]) und später auch für die Beschreibung der Teilchendisersion aufgrund turbulenter Geschwindigkeitsschwankungen (z.B. Durbin [77]) eingesetzt. Es handelt sich beim Langevin-Gleichungsmodell um ein stochastisches Modell aus der Gruppe der *Random Walk* Modelle und die aktuelle Form geht im Wesentlichen auf Untersuchungen der Teilchendisersion in der Atmosphäre zurück (z.B. Csanady [56], Hall [110], Legg & Raupach [175][174] und Sawford [279]).

Der beschreibende Markov-Prozess (Gl. 4.46) enthält sowohl einen zufälligen Anteil zur Erfassung der turbulenten Bewegung des Fluids als auch einen korrelierten Term zur Berücksichtigung von Turbulenzballen (d.h. größeren Wirbelstrukturen). Die Fluidgeschwindigkeiten, welche auf ein Teilchen entlang dessen Flugbahn wirken, sind also in Abhängigkeit von den Wirbelstrukturen mehr oder weniger stark korreliert (s. auch Sommerfeld [294] und Decker [61]).

Im Allgemeinen haben disperse Teilchen und Fluidelemente auch bei gleichem Startpunkt unterschiedliche Trajektorien (s. Abb. 4.2). Dies erklärt sich durch die Teilchenträgheit sowie die auf das Teilchen wirkenden äußeren Kräfte. Die Ermittlung der vom Teilchen gesehenen momentanen Fluidgeschwindigkeit erfolgt basierend auf Arbeiten von Ormancey & Martinon [229] im wesentlichen in zwei Schritten. Im ersten Schritt wird die Fluktuationgeschwindigkeit des Fluids entlang der Trajektorie eines Fluidelements unter Verwendung einer Lagrangeschen Korrelationsfunktion ermittelt. Benötigt wird aber die Fluktuationgeschwindigkeit entlang der Partikelbahn, so dass im zweiten Schritt mit einer Eulerschen Korrelationsfunktion eine Beziehung zwischen der Geschwindigkeit am Partikelort mit der am Ort des Fluidelements hergestellt wird. Die Erfassung der Geschwindigkeitsänderung entlang der Partikelbahn erfolgt dann durch eine Kombination der beiden Schritte.

Für die Lagrangesche Korrelation der Fluidfluktuationgeschwindigkeiten (man spricht hier auch oft von einer Auto- oder Zeitkorrelation, da nur eine Änderung

⁵Sowohl Sommerfeld et al. [304] als auch Milojević [203] empfehlen die Verwendung einer Proportionalitätskonstante von 0.3.

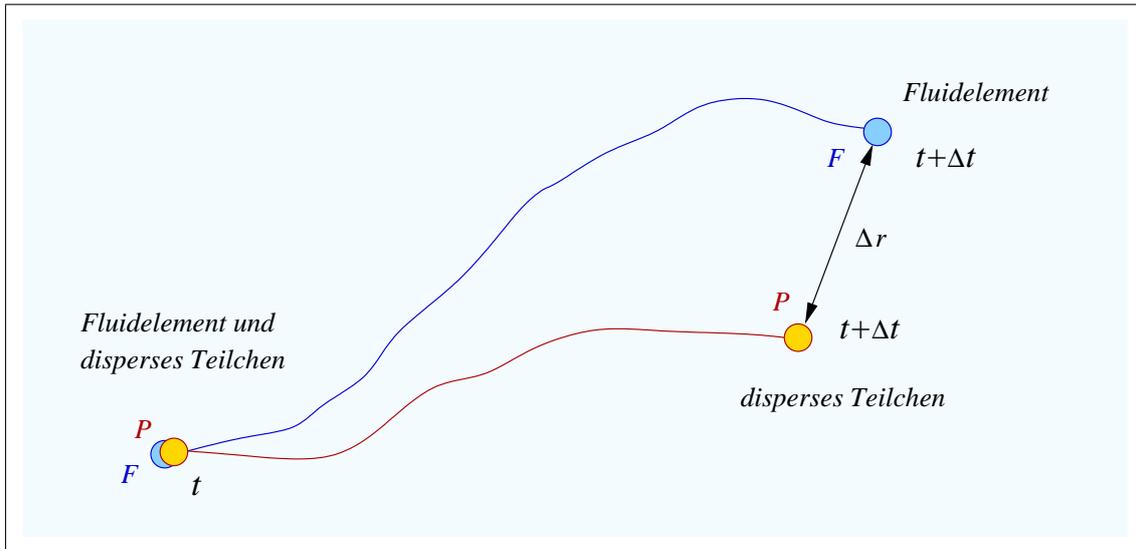


Abbildung 4.2: Unterschiedliche Ortsänderung bzw. Bewegungsbahn eines festen dispersen Teilchens P und eines Fluidelements F innerhalb eines Zeitschritts

der Zeit betrachtet wird) die folgende Beziehung:

$$\mathcal{R}_{\mathcal{L}} = (\mathcal{R}_{\mathcal{L}})_{ij} \{e_i e_j\} = R_{L,ij} \{e_i e_j\} = \frac{u'_i(t + \Delta t) u'_j(t)}{\sqrt{u'^2_i(t) u'^2_j(t)}} \{e_i e_j\} \quad (4.44)$$

Der Korrelationstensor hängt also sowohl von der Zeit t als auch vom Zeitschritt Δt ab, wobei die Abhängigkeit von t normalerweise nicht berücksichtigt werden muss. Vernachlässigt man die Kreuzkorrelationen⁶, so lässt sich der Tensor $\mathcal{R}_{\mathcal{L}}$ auf einen Vektor $\mathbf{R}_{\mathbf{L}}$ mit den folgenden Elementen reduzieren:

$$\mathbf{R}_{\mathbf{L}} = (\mathbf{R}_{\mathbf{L}})_i e_i = R_{L,i} e_i = (\mathcal{R}_{\mathcal{L}})_{ii} e_i = R_{L,ii} e_i \quad (4.45)$$

Entlang der Trajektorie eines Fluidelements ergibt sich somit die folgende Beziehung für die Fluktuationsgeschwindigkeiten mit einem zeitlichen Abstand von Δt :

$$u'_{i,F}(t + \Delta t) = R_{L,i} u'_{i,F}(t) + \sqrt{1 - (R_{L,i})^2} \sigma_{u_i} \xi_{u_i} \quad (4.46)$$

Dabei steht $u'_{i,F}$ für die Fluidfluktuationsgeschwindigkeit am Ort des Fluidelements, σ_{u_i} für die Standardabweichung der Fluidgeschwindigkeitskomponente u_i und ξ_{u_i} für eine Gauß-verteilte Zufallszahl mit einem Mittelwert von Null und einer Standardabweichung von 1 (ebenfalls für Fluidgeschwindigkeitskomponente u_i). Die Komponenten des Lagrangeschen Geschwindigkeitskorrelationsvektors $\mathbf{R}_{\mathbf{L}}$ können mit der

⁶Andere Autoren (z.B. Berlemont et al. [21][23] und Zhou & Leschziner [356][357]) berücksichtigen bei ihren Modellen die gesamte Matrix. Während Berlemont et al. bis zu 50 zurückliegende Zeitschritte berücksichtigen, beschränken sich Zhou & Leschziner auf die Berücksichtigung des letzten Zeitschritts.

Annahme von homogener und isotroper Turbulenz (s. Hinze [124]) als Exponentialfunktionen der Form

$$R_{L,i} = e^{-\Delta t/T_{L,i}} \quad (4.47)$$

angesetzt werden, wobei $T_{L,i}$ das Lagrangesche integrale Zeitmaß der Turbulenz für die i -te Koordinatenrichtung darstellt. Berechnungen mit dem k - ε -Turbulenzmodell implizieren allerdings die Verwendung von nur einem Zeitmaß, so dass sich das Lagrangesche integrale Zeitmaß mit

$$T_L = C_T \frac{2}{3} k/\varepsilon \quad (4.48)$$

bestimmen lässt. Nach Untersuchungen von Sommerfeld [294] ist für C_T der Wert 0.24 zu setzen. Der Korrelationsvektor \mathbf{R}_L geht somit in den skalaren Wert R_L über.

Berlemont et al. [23] verwenden anstelle von Gl. 4.47 einen gemischten, d.h. nicht rein exponentiellen, Ansatz zur Beschreibung der Korrelationsfunktion. Es ist aber zu bemerken, dass streng genommen nur die rein exponentielle Form mit den Herleitungen konsistent ist.

Bei inhomogener Turbulenz kann es zu einer künstlichen Akkumulation von leichten Teilchen in Regionen mit geringer Turbulenzintensität führen (s. z.B. MacInnes & Bracco [189]). Legg & Raupach [175] haben daher Driftkorrekturen vorgeschlagen, um die Variationen der Geschwindigkeitsvarianz in inhomogener Turbulenz in Verbindung mit Druckgradienten zu berücksichtigen.

Wie bereits angedeutet, ist die Fluktuationengeschwindigkeit, welche ein Fluidteilchen während eines Zeitschritts erfährt, anders als die, die ein Feststoffteilchen erfährt. Die Lagrangesche Korrelationsfunktion kann nur die Korrelation zwischen zwei Zeitpunkten entlang der Bahn eines Fluidelements berücksichtigen, so dass eine zweite (Eulersche) Korrelationsfunktion verwendet wird, um die Ortsverschiebung $\Delta \mathbf{r}$ zwischen Fluid- und Feststoffteilchen während eines Zeitschritts Δt zu erfassen (s. Abb. 4.2).

Für die eingesetzte Eulersche Korrelation (oft auch Raum- oder Ortskorrelation genannt, da nur eine Ortsänderung betrachtet wird) gilt folgende Beziehung:

$$\mathcal{R}_{\mathcal{E}} = (\mathcal{R}_{\mathcal{E}})_{ij} \{\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j\} = R_{E,ij} \{\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j\} = \frac{\overline{u'_i(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}) u'_j(\mathbf{r})}}{\sqrt{\overline{u'^2(\mathbf{r})} \overline{u'^2(\mathbf{r})}}} \{\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j\} \quad (4.49)$$

Der Korrelationstensor $\mathcal{R}_{\mathcal{E}}$ hängt also sowohl vom Ort \mathbf{r} als auch von der Ortsverschiebung $\Delta \mathbf{r}$ ab, wobei analog zur Lagrangeschen Korrelation die Abhängigkeit von \mathbf{r} normalerweise nicht berücksichtigt werden muss. Vernachlässigt man auch hier die Kreuzkorrelationen, so reduziert sich der Tensor $\mathcal{R}_{\mathcal{E}}$ auf den Vektor \mathbf{R}_E :

$$\mathbf{R}_E = (\mathbf{R}_E)_i \mathbf{e}_i = R_{E,i} \mathbf{e}_i = (\mathcal{R}_{\mathcal{E}})_{ii} \mathbf{e}_i = R_{E,ii} \mathbf{e}_i \quad (4.50)$$

Die Ortskorrelation setzt also die Geschwindigkeitsfluktuationen des Fluids am neuen Partikelort in Beziehung zu den Geschwindigkeiten am neuen Ort des Fluidelements. Im Fall von lokal homogener und isotroper Turbulenz kann eine Koordinatentransformation vorgenommen werden. Damit lässt sich der Ortskorrelationsvektor

zwischen zwei beliebigen Punkten mit Hilfe von zwei skalaren Funktionen darstellen. Dies sind eine longitudinale und eine transversale Korrelationsfunktion $f(\Delta r)$ und $g(\Delta r)$ (s. Dryden [76] und von Kármán & Howarth [337]). Damit erhält man für den Korrelationstensor

$$\mathbf{R}_E = \frac{f(\Delta r) - g(\Delta r)}{(\Delta r)^2} \{\Delta \mathbf{r} \Delta \mathbf{r}\} + g(\Delta r) \mathbf{I} \quad (4.51)$$

bzw. für die Komponenten des Korrelationsvektors

$$R_{E,i} = \frac{f(\Delta r) - g(\Delta r)}{(\Delta r)^2} (\Delta r_i)^2 + g(\Delta r) \quad (4.52)$$

Hierbei steht Δr für den Betrag von $\Delta \mathbf{r}$, \mathbf{I} für den Einheitstensor und $\{\Delta \mathbf{r} \Delta \mathbf{r}\}$ für das dyadische Produkt zweier Vektoren.

Die folgenden Relationen wurden ermittelt aus Vergleichen mit experimentellen Ergebnissen (s. Frenkiel [98] und Rotta [271]) und sind gute Approximationen für die longitudinale und die transversale Korrelation im Fall lokal homogener und isotroper Turbulenz.

$$f(\Delta r) = e^{-\Delta r/L_E} \quad (4.53)$$

$$g(\Delta r) = \left(1 - \frac{\Delta r}{2L_E}\right) e^{-\Delta r/L_E} \quad (4.54)$$

Das Eulersche integrale Längenmaß am neuen Fluidteilchenort wird näherungsweise mit

$$L_E = C_L T_L \sqrt{\frac{2}{3} k} \quad (4.55)$$

bestimmt. Durch den Vergleich mit Experimenten wurde von Sommerfeld et al. [304] für C_L ein Wert von 3.0 ermittelt.

Durch eine Kombination der Zeit- und Ortskorrelation erhält man schließlich einen effektiven Korrelationsvektor (Sommerfeld [294] und Walklate [340]):

$$\mathbf{R}_P = R_L \mathbf{R}_E \quad (4.56)$$

bzw. $R_{P,i} = R_L R_{E,i}$ für dessen Komponenten.

Für die Berechnung der Fluidfluktationsgeschwindigkeit am neuen Partikelort in Abhängigkeit von den Daten am alten Partikelort ergibt sich somit die folgende Beziehung:

$$u'_{i,P}(t + \Delta t) = R_{P,i} u'_{i,P}(t) + \sqrt{1 - (R_{P,i})^2} \sigma_{u_i} \xi_{u_i} + (1 - R_{P,i}) T_L \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_j} \quad (4.57)$$

Der erste Term steht dabei für den korrelierten Anteil, der zweite für den zufälligen Anteil und der dritte für die Driftkorrektur. Die Korrektur lässt sich aus der Impulsgleichung ableiten und wurde eingeführt, um eine mittlere Driftbewegung der

Teilchen aus turbulenten Gebieten in Richtung weniger turbulenten Zonen zu vermeiden.

Validierungsberechnungen für das beschriebene Modell wurden bereits von Sommerfeld [294] unter Verwendung experimenteller Ergebnisse von Snyder & Lumley [290] und Wells & Stock [345] bei isotroper Gitterturbulenz sowie von Calabrese & Middleman [39] bei nichtisotroper Turbulenz durchgeführt und ausführlich diskutiert. Ferner wurde die Dispersion eines Fluidelements betrachtet und mit den theoretischen Ableitungen von Taylor [320] verglichen.

4.4 Rückwirkung der dispersen Phase auf die kontinuierliche Phase

Wenn sich der Impuls der dispersen Phase aufgrund der Krafteinwirkung des Fluids erhöht bzw. verringert, so muss sich aus Gründen der Impulserhaltung der Impuls des Fluids in der Umgebung der Teilchen ebenfalls ändern, nämlich verringern bzw. erhöhen. Ebenso kann die Anwesenheit von Teilchen die Turbulenz der Strömung je nach Massenbeladung und Größe der Teilchen sowohl anregen als auch dämpfen⁷.

⁷Bei experimentellen Untersuchungen einer horizontalen Rohrströmung mit moderater Teilchenkonzentration fand Zisselmar [358] eine Turbulenzanfächung in Wandnähe, während sich in der Rohrmitte keine Änderungen zeigten. Dies begründete er mit den kleineren Wirbeln in Wandnähe, welche eine maximale Wechselwirkung mit den Teilchen ermöglichen.

Neeße et al. [215] stellen bei ihren Untersuchungen mit gerührten Suspensionen eine starke Turbulenzdämpfung mit zunehmender Beladung und abnehmender Teilchengröße fest. Ähnliche Aussagen resultierten auch aus den Messungen von Svenka [314].

Die Experimente von Geisler [102] (Suspension im Rührbehälter) zeigten ebenfalls eine Turbulenzdämpfung in fast allen betrachteten Zonen bei einem Partikelvolumenanteil von 8% und mehr. Es gab aber auch Positionen mit einer Anfächung (z.B. unterhalb des Rührers im Bereich der Blattspitzen). Die Zonen maximaler Energiedissipation verschoben sich mit zunehmender Partikelbeladung in Richtung Behälterboden. Im Gegensatz zu Neeße et al. [215] fand Geisler auch einen Einfluss der Konzentration auf die turbulenten Längenmaße.

Nouri et al. [222] erklären die zunehmenden Dämpfungseffekte mit steigender Konzentration durch eine Vergrößerung der Längenmaße in Folge von steigender Suspensionsviskosität. Damit wird τ_P kleiner und die Teilchen können den Fluidschwankungen besser folgen, wodurch sich die Turbulenzanfächung aufgrund von Nachlaufeffekten reduziert.

Gore & Crowe [105] werteten eine Vielzahl von Experimenten (primär Gas-Feststoff Rohrströmungen) hinsichtlich Turbulenzbeeinflussung aus. Dabei fanden sie eine Dämpfung für $d/L_E < 0.1$ (ein Teil der Wirbelenergie wird auf die Teilchen übertragen) und eine Anfächung für größere Teilchen (diese erzeugen im Nachlauf kleinere Wirbel). Über die Stärke der Effekte war keine Aussage möglich, da sie sehr stark vom jeweiligen System abhängen.

Analoge Aussagen finden sich bei Hetsroni [123]. Auch er erhält eine Reduzierung der Wirbelenergie im Hochfrequenzbereich bei der Präsenz von kleinen Teilchen und eine Anfächung bei hinreichend großen Partikelreynoldszahlen (Hetsroni nannte in diesem Zusammenhang einen Schwellenwert von $Re_P = 110$).

Untersuchungen von Elghobashi & Truesdell [87] mit *DNS* und sehr kleinen Teilchen ($\tau_P \approx \tau_F$) führten allerdings zu abweichenden Schlussfolgerungen. Es wurden aber nur sehr geringe Konzentrationen betrachtet, so dass Partikel-Partikel-Kollisionen unberücksichtigt blieben. (Die

Nur bei stark verdünnten Zweiphasenströmungen ist der Einfluss der Teilchen auf das Fluid vernachlässigbar.

Die durch die einzelnen Teilchen verursachten Impulsänderungen können für die einzelnen Kontrollvolumina, d.h. für bestimmte finite Bilanzvolumina, aufintegriert bzw. -summiert und in Partikelquelltermen (s. Gl. 3.24) zusammenfasst werden. Dabei wird jeweils entlang des Partikelweges innerhalb des Volumens integriert und für alle Teilchen die das Bilanzgebiet durchqueren aufsummiert. Die Quellterme lassen sich mit einer modifizierten Version des *Particle-Source-in-Cell*-Verfahrens von Crowe et al. [54] berechnen. Es wird angenommen, dass die disperse Phase eine Massen- oder Impulsquelle oder -senke, bzw. eine Quelle für die turbulenten Größen darstellt. Bei den vorliegenden Untersuchungen kommen ausschließlich inerte Teilchen zum Einsatz, so dass keine Massenänderung durch chemische Reaktion oder Phasenwechsel zu berücksichtigen ist. Der Partikelquellterm in der Kontinuitätsgleichung (s. Gl. 3.24) kann somit zu Null gesetzt werden.

Die durch die Partikelbewegung auf das Fluid übertragene Impulsänderung innerhalb eines Zeitschritts errechnet sich mit der entsprechenden Änderung der Teilchengeschwindigkeiten. Durch Summation über alle Zeitschritte, welche in ein bestimmtes Kontrollvolumen fallen, wobei natürlich jedem Zeitschritt ein bestimmtes repräsentatives Teilchen⁸ zugeordnet ist (\implies Index k für die jeweiligen Teilcheneigenschaften), kann die Impulsänderung für ein bestimmtes Kontrollvolumen (mit dem Volumen V_{KV}) ermittelt werden. Durch die Mittelung⁹ über eine große Anzahl von Zeitschritten n_s im betrachteten Kontrollvolumen (dies geht einher mit einer großen Anzahl betrachteter Teilchen) errechnet sich somit ein statistisch signifikanter Partikelquellterm für die Impulsgleichung:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{U,P} &= \sum_{k=1}^{n_s} \mathbf{S}_{U,P,k} \\ &= -V_{KV}^{-1} \sum_{k=1}^{n_s} \dot{m}_{P,k} \left[(\mathbf{v}_k^{t_k + \Delta t_k} - \mathbf{v}_k^{t_k}) - (1 - \gamma_{\rho,k}) \mathbf{g} \Delta t_k \right] \end{aligned} \quad (4.58)$$

Der Massenfluss $\dot{m}_{P,k}$ erfasst dabei die Masse aller Teilchen, welche durch das repräsentative Teilchen symbolisiert werden. Im Falle eines geschlossenen Systems sind keine Massenflüsse gegeben, so dass für eine korrekte Massenbilanz $\dot{m}_{P,k}$ durch $N_{P,k} m_k t_{ref}^{-1}$ ersetzt werden muss. Dabei wird das Produkt aus Partikelmasse m und der Anzahl an realen Teilchen im Parcel N_P durch eine festzulegende Referenzzeit t_{ref} , welche dem Betrachtungszeitraum entspricht, dividiert. Ferner sind Gewichtungsfaktoren (entsprechend der Verweilzeit im jeweiligen Kontrollvolumen) zu

Modifikation der Turbulenz durch die Gegenwart einer dispersen Phase ohne Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen (*two-way coupling* - Crowe [52]) reicht nach Rizk & Elghobashi [268] aus, sofern $\varphi_P < 5 \cdot 10^{-4}$ und $\rho_P \gg \rho$ ist.) Eine Übertragung auf technische Systeme ist damit schwierig.

⁸In der internationalen Literatur werden die repräsentativen Teilchen, welche ja Teilchenkollektive darstellen, oft auch als Parcel oder Cluster bezeichnet (vgl. Abschnitt 5.2). In der vorliegenden Arbeit werden die verschiedenen Begriffe als gleichwertig verwendet.

⁹Details zur verwendeten Ensemble-Mittelung sind in Abschnitt 5.2.4 zusammengestellt.

berücksichtigen, wenn Teilchen innerhalb eines Zeitschritts Kontrollvolumengrenzen überqueren (vgl. Abschnitt 5.2.4).

Äußere Kräfte, wie die Schwer- und Auftriebskraft, sind unabhängig von der Strömung und tragen daher nicht zur Impulsänderung des Fluids bei. Sie müssen somit aus der Betrachtung herausgenommen werden.

Der Quellterm für die Erhaltungsgleichung der turbulenten kinetischen Energie lässt sich durch zeitliche Mittelung der Navier-Stokes-Gleichung exakt ableiten (s. z.B. Shuen et al. [287]) und lautet:

$$S_{k,P} = \overline{\mathbf{u} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{U},\mathbf{P}}} - (\mathbf{U} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{U},\mathbf{P}}) \quad (4.59)$$

wobei der Term der gemittelten Momentanwerte durch eine Summe angenähert werden kann.

$$\overline{\mathbf{u} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{U},\mathbf{P}}} = n_s^{-1} \sum_{k=1}^{n_s} (\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{U},\mathbf{P},k}) \quad (4.60)$$

Die Modellierung des Partikelquellterms für die Dissipationsrate basiert auf Arbeiten von Desjonqueres [71] und erfolgt analog zur Vorgehensweise bei der Turbulenzmodellierung (Modellierung von ε in der k -Gleichung). Somit erhält man für den Partikelquellterm:

$$S_{\varepsilon,P} = C_3 \varepsilon k^{-1} S_{k,P} \quad (4.61)$$

Die Modellkonstante wird nach Squires & Eaton [307] mit $C_3 = 1.1$ angenommen. Es muss erwähnt werden, dass für die Modellkonstante in der Literatur je nach Anwendungsfall stark streuende Zahlenwerte zu finden sind. Eine gute Übersicht (auch bzgl. alternativer Modellierungen) bietet hier die Arbeit von Kohnen [157].

4.5 Partikel-Partikel-Kollisionen

Die Bedeutung von Partikel-Partikel-Kollisionen hängt im wesentlichen von der Anzahlkonzentration der Teilchen sowie der Partikelgeschwindigkeitsfluktuationen ab. Bei stark verdünnten Zweiphasenströmungen können Partikel-Partikel-Wechselwirkungen vernachlässigt werden, mit zunehmender Anzahl an Teilchen in einem bestimmten Volumen sowie mit zunehmenden Fluktuationengeschwindigkeiten steigt die Bedeutung der Partikel-Partikel-Kollisionen und der resultierende Energieverlust im Falle von nicht vollständig elastischen Kollisionen muss berücksichtigt werden. So geben z.B. Oesterlé & Petitjean [227] als Grenzwert bei Gas-Feststoff-Strömungen eine Beladung von 1 an. Aber auch schon bei moderaten Beladungen können Partikel-Partikel-Kollisionen den Charakter einer mehrphasigen Strömung entscheidend prägen. Eine aktuelle Analyse von Kollisionseffekten bei turbulenter Gas-Feststoff Strömung im horizontalen Kanal findet sich z.B. bei Sommerfeld & Kussin [301][305]. Auch bei dieser Untersuchung von Partikel-Wand-Kollisionen (die Wandrauigkeit wurde berücksichtigt variiert) sowie Partikel-Partikel-Kollisionen (bei Variation der Teilchengröße und der Beladung) wurde die

große Bedeutung der Kollisionseffekte für das Partikelverhalten (wie auch bereits von Oesterlé & Petitjean [227] sowie Sommerfeld [306]) demonstriert.

Durch Partikel-Partikel-Kollisionen wird die Teilchenverteilung in der Regel gleichmäßig (s. z.B. Tanaka & Tsuji [318] oder Oesterlé & Petitjean [227]), d.h. es liegt eine erhöhte Dispersion vor. Vor Wänden kann es zu der Ausbildung einer Art Pufferzone kommen, wenn bei hoher Teilchenkonzentration aufgrund sehr vieler Partikel-Wand-Kollisionen eine sehr breite Streuung der Partikelgeschwindigkeiten vorliegt und damit verstärkt Partikel-Partikel-Kollisionen eintreten (s. Oesterlé & Petitjean [227]). Auch die Erosion an Wänden kann durch Partikel-Partikel-Kollisionen verändert werden. Durch die statistische Umverteilung der Auftreffwinkel und -geschwindigkeiten an der Wand kann die Erosion verstärkt werden. Bei hohen Beladungen können Abschirmeffekte durch rückprallende Teilchen die Aufprallgeschwindigkeiten auf der Wand und damit den Abtrag reduzieren (s. Kitron et al. [153]).

Für die direkte Berechnung von Partikel-Partikel-Kollisionen mit dem Lagrange-schen Verfahren (s. z.B. die deterministische Simulation von Tanaka & Tsuji [318]¹⁰ oder von Lun & Liu [185]¹¹) ist die gleichzeitige Verfolgung aller vorliegenden Teilchen im Strömungsgebiet nötig. Eine Zusammenfassung mehrerer realer Teilchen mit gleichen Eigenschaften zu repräsentativen Teilchen sowie eine stationäre Fluidberechnung ist nicht möglich, da die physikalischen Verhältnisse exakt behandelt werden. Dies bedeutet, je höher die Beladung der Strömung und je größer die betrachtete Geometrie, desto mehr Teilchen befinden sich im Berechnungsgebiet und desto mehr Trajektorien müssen gleichzeitig bestimmt werden. Zur Detektion von Kollisionen müssen zu jedem Zeitschritt für alle Kontrollvolumina jeweils alle möglichen Kollisionspaare überprüft werden, ob es zu einer Kollision kommt (d.h. ob sich ihre Flugbahnen kreuzen) oder nicht. Die zur Paarungsprüfung in einem Kontrollvolumen mit N Teilchen benötigte Rechenzeit ist somit proportional zu $\frac{1}{2}N(N-1)$. Damit wird klar, dass bereits bei sehr moderaten Beladungen die Grenzen der zur Zeit vorliegenden Computerkapazitäten überschritten werden und das Verfahren nur im akademischen Bereich von Bedeutung ist.

Zur Vermeidung des Hauptnachteils der deterministischen Simulation, nämlich die hohe Anzahl an simultan zu berechnenden Teilchenbahnen, lässt sich eine Monte-Carlo-Simulation einsetzen (s. z.B. Kitron et al. [153][154], Tanaka et al. [317], Wasen [342] oder Yonemura et al. [352]) Dabei wird mit repräsentativen Teilchen gearbeitet und die Partikel-Partikel-Kollisionen mit einem stochastischen Algorithmus in

¹⁰Bei den Berechnungen wurde eine von Tanaka experimentell untersuchte vertikale Rohrströmung simuliert. Aufgrund des geringen Rohrdurchmessers ($D_R = 40$ mm), der relativ großen Teilchen ($d = 0.4$ mm bzw. $d = 1.5$ mm) und der Betrachtung eines periodischen Rohrabschnitts konnte die Anzahl an simultan zu betrachtenden Teilchen auf 800 bzw. 200 reduziert werden. Die bei den Experimenten gefundene verstärkte Dispersion durch die Partikel-Partikel-Kollisionen konnte durch die Simulation reproduziert werden.

¹¹Auch bei der Arbeit von Lun & Liu wurden periodische Randbedingungen benutzt um das Strömungsgebiet klein zu halten und damit die Anzahl an simultan zu betrachtenden Teilchen zu minimieren. Die Autoren berichten von Berechnungen mit 500 Partikeln.

Analogie zur Berechnung verdünnter Gasströmungen ermittelt. Für eine zuverlässige Statistik sind aber immer noch viele Teilchen simultan zu verfolgen, so dass die Nutzung von Parallelrechnern ratsam ist (s. Wassen [342]). Ein großer Vorteil ist, dass die Anwendbarkeit auf instationäre Strömungen erhalten bleibt. Auch die Bildung von temporären Teilchenanhäufungen an bestimmten Orten des Strömungsgebietes lässt sich aufgrund der simultanen Berechnung erfassen.

Für praktische Anwendungen im stationären Bereich überwiegen allerdings in der Regel nach wie vor die Nachteile, so dass in den meisten Fällen ein anderer Weg, nämlich der der Modellierung, eingeschlagen wird. Im Folgenden soll daher die stochastische Modellierung näher beschrieben werden, welche auch bei den vorliegenden Berechnungen eingesetzt wurde.

4.5.1 Stochastische Modellierung - Überblick

Ein übliches Vorgehen zur Modellierung von Kollisionen in moderat dichten Zweiphasenströmungen besteht darin, während der Berechnung der Trajektorien der repräsentativen Teilchen mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit (welche von den lokal vorliegenden Konzentrationen und Geschwindigkeiten abhängt) künstliche Partikel-Partikel-Kollisionen (wobei die Dynamik der Kollision mit dem generierten fiktiven Teilchen exakt berechnet wird) einzuführen. Diese Art der Berechnung von dispersen Zweiphasenströmungen wurde bereits von einer Vielzahl von Wissenschaftlern beschrieben und mit Erfolg eingesetzt (z.B. Crowe et al. [55], Huber [130][131][132], Oesterlé & Petitjean [227] und Sommerfeld [306][293][294][295][296][299]. Der große Vorteil der Modellierung besteht in der Unabhängigkeit der zu berechneten Trajektorien von der tatsächlich vorliegenden Konzentration.

Im folgenden soll nun das stochastische Modell von Sommerfeld [296], welches auch bei den vorliegenden Untersuchungen verwendet wurde, näher beschrieben werden. Im wesentlichen sind damit für die Berechnung von Partikel-Partikel-Wechselwirkungen die folgenden Schritte nötig:

1. Generierung eines fiktiven möglichen Stoßpartners mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen für die Teilchengröße und -geschwindigkeit.
(s. Abschnitt 4.5.2)
2. Ermittlung der Wahrscheinlichkeit für eine Kollision des betrachteten Teilchens mit dem generierten möglichen Stoßpartner innerhalb des betrachteten Zeitschritts.
(s. Abschnitt 4.5.3)
3. Entscheidung ob eine Kollision vorliegt oder nicht. Die beiden folgenden Punkte sind nur im Falle einer Kollision auszuführen.
(s. Abschnitt 4.5.4)

4. Generierung eines zufälligen Kontaktpunktes der beiden Teilchen bei der Kollision.
(s. Abschnitt 4.5.5)
5. Berechnung des Stoßvorgangs mit Hilfe eines geeigneten Kollisionsoperators.
(s. Abschnitt 4.5.6)

Dabei wird in mehreren Schritten auf statistische Werte zurückgegriffen, welche nur durch eine bereits vorliegende (vorläufige) Berechnung ermittelt werden können. Dies verdeutlicht den iterativen Charakter der Modellierung.

4.5.2 Generierung eines möglichen Stoßpartners

Für jeden Zeitschritt bei der Berechnung der Trajektorie eines Teilchens A wird ein fiktives Teilchen B anhand vorher bestimmter Statistiken generiert. Dazu ist sowohl die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Teilchengröße als auch für die Teilchengeschwindigkeit am aktuellen Ort nötig. Im Gegensatz zu anderen Verfahren wird beim Modell von Sommerfeld [296] die Geschwindigkeitskorrelation zwischen den Teilchen A und B berücksichtigt. Sie hängt im Wesentlichen vom Strömungsfolgevermögen der Teilchen, charakterisiert durch die Partikelrelaxationszeit τ_P (s. Abschnitt 4.1 und 4.2.2), und den turbulenten Eigenschaften der Strömung, beschreibbar z.B. durch das integrale turbulente Zeitmaß T_L (s. Abschnitt 4.3), ab. Es liegt daher nahe, eine Beschreibung anhand der Partikel-Stokeszahl $St = \tau_P/T_L$ vorzunehmen. Für die beiden Grenzfälle $St \rightarrow 0$, d.h. die Teilchen sind klein im Vergleich zu den Skalen der Turbulenz und folgen somit allen turbulenten Schwankungen (vollständige Korrelation), und $St \rightarrow \infty$, d.h. die Teilchenbewegung wird nicht durch turbulente Schwankungen beeinflusst womit weder eine Korrelation zwischen Fluid und Teilchen noch zwischen verschiedenen Teilchen vorliegt, lassen sich theoretische Kollisionsfrequenzen bestimmen (s. Sommerfeld [296]). Bei praktischen Anwendungen liegt aber normalerweise nur eine partielle Korrelation vor, d.h. keiner der beiden Grenzfälle ist erfüllt.

Bei der betrachteten Modellierung wird die Partikelgeschwindigkeit des fiktiven Teilchens B analog zum Langevin-Gleichungsmodell für die Teilchendisersion (s. Abschnitt 4.3) über folgende Gleichung für die einzelnen Geschwindigkeitskomponenten mit der Geschwindigkeit von Teilchen A korreliert:

$$v'_{i,B} = R_{AB} v'_{i,A} + (1 - R_{AB}^2)^{1/2} \sigma_{v_{i,B}} \xi_i \quad (4.62)$$

Dabei ergibt sich $v'_{i,A}$ durch Subtraktion des statistischen Mittelwertes dieser Teilchenart von der aktuellen Geschwindigkeit. Die Standardabweichung der Geschwindigkeit der Partikelart B am aktuellen Ort ($\sigma_{v_{i,B}}$) wurde in der vorausgegangenen Iteration bestimmt. Ferner steht ξ_i für eine Gauß-verteilte Zufallszahl mit einem Mittelwert von Null und einer Standardabweichung von 1.

Somit besteht die Bestimmungsgleichung 4.62 aus einem korrelierten Anteil und einem zufälligen Anteil. Die Gewichtung erfolgt über die Korrelationsfunktion R_{AB} , welche von Sommerfeld [296] mit Hilfe von *LES*-Simulationen zu

$$R_{AB} = \exp(-0.55 \text{St}_B^{0.4}) \quad (4.63)$$

bestimmt wurde. Die Stokeszahl ist dabei auf die Eigenschaften von Teilchen B zu beziehen.

Mit dem Durchmesser und der Geschwindigkeit des fiktiven Teilchens ist dieses zunächst ausreichend spezifiziert um mit dem nächsten Schritt fortzufahren.

4.5.3 Wahrscheinlichkeit für eine Kollision

Die Wahrscheinlichkeit für eine Kollision zwischen zwei Teilchen A und B lässt sich mit Hilfe der kinetischen Gastheorie bestimmen. Grundsätzliche Überlegungen zur Ableitung der Kollisionswahrscheinlichkeit P_{PPK} findet man z.B. bei Wedler [344] oder Frohn [100]. Entsprechend berechnet sich die Kollisionswahrscheinlichkeit P_{PPK} nach Gl. 4.64 in Abhängigkeit von den Teilchendurchmessern d_A und d_B , der relativen Teilchengeschwindigkeit $\mathbf{v}_{AB} = \mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B$, dem betrachteten Zeitintervall Δt sowie der Partikelanzahldichte n_P .

$$P_{PPK} = \underbrace{\frac{1}{4}\pi (d_A + d_B)^2}_{\text{Kollisionszylinder- fläche}} \underbrace{|\mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B| \Delta t}_{\text{Kollisionszylinder- länge}} n_P \quad (4.64)$$

In der Literatur finden sich auch Formulierungen mit der Maxwellschen freien Weglänge, so dass bei der Kollisionswahrscheinlichkeit ein zusätzlicher Faktor von $\sqrt{2}$ auftritt. Dieser resultiert aus der Berücksichtigung der Bewegungsrichtungsverteilung der einzelnen Moleküle eines Gases. Bei Partikel-Partikel-Kollisionen werden aber die Geschwindigkeiten sowie die Teilchentrajektorien bis zur Kollision als bekannt vorausgesetzt, so dass keine Verteilung zu berücksichtigen ist und der Faktor $\sqrt{2}$ nicht eingeführt werden darf.

Häufig wird in diesem Zusammenhang von einem Kollisionszylinder gesprochen, dessen Durchmesser durch die Teilchengrößen und dessen Länge mit dem Produkt aus relativer Geschwindigkeit und Zeitintervall bestimmt werden. In Abb. 4.3 ist dieser schematisch dargestellt.

Dabei ist zu erwähnen, dass der Zeitschritt Δt zum einen hinreichend groß sein muss, um eine statistische Betrachtung zu ermöglichen, und zum anderen klein genug, um die Dominanz von binären Kollisionen zu gewährleisten. Ferner ist zu beachten, dass innerhalb eines Zeitschritts mit ausreichender Sicherheit maximal eine Kollision des betrachteten Teilchens A stattfindet.

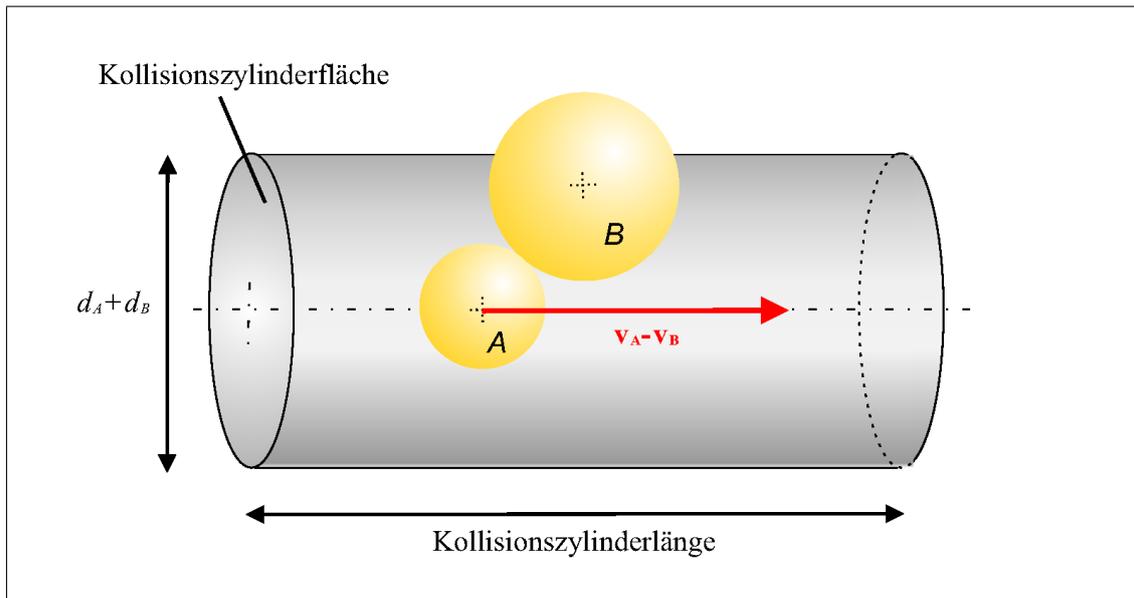


Abbildung 4.3: Schematische Darstellung eines binären Kollisionsvorgangs

4.5.4 Entscheidung ob Kollision vorliegt oder nicht

Zur Entscheidung, ob eine Kollision zwischen Teilchen A und dem fiktiven Teilchen B vorliegt oder nicht, genügt ein sehr einfaches Verfahren. Mit Hilfe einer Zufallszahl ζ , welche im Intervall $[0; 1]$ gleichverteilt vorliegt, wird entschieden ob es zu einer Kollision kommt oder nicht. Ist $\zeta < P_{PPK}$, so wird eine Kollision berechnet, d.h. die weiteren Schritte werden ausgeführt. Findet keine Kollision statt, so werden sie übersprungen.

4.5.5 Generierung des Kollisionskontaktpunktes

Damit es im betrachteten Zeitschritt zu einer Kollision zwischen Teilchen A und B kommen kann, muss sich das fiktive Teilchen (bzw. um genau zu sein der Schwerpunkt des Teilchens), dessen genaue Position bisher noch nicht spezifiziert wurde, innerhalb des unter Abschnitt 4.5.3 beschriebenen geraden Kollisionszylinder befinden. Zur Bestimmung der im nächsten Schritt benötigten Koordinaten des Kontaktpunktes genügt es allerdings, die Position des fiktiven Teilchens in einem beliebigen senkrechten Schnitt des Zylinders zu kennen. Die Generierung der Position von Teilchen B reduziert sich also auf die Ermittlung einer zufälligen Position in einer Kreisfläche mit Durchmesser $d_A + d_B$, welche senkrecht auf \mathbf{v}_{AB} steht und ihren Mittelpunkt bei $\mathbf{x}_{P,A}$ hat.

Die Beschreibung der Kreisfläche kann dabei über zwei Basisvektoren \mathbf{b}_1 und \mathbf{b}_2

erfolgen, welche folgenden Beziehungen gehorchen:

$$(\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{b}_2) = (\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{v}_{AB}) = (\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{v}_{AB}) = 0 \quad (4.65)$$

$$[\mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2] = \mathbf{v}_{AB} |\mathbf{v}_{AB}|^{-1} \quad (4.66)$$

$$|\mathbf{b}_1| = |\mathbf{b}_2| = 1 \quad (4.67)$$

wobei die Richtung von \mathbf{b}_1 auf der Kreisfläche beliebig ist. Zur Spezifikation lässt sich z.B. ein beliebiger Punkt \mathbf{x}_{bel} im Raum wählen, mit der einzigen Bedingung $([\mathbf{x}_{\text{bel}} - \mathbf{x}_{P,A}] \cdot \mathbf{v}_{AB}) \neq 0$, um dann \mathbf{b}_1 zu bestimmen.

$$\mathbf{b}_1 = \frac{[[\mathbf{x}_{\text{bel}} - \mathbf{x}_{P,A}] \times \mathbf{v}_{AB}]}{|[[\mathbf{x}_{\text{bel}} - \mathbf{x}_{P,A}] \times \mathbf{v}_{AB}]|} \quad (4.68)$$

Damit reduziert sich die Generierung eines Punktes in der Kreisfläche auf

$$\mathbf{x}_{\text{Kreis}} = \mathbf{x}_{P,A} + \frac{1}{2}(d_A + d_B)[\zeta_1 \mathbf{b}_1 + \zeta_2 \mathbf{b}_2] \quad (4.69)$$

mit zwei gleichverteilten Zufallszahlen ζ_1 und ζ_2 im Intervall $[-1; 1]$. Zu beachten ist, dass die Zufallszahlen die Bedingung $\zeta_1^2 + \zeta_2^2 < 1$ erfüllen, da der Punkt sonst nicht in der Kreisfläche liegt. Im Mittel wird also eine Wiederholung der Zufallszahlengenerierung in 21% aller Fälle nötig sein.

Da der Kontaktpunkt im Moment des Stoßes auf der halben Oberfläche von Teilchen A bzw. der Schwerpunkt von Teilchen B auf der halben Oberfläche der Kugel mit Radius $\frac{1}{2}(d_A + d_B)$ und Mittelpunktskoordinate $\mathbf{x}_{P,A}$ liegt (wobei jeweils die Hälfte im Lee-Bereich bei der Kollision nicht erreicht werden kann), berechnen sich die Koordinaten des Schwerpunkts von Teilchen B durch Projektion der Koordinaten im Kreis $\mathbf{x}_{\text{Kreis}}$ auf die Kugeloberfläche:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{P,B} &= \mathbf{x}_{\text{Kreis}} + \frac{1}{2}(d_A + d_B)(1 - \zeta_1^2 - \zeta_2^2)^{1/2} \mathbf{v}_{AB} |\mathbf{v}_{AB}|^{-1} \\ &= \mathbf{x}_{P,A} + \frac{1}{2}(d_A + d_B) \left[\zeta_1 \mathbf{b}_1 + \zeta_2 \mathbf{b}_2 + (1 - \zeta_1^2 - \zeta_2^2)^{1/2} \mathbf{v}_{AB} |\mathbf{v}_{AB}|^{-1} \right] \end{aligned} \quad (4.70)$$

bzw. für den Kollisionskontaktpunkt:

$$\mathbf{x}_K = \mathbf{x}_{P,A} + \frac{1}{2} d_A \left[\zeta_1 \mathbf{b}_1 + \zeta_2 \mathbf{b}_2 + (1 - \zeta_1^2 - \zeta_2^2)^{1/2} \mathbf{v}_{AB} |\mathbf{v}_{AB}|^{-1} \right] \quad (4.71)$$

Die noch zu definierenden Rotationsgeschwindigkeiten von Teilchen B werden analog zu den Translationsgeschwindigkeiten bestimmt (s. Gl. 4.62). Allerdings wird bei der Rotation eine vollständige Unkorreliertheit angenommen, d.h. $R_{AB} = 0$.

4.5.6 Kollisionsoperator

Zur Bestimmung der Teilcheneigenschaften nach einer binären Kollision in Abhängigkeit von den Eigenschaften vor der Kollision sowie der vorliegenden Geometrie und den Materialkonstanten wird ein Kollisionsoperator benötigt. Eine sehr

ausführliche Übersicht möglicher Kollisionsoperatoren aufgrund unterschiedlicher Ansätze wurde z.B. von Schäfer [280] zusammengestellt.

Allgemein lassen sich Partikel-Partikel-Kollisionen (schiefe Stöße) in Abhängigkeit vom Schiefeparameter, welcher ein Maß für die Abweichung von einer frontalen Kollision darstellt und im folgenden (s. Gl. 4.99) noch genau spezifiziert wird, in drei Kategorien einteilen:

1. Die Teilchen gleiten im Kontaktpunkt während des gesamten Kollisionsprozesses (große Schiefeparameter).
2. Während der Kollision kommt es zum Übergang von Gleiten zu Rollen bzw. Haften (mittlere Schiefeparameter).
3. Es liegt direkt ab Beginn der Kollision Haftreibung, d.h. Rollen, vor (kleine Schiefeparameter).

Ein physikalischer Kollisionsoperator ergibt sich auf Basis des Waltonschen Kollisionsmodells (s. Crowe et al. [55], Schäfer [280] oder Sommerfeld [294]), bei dem vereinfachend die zweite Kategorie von Stößen vernachlässigt wird. Somit lassen sich die Impulserhaltungsgleichungen für den Stoßvorgang wie folgt formulieren:

$$m_A [\mathbf{v}_A^* - \mathbf{v}_A] = \mathbf{J} \quad (4.72)$$

$$m_B [\mathbf{v}_B^* - \mathbf{v}_B] = -\mathbf{J} \quad (4.73)$$

$$I_{P,A} [\boldsymbol{\omega}_{P,A}^* - \boldsymbol{\omega}_{P,A}] = \frac{1}{2} d_A [\mathbf{e}_n \times \mathbf{J}] \quad (4.74)$$

$$I_{P,B} [\boldsymbol{\omega}_{P,B}^* - \boldsymbol{\omega}_{P,B}] = \frac{1}{2} d_B [\mathbf{e}_n \times \mathbf{J}] \quad (4.75)$$

Der Impuls, welcher auf Teilchen A wirkt bzw. von Teilchen B auf Teilchen A übergeht wird, dabei mit \mathbf{J} bezeichnet. Die Teilcheneigenschaften nach der Kollision sind mit * markiert.

Für die Lösung des Systems werden folgende Randbedingungen angenommen:

1. Die kollidierenden Teilchen sind kugelförmig.
2. Es liegt maximal eine moderate Inelastizität der Teilchen vor, d.h. die Geometrie der Teilchen kann während des gesamten Kollisionsvorgangs als konstant angenommen werden und eine instationäre Deformation erscheint nicht explizit in den beschreibenden Gleichungen.
3. Die Kontaktfläche während der Kollision ist sehr klein.
4. Das Gleiten an den Teilchenoberflächen kann durch das Coulombsche Reibungsgesetz beschrieben werden.
5. Kommt das Gleiten zwischen den Teilchen während des Kollisionsvorgangs zum Stillstand, so liegt auch im folgenden kein Gleiten vor.

Die Beschreibung der Kollision vereinfacht sich durch die Definition einer normalen Koordinate, welche im Zeitpunkt des Kontaktes vom Schwerpunkt des Teilchens A zum Schwerpunkt von Teilchens B zeigt. Der normale Einheitsvektor \mathbf{e}_n hat somit die folgende Definition:

$$\mathbf{e}_n = \frac{\mathbf{x}_{P,B} - \mathbf{x}_{P,A}}{|\mathbf{x}_{P,B} - \mathbf{x}_{P,A}|} = \frac{\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_{P,A}}{|\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_{P,A}|} \quad (4.76)$$

Bei kugelförmig angenommenen Teilchen berechnet sich das Massenträgheitsmoment jeweils mit:

$$I_P = \frac{1}{10} m d^2 \quad (4.77)$$

Die relativen Geschwindigkeiten zwischen den beiden Teilchen vor und nach der Kollision werden mit \mathbf{v}_{AB} und \mathbf{v}_{AB}^* bezeichnet.

$$\mathbf{v}_{AB} = \mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B \quad (4.78)$$

$$\mathbf{v}_{AB}^* = \mathbf{v}_A^* - \mathbf{v}_B^* \quad (4.79)$$

Unter Berücksichtigung der Teilchenrotation erhält man für die relative Geschwindigkeit der beiden Teilchen am Kontaktpunkt (zu Beginn des Stoßvorgangs):

$$\mathbf{v}_{AB,K} = \mathbf{v}_{AB} - \frac{1}{2} d_A [\mathbf{e}_n \times \boldsymbol{\omega}_{P,A}] - \frac{1}{2} d_B [\mathbf{e}_n \times \boldsymbol{\omega}_{P,B}] \quad (4.80)$$

Diese lässt sich nun in eine normale und eine tangentielle Komponente aufspalten.

$$\mathbf{v}_{AB,K} = \mathbf{v}_{AB,K,n} + \mathbf{v}_{AB,K,t} \quad (4.81)$$

Da die beiden letzten Terme von Gl. 4.80 keinen Beitrag in normaler Richtung liefern, gilt für die entsprechende Geschwindigkeit im Kontaktpunkt:

$$\mathbf{v}_{AB,K,n} = v_{AB,K,n} \mathbf{e}_n = (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) \mathbf{e}_n \quad (4.82)$$

Für die tangentielle Komponente ergibt sich somit aufgrund von Gl. 4.80, - 4.82:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{AB,K,t} &= \mathbf{v}_{AB,K} - \mathbf{v}_{AB,K,n} = v_{AB,K,t} \mathbf{e}_t \\ &= \mathbf{v}_{AB} - \frac{1}{2} d_A [\mathbf{e}_n \times \boldsymbol{\omega}_{P,A}] - \frac{1}{2} d_B [\mathbf{e}_n \times \boldsymbol{\omega}_{P,B}] \\ &\quad - (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) \mathbf{e}_n \end{aligned} \quad (4.83)$$

Dabei definiert sich der tangentielle Einheitsvektor im Kontaktpunkt durch:

$$\mathbf{e}_t = \frac{\mathbf{v}_{AB,K,t}}{|\mathbf{v}_{AB,K,t}|} = \frac{\mathbf{v}_{AB,K,t}}{v_{AB,K,t}} \quad (4.84)$$

Analog zur relativen Geschwindigkeit lässt sich auch der auf Teilchen A wirkende Impuls unterteilen:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_n + \mathbf{J}_t = J_n \mathbf{e}_n + J_t \mathbf{e}_t \quad (4.85)$$

Durch Einführung des normalen Restitutionskoeffizienten $s_{n,PPK}$ (oft auch als Stoßzahl bezeichnet) wird eine Beziehung zwischen der normalen relativen Geschwindigkeit der Teilchen vor und nach dem Stoß hergestellt.

$$s_{n,PPK} = - \frac{(\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}^*)}{(\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB})} \quad (4.86)$$

Eine derartige Betrachtung ist nötig, da in der Realität normalerweise die Hertzsche Theorie nicht gilt, d.h. keine elastischen Stöße vorliegen. Die Energiedissipation bei der Kollision spiegelt sich somit in Restitutionskoeffizienten kleiner eins wider. Gründe für die Energieverluste finden sich bei der plastischen Verformung der Teilchen, Viskoelastizität sowie elastischen Wellen im Material.

Unter Berücksichtigung von Gl. 4.78 und 4.79 liefert die Kombination von Gl. 4.72 und 4.73 die folgende Beziehung für die relative Geschwindigkeit nach der Kollision:

$$\mathbf{v}_{\mathbf{AB}}^* = \mathbf{v}_{\mathbf{AB}} + (m_A + m_B) m_A^{-1} m_B^{-1} \mathbf{J} = \mathbf{v}_{\mathbf{AB}} + m_{eff}^{-1} \mathbf{J} \quad (4.87)$$

wobei $m_{eff} = m_A m_B (m_A + m_B)^{-1}$ für die effektive Partikelmasse steht.

Betrachtet man nur die normale Komponente, dies entspricht einer Multiplikation von Gl. 4.87 mit \mathbf{e}_n , und berücksichtigt die Definition des normalen Restitutionskoeffizienten (Gl. 4.86), so erhält man für J_n :

$$J_n = (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{J}) = -(1 + s_{n,PPK}) m_{eff} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{AB}}) \quad (4.88)$$

Gleiten die beiden Teilchen im Kontaktpunkt während der gesamten Kollisionsphase, so spricht man von einem Gleitstoß und für die tangential Impulskomponente gilt aufgrund des Coulombschen Reibungsgesetzes

$$|J_t| = \mu_{d,PPK} |J_n| \quad (4.89)$$

mit dem dynamischen Reibungsbeiwert $\mu_{d,PPK}$. Da die Reibung stets der Bewegungsrichtung entgegengesetzt ist ergibt sich für den Gesamtimpuls:

$$\mathbf{J} = J_n \mathbf{e}_n + J_t \mathbf{e}_t = -(1 + s_{n,PPK}) m_{eff} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{AB}}) [\mathbf{e}_n - \mu_{d,PPK} \mathbf{e}_t] \quad (4.90)$$

Die folgenden Überlegungen dienen nun der Ermittlung eines Entscheidungskriteriums, um zu erfassen, ob tatsächlich ein Gleitstoß oder etwa ein Haftstoß vorliegt.

Analog zu Gl. 4.80 gilt für die relative Geschwindigkeit im Kontaktpunkt nach dem Stoß:

$$\mathbf{v}_{\mathbf{AB},\mathbf{K}}^* = \mathbf{v}_{\mathbf{AB}}^* - \frac{1}{2} d_A [\mathbf{e}_n \times \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{P},\mathbf{A}}^*] - \frac{1}{2} d_B [\mathbf{e}_n \times \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{P},\mathbf{B}}^*] \quad (4.91)$$

Ersetzt man nun in Gl. 4.91 $\mathbf{v}_{\mathbf{AB}}^*$ durch Gl. 4.87 und $\mathbf{v}_{\mathbf{AB}}$ mit Hilfe von Gl. 4.80 so erhält man unter Berücksichtigung von Gl. 4.85 die folgende Beziehung:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{\mathbf{AB},\mathbf{K}}^* &= \mathbf{v}_{\mathbf{AB},\mathbf{K}} + m_{eff}^{-1} (J_n \mathbf{e}_n + J_t \mathbf{e}_t) \\ &\quad - \frac{1}{2} d_A [\mathbf{e}_n \times (\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{P},\mathbf{A}}^* - \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{P},\mathbf{A}})] \\ &\quad - \frac{1}{2} d_B [\mathbf{e}_n \times (\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{P},\mathbf{B}}^* - \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{P},\mathbf{B}})] \end{aligned} \quad (4.92)$$

Unter Verwendung von Gl. 4.74, 4.75 und 4.77 sowie des Entwicklungssatzes lassen sich die letzten beiden Terme umformen und es ergibt sich:

$$\mathbf{v}_{\mathbf{AB},\mathbf{K}}^* = \mathbf{v}_{\mathbf{AB},\mathbf{K}} + m_{eff}^{-1} (J_n \mathbf{e}_n + \frac{7}{2} J_t \mathbf{e}_t) \quad (4.93)$$

Die relativen Geschwindigkeiten werden entsprechend Gl. 4.81 durch

$$\mathbf{v}_{AB,K} = \mathbf{v}_{AB,K,n} + \mathbf{v}_{AB,K,t} = v_{AB,K,n} \mathbf{e}_n + v_{AB,K,t} \mathbf{e}_t \quad (4.94)$$

$$\mathbf{v}_{AB,K}^* = \mathbf{v}_{AB,K,n}^* + \mathbf{v}_{AB,K,t}^* = v_{AB,K,n}^* \mathbf{e}_n + v_{AB,K,t}^* \mathbf{e}_t \quad (4.95)$$

ersetzt. Ferner wird \mathbf{e}_t ausgeklammert und durch Gl. 4.84 ersetzt. Mit entsprechender Umformung und Beachtung von Gl. 4.87 ergibt sich somit:

$$\mathbf{v}_{AB,K,t}^* = \left(v_{AB,K,t} + \frac{7}{2} m_{eff}^{-1} J_t \right) \frac{\mathbf{v}_{AB,K,t}}{v_{AB,K,t}} \quad (4.96)$$

Für ein kontinuierliches Gleiten während des gesamten Kollisionsvorgangs muss somit der Term in Klammern positiv sein.

Mit dem tangentialen Restitutionskoeffizienten $s_{t,PPK}$

$$s_{t,PPK} = - \frac{(\mathbf{e}_t \cdot \mathbf{v}_{AB,K,t}^*)}{(\mathbf{e}_t \cdot \mathbf{v}_{AB,K,t})} \quad (4.97)$$

(welcher bei ideal glatten, d.h. reibungsfreien, Teilchen zu Eins wird) und einer Multiplikation von Gl. 4.96 mit \mathbf{e}_t sowie entsprechenden Umformungen unter Nutzung von Gl. 4.89 und 4.88 resultiert dann:

$$\frac{v_{AB,K,t}}{v_{AB,K,n}} = \frac{v_{AB,K,t}}{(\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB})} = \frac{7}{2} \mu_{d,PPK} \frac{1 + s_{n,PPK}}{1 - s_{t,PPK}} \quad (4.98)$$

Der linke Teil der Gleichung wird üblicherweise als Schiefe des Stoßes bezeichnet. Bei den hier betrachteten Koordinaten ist diese identisch mit dem symmetrischen Schiefeparameter, welcher durch

$$\psi = \frac{|\mathbf{v}_{AB,K,t}|}{|\mathbf{v}_{AB,K,n}|} \quad (4.99)$$

definiert ist. Damit lässt sich ein wirksamer (positiv definit) Stoßwinkel definieren, welcher gleich dem Winkel zwischen dem Vektor der relativen Geschwindigkeit im Kontaktpunkt und der Normalen \mathbf{e}_n ist:

$$\vartheta = \arctan \psi \quad (4.100)$$

Dieser ist in der Regel nicht identisch mit dem geometrischen Stoßwinkel, welcher sich (ebenfalls positiv definit) mit

$$\vartheta_g = \arctan \frac{|(\mathbf{e}_t \cdot \mathbf{v}_{AB})|}{|(\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB})|} \quad (4.101)$$

berechnen lässt. Die beiden Winkel stimmen nur im Grenzfall verschwindender Rotationsanteile (d.h. die Summe der beiden letzten Terme von Gl. 4.80 wird zu Null) überein.

Im Falle von $\psi = 0$ bzw. $\vartheta = 0$ liegt somit eine frontale Kollision vor, während man bei $\psi > 0$ bzw. $\vartheta > 0$ von einer schiefen Kollision spricht. Bei der frontalen Kollision

ist die tangentielle Geschwindigkeit im Kontaktpunkt gleich Null, so dass immer ein Haftstoß gegeben ist.

Geht man nun über zum Grenzfall eines Haftstoßes, so wird der tangentielle Restitutionskoeffizient wegen verschwindender Endtangentialgeschwindigkeit (d.h. der Gleitvorgang ist in einen Rollvorgang übergegangen) zu Null und der dynamische Reibungsbeiwert muss durch den statischen Beiwert ersetzt werden. Somit ergibt sich für den Grenzschiefeffizienten ψ_0 :

$$\psi_0 = \frac{7}{2} \mu_{s,PPK} (1 + s_{n,PPK}) \quad (4.102)$$

bzw. als anschaulicheres Maß der Grenzstoßwinkel ϑ_0 :

$$\vartheta_0 = \arctan \psi_0 \quad (4.103)$$

Ist der wirksame Stoßwinkel kleiner als der Grenzstoßwinkel, d.h. $\vartheta > \vartheta_0$ bzw. $\psi > \psi_0$, so ist der tangentielle Geschwindigkeitsanteil im Kontaktpunkt hinreichend groß um ein Gleiten während des gesamten Kollisionsvorgangs zu gewährleisten (Gleitstoß). Andernfalls kommt es zum Rollen und es liegt ein Haftstoß vor.

Da beim Haftstoß die relative tangentielle Geschwindigkeit nach der Kollision im Kontaktpunkt $\mathbf{v}_{\mathbf{AB},\mathbf{K},t}^*$ gleich Null ist, erhält man aus Gl. 4.96:

$$J_t = -\frac{2}{7} m_{eff} v_{AB,K,t} \quad (4.104)$$

bzw. für den Gesamtimpuls:

$$\mathbf{J} = J_n \mathbf{e}_n + J_t \mathbf{e}_t = -m_{eff} [(1 + s_{n,PPK}) (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{AB}}) \mathbf{e}_n + \frac{2}{7} v_{AB,K,t} \mathbf{e}_t] \quad (4.105)$$

In Tab. 4.1 ist der Kollisionsoperator, d.h. die resultierenden Gleichungen zur Beschreibung der Änderung von Translations- und Rotationsgeschwindigkeit durch Partikel-Partikel-Kollisionen, zusammengefasst. Es ist zu bemerken, dass die Eigenschaften des fiktiven Teilchens B nach der Kollision für die Berechnung der Trajektorie des betrachteten Teilchens A nicht weiter benötigt werden. Die entsprechenden Gleichungen in Tab. 4.1 sind somit nur zur Vollständigkeit aufgeführt.

Die benötigten Stoffkonstanten sind anhand von Experimenten zu bestimmen. Oesterlé & Petitjean [227] geben im Fall von Kügelchen aus Glas für den normalen Restitutionskoeffizienten $s_{n,PPK} = 0.95$ sowie für den statischen und dynamischen Reibungsbeiwert $\mu_{s,PPK} = 0.94$ und $\mu_{d,PPK} = 0.4$ an, wobei sie sich bei den Reibungsbeiwerten auf Daten von Fuller [101] berufen. Diese Materialkonstanten wurden auch bei den Simulationen in dieser Arbeit verwendet. So berechnet sich für den Grenzschiefeffizienten $\psi_0 = 6.42$ bzw. für den Grenzstoßwinkel $\vartheta_0 = 81.1^\circ$. In der Literatur findet man häufig Berechnungen mit der vereinfachenden Annahme, dass nur ein Reibungsbeiwert vorliegt, nämlich der dynamische. Damit erhält man allerdings einen deutlich abweichenden Grenzschiefeffizienten (d.h. mit den oben angegebenen Zahlenwerten errechnet sich $\psi_0 = 2.73$ bzw. $\vartheta_0 = 69.9^\circ$).

| | |
|---|--|
| Gleitstoß | falls $\psi > \psi_0 = \frac{7}{2} \mu_{s,PPK} (1 + s_{n,PPK})$ |
| $\mathbf{v}_A^* = \mathbf{v}_A - (1 + s_{n,PPK}) m_{eff} m_A^{-1} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) [\mathbf{e}_n - \mu_{d,PPK} \mathbf{e}_t]$ | |
| $\mathbf{v}_B^* = \mathbf{v}_B + (1 + s_{n,PPK}) m_{eff} m_B^{-1} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) [\mathbf{e}_n - \mu_{d,PPK} \mathbf{e}_t]$ | |
| $\boldsymbol{\omega}_{P,A}^* = \boldsymbol{\omega}_{P,A} + 5 (1 + s_{n,PPK}) \mu_{d,PPK} d_A^{-1} m_{eff} m_A^{-1} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) [\mathbf{e}_n \times \mathbf{e}_t]$ | |
| $\boldsymbol{\omega}_{P,B}^* = \boldsymbol{\omega}_{P,B} + 5 (1 + s_{n,PPK}) \mu_{d,PPK} d_B^{-1} m_{eff} m_B^{-1} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) [\mathbf{e}_n \times \mathbf{e}_t]$ | |
| | |
| Haftstoß | falls $\psi \leq \psi_0 = \frac{7}{2} \mu_{s,PPK} (1 + s_{n,PPK})$ |
| $\mathbf{v}_A^* = \mathbf{v}_A - m_{eff} m_A^{-1} \left[(1 + s_{n,PPK}) (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) \mathbf{e}_n + \frac{2}{7} v_{AB,K,t} \mathbf{e}_t \right]$ | |
| $\mathbf{v}_B^* = \mathbf{v}_B + m_{eff} m_B^{-1} \left[(1 + s_{n,PPK}) (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) \mathbf{e}_n + \frac{2}{7} v_{AB,K,t} \mathbf{e}_t \right]$ | |
| $\boldsymbol{\omega}_{P,A}^* = \boldsymbol{\omega}_{P,A} - \frac{10}{7} v_{AB,K,t} d_A^{-1} m_{eff} m_A^{-1} [\mathbf{e}_n \times \mathbf{e}_t]$ | |
| $\boldsymbol{\omega}_{P,B}^* = \boldsymbol{\omega}_{P,B} - \frac{10}{7} v_{AB,K,t} d_B^{-1} m_{eff} m_B^{-1} [\mathbf{e}_n \times \mathbf{e}_t]$ | |

Tabelle 4.1: Zusammenfassung des Kollisionsoperators für Teilchen-Teilchen-Stöße

4.6 Partikel-Wand-Kollisionen

Neben den Partikel-Partikel-Kollisionen sind in begrenzten Strömungsgebieten auch Partikel-Wand-Kollisionen¹² von großer Bedeutung. Dabei wird der Einfluss der Wandstöße auf das Strömungsverhalten umso größer sein, desto kleiner im Strömungsgebiet das Verhältnis von Volumen zu Wandfläche ist. Als Beispiel sei der pneumatische Transport in Rohren mit kleinem Durchmesser genannt. Ähnlich verhält es sich in Rührkesseln, bei welchen die wandnahe Strömung die globale Struktur der Strömung entscheidend prägt. Besonders ist dies bei Suspendierprozessen zu beobachten. Dort kommt es an der Behälterwand zu einer starken Erhöhung der Teilchenkonzentration und damit zu sehr vielen Partikel-Wand-Kollisionen. Es ist somit durchaus möglich, dass auch bei verdünnten Zweiphasenströmungen die Wechselwirkungen mit der Wand entscheidenden Einfluss auf die gesamte Strömung haben.

¹²Neben Kollisionen können begrenzende Wände auch zu Änderungen des Widerstandbeiwertes c_D führen. Bezüglich dieses Effekts soll an dieser Stelle nur auf die Zusammenfassung von Sommerfeld [300] verwiesen werden.

4.6.1 Allgemeines

Im wesentlichen lassen sich zwei unterschiedliche Wirkungen der Wand auf die Teilchenbewegung festhalten. Dies ist zum einen die direkte Kollision (rein mechanische Interaktion) und zum anderen die indirekte Wirkung durch die von der Wand beeinflusste Fluidströmung (s. z.B. Saffman-Kraft in Abschnitt 4.2.2). Diese hydrodynamische Wechselwirkung kann unter Umständen eine Kollision mit der Wand unterbinden oder den Verlauf der Kollision beeinflussen. Auf der anderen Seite kann sie vernachlässigt werden, wenn die Partikelträgheit hinreichend groß ist, so dass die Kollision in einem viel kleineren Zeitrahmen erfolgt als die Relaxation der Teilchen. Das Dichteverhältnis aber auch der Turbulenzgrad spielen also eine wichtige Rolle.

Bei der Kollision von massiven Teilchen mit der Wand kommt es in der Regel zu einer Reflektion, wobei kinetische Energie durch Reibung und inelastische Effekte verloren geht. Dieser Impulsverlust und die daraus resultierende Wirkung auf die zweiphasige Strömung hängt stark von der Trägheit der Teilchen ab. Je größer und schwerer die Teilchen sind, desto mehr Impuls besitzen sie und desto länger dauert es, bis sie ihre Geschwindigkeit wieder der des Fluids angepasst haben. Kleinere Teilchen mit einer kleineren Partikelrelaxationszeit τ_P passen sich schneller wieder der Strömung an, so dass die Teilchenbewegung weniger durch die Kollisionen als vielmehr durch die Strömung bestimmt wird. Zudem kann es sein, dass bei sehr kleinen Teilchen weitere Kräfte, wie z.B. Van-der-Waals Kräfte, wichtig werden. Unter Umständen bleiben die Teilchen dann anstatt zu reflektieren an der Wand haften.

Bei reflektierenden Partikel-Wand-Kollisionen kommt es neben der Änderung der Translationsgeschwindigkeit der Teilchen \mathbf{v} auch zu einer Änderung der Teilchenrotation $\boldsymbol{\omega}_P$. Diese wiederum beeinflusst über die Magnuskraft \mathbf{F}_{LM} (s. Abschnitt 4.2.2) die weitere Bewegung der Teilchen. Die wesentlichen Parameter des Kollisionsvorgangs sind also die Translations- und Rotationsgeschwindigkeit der Teilchen, der Auftreffwinkel, das Material der Wand und der Teilchen, die Partikelform sowie die Oberflächenbeschaffenheit der Wand.

4.6.2 Kollisionsoperator

Der Kollisionsvorgang eines Teilchens mit einer Wand unterteilt sich in eine Kompressions- und eine Rückprallphase. Bei harten Wandmaterialien kann angenommen werden, dass ein Teilchen bei einer Wandberührung zunächst zu gleiten beginnt. Für den gesamten Kollisionsvorgang lassen sich analog zu den Partikel-Partikel-Kollisionen drei Fälle unterscheiden:

1. Das Teilchen beginnt in der Kompressionsphase zu rollen.
2. Das Teilchen beendet die Gleitphase in der Rückprallphase.
3. Das Teilchen gleitet während des gesamten Kollisionsvorgangs

In Abb. 4.4 ist der Stoßvorgang eines Teilchens mit einer festen Wand (lokal glatt

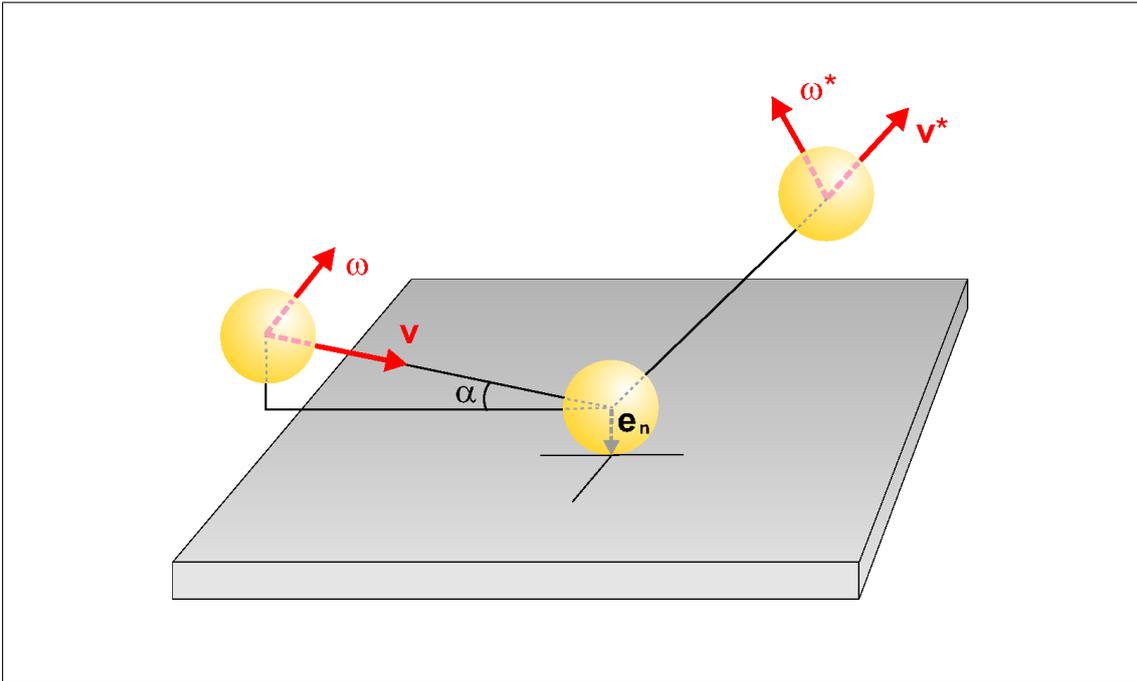


Abbildung 4.4: Schematische Darstellung des Kollisionsvorgangs eines Teilchens mit einer Wand

und eben) schematisch dargestellt. Er lässt sich mit Hilfe von Impulserhaltungsgleichungen für die Translation und Rotation eines Teilchens in Verbindung mit dem Coulombschen Reibungsgesetz für die einzelnen Phasen der Kollision beschreiben. Man erhält so ein Gleichungssystem von 27 Erhaltungsgleichungen, welches durch Integration über die Kollisionszeit und unter Berücksichtigung entsprechender Randbedingungen zu lösen ist (s. z.B. Crowe et al. [55], Tsuji et al. [330]).

Alternativ lässt sich der Kollisionsoperator für eine reflektierende Wandkollision mit Hilfe der bereits gewonnenen Erkenntnisse bei der Partikel-Partikel-Kollision definieren. Dies führt bei den gleichen Randbedingungen bzw. Annahmen zum gleichen Resultat und soll im Folgenden näher erläutert werden.

Für die Wand als Stoßpartner lässt sich ein unendlich schweres und ausgedehntes Teilchen annehmen, so dass der in Tab. 4.1 zusammengefasste Kollisionsoperator für Teilchen-Teilchen-Stöße direkt für die Betrachtung von Teilchen-Wand-Stößen eingesetzt werden kann. Für die Masse und den Durchmesser des Teilchens B gilt dann:

$$m_B \longrightarrow \infty \quad \text{bzw.} \quad d_B \longrightarrow \infty \quad (4.106)$$

Für die effektive Masse m_{eff} bzw. deren Verhältnis zu m_A und m_B ergibt sich somit:

$$m_{eff} \longrightarrow m_A \quad \text{bzw.} \quad m_{eff} m_A^{-1} \longrightarrow 1 \quad \wedge \quad m_{eff} m_B^{-1} \longrightarrow 0 \quad (4.107)$$

Ferner sind die Translations- und Rotationsgeschwindigkeiten von Teilchen B zu Null zu setzen und bei den Materialkonstanten die entsprechenden Werte für eine

Partikel-Wand-Kollision zu verwenden. Damit reduziert sich der Kollisionsoperator für ein Teilchen A auf die in Tab. 4.2 zusammengefassten Gleichungen.

| | |
|--|---|
| <div style="border: 1px solid black; display: inline-block; padding: 2px 5px; margin-bottom: 5px;">Gleitstoß</div> | falls $\psi > \psi_0 = \frac{7}{2} \mu_{s,PWK} (1 + s_{n,PWK})$ $\mathbf{v}_A^* = \mathbf{v}_A - (1 + s_{n,PWK}) (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_A) [\mathbf{e}_n - \mu_{d,PWK} \mathbf{e}_t]$ $\boldsymbol{\omega}_{P,A}^* = \boldsymbol{\omega}_{P,A} + 5 (1 + s_{n,PWK}) \mu_{d,PWK} d_A^{-1} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_A) [\mathbf{e}_n \times \mathbf{e}_t]$ |
| <div style="border: 1px solid black; display: inline-block; padding: 2px 5px; margin-bottom: 5px;">Haftstoß</div> | falls $\psi \leq \psi_0 = \frac{7}{2} \mu_{s,PWK} (1 + s_{n,PWK})$ $\mathbf{v}_A^* = \mathbf{v}_A - \left[(1 + s_{n,PWK}) (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_A) \mathbf{e}_n + \frac{2}{7} v_{AB,K,t} \mathbf{e}_t \right]$ $\boldsymbol{\omega}_{P,A}^* = \boldsymbol{\omega}_{P,A} - \frac{10}{7} v_{AB,K,t} d_A^{-1} [\mathbf{e}_n \times \mathbf{e}_t]$ |

Tabelle 4.2: Zusammenfassung des Kollisionsoperators für Teilchen-Wand-Stöße

Zu beachten ist, dass der normale Einheitsvektor entgegen den üblichen Definitionen zur Wand gerichtet ist. Er definiert sich entsprechend Gl. 4.76 mit Hilfe des Kontaktpunktes \mathbf{x}_K :

$$\mathbf{e}_n = \frac{\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_{P,A}}{|\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_{P,A}|} \quad (4.108)$$

Die relative tangentielle Geschwindigkeit im Kontaktpunkt $\mathbf{v}_{AB,K,t}$ berechnet sich analog zu Gl. 4.83 mit

$$\mathbf{v}_{AB,K,t} = \mathbf{v}_A - \frac{1}{2} d_A [\mathbf{e}_n \times \boldsymbol{\omega}_{P,A}] - (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_A) \mathbf{e}_n \quad (4.109)$$

Die Definition des tangentialen Einheitsvektors ergibt sich somit entsprechend Gl. 4.84 zu:

$$\mathbf{e}_t = \frac{\mathbf{v}_{AB,K,t}}{|\mathbf{v}_{AB,K,t}|} = \frac{\mathbf{v}_{AB,K,t}}{v_{AB,K,t}} \quad (4.110)$$

Der symmetrische Schiefeparameter ψ und der Grenzschiefeparameter ψ_0 berechnen sich mit Gl. 4.99 und 4.102.

Ferner werden für die Lösung, wie auch bei den Partikel-Partikel-Kollisionen, Informationen zum statischen und dynamischen Reibungsbeiwert $\mu_{s,PWK}$ und $\mu_{d,PWK}$ sowie zum normalen Restitutionskoeffizienten $s_{n,PWK}$ benötigt. Diese Werte hängen wesentlich von der Materialkombination und dem Auftreffwinkel α ab und müssen experimentell bestimmt werden. Mit Teilchen-Wand-Kollisionsversuchen für eine

Vielzahl von Materialkombinationen konnten Huber [130] sowie Sommerfeld & Huber [303] die Abhängigkeit des dynamischen Reibungsbeiwertes und des normalen Restitutionskoeffizienten vom Aufprallwinkel bestimmen. Für Glasteilchen in Kombination mit einer polierten Stahlplatte ergeben sich somit die in Abb. 4.5 dargestellten vereinfachten Abhängigkeiten vom Auftreffwinkel α .

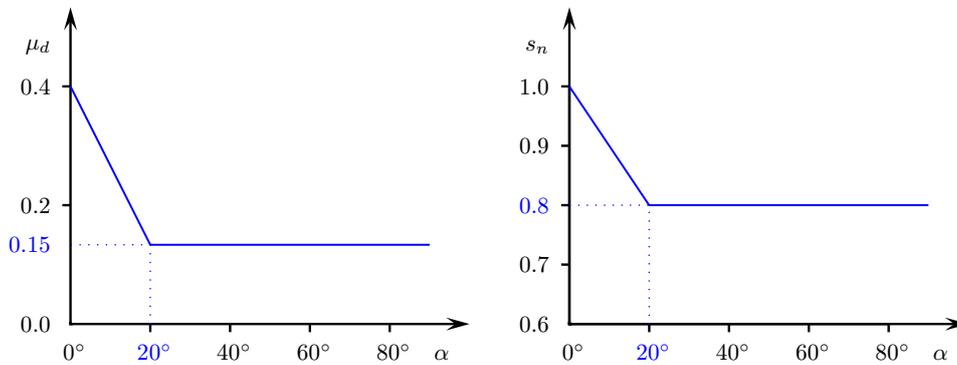


Abbildung 4.5: Abhängigkeit des dynamischen Reibungsbeiwertes und des normalen Restitutionskoeffizienten vom Auftreffwinkel

Bei frontaler Kollision ist der dynamische Reibungsbeiwert gleich dem statischen Reibungsbeiwert von 0.4. Er nimmt mit zunehmendem Auftreffwinkel α linear ab und hat später einen konstanten Wert von 0.15. Ähnlich verhält es sich mit dem normalen Restitutionskoeffizienten, welcher ebenfalls zunächst mit steigendem Winkel abfällt und dann einen konstanten Wert von 0.8 annimmt.

Im Falle von Rührwerksströmungen kommen an der Behälterwand aufgrund der Strömungsstruktur primär große Auftreffwinkel α vor, so dass eine Dominanz von Gleitstößen anzunehmen ist. Aufgrund fehlender Daten für Kollisionen von Glasteilchen auf Glaswänden, wurden die oben genannten experimentellen Ergebnisse als gute Näherung auch bei den vorliegenden Berechnungen verwendet.

4.6.3 Irreguläre Partikel-Wand-Kollisionen

Bei den vorangegangenen Ableitungen wurde von ideal glatten Wänden und kugelförmigen Teilchen ausgegangen. Derartig ideale Zustände liegen aber bei praktischen Anwendungen in der Regel nicht vor, so dass es zu irregulären Partikel-Wand-Kollisionen kommt. Generell lässt sich festhalten, dass die Berücksichtigung irregulärer Stöße mit zunehmender Teilchengröße an Bedeutung gewinnt, da größere Teilchen weniger durch fluiddynamische Kräfte (wie z.B. Saffman- und Magnus-Kraft oder Fluidturbulenz) beeinflusst werden und somit Kollisionen eine erhebliche Auswirkung auf die Teilchenbahnen haben.

Entsprechend den zwei Hauptursachen für irreguläre Partikel-Wand-Kollisionen lässt

sich eine Klassifizierung in zwei Typen von Modellen zu ihrer Berücksichtigung vornehmen. Bei der einen Gruppe von Modellen werden nicht-sphärische Partikel berücksichtigt (entsprechende Untersuchungen bzw. Modelle wurden z.B. von Matsumoto & Saito [194], Tsuji et al. [331][332] und Sommerfeld [298] vorgestellt) während beim zweiten Typ Wandrauigkeiten als Ursache für irreguläre Kollisionen angenommen werden. Auch für die Berücksichtigung von Wandrauigkeiten wurden bereits verschiedene Modelle vorgestellt (s. z.B. Matsumoto & Saito [193], Tsuji et al. [328], Sommerfeld & Zivkovic [306], Frank et al. [97]). Die analytische Beschreibung von irregulären Partikel-Wand-Kollisionen stößt dabei sehr schnell an ihre Grenzen (wobei sich die Erfassung von kantigen Teilchen als besonders schwierig erweist, s. z.B. Crowe et al. [55]), so dass praktisch alle praxisrelevanten Modelle stochastischer Natur sind. Im Gegensatz zu den auf Impulserhaltung basierenden Modellen finden zum Teil auch noch rein empirische Modelle Verwendung (s. z.B. Grant & Tabakoff [107], deren Modell auf Experimenten von Tabakoff basieren).

Da bei den vorliegenden Arbeiten ausschließlich sphärische bzw. nahezu sphärische Teilchen verwendet werden, sollen die entsprechenden Modelle, welche im Übrigen bereits von Frank [95] neben einer Vielzahl von Wandkollisionsmodellen vergleichend zusammengestellt wurden, hier nicht weiter behandelt werden. Ferner werden Kollisionen an rauen Wänden mit dem weiterentwickelten Wandkollisionsmodell von Sommerfeld [291][292] berücksichtigt, wobei die Änderung des Abprallwinkels durch die Wandrauigkeit über eine statistische Betrachtung erfasst wird.

Die Bedeutung der Wandrauigkeit für die Teilchen-Wand-Wechselwirkung hängt wesentlich vom Verhältnis der Teilchengröße zu den charakteristischen Abmessungen der Wandrauigkeit ab. In Abb. 4.6 wird dieser Zusammenhang veranschaulicht.

Die Struktur der Wandrauigkeit ergibt sich hauptsächlich durch das Herstellungsverfahren aber auch durch betriebsbedingte Verschleißerscheinungen (z.B. Erosion durch harte Teilchen). Durch eine mittlere Rauhtiefe Δz_R und den Profilfraganteil Δx_R kann die Wandrauigkeit charakterisiert werden. Bei zyklischer Rauigkeit lässt sich so der maximale Winkel $\gamma_{R,max}$ in Abhängigkeit von der Teilchengröße bestimmen. Dieser Winkel definiert ein Maß für die maximal von einem bestimmten Teilchen sichtbare Rauigkeit, d.h. die Winkelabweichung der realen (lokal aufgelösten) Wandoberfläche von der idealisierten (gemittelten) Wand. Allgemein gilt bei hinreichend kleinen Teilchen (Durchmesser von gleicher Größenordnung wie die charakteristischen Rauigkeitsabmessungen), dass $\gamma_{R,max}$ mit zunehmender Rauhtiefe steigt und mit zunehmender Periodenlänge abnimmt. Je größer die Teilchen sind, desto kleiner wird $\gamma_{R,max}$, sofern die betrachtete Periodenlänge hinreichend klein ist. Bei der Modellierung werden diese Effekte durch stetige Überprüfung der Teilchengröße, des Auftreffwinkels usw. berücksichtigt.

Im Modell wird angenommen, dass sich der tatsächliche Kollisionswinkel eines Teilchens mit einer Wand aus dem Flugbahnwinkel und einem stochastischen Anteil durch die Wandrauigkeit, dem sogenannten Rauigkeitswinkel γ_R , zusammensetzt. Da bei der Modellierung ursprünglich der zweidimensionale Fall betrachtet wurde, hier aber Dreidimensionalität, muss der Rauigkeitswinkel auf ein Rauigkeitswin-

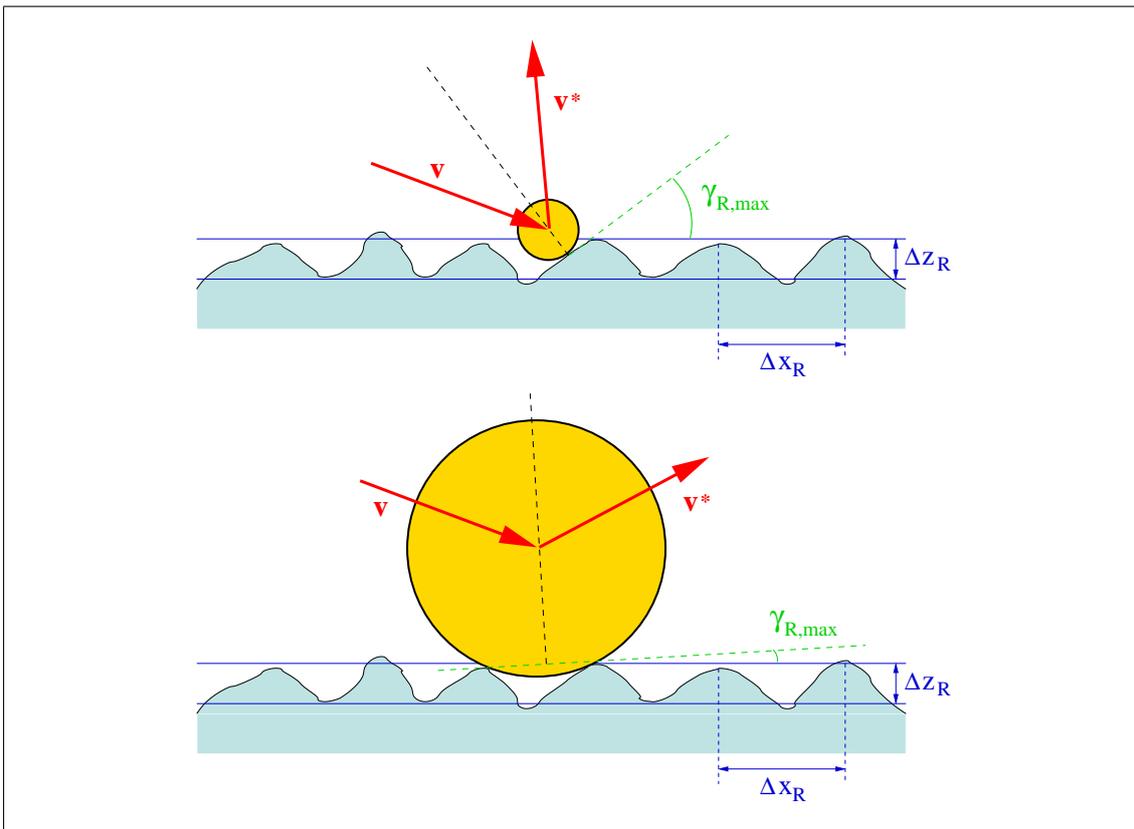


Abbildung 4.6: Einfluss der Teilchengröße auf das Kollisionsverhalten an rauhen Wänden

kelpaar erweitert werden, um die dreidimensionale Oberflächenstruktur zu erfassen. Die beiden Einzelrauhigkeitswinkel werden jeweils durch Gauß-verteilte Zufallszahlen mit einem Mittelwert von Null und einer Standardabweichung von $\gamma_{R,eff}$ simuliert. Dabei wird angenommen, dass keine Vorzugsrichtung der Rauheitsstruktur vorliegt und die Oberflächenrauigkeit mit Hilfe der genannten Winkel und Zufallszahlen hinreichend beschreibbar ist. Der Winkel $\gamma_{R,eff}$ muss dann anhand von Oberflächenanalysen des Wandmaterials unter Berücksichtigung der Teilchengröße bestimmt werden (s. Huber [130]). Als Größenordnung sei hier ein Bereich von $1-10^\circ$ genannt.

Der eigentliche Stoßprozess erfolgt also an einer virtuellen Wand, welche abhängig von den Rauheitswinkeln stochastisch verteilt von der Wandebene abweicht (normalverteilte lokale Inkliniation). Der in Abschnitt 4.6.2 abgeleitete Kollisionsoperator ist somit unverändert auch bei Verwendung des Wandrauheitsmodells nutzbar. Allerdings ist noch zu berücksichtigen, dass bestimmte Winkelbereiche aufgrund von Abschattungseffekten von den Teilchen nicht erreicht werden können. Werden Rauheitswinkel in diesen Bereichen generiert, so müssen diese verworfen und alternative Winkel bestimmt werden. Die Verteilung der möglichen Rauheitswinkel verschiebt sich somit in Richtung positive Winkel (Sommerfeld & Huber [303]) und

der Abprallwinkel wird im Mittel größer.

Durch Partikel-Wand-Kollisionen sind weiterhin Erosionserscheinungen möglich. Die Stärke der Erosion ist dabei proportional zum Quadrat der Teilchengeschwindigkeit und die maximale Abtragung erfolgt im Fall von zähen Wandmaterialien bei Einfallswinkeln von ca. 15° sowie bei spröden Materialien von ca. 90° . Relevant ist die Berücksichtigung der Materialabtragung allerdings nur bei Bauteilen mit starker Erosionsgefahr, wie z.B. schnelldrehende Turbinenschaufeln. Bei den vorliegenden Untersuchungen ist dies nicht der Fall, so dass Erosionseffekte vernachlässigt werden.

Bei sehr kleinen Teilchen kann es ferner sein, dass bereits relativ kleine absolute Kräfte eine Reflektion von der Wand unterbinden, d.h. elektrische Ladungen oder Van-der-Waals-Kräfte können zu einer Adhäsion an der Wand führen. Die Bedeutung von Adhäsion ist dabei in Zweiphasenströmungen mit gasförmigen Fluiden größer als bei Strömungen mit Flüssigkeiten. Da Adhäsion bei den in dieser Arbeit vorliegenden Rahmenbedingungen nicht zu erwarten ist, wird immer von einer Reflektion ausgegangen.

4.7 Schwarmeffekte

Neben den Kollisionen als Partikel-Partikel-Wechselwirkungen spielen auch die hydrodynamischen Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Teilchen eine wichtige Rolle. Analog zu den Kollisionen ist auch hier die Partikelkonzentration und damit der mittlere Abstand zwischen benachbarten Teilchen von zentraler Bedeutung.

Befindet sich ein Teilchen im Nachlauf eines anderen Teilchens, so reduziert sich dessen Widerstandsbeiwert aufgrund der gestörten Umströmung umso stärker, je geringer der Abstand zwischen den beiden Teilchen ist. Dieser Effekt wird üblicherweise als Schwarmeffekt bezeichnet, da er in der Regel nur bei hohen Teilchenkonzentrationen (auch lokalen Ansammlungen) relevant wird. Bei nebeneinander angeordneten Teilchen kommt es dagegen zu einer Erhöhung des Widerstandsbeiwerts. Die Effekte sind hier aber geringer, da der Teilchenabstand für eine wirksame Beeinflussung deutlich kleiner sein muss.

Bei schleichender Umströmung konnten die Kräfte auf zwei benachbarte Kugeln bereits 1911 von Smoluchowski [289] analytisch beschrieben werden. Erweiterungen für höhere Reynoldszahlen wurden dann von Oseen [234] und später auch von Happel & Pfeffer [113] sowie für noch höhere Reynoldszahlen (bis etwa 1000) von Tsuji et al. [329] vorgeschlagen. Neuere Untersuchungen von Kim et al. [148] und Ramachandran et al. [248] (für nebeneinander bzw. hintereinander angeordnete Teilchen) ergaben, dass der Widerstandsbeiwert bereits bei Teilchenabständen von etwa 10 Teilchendurchmessern merklich vom Widerstandsbeiwert eines isolierten Teilchens abweicht. Mit Annahme einer homogenen Teilchenverteilung sowie kubisch-einfacher

Anordnung¹³ gilt für den kürzesten Abstand ℓ zwischen zwei Teilchenzentren die folgende Beziehung:

$$\varphi_P = \frac{1}{6}\pi d^3 \ell^{-3} \quad \Longrightarrow \quad \ell/d = \left(\frac{1}{6}\pi \varphi_P^{-1}\right)^{1/3} \quad (4.111)$$

Ein Abstand von $\ell = 10d$ liegt somit bereits bei einem Partikelvolumenanteil von $\varphi_P = 5.2 \cdot 10^{-4}$ vor. Crowe et al. [55] betrachten den Einfluss benachbarter Teilchen bei einem Abstand von etwa $\ell = 10d$ als gering, so dass hier noch von isolierten Teilchen ausgegangen werden kann. (Andere Autoren, wie z.B. Schubert et al. [285], gehen von einer völligen Vernachlässigbarkeit der Wechselwirkungen bei mittleren Abständen von $\ell > 6d$ aus.) Bei Abständen von $\ell = 3d$ (dies entspricht einem Partikelvolumenanteil von $\varphi_P = 1.9 \cdot 10^{-2}$) und kleiner schließen sie die Möglichkeit einer isolierten Betrachtung definitiv aus. Für den Bereich dazwischen wird leider keine Aussage getroffen, so dass von Fall zu Fall zu entscheiden ist, ob eine isolierte Betrachtung im Rahmen der vorliegenden Genauigkeitsanforderungen noch möglich ist oder nicht.

Durch den verringerten Widerstandsbeiwert eines nachfolgenden Teilchens kann dieses seinen Vorläufer unter Umständen einholen und sogar mit ihm kollidieren. Diesen Effekt konnten z.B. Happel & Pfeffer [113] mit ihren Ableitungen abbilden. Fortes et al. [94] bestätigten diesen Vorgang auch bei höheren Konzentrationen, d.h. bei Betrachtung von mehr als zwei Teilchen.

Zur genauen Abbildung der hydrodynamischen Wechselwirkungen zwischen den Teilchen bei der numerischen Simulation mit dem Lagrangeschen Verfahren müssen alle Teilchen simultan verfolgt werden, so dass zu jedem Zeitpunkt alle Positionen und damit alle möglichen Wechselwirkungen erfasst werden können. Entsprechende Ableitungen für hintereinander bzw. nebeneinander angeordnete Teilchen wurden z.B. von Huber [130] durchgeführt und angewandt. Zentrale Parameter waren dabei neben den Teilchenpositionen (und damit die relativen Lagen und Entfernungen) auch die Bewegungsrichtungen und die Teilchengrößen.

Die parallele Betrachtung sehr vieler Teilchen ist mit einem sehr hohen Berechnungsaufwand verbunden. Daher erfolgt die Erfassung der hydrodynamischen Wechselwirkungen bei praxisrelevanten Anwendungen in der Regel mit Hilfe integraler halbempirischer Korrelationen für den Widerstandsbeiwert.

Druckverlust-Untersuchungen in Kugelpackungen bilden die Basis erster Beziehungen zwischen Partikelvolumenanteil und Widerstandsbeiwert. Aufgrund theoretischer Überlegungen sowie der Dimensionsanalyse erhält man für den Druckverlust in Packungen:

$$\Delta p/\Delta L = k_1 \mu d_{32}^{-2} \bar{U} \varphi_P^2 (1 - \varphi_P)^{-3} + k_2 \rho d_{32}^{-1} \bar{U}^2 \varphi_P (1 - \varphi_P)^{-3} \quad (4.112)$$

bzw. mit $\text{Re} = \bar{U} d_{32} \nu^{-1}$

$$\Delta p/\Delta L = \left(k_1 \varphi_P \text{Re}^{-1} + k_2\right) \rho d_{32}^{-1} \bar{U}^2 \varphi_P (1 - \varphi_P)^{-3} \quad (4.113)$$

¹³Bei kubisch-einfacher Anordnung ist ein Raumwürfel jeweils an seinen Ecken mit einem Teilchen bestückt.

Der erste Term in Gl. 4.112 ist der auf Fluidreibung zurückzuführende Anteil ($\propto \mu \bar{U}$) und der zweite Term resultiert aus dem Staudruck ($\propto \rho \bar{U}^2$). Ergun [88] quantifizierte die Koeffizienten für Schüttungen mit relativ enger Korngrößenverteilung zu $k_1 = 150$ und $k_2 = 1.75$.

Bei einer Betrachtung von kugelförmigen, monodispersen Teilchen (d.h. $d_{32} = d$) und der lokalen Geschwindigkeit in den Poren $\bar{U}(1 - \varphi_P)^{-1}$ ergibt sich unter Verwendung der Relativgeschwindigkeit \mathbf{u} die allgemeinere Beziehung für den Druckverlust. Berücksichtigt man nun noch, dass der Druckverlust des Fluids in einem bestimmten Volumen¹⁴ in guter Näherung gleich der Widerstandskraft aller beteiligten Teilchen ist, so lässt sich die Widerstandskraft eines Teilchens wie folgt formulieren:

$$\mathbf{F}_D = n_P^{-1} \left[k_1 \text{Re}_P^{-1} \varphi_P (1 - \varphi_P)^{-1} + k_2 \right] \rho d^{-1} |\mathbf{u}| \mathbf{u} \varphi_P \quad (4.114)$$

Mit Gl. 4.16 lässt sich nun nach dem Widerstandsbeiwert c_D auflösen, wobei im vorliegenden Fall für die Teilchenanzahldichte $n_P = \varphi_P (\frac{1}{6} \pi d^3)^{-1}$ gilt.

$$c_D = \frac{4}{3} \left[k_1 \text{Re}_P^{-1} \varphi_P (1 - \varphi_P)^{-1} + k_2 \right] = 200 \text{Re}_P^{-1} \varphi_P (1 - \varphi_P)^{-1} + \frac{7}{3} \quad (4.115)$$

Aufgrund der Ableitung ist diese Beziehung für den Widerstandsbeiwert nur bei Strömungen mit sehr hohen Teilchenbelastungen gültig. Nach Gidasopow [103] ist Gl. 4.115 bei Partikelvolumenanteilen von 20% und mehr einsetzbar.

Richardson & Zaki [265] haben den Zusammenhang zwischen Teilchenkonzentration und Widerstandsbeiwert (bzw. stationärer Sinkgeschwindigkeit) mit Hilfe von Sedimentationsexperimenten untersucht. Sie korrelierten das Verhältnis der tatsächlich gemessenen Sinkgeschwindigkeit v_s zu der theoretischen stationären Sinkgeschwindigkeit eines einzelnen Teilchens v_{s1} mit dem Volumenanteil der kontinuierlichen Phase. Bei Berücksichtigung von Partikelwiderstand, Schwerkraft und statischem Auftrieb (diese Kräfte befinden sich bei unbeschleunigter Sinkbewegung im Gleichgewicht) berechnet sich die stationäre Sinkgeschwindigkeit eines isolierten Teilchens zu:

$$v_{s1} = \left[\frac{4}{3} d |\mathbf{g}| (\gamma_\rho^{-1} - 1) c_D^{-1} \right]^{1/2} \quad (4.116)$$

Damit reduziert sich das Verhältnis der Sinkgeschwindigkeiten auf:

$$\frac{v_s(\varphi_P)}{v_{s1}} = \left[\frac{c_D(\varphi_P \rightarrow 0)}{c_D(\varphi_P)} \right]^{1/2} \quad (4.117)$$

Aus den Daten von Richardson & Zaki resultiert die folgende Beziehung für den Widerstandsbeiwert:

$$c_D = 24 \text{Re}^{-1} (1 - \varphi_P)^{-k} \quad \text{mit} \quad k = 4.45 \text{Re}^{-0.1} \quad (4.118)$$

Dabei lag die mit v_{s1} berechnete Reynoldszahl Re bei den Sedimentationsexperimenten im Bereich von 200 bis 500. Durch Gl. 4.118 wird die Abnahme der Schwarm-sinkgeschwindigkeit bei zunehmender Turbulenz verdeutlicht. Dies lässt sich durch eine erhöhte gegenseitige Behinderung der Teilchen erklären.

¹⁴Der Druckverlust bezieht sich dabei nur auf die Fluidphase, so dass der zusätzliche Faktor $(1 - \varphi_P)$ zu berücksichtigen ist.

Generell nimmt die Sinkgeschwindigkeit mit zunehmender Teilchenkonzentration zunächst zu (gegenseitige hydrodynamische Beeinflussung der Teilchen durch Bildung von Teilchenkomplexen) und durchläuft im Bereich von $\varphi_P \approx 0.002 \dots 0.015$ eine maximale Überhöhung. Bei weiterer Konzentrationszunahme steigt der bewegungsbehindernde Einfluss und die Sinkgeschwindigkeit wird wieder kleiner. Ein Modell zur Berücksichtigung der Bewegungsbehinderung wurde von Brauer et al. [31][32][146] entwickelt. Dabei setzt sich der Schwarmbehinderungsfaktor aus dem Gegenstromfaktor k_G und dem Schwarmturbulenzfaktor k_T zusammen und es gilt die folgende Beziehung für die Schwarmsinkgeschwindigkeit:

$$v_s = k_G k_T v_{s1} \quad (4.119)$$

Die beiden Faktoren k_G und k_T können dann in Abhängigkeit vom Teilchenvolumenanteil φ_P beschrieben werden. Im Fall von monodispersen Teilchen lauten die Beziehungen:

$$k_G = \left[1 + \varphi_P (1 - \varphi_P)^{-2} \right]^{-1} \quad (4.120)$$

$$k_T = (1 - \varphi_P) \left(1 + 1.05 \left[\left(1 + \frac{1}{144} \pi^2 \varphi_P^{-2} \right)^{1/2} - \frac{1}{2} \right]^{-1} \right)^{-1} \quad (4.121)$$

Brauer et al. haben ihr Modell aber auch für polydisperse Teilchen erweitert und publiziert.

Es ist zu bemerken, dass die Zunahme der Sinkgeschwindigkeit in Suspensionen mit kleinen Teilchenkonzentrationen ausbleibt, wenn z.B. durch Mischprozesse die Bildung von Teilchenkomplexen verhindert wird. In der Verfahrenstechnik ist damit, auch aufgrund der üblicherweise höheren Konzentrationen, in der Regel mit einer Abnahme der Sinkgeschwindigkeit zu rechnen.

Wen & Yu [346] führten eine Reihe von Fluidisationsexperimenten bei hoher Partikelbeladung durch. Ihre Daten kondensierten sie dann unter Beachtung früherer Ergebnisse (wie z.B. Richardson & Zaki [265]) in einem Korrekturfaktor f_c für die c_D -Beziehung für einzelne Teilchen nach Schiller & Naumann [284] (s. Abschnitt 4.2.2).

$$f_c = (1 - \varphi_P)^{-3.7} \quad (4.122)$$

Der Widerstandsbeiwert berechnet sich somit zu

$$c_D = 24 \operatorname{Re}^{-1} \left(1 + 0.15 \operatorname{Re}^{0.687} \right) (1 - \varphi_P)^{-3.7} \quad (4.123)$$

Bei den Untersuchungen von Wen & Yu wurden auch die Einflüsse der Reynoldszahl auf die stationäre Sinkgeschwindigkeit berücksichtigt, so dass sie in der Lage waren eine empirische Korrelation für den gesamten Reynoldszahlbereich zu entwickeln.

Im Jahr 1994 hat Di Felice [72] verschiedene in der Literatur verfügbare Datensätze analysiert und den Korrekturfaktor f_c wie üblich als Funktion von φ_P und Re_P (in Form des Faktors k) angesetzt.

$$f_c = (1 - \varphi_P)^{-k} \quad (4.124)$$

Bei kleinen Reynoldszahlen strebt der Exponent k gegen 3.65 (basierend auf den Ergebnissen von Richardson & Zaki [265]) und bei größeren Reynoldszahlen gegen 3.7 (basierend auf den Ergebnissen von Wen & Yu [346] und anderen). Di Felice empfiehlt folgende empirische Beziehung für den Korrekturfaktor f_c :

$$k = 3.7 - 0.65 \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} - \log_{10} \text{Re}_P \right)^2 \right] \quad (4.125)$$

Insgesamt wird damit ein Reynoldszahlenbereich von $10^{-2} < \text{Re}_P < 10^4$ abgedeckt und k durchläuft bei dieser symmetrischen Funktion einen minimalen Wert von 3.05 bei $\text{Re}_P \approx 30$.

Eine weitere Korrelation wurde von O'Rourke [230][2] vorgeschlagen (Gl. 4.126). Dabei wird die c_D -Beziehung für einzelne Teilchen nach Putnam [247] (s. Anhang A.1) mit den Ergebnissen von Richardson & Zaki [265] kombiniert, d.h. bei sehr kleinen Partikelbeladungen geht Gl. 4.126 in Gl. A.4 über und bei höheren Beladungen erfolgt entsprechend eine Annäherung an Gl. 4.118.

$$c_D = 24 \text{Re}_P^{-1} \left[(1 - \varphi_P)^{-2.65} + \frac{1}{6} \text{Re}_P^{2/3} (1 - \varphi_P)^{-1.78} \right] \quad (4.126)$$

Mit der Beziehung, welche auch bei den vorliegenden Untersuchungen mit signifikanten Partikelbeladungen verwendet wurde, können Reynoldszahlen bis $\text{Re}_P \approx 10^3$ abgedeckt werden.

Die hier aufgeführten Ansätze stellen natürlich nur einen kleinen Ausschnitt der bereits veröffentlichten Korrelationen dar. Für eine ergänzende Zusammenstellung sei z.B. auf eine entsprechende Diskussion von Politis [245]¹⁵ verwiesen.

Zusammenfassend muss bemerkt werden, dass die aktuellen Erkenntnisse in Hinblick auf Schwarmeffekte nach wie vor unzureichend für eine exakte Modellierung sind. Weitere experimentelle und numerische Untersuchungen von Strömungen mit vielen Teilchen unter Auflösung der Teilchenumströmung versprechen eine erhebliche Verbesserung des Verständnisses.

¹⁵Politis [245] hat neben dem Einfluss auf die Widerstandskraft auch die Wirkung auf andere Kräfte erörtert. Nach einer Abschätzung der Größenordnung der einzelnen Kräfte hat er allerdings bei seinen Berechnungen schließlich nur die Widerstandskraft berücksichtigt (s. auch Abschnitt 7.3). Politis diskutierte auch den Effekt turbulenter Schwankungen auf den Widerstandsbeiwert. Im Allgemeinen wird ein Teilchen auf Fluktuationen mit einem turbulenten Längenmaß größer als dem Teilchendurchmesser reagieren. Dabei lässt sich der Effekt durch ein Dispersionsmodell erfassen (dieser Fall wurde in der vorliegenden Arbeit angenommen). Sind die Teilchen kleiner als das Längenmaß, so besteht der Effekt der Turbulenz darin, dass die Strömung um die Teilchen verändert wird (s. z.B. Clift et al. [47]).

5 Numerische Berechnung von Zweiphasenströmungen

Im Wesentlichen stehen für die Diskretisierung und Lösung der in den Abschnitten 3 und 4 beschriebenen Erhaltungsgleichungen für Zweiphasenströmungen zwei prinzipielle Verfahren¹ zur Auswahl, das Euler-Euler-Verfahren und das Euler-Lagrange-Verfahren. Beim Euler-Euler-Verfahren wird angenommen, dass die disperse Phase in Analogie zum Fluid als Kontinuum beschrieben werden kann, welches mit dem Fluid-Kontinuum in Wechselwirkung steht und dieses auch durchdringt (s. z.B. Reeks [260], Elghobashi & Abou-Arab [85], Elghobashi et al. [86] oder Durst et al. [79]). Durch die räumliche Mittelung in den einzelnen Kontrollvolumina erhält man Erhaltungsgleichungen für die beiden Phasen die sich nur aufgrund der Austauschterme von einer einphasigen Formulierung unterscheiden. Dies ermöglicht eine sehr einfache numerische Behandlung, da die Lösung beider Phasen mit den gleichen Algorithmen erfolgen kann. Neben dem allgemeinen Problem der Definition einer punktförmigen Konzentration bei einer relativ kleinen Anzahl an diskreten Teilchen in einem bestimmten Volumen (s. z.B. Wassen [342])² ist es in der Regel schwierig, allgemeingültige Ansätze für die Formulierung der Schubspannung der dispersen Phase, für die Partikeldispersion oder auch für die Diffusion der kinetischen Energie zu finden (s. Crowe [53]). Meist werden hierzu Gradienten-Diffusions-Ansätze mit einer Reihe von empirische Konstanten eingesetzt (Elghobashi [85]), welche mit einer Vielzahl von Experimenten und Simulationen optimiert werden müssen. Ein weiteres Problem ist die Modellierung der Wechselwirkungen mit geometrischen Berandungen. Der größte Vorteil des Verfahrens ist die implizite Berücksichtigung der Wechselwirkungen zwischen den Phasen, allerdings muss bei polydispersen Systemen pro Teilchengrößenklasse eine eigene Phase betrachtet werden. Dies resultiert in einer erhöhten Anzahl an zu lösenden Gleichungen mit entsprechend erhöhtem Bedarf an Speicher und Berechnungszeit.

Beim Euler-Lagrange-Verfahren wird nur das Fluid als Kontinuum betrachtet und die disperse Phase durch eine endliche Menge diskreter Einzelteilchen repräsentiert.

¹Ein Überblick über die verschiedenen Modellierungsmethoden findet sich z.B. bei Crowe et al. [55][52].

²Das Verfahren ist somit auf Anwendungsfälle begrenzt, bei denen die Anzahldichte der Teilchen in allen Bereichen des Berechnungsgebietes hinreichend groß ist, so dass mittlere lokale Größen sinnvoll ermittelt werden können.

Für diese werden die Erhaltungsgleichungen (s. Abschnitt 4) gelöst und somit ihre Trajektorien berechnet. Numerische Diffusion ist damit prinzipiell vernachlässigbar. Zur Begrenzung der Berechnungszeit ist die betrachtete Anzahl an Teilchen in der Regel eine Teilmenge der realen Teilchen. Makroskopische Strömungsgrößen können durch geeignete Mittelung bestimmt werden. Diese lässt sich zum Vergleich mit Messungen an das jeweilige Messverfahren anpassen. Die Partikelbahnen lassen sich sowohl simultan als auch sequentiell berechnen, wobei die Berücksichtigung von mehreren Teilchengrößenklassen praktisch keinen zusätzlichen Aufwand bedeutet. Allerdings sind die Wechselwirkungen zwischen den Phasen nicht wie beim Euler-Euler-Verfahren implizit enthalten, so dass hier eine zusätzliche Kopplung nötig wird, deren Zeitbedarf nicht zu unterschätzen ist. Beim Euler-Lagrange-Verfahren sind dafür die Modellierungsmöglichkeiten viel direkter, d.h. viel näher an der physikalischen Gegebenheiten, so dass das Verfahren auch oft als direkte Simulation bezeichnet wird. Effekte im Mikrobereich, wie z.B. Oberflächenreaktionen, sind damit erheblich besser und leichter zu erfassen. Für jede der beiden Phasen kommt somit die adäquate Modellierungsmethode zum Einsatz. Dies war die Motivation auch bei den vorliegenden Untersuchungen von Suspensionen in Rührkesseln, bei denen in der Regel relativ hohe Partikelkonzentrationen vorliegen und somit normalerweise das Euler-Euler-Verfahren zum Einsatz kommt, das Euler-Lagrange-Verfahren zu verwenden, um damit die Grundlage zu schaffen in Zukunft auch Detaileffekte zu betrachten, welche nur mit diesem Verfahren korrekt wiedergegeben werden können.

Bei den durchgeführten Berechnungen wurde zur Lösung der Erhaltungsgleichungen das Programmpaket *FASTEST3D*³, welches nach der Finite-Volumen-Methode (*FVM*) arbeitet (d.h. die Gleichungen werden in ihrer Integralform betrachtet), in Kombination mit *LAG3D*⁴, bei dem die dispersen Phasen nach dem Lagrangeschen Verfahren berechnet werden, verwendet. In den Abschnitten 5.1 und 5.2 folgt eine kurze Beschreibung der bei den beiden Programmen verwendeten Verfahren. Die Berücksichtigung der Wechselwirkungen zwischen den Phasen, d.h. die Kopplung der beiden Programmteile, ist in Abschnitt 5.3 beschrieben. In Abschnitt 5.4 ist der gesamte Programmablauf zusammengefasst.

5.1 Numerische Berechnung der fluiden Phase

Die zeitgemittelte Navier-Stokes-Gleichung bildet die Grundlage für die Berechnung der fluiden Phase bei Eulerscher Betrachtungsweise, d.h. die fluide Phase wird als Kontinuum betrachtet. Sowohl bei den untersuchten Gas- als auch bei den Flüssigkeitsströmungen (in beiden Fällen Newtonsche Fluide) ist die Annahme der

³*FASTEST3D*: Das Berechnungsprogramm für die Fluidströmung wurde am Lehrstuhl für Strömungsmechanik der Universität Erlangen-Nürnberg (*FAU-LSTM*) entwickelt.

⁴*LAG3D*: Das Berechnungsprogramm für disperse Phasen wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit am Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik der Universität Halle-Wittenberg (*MLU-MVT*) entwickelt. *LAG3D* ist als Add-on für *FASTEST3D* konzipiert, lässt sich aber prinzipiell auch mit anderen Finite-Volumen-Berechnungsprogrammen kombinieren.

Inkompressibilität gut erfüllt, so liegt bei isothermer Betrachtung konstante Dichte als auch konstante Viskosität vor. Ferner spielt die Praxisrelevanz eine zentrale Rolle, d.h. sowohl die benötigten Rechnerressourcen als auch die benötigte Berechnungszeit muss sich in einem angemessenen Rahmen bewegen, so dass sich bei den vorliegenden Untersuchungen auf stationäre Strömungen beschränkt wird.

Die Strömung in Rührbehältern ist allerdings aufgrund rotierender Einbauten prinzipiell immer instationär. Durch die Verwendung des sogenannten *ASS*-Verfahrens⁵ lässt sich die Berechnung aber in den stationären Bereich verschieben. Dabei wird das Berechnungsgebiet in zwei Bereiche (ein rotierender und ein ortsfester Bereich) aufgeteilt, welche jeweils stationär behandelt werden. Das Verfahren wird in Abschnitt 5.1.2 näher erläutert und mit anderen Berechnungsverfahren verglichen.

5.1.1 Beschreibung des eingesetzten Berechnungsverfahrens

Eine ausführliche Beschreibung der eingesetzten Methoden zur Berechnung der fluiden Phase findet man z.B. bei Ferziger & Perić [92] oder Schäfer & Perić [282], so dass im Folgenden nur ein kurzer Überblick gegeben werden soll.

Da die mathematisch exakte Lösung des in Tab. 3.1 beschriebenen Gleichungssystems in der Regel nicht möglich ist, wird es durch ein prinzipiell lösbares Gleichungssystem approximiert. Dazu erfolgt eine Diskretisierung in ein algebraisches Gleichungssystem, so dass Variablenwerte nur an diskreten Stützstellen vorliegen. Ein Lösungsverfahren stellt die hier verwendete Finite-Volumen-Methode dar (s. z.B. Patankar [235]), bei der das Strömungsgebiet in elementare Volumina (idealerweise Hexaeder), den sogenannten Kontrollvolumen (*KV*), unterteilt wird. Zur besseren Anpassung des Gitters an die jeweiligen Geometrien wird üblicherweise eine Grobunterteilung in Blöcken vorgenommen. Entsprechend lassen sich mit dem Programmpaket *FASTEST3D* [135] nicht-orthogonale, blockstrukturierte Gitter in blockweiser freier Topologie⁶ realisieren. Zur Vermeidung von Schachbrettoszillationen und der Möglichkeit von körperangepassten nicht-orthogonalen Gittern wurde die nicht-versetzte Gitteranordnung (s. z.B. Rhie & Chow 1983 [264]) umgesetzt. Ein Vergleich mit den Möglichkeiten der versetzten Anordnung findet sich z.B. bei Ferziger & Perić [92].

Im Gegensatz zur Finite-Elemente-Methode (*FEM*) zeichnet sich die *FVM* durch ihren vollkonservativen Charakter (d.h. die Massenerhaltung ist auf jeden Fall gewährleistet) aus. Die Bilanzierung kann somit für jedes Kontrollvolumen einzeln über konvektive und diffusive Flüsse in bzw. aus dem Kontrollvolumen erfolgen. Dazu ist es nötig die integralen Erhaltungsgleichungen durch die Nutzung des Gaußschen Integralsatzes in Oberflächenintegrale zu überführen. Alle Variablenwerte (d.h.

⁵Häufig 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.

⁶Diese Art der Vernetzung ist ein Kompromiss zwischen der hohen geometrischen Flexibilität eines vollständig unstrukturierten Gitters und der bei global strukturierten Gittern erreichbaren ausgezeichneten numerischen Effizienz.

die jeweiligen Mittelwerte) sind aber in den KV -Zentren gespeichert, so dass die Flüsse durch die KV -Flächen interpoliert werden müssen.

Zur Diskretisierung der konvektiven Flüsse durch die KV -Flächen kommt die sogenannte Fluss-Korrektur-Methode nach Khosla & Rubin [147] zum Einsatz, welche zur Gruppe der *Deferred-Correction Approaches* gehört und eine Linearkombination aus der UDS -Methode (*Upwind Difference Scheme*), mit einem Fehler 1. Ordnung, und der CDS -Methode (*Central Difference Scheme*), mit einem Fehler 2. Ordnung, darstellt. Zu bemerken ist, dass die UDS -Methode deutlich robuster ist und damit häufig bevorzugt wird. Wie in Abschnitt 7.7 aufgezeigt ist, führt die Diskretisierung nach der UDS -Methode bei bestimmten Anwendungen, wie z.B. der Berechnung von Rührkesselströmungen, zu erheblichen Verfälschungen der Strömungsstruktur und damit zu nicht tolerierbaren Fehlern. Die Diskretisierung der diffusiven Flüsse erfolgt immer mit einer reinen CDS -Methode. Eine sehr ausführliche Diskussion weiterer Diskretisierungsmöglichkeiten mit ihren spezifischen Vor- und Nachteilen findet sich bei Ferziger & Perić [92] als auch bei Schäfer & Perić [282].

Die Lösung der durch die Diskretisierung entstandenen algebraischen Matrix erfolgt mit dem halb-impliziten Verfahren von Stone [310] (SIP , *Strongly Implicit Procedure*), welches für penta- und hepta-Diagonalmatrizen (d.h. für dünnbesetzte Matrizen) optimiert ist. Das iterative Lösungsverfahren beruht auf einer unvollständigen Dreieckszerlegung (ILU , *Incomplete Lower-Upper Decomposition*, s. z.B. Press et al. [246]) und hat gegenüber direkten Verfahren einen erheblichen Geschwindigkeitsvorteil.

Da mit dem SIP -Verfahren jede Gleichung einzeln gelöst wird, ist eine anschließende Kopplung zwischen den einzelnen Variablen nötig. Bei den vorliegenden Untersuchungen wird dazu der $SIMPLE$ -Algorithmus (*Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations*) von Patankar & Spalding [236] verwendet, um sich iterativ der Lösung mit gegebener Genauigkeit, d.h. die Residuen müssen einen bestimmten Grenzwert unterschreiten, anzunähern. Von zentraler Bedeutung beim $SIMPLE$ -Verfahren ist die Kopplung zwischen Kontinuitäts- und Impulsgleichung durch die Druckkorrekturgleichung (welche auf Arbeiten von Rhie & Chow [264] zurückgeht und im Laufe der Zeit, z.B. von Perić [237], verbessert wurde), da keine explizite Gleichung für den Druck zur Verfügung steht.

Zur Strömungsberechnung in komplexen Geometrien mit beliebigen Randformen ist eine lokale Transformation in ein allgemeines nicht-orthogonales Koordinatensystem nötig. Perić [237] hat diese Problematik ausführlich diskutiert und die Vorteile eines kartesischen Koordinatensystems als Basissystem dargelegt.

Das Konvergenzverhalten kann durch den Einsatz der Mehrgittermethode (FMG , *Full MultiGrid Method*, s. z.B. Hackbusch [109] oder Ferziger & Perić [92]) beschleunigt werden. Dabei wird berücksichtigt, dass die Fehlerglättung am effizientesten erfolgt, wenn die Gittermaschenweite in der Größenordnung der Wellenlänge der Fehler liegt. Durch Nutzung mehrerer Gitter, und damit Abdeckung mehrerer Wellenlängenbereiche, lässt sich eine erhebliche Beschleunigung erreichen.

Die Nutzung leistungstarker Rechner, wie z.B. Vektor- und/oder Parallelrechner bietet eine weitere Möglichkeit die Berechnungen zu beschleunigen. Dabei haben sich in den letzten Jahren die Forschungstätigkeiten immer mehr Richtung Parallelisierung verschoben, da dieses Verfahren nicht zwangsläufig auf High-End Rechner angewiesen ist, sondern auch Kombinationen von Kleinrechnern als virtuelle Parallelrechner nutzen kann.

Bei *FASTEST3D* werden *MPI*-Routinen (*Message Passing Interface*) zur Realisierung der Kommunikation zwischen den Prozessoren eingesetzt. Jedem Prozessor wird ein bestimmter Teil des Strömungsgebietes zugeordnet und der Prozessor hat die Möglichkeit innerhalb seines eigenen Speicherbereiches autark zu agieren, d.h. ein Ausbremsen durch gemeinsamen Speicherzugriff ist nicht möglich. Allerdings müssen die einzelnen Gebiete miteinander gekoppelt werden, so dass eine Kommunikation zwischen den Prozessoren nötig wird. Reduziert man die Kommunikation (d.h. ein Datenaustausch findet z.B. nur nach jeweils n Iterationen statt), so führt das zu einer Verstärkung der Entkopplung und damit zu einer Erhöhung der Iterationszahl um zum gleichen Ergebnis zu gelangen. Da dieser Effekt stärker wiegt als der Kommunikationsaufwand, erfolgt ein Datenaustausch nach jeder Iteration.

Ein ähnliches Phänomen erhält man bei der Erhöhung der Anzahl an Prozessoren, da hier die den einzelnen Prozessoren zugeordneten Strömungsteilgebiete immer kleiner werden und es dadurch zu einer verstärkten Entkopplung kommt. Ebenso nimmt naturgemäß der Kommunikationsaufwand mit der Anzahl an Prozessoren zu. Eine gute Skalierbarkeit ist also nur bis zu einer bestimmten Anzahl an Prozessoren möglich.

5.1.2 Strömungsberechnung im Rührkessel

Aufgrund der hohen Komplexität von Rührkesselströmungen (Koexistenz von bewegten und ortsfesten Elementen) wurden im Laufe der Zeit eine Vielzahl von Varianten zur Erfassung des Impulseintrags durch den Rührer entwickelt, wobei in aller Regel die jeweils aktuellen Limitierungen der Computertechnik sowie das Ziel der Berechnung den Grad der Vereinfachung bestimmten. Eine Übersicht verschiedener Ansätze findet sich z.B. bei Brucato et al. [36] oder Sommerfeld & Decker [302]

Das älteste und prinzipiell einfachste Verfahren ist das *IBC*-Verfahren (*Impeller Boundary Condition*). Dabei wird die Geometrie des Rührers nicht aufgelöst⁷ und der Impulseintrag durch das Rührorgan erfolgt über zu spezifizierende Randbedingungen am fiktiven Rührerzylinder (siehe z.B. Issa & Gosman [139]), d.h. dem Gebiet, welches von den physikalischen Rührerblättern erfasst wird, oder über entsprechende Volumenquellterme für den Impuls (siehe z.B. Pericleous & Patel [238][239]), welche dann für den gesamten Rührerzylinder zu spezifizieren sind. Die Betrachtung des Rührers erfolgt damit umfangsgemittelt, so dass die Berechnung stati-

⁷Die Rührerwelle und ggf. die Rührerscheibe lassen sich aber ebenso wie die Stromstörer geometrisch auflösen.

onär durchgeführt werden kann. Unter Ausnutzung der Symmetrie reicht es bei vier Stromstörern ein Viertel des Strömungsgebiets aufzulösen. An der Berandung des Rührerzylinders werden dann Geschwindigkeitsprofile (und ggf. Daten für die turbulenten Größen) als Randbedingung vorgegeben, welche häufig direkt aus experimentellen Daten extrahiert werden.

In der Literatur wurde bereits eine Vielzahl von Varianten vorgeschlagen. So wurde die Rührerzone zum Teil komplett ausgeklammert (Betrachtung als poröser Zylinder, siehe z.B. Issa & Gosman [139]), als Bereich mit Festkörperrotation angenommen (siehe z.B. Harvey & Greaves [118][119]) oder mit entsprechenden Volumenquelltermen mitgerechnet (siehe z.B. Pericleous & Patel [238][239]). Die Randbedingungen wurden meist nur am Abstromrand des Zylinders gesetzt (siehe z.B. Bakker [6]), manchmal aber vollständig an allen Berandungsflächen (siehe z.B. Ranade & Joshi [255]). Oft lagen nur Meßwerte für einzelne Geschwindigkeitskomponenten vor, während die anderen Komponenten (meist auch die turbulenten Größen) abgeschätzt wurden (siehe z.B. Bakker [6]). Bei manchen Rechnungen blieben die turbulenten Randbedingungen auch vollständig unberücksichtigt (siehe z.B. Harvey & Greaves [118][119]).

In Abhängigkeit von der Güte der für den betrachteten Berechnungsfall benötigten Messungen, lassen sich die Strömungszustände im Rührkessel gut abbilden. Je nach Anwendungsfall muss die Datenbasis aber gegebenenfalls um sehr aufwendige detaillierte Messungen erweitert werden⁸, so dass eine schnelle Berechnung nicht mehr gegeben ist. Diese Abhängigkeit von sehr speziellen experimentellen Ergebnissen und deren Genauigkeit ist daher als großer Nachteil des Verfahrens zu bewerten.

Eine gewisse Verbesserung lässt sich durch allgemeinere Modellierungsansätze erreichen. Das phänomenologische *Swirling Radial Jet Model* (Kolar et al. [159], Kresta & Wood [163], Kresta [162]) ermöglicht eine alternative Beschreibung von Radialrührern. Die verschiedenen Modellparameter sind dann aber wieder mit Hilfe von Messungen zu ermitteln. Kresta & Wood [163] schlugen aber unter Berücksichtigung einer Vielzahl von experimentellen Ergebnissen (meist *LDA*-Messungen) optimale Werte für eine Reihe von Anwendungen vor, so dass für diese keine weiteren Messungen benötigt werden.

Ein theoretischer Ansatz wurde bei einem in der eigenen Arbeitsgruppe entwickelten Rührermodell verfolgt, bei dem ähnliche Ansätze zu Grunde liegen wie bei der Modellierung von Pericleous & Patel [238][239]. Die Impulsquellen werden über die Betrachtung der Widerstandskraft eines bewegten Körpers berechnet. Die Kräfte, welche die Rührerblätter auf das Fluid ausüben, lassen sich so lokal (d.h. in radialer und vertikaler Richtung aufgelöst und in Umfangsrichtung gemittelt) herleiten und

⁸Bei Untersuchungen von Fokema et al. [93] hat sich gezeigt, dass die für eine bestimmte Konfiguration gemessenen Randbedingungen nicht universell, sondern nur für sehr ähnliche geometrische Anordnungen einsetzbar sind., wobei diese in allen Kontrollvolumen angesetzt werden, welche durch den Rührer erfasst würden. So ist z.B. eine Variation der Einbauhöhe des Rührers nicht uneingeschränkt möglich, sofern nicht entsprechende Messungen für modifizierte Randbedingungen verfügbar sind.

berechnen. Aus den Kräften resultieren dann die entsprechenden Quellterme in den von den gedachten Rührerblättern durchstreiften Kontrollvolumen (siehe Decker & Sommerfeld [62]).

Analog zu den Rührerquelltermen lassen sich auch die Stromstörer als Volumenquellterme (wobei hier der Terminus Senke sicher zutreffender ist) modellieren. Damit ermöglichen sich dann zweidimensionale Betrachtungen (siehe z.B. Morud & Hjertager [209]) oder die geometrische Auflösung des Rührers (siehe z.B. Hutchings et al. [133]). Im zweiten Fall erfolgt die Berechnung dann im rotierenden Koordinatensystem und die Quellterme sind im gesamten Umfang anzusetzen⁹. In erster Näherung kann durch Transformation in ein stationäres Koordinatensystem auch mit bewegten Behälterwänden (d.h. entsprechend transformierten Quelltermen für die Stromstörer) gerechnet werden.

Generell sollten natürlich immer jene Bereiche modelliert werden, welche bei der aktuellen Betrachtung von geringerer Bedeutung sind. Eine Modellierung der Stromstörer macht also Sinn, wenn primär die Strömung am Rührer interessiert, während die Modellierung des Rührers angezeigt ist, wenn in erster Linie die Globalströmung im Rührbehälter richtig wiedergegeben werden muss. Zwangsläufig resultieren aber durch zeitliche Mittelung Ungenauigkeiten im Bereich der Modellierung (Rührer bzw. Stromstörer und Behälterwand). Eine ganzheitliche Betrachtung der Strömung im bewehrten Rührwerk, d.h. die Erfassung der lokalen Effekte an den Rührerblättern als auch an den Stromstörern, ist mit umfangsmittelnden Verfahren nicht möglich, so dass diese rasch an ihre Grenzen gelangen. Im Zuge der immer größeren Leistungsfähigkeit der verfügbaren Computer, werden diese Ansätze daher in jüngster Zeit kaum noch eingesetzt.

Zur parallelen geometrischen Auflösung des Rührers und der Stromstörer muss das Berechnungsgebiet in eine rotierende innere Zone (zur Auflösung der Rührergeometrie) und eine ortsfeste äußere Zone (für die Erfassung der Stromstörer und Behälterwände) unterteilt werden. Eine relativ einfache Umsetzung dieses Prinzips findet sich beim *IO*-Verfahren (*Inner-Outer*), welches von Brucato et al. [35] vorgeschlagen wurde. Dabei werden die Zonen (welche sich stark überlappen) getrennt von einander vernetzt und stationär nacheinander alternierend berechnet. Die fehlenden inneren Randbedingungen werden dann durch Interpolation und Transformation aus Daten der jeweils anderen Zone bestimmt. Nach mehreren Kopplungssimulationen erhält man so eine konvergente Gesamtlösung. Durch eine Mittelung der inneren Randbedingungen in Umfangsrichtung ist es auch möglich, dass die beiden Zonen, welche praktisch entkoppelt berechnet werden, verschieden große Winkelbereiche abdecken (z.B. innen 60° bei Sechsstabtrührern und außen 90° bei vier Stromstörern). Dabei wird angenommen, dass in der inneren Zone nur die Periodizität der Rührerblätter und in der äußeren Zone nur die der Stromstörer wirkt. Dies entspricht je nach Wahl der Zonengrenzen mehr oder weniger gut den realen

⁹Im eher seltenen Fall von unbewehrten Rührkesseln kann bei der Berechnung im rotierenden Koordinatensystem sogar ganz ohne Modellierung ausgekommen werden (siehe z.B. Dong et al. [74][75]).

Bedingungen.

Ohne eine Aufspaltung in zwei Zonen kommt das *CS*-Verfahren (*C*omputational *S*napshot) aus (siehe z.B. Ranade & Dommeti [252]). Die Auflösung des Rührers erfolgt hier allerdings indirekt, indem an den Oberflächen der Rührerblätter Quellterme entsprechend der Bewegung gesetzt werden¹⁰, um den resultierenden Drehimpuls zu berücksichtigen. Da es sich um eine stationäre Berechnung handelt (die transienten Terme in den Erhaltungsgleichungen werden vernachlässigt), wird faktisch die Strömung zu einem bestimmten Zeitpunkt betrachtet. Durch die Variation der Rührerstellung (d.h. des Zeitpunkts) kann so die gesamte Strömung untersucht werden. Bei einer instationären Berechnung sind die Quellterme in den Erhaltungsgleichungen dann zeitabhängig, d.h. sie werden jeweils an der aktuellen Position der Rührerblätter eingebracht und entsprechend der Rotation des Rührers für jeden Zeitschritt modifiziert (siehe z.B. Revstedt et al. [262]). Da die Beträge der Quellterme über die Betrachtung der Geschwindigkeitsdifferenz zwischen Rührerblätter und Fluid bestimmt werden, sind für die Umsetzung keinerlei experimentelle Daten nötig. Derksen & Van den Akker [70] haben für diesen Ansatz mit stationärem Gitter den Begriff *AFFT* (*A*daptive *F*orce-*F*ield *T*echnique) eingeführt.

Zur Vermeidung von Fehlern, welche durch Ungenauigkeiten der Quellterme entstehen würden, lässt sich das *SM*-Verfahren (*S*liding *M*esh)¹¹ verwenden (siehe z.B. Luo et al. [188]). Bei diesem instationären Verfahren wird das Berechnungsgebiet wie beim *IO*-Verfahren in einen inneren rotierenden und einen äußeren stationären Bereich unterteilt, um eine vollständige geometrische Auflösung zu ermöglichen. Die beiden Teilbereiche überlappen sich nicht (implizite Kopplung an der Grenzfläche) und können durch geeignete Interpolation aneinander vorbeigleiten. Eine Sonderform stellt das *CM*-Verfahren (*C*licking *M*esh) dar (siehe z.B. Wechsler et al. [343]), bei dem die Austauschfläche nach dem Berechnungszeitschritt Δt , d.h. nach der Verdrehung während dieses Zeitschritts, genau mit der entsprechenden Austauschfläche des Nachbarkontrollvolumens zusammenfällt. Die Unterteilung sowie (exemplarisch) der Austausch zwischen den beiden Bereichen zu einem Zeitpunkt t_i ist in Abb. 5.1-B für das *CM*-Verfahren skizziert. (Beim *IBC*-Verfahren würde entsprechend der in Abb. 5.1-A dargestellte Fall vorliegen, wobei entweder die Auflösung des Rotors oder des Stators vernachlässigt würde.) Durch die Drehung des Rotors erhält man dann zum Zeitpunkt $t_{i+1} = t_i + \Delta t$ die in Abb. 5.1-C dargestellte geänderte Austauschsituation, bzw. in Abb. 5.1-D die entsprechende programmtechnische Umsetzung. Beim *CM*-Verfahren ist die Wahl des Berechnungszeitschritts also sehr stark an die Drehzahl des Rotors und die Gitterauflösung in Umfangsrichtung (welche im Übrigen äquidistant sein muss) gekoppelt und kann somit nicht frei

¹⁰Im Falle es Scheibenrührers kann vereinfachend auch an den Rührerblättern sowie der Scheibe die tangentiale Geschwindigkeit (in Abhängigkeit vom Radius und der Rührerdrehzahl) als Randbedingung gesetzt.

¹¹Beim *SM*-Verfahren sind keinerlei Vereinfachungen nötig und der einzige empirische Parameter ist die Rührerdrehzahl. Die Auflösung der räumlichen wie auch der zeitlichen Strukturen resultiert aber in hohen Rechenzeiten, so dass die Nutzung von Periodizitäten große Bedeutung hat.

gewählt werden. Dafür entfällt die beim *SM*-Verfahren benötigte Interpolation¹² an den Übergangsfächen. Die Austauschterme müssen natürlich entsprechend der Austauschrichtung von einem rotierenden auf ein stationäres Koordinatensystem bzw. umgekehrt transformiert werden. Beim *MDM*-Verfahren (*Moving Deforming Mesh*) gleiten die beiden Bereichen nicht aneinander vorbei, sondern das Gitter wird im Übergangsbereich durch die Bewegung verzerrt (siehe z.B. Perng & Murthy [240]). Damit entfällt ebenfalls die Interpolation, allerdings können nun Fehler durch eine zu starke Verzerrung entstehen. Daher muss in kurzen regelmäßigen Abständen eine Umstrukturierung des Gitters erfolgen. Auch der hohe Verwaltungsaufwand während der Berechnung ist zu erwähnen.

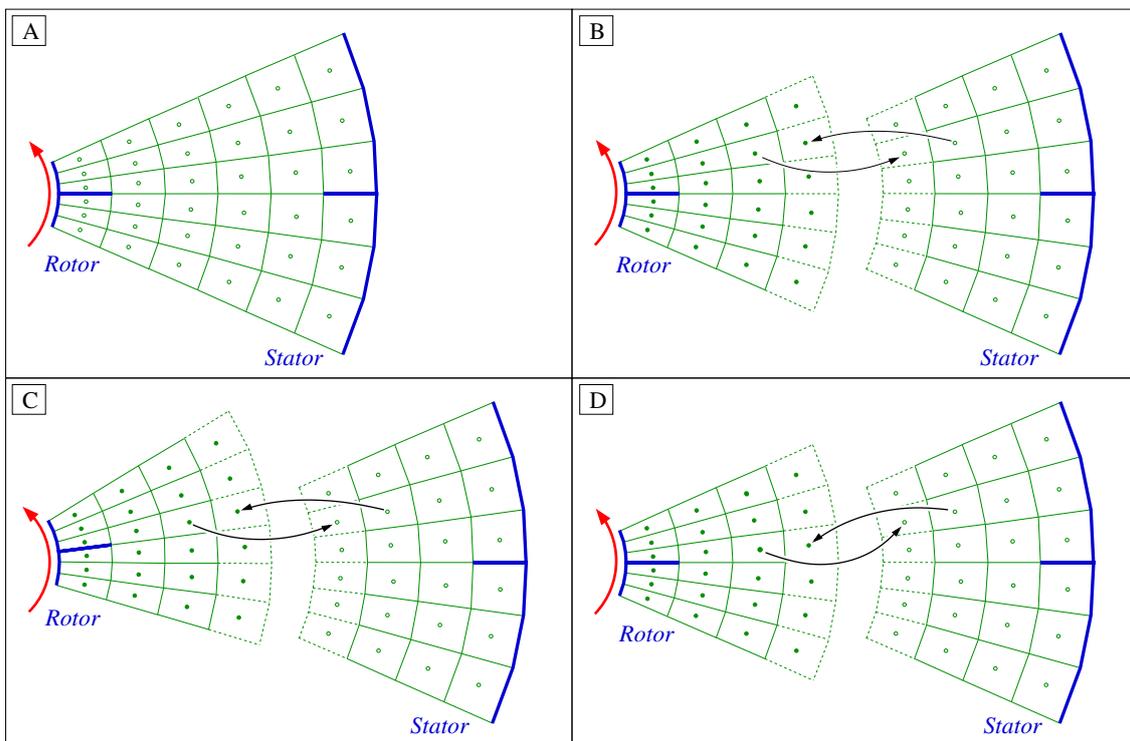


Abbildung 5.1: Einteilung des Berechnungsgitters bei verschiedenen Verfahren zur Berechnung einer Rotor-Stator Kombination

Für die meisten Anwendungen sind die sehr detaillierten Ergebnisse einer instationären Berechnung (z.B. für die Anfahr- und Übergangsphase zur periodisch stationären Strömung) nicht von Interesse, da die entsprechenden Prozesse (periodisch) stationär betrieben werden. Der sehr hohe Rechenaufwand, wobei der Löwenanteil auf die Anfahr- und Übergangsphase entfällt¹³, ist daher eigentlich nicht gerechtfertigt.

¹²Eine saubere Interpolationstechnik an den Grenzflächen zwischen rotierenden und stationären Bereichen ist nötig, um die Massen- und Impulserhaltung zu gewährleisten.

¹³Bakker et al. [9] ermittelten einen Bedarf von ca. 35 Umdrehungen, um einen voll entwickelten periodischen Strömungszustand zu erreichen.

tigt. Oft liegen auch zeitkritische Aufgabenstellungen vor, bei denen eine instationäre Betrachtung von vornherein auszuschließen ist.

Das *ASS*-Verfahren (*A*pproximate *S*teady-*S*tate) (oft auch als *MFR*-Verfahren (*M*ultiple *F*rames of *R*eference) oder *FR*-Verfahren (*F*rozen *R*otor) bezeichnet) verwendet wie das *IO*- und das *SM-/CM-/MDM*-Verfahren zwei Referenzkoordinatensysteme und die Rechnung erfolgt stationär (siehe z.B. Luo et al. [187] oder Issa [137]). Die Gitteranordnung entspricht aber dem *SM-/CM-/MDM*-Verfahren (s. Abb. 5.1-B), so dass im Gegensatz zum *IO*-Verfahren ein implizit gekoppeltes Gitter vorliegt (keine externen Iterationen nötig). Alle Teile des Rührsystems werden geometrisch exakt erfasst. Die Grenze zwischen der rotierenden und ortsfesten Zone ist so zu wählen, dass in Umfangsrichtung möglichst konstante Werte vorliegen (d.h. weder die instationäre Wirkung der Rührerblätter noch die Effekte der Stromstörer dürfen dominieren), um den Fehler durch die Betrachtung von nur einer Winkelstellung des Rührers klein zu halten (s. auch Issa [138]). Die geschickte Wahl der Grenzfläche spielt also eine Schlüsselrolle bei diesem Verfahren. Ferner ist zu bemerken, dass das Verfahren bei zu großen Rührern aus oben genannten Gründen nicht sinnvoll eingesetzt werden kann.

Die verschiedenen Modellierungsansätze¹⁴ wurden inzwischen in einer Vielzahl von Arbeiten für verschiedenste Anwendungsfälle verglichen (siehe z.B. Harvey et al. [115], Tabor et al. [315], Brucato et al. [36], Wechsler et al. [343], Montante et al. [204] usw. — eine umfangreichere Übersicht verschiedener Anwendungen, weitere Details zu den Realisierungen und Vergleiche der Ansätze befindet sich in Abschnitt 7.3). Dabei zeigte sich, dass stationäre Verfahren mit mehreren Referenzkoordinatensystemen im Vergleich zur instationären Berechnung bzw. zu Experimenten sehr gute Resultate liefern. Die Unterschiede zu instationären Verfahren sind meist sehr klein und tendenziell umso geringer, je kleiner der Abstand zwischen Rührerblättern und Stromstörern ist. Das *IBC*-Verfahren schneidet bei Vergleichen in der Regel deutlich schlechter ab.

Aufgrund der erheblichen Vorteile des *ASS*-Verfahrens bei den Berechnungszeiten, gerade mit Hinblick auf die benötigten Kopplungsiterationen mit dem Lagrange-schen Berechnungsteil für die disperse Phase (s. Abschnitt 5.4), ohne Einbußen bei der geometrischen Auflösung, wurde dieses Verfahren gegenüber den instationären Verfahren als ökonomische Alternative bevorzugt und bei den vorliegenden Untersuchungen eingesetzt.

¹⁴Eine schlüssige strukturierte Unterteilung der Verfahren ist nur bedingt möglich, da eine Vielzahl an Unterscheidungskriterien vorliegen (stationär oder instationär, ein oder mehrere Referenzkoordinatensysteme, Auflösung oder Ausklammerung der Rührergeometrie, experimentelle oder theoretische Randbedingungen, gemittelte oder Momentanbetrachtung usw.), so dass an dieser Stelle darauf verzichtet wurde.

5.2 Numerische Berechnung der dispersen Phase

Bei der Lagrangeschen Betrachtungsweise werden diskrete Teilchen betrachtet. Die Modellierung der dispersen Phase besteht also im Wesentlichen darin, die Analyse auf eine ausreichende Anzahl an repräsentativen Teilchen, welche als Kollektiv realer Teilchen mit gleichen Eigenschaften betrachtet werden, zu beschränken um diese dann im Strömungsfeld zu verfolgen. Die Berechnung der Partikelbahnen erfolgt anhand der angreifenden Kräfte und Momente durch schrittweise zeitliche Integration der Partikelbewegungsgleichungen (s. Abschnitt 4.2) entlang der Trajektorien. Die entsprechenden Fluideigenschaften am aktuellen Partikelort sind durch geeignete Interpolation zu bestimmen und werden für die Dauer eines Zeitschritts als konstant angenommen.

5.2.1 Zeitschrittbestimmung für die Partikelbewegung

Beim Verfolgen der repräsentativen Teilchen muss gewährleistet sein, dass der verwendete Zeitschritt Δt hinreichend klein ist, um den Teilchen die Möglichkeit zu geben auf Änderungen der Fluideigenschaften entlang der Trajektorien zu reagieren. Andererseits führen unnötig kleine Zeitschritte unter Umständen zu einer massiven Rechenzeiterhöhung. Daher ist es sinnvoll eine adaptive Zeitschrittbestimmung zu verwenden, bei der anhand von verschiedenen Kriterien der jeweils optimale lokale Zeitschritt bestimmt wird.

Zum einen muss sichergestellt sein, dass der Zeitschritt Δt kleiner als die Partikelrelaxationszeit τ_P ist, um dem Fluidfolgevermögen der Teilchen Rechnung zu tragen. Ferner müssen bei turbulenten Strömungen deren Strukturen berücksichtigt werden, um den Teilchen hinreichend Zeit für eventuelle Wechselwirkungen zu geben, d.h. das integrale turbulente Zeit- und Längenmaß muss berücksichtigt werden ($\Delta t < T_L$ und $\Delta t < L_E |\mathbf{v}|^{-1}$). Aus statistischen Gründen muss sich jedes Teilchen eine bestimmte Mindestanzahl an Zeitschritten in jedem Kontrollvolumen aufhalten. Bei einer charakteristischen Abmessung eines Kontrollvolumens von ℓ_{KV} muss somit $\Delta t < \ell_{KV} |\mathbf{v}|^{-1}$ gelten¹⁵. Um auf der sicheren Seite zu sein und z.B. den Annahmen bei der Ableitung des Dispersionsmodells (s. Abschnitt 4.3) zu genügen ($\Delta t \ll T_L$), werden entsprechende Sicherheitsfaktoren in der Größenordnung von 0.1 verwendet.

Bei der Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen kommt ein zusätzliches Kriterium hinzu, da bei den Ableitungen des Kollisionsmodells angenommen wurde, dass während eines Zeitschritts maximal eine Partikel-Partikel-Kollision stattfindet (s. Abschnitt 4.5.3). Der maximale Zeitschritt $\Delta t_{max,PPK}$ lässt sich mit Hilfe von Gl. 4.64 — unter Vorgabe einer Kollisionswahrscheinlichkeit für die nur eine binäre

¹⁵Bei der instationären Berechnung einer Fluidströmung existiert eine analoge Bedingung in Form der Courantzahl ($Co = \Delta t_E |\mathbf{u}| \ell_{KV}^{-1}$), welche das Verhältnis von Zeitschritt und charakteristischer Konvektionszeit beschreibt. Insbesondere für die Bewertung der Genauigkeit einer Berechnung ist die Courantzahl ein Schlüsselparameter (s. auch z.B. Ferziger & Perić [92]).

Kollision zu erwarten ist (hier $P_{PPK} = 5\%$) — berechnen und ist somit abhängig von den Teilchengrößen und -geschwindigkeiten sowie der lokalen Partikelanzahldichte.

5.2.2 Wechsel des Bezugssystems während der Bewegung entlang einer Partikeltrajektorie

Bei Verfahren mit mehreren Referenzkoordinatensystemen (wie beim hier verwendeten *ASS*-Verfahren) ist es nötig, die Teilchengeschwindigkeiten entsprechend dem jeweils relevanten Koordinatensystem zu betrachten, d.h. bei einem Wechsel des Bezugssystems muss eine entsprechende Transformation der Teilcheneigenschaften erfolgen. Zusätzlich ist die momentan vorliegende Fluidgeschwindigkeit in der Umgebung des Teilchens zu transformieren. Je nach Richtung des Übergangs muss zu der Tangentialkomponente der Geschwindigkeit der Term $\Omega_G(x_{1,P}^2 + x_{2,P}^2)^{1/2}$ addiert oder von ihr subtrahiert werden¹⁶. Ferner muss der Übergang bei der Partikelrotationsgeschwindigkeit berücksichtigt werden. Dies bedeutet, es muss von der $\omega_{3,P}$ -Komponente die Rotation des Gitters Ω_G subtrahiert oder zu ihr addiert werden. Bei beiden Transformationen wird bei einem Übergang vom stationären Gitter auf das rotierende Gitter subtrahiert und im umgekehrten Fall addiert.

Um dem instationären Verhalten des Rührers bei zeitabhängiger Betrachtung (wie sie beim Lagrange-Verfahren vorliegt) Rechnung zu tragen, muss der Übergangsort entsprechend der Flugzeit des Teilchens (und damit entsprechend der Rührerstellung) für das neue Bezugssystem bestimmt werden. Es erfolgt also in der Regel ein Versatz der Teilchenposition auf der Übergangsfläche in Umfangsrichtung.

5.2.3 Weitere Unterteilung des Berechnungsgitters für die disperse Phase

Bei der Erzeugung von komplexen hexaedralen Berechnungsgittern mit entsprechenden kommerziellen Gittergenerierungstools bestehen die Seitenflächen der einzelnen Kontrollvolumina in der Regel nicht aus exakt planen Flächen, d.h. die vier Eckpunkte liegen nicht zwingend in einer Ebene. Die Abweichungen spielen bei der Berechnung der fluiden Phase aufgrund des Finite-Volumen-Ansatzes keine Rolle, solange sie nicht zu groß werden. Dies ist praktisch immer sichergestellt, so dass dieses Phänomen bei einphasigen Berechnungen irrelevant und somit bei den meisten Bearbeitern nahezu unbekannt ist. Bei der Berechnung einer dispersen Phase mit dem Lagrangeschen Verfahren können diese kleinen Abweichungen aber fatale Folgen haben, da der aktuelle Partikelort unter Umständen nicht mehr eindeutig bestimmbar ist und das Teilchen somit in eine Endlosschleife geraten kann, welche dann wiederum explizit abgefangen werden muss. Um diese Problematik zu vermeiden werden die Kontrollvolumina in die kleinstmöglichen Einheiten unterteilt.

¹⁶Dabei wird angenommen, dass $\Omega_G \parallel \mathbf{e}_3$ erfüllt ist.

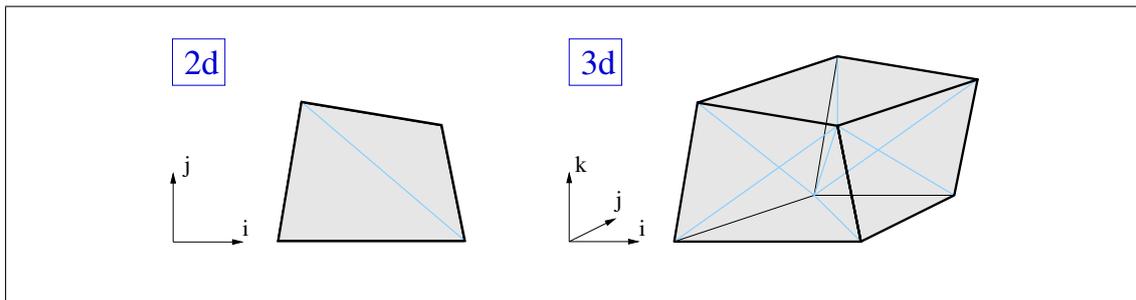


Abbildung 5.2: Unterteilung der Kontrollvolumina bei zwei- bzw. dreidimensionaler Betrachtung

Wie in Abb. 5.2 dargestellt resultieren dabei im Zweidimensionalen aus einem Viereck zwei Dreiecke und im Dreidimensionalen aus einem Hexaeder sechs Tetraeder. In Abb. 5.3 ist die gewählte Unterteilung in Tetraeder noch einmal deutlicher dargestellt. Entsprechend müssen auch die Seitenflächen der Kontrollvolumen für die korrekte Behandlung der Randbedingungen (z.B. Kollisionen der Teilchen mit der Wand) jeweils in zwei Dreiecksflächen unterteilt werden. Diese Unterteilungen sind in Abb. 5.4 mit der entsprechenden Indizierung zusammengefasst.

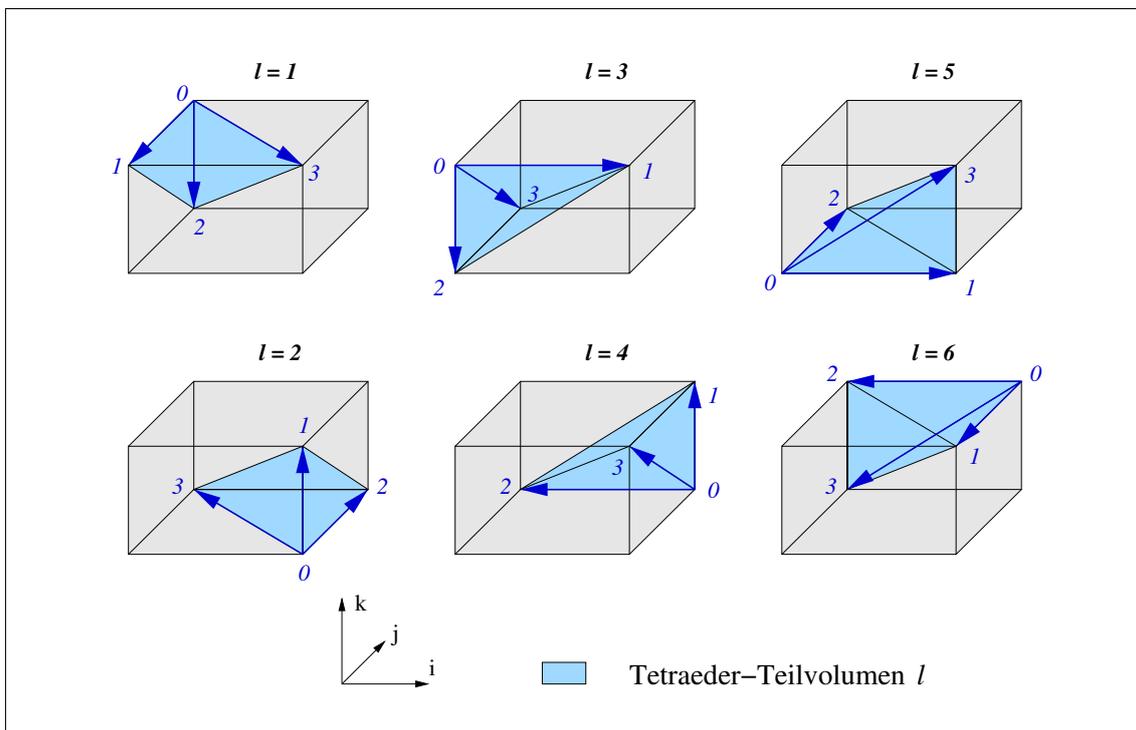


Abbildung 5.3: Unterteilung der einzelnen Kontrollvolumina (Hexaeder) in jeweils sechs Tetraeder-Teilvolumen

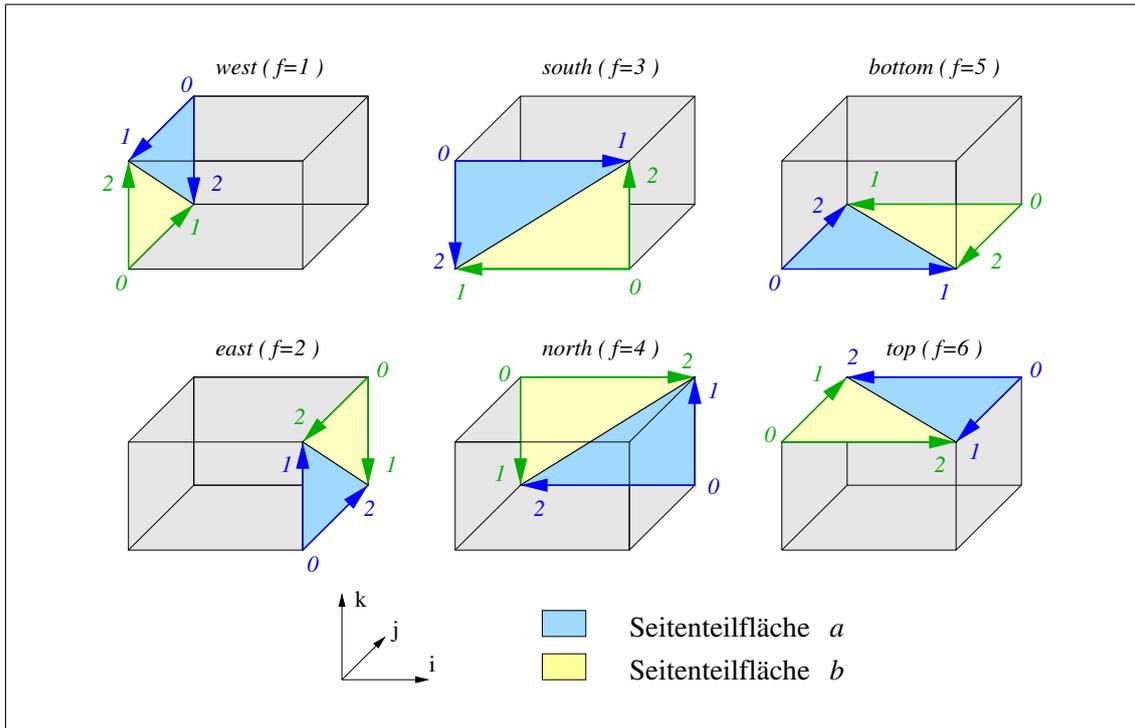


Abbildung 5.4: Unterteilung der Seitenflächen der einzelnen Kontrollvolumina

Durch die Unterteilung in Tetraeder lässt sich eine effiziente und einfache Interpolation der Fluideigenschaften am Partikelort realisieren. Die Nachbar-Tetraeder sind aufgrund der geordneten Struktur der Einteilung direkt bekannt, so dass sich durch die Berechnung von lokalen Koordinaten des neuen Partikelorts im bisherigen Tetraeder die Bewegungsrichtung bezüglich des Gitters und somit auch die Zuordnung der Partikelbahn zu den entsprechenden Kontrollvolumen bzw. Tetraedern effizient gestalten lässt.

5.2.4 Berechnung der Mittelwerte der dispersen Phase in den einzelnen Kontrollvolumina

Da die zeitlichen Mittelwerte der Partikelphase in den einzelnen Kontrollvolumina aufgrund der Lagrangeschen Betrachtungsweise nicht direkt vorliegen, müssen sie mit Hilfe der Ensemble-Mittelung gesondert bestimmt werden. Dieses Vorgehen entspricht sowohl einer zeitlichen als auch einer räumlichen Mittelung im Kontrollvolumen. Die Berechnung der einzelnen Größen erfolgt dabei gewichtet sowohl mit den jeweiligen Zeitschritten als auch mit der Anzahl an realen Partikeln pro Parcel.

Für die mittlere Partikelgeschwindigkeit ($\phi = \mathbf{V}$), den mittleren Partikeldurchmesser ($\phi = \bar{d}$) und die mittlere Dichte der Teilchen ($\phi = \bar{\rho}_P$) im betrachteten

Kontrollvolumen erhält man somit:

$$\phi = N_t^{-1} \sum_{k=1}^{n_s} \varphi_k N_{P,k} \Delta t_k f_{s,k} \quad \forall \quad \varphi = \mathbf{v}, d, \rho_P \quad (5.1)$$

$$\text{mit} \quad N_t = \sum_{k=1}^{n_s} N_{P,k} \Delta t_k f_{s,k} \quad (5.2)$$

Dabei ist f_s der Faktor für den anteiligen Aufenthalt eines Parcels im betrachteten Kontrollvolumen während eines Zeitschrittes Δt . Hält sich ein Parcel während des gesamten Zeitschrittes Δt im betrachteten Kontrollvolumen auf, so gilt $f_s = 1$. Entsprechend ist $f_s < 1$, wenn ein Parcel während des Zeitschrittes Δt das Kontrollvolumen betritt oder verlässt.

Die Komponenten der mittleren Partikelschwankungsgeschwindigkeit v'_i im betrachteten Kontrollvolumen berechnen sich entsprechend Gl. 5.3.

$$v'_i = \left(N_t^{-1} \sum_{k=1}^{n_s} v_i^2 N_{P,k} \Delta t_k f_{s,k} - V_i^2 \right)^{1/2} \quad (5.3)$$

Der mittlere Zeitschritt eines Partikels in einem bestimmten Kontrollvolumen errechnet sich analog mit:

$$\overline{\Delta t} = N_N^{-1} \sum_{k=1}^{n_s} N_{P,k} \Delta t_k f_{s,k} \quad (5.4)$$

$$\text{und} \quad N_N = \sum_{k=1}^{n_s} N_{P,k} f_{s,k} \quad (5.5)$$

Für die mittlere Verweilzeit eines Teilchens in einem bestimmten Kontrollvolumen (bezogen auf dessen Volumen V_{KV}) erhält man:

$$t_{KV} = V_{KV}^{-1} \overline{\Delta t} n_{ps} n_{pe}^{-1} \quad (5.6)$$

Dabei steht n_{ps} für die Anzahl an Partikelereignissen im betrachteten Kontrollvolumen und n_{pe} entsprechend für die Anzahl an Partikeleintritten. Diese beiden Werte sind nicht zu verwechseln mit n_s und n_e , welche die Anzahl an Parcelereignissen bzw. -eintritten repräsentieren.

Der mittlere Partikelvolumenanteil im betrachteten Kontrollvolumen berechnet sich mit:

$$\varphi_P = V_{KV}^{-1} \sum_{k=1}^{n_s} \dot{m}_{P,k} \rho_{P,k}^{-1} \Delta t_k f_{s,k} \quad (5.7)$$

Diese Beziehung gilt aber nur für offene Systeme, da bei geschlossenen Systemen in der Regel keine Massenströme verfügbar sind. Analog zu Abschnitt 4.4 lässt sich der mittlere Partikelvolumenanteil im Falle von geschlossenen Systemen wie folgt berechnen:

$$\varphi_P = V_{KV}^{-1} \sum_{k=1}^{n_s} \frac{1}{6} \pi d_k^3 N_{P,k} t_{ref}^{-1} \Delta t_k f_{s,k} \quad (5.8)$$

5.2.5 Abschätzung des statistischen Fehlers

Für die Beurteilung der Güte der mit den Gleichungen 5.1–5.8 errechneten Mittelwerte kommt die mathematische Statistik zum Einsatz. Dabei wird basierend auf Kenntnissen über gewisse Eigenschaften einer Teilmenge (diese ergibt sich im vorliegenden Fall durch die Berechnung von repräsentativen Teilchen) auf die entsprechenden Eigenschaften der Gesamtmenge bzw. Grundgesamtheit (welche alle Teilchen umfasst) geschlossen. Das interessierende Merkmal der Grundgesamtheit kann mathematisch durch eine Zufallsgröße X mit einer bestimmten Verteilung $F(X)$ modelliert werden. Dabei ist im quantitativen Fall die Zufallsgröße das Merkmal selbst.

Eine durchgeführte Lagrangesche Berechnung der dispersen Phase kann somit als eine Realisierung einer mathematischen Stichprobe eines bestimmten Umfangs betrachtet werden. Dabei wird vorausgesetzt, dass die Entnahme bzw. Wahl der einzelnen Elemente der Stichprobe zufällig und mathematisch unabhängig voneinander¹⁷ aus der Grundgesamtheit erfolgt. Aus dieser Realisierung lässt sich nun das empirische Mittel \bar{x} und die empirische Varianz s_x^2 der Stichprobe (x_1, \dots, x_n) berechnen. Bei einem Stichprobenumfang von n gilt somit:

$$\bar{x} = n^{-1} \sum_{k=1}^n x_k \quad \text{und} \quad s_x^2 = (n-1)^{-1} \sum_{k=1}^n (x_k - \bar{x})^2 \quad (5.9)$$

Die empirischen Werte sind also Schätzwerte für den Erwartungswert μ_x und die Varianz σ_x^2 der Grundgesamtheit und gleichen sich mit zunehmendem Stichprobenumfang n diesen asymptotisch an.

Bei wiederholter Realisierung und Berechnung von \bar{x} und s_x^2 kann man die Streuung der empirischen Mittelwerte mit Gl. 5.10 abschätzen.

$$s_{\bar{x}}^2 = s_x^2 n^{-1} \quad (5.10)$$

Lässt sich für X eine Normalverteilung nach $N(\bar{x}, s_x)$ annehmen, dann gilt für die Verteilung von \bar{x} entsprechend $N(\bar{x}, s_x n^{-1/2})$ und für die Stichprobenfunktion $Z_n = (\bar{x} - \mu_x) n^{1/2} \sigma_x^{-1}$ gilt $N(0, 1)$. Bei großen Stichproben¹⁸ genügt die Kenntnis der asymptotischen Grenzverteilung von Z_n für $n \rightarrow \infty$, d.h. die Streuung σ_x lässt sich mit guter Näherung durch die empirische Streuung s_x ersetzen. Damit gilt für die Stichprobenfunktion und deren Verteilung:

$$Z_n = (\bar{x} - \mu_x) s_x^{-1} n^{1/2} \quad (5.11)$$

¹⁷Entlang einer Parcel-Bahn innerhalb eines Kontrollvolumens kann in der Regel keine statistische Unabhängigkeit angenommen werden. Statistisch unabhängige Ereignisse liegen also primär bei unterschiedlichen repräsentativen Teilchen vor. Dies gilt besonders bei relativ kleinen Kontrollvolumina. Bei sehr großen Kontrollvolumina sind aber durchaus auch entlang einer Parcel-Bahn (aufgrund der relativ langen Weglänge) unkorrelierte Ereignisse möglich. Im vorliegenden Fall entspricht der Stichprobenumfang n also weniger der Anzahl an Parcelereignissen im betrachteten Kontrollvolumen als vielmehr der Anzahl an Parceleintritten.

¹⁸Ab welchem Wert n als groß zu bezeichnen ist, kann leider nicht allgemein festgelegt werden, da der asymptotische Verlauf abhängig von der gültigen Verteilungsfunktion ist. Im Falle einer Normalverteilung ist $n > 30$ bereits hinreichend groß.

$$\Phi(z) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^z \exp(-\frac{1}{2}z^2) dz \quad (5.12)$$

Für die Wahrscheinlichkeit, dass sich Z_n im Konfidenzintervall (oder Vertrauensintervall bzw. Toleranzbereich) von $-z_\alpha$ bis z_α befindet gilt also:

$$P(|Z_n| < z_\alpha) = \Phi(z_\alpha) - \Phi(-z_\alpha) = 2\Phi(z_\alpha) - 1 = P_\varepsilon = 1 - P_\alpha \quad (5.13)$$

P_ε ist also die statistische Sicherheit und P_α die Irrtumswahrscheinlichkeit. Durch die Vorgabe der erforderlichen statistischen Sicherheit (diese wird in der Praxis z.B. umso höher gewählt, je folgenreicher ein Irrtum bei der Ermittlung eines Merkmals der Grundgesamtheit ist) bzw. der Irrtumswahrscheinlichkeit lässt sich mit Hilfe von Tabellenwerken (z.B. Bronstein & Semendjajew [34] oder Strom [312]) z_α bestimmen. Die in der Praxis wichtigsten P_ε - P_α - $\Phi(z_\alpha)$ - z_α -Beziehungen sind in Tab. 5.1 zusammengefasst.

| P_ε | P_α | $\Phi(z_\alpha)$ | z_α |
|-----------------|------------|------------------|------------|
| 0.800 | 0.200 | 0.9000 | 1.282 |
| 0.900 | 0.100 | 0.9500 | 1.645 |
| 0.950 | 0.050 | 0.9750 | 1.960 |
| 0.990 | 0.010 | 0.9950 | 2.576 |
| 0.999 | 0.001 | 0.9995 | 3.291 |

Tabelle 5.1: Praxisrelevante P_ε - P_α - $\Phi(z_\alpha)$ - z_α -Beziehungen

Damit resultiert bei einer bestimmten Irrtumswahrscheinlichkeit der Vertrauensintervall für Z_n und damit ein Maß für den möglichen Fehler des berechneten Mittelwertes in Abhängigkeit von der empirischen Varianz und dem Stichprobenumfang. Mit einer statistischen Sicherheit von P_ε liegt also der tatsächliche Mittelwert der Grundgesamtheit im Bereich von $\bar{x} - z_\alpha s_x n^{-1/2}$ bis $\bar{x} + z_\alpha s_x n^{-1/2}$. Entsprechend lässt sich auch ein relativer Fehler ε_{rel} definieren, der dann zusätzlich noch vom empirischen Mittel abhängt. Der relative Fehler sinkt also mit $n^{-1/2}$, d.h. für eine Halbierung von ε_{rel} muss n vervierfacht werden.

$$\varepsilon_{rel} = |\bar{x} - \mu_x| |\bar{x}|^{-1} = z_\alpha s_x |\bar{x}|^{-1} n^{-1/2} \quad (5.14)$$

Die bei den Ableitungen getroffene Annahme, dass die Zufallsgröße X einer Normalverteilung folgt, wird im Allgemeinen als erfüllt betrachtet, da nach dem zentralen Grenzwertsatz der Statistik für die Mittelwerte bei großer Stichprobenzahl auch dann eine Normalverteilung vorliegt, wenn die Zufallsvariable in der Grundgesamtheit nicht einer solchen folgt. Zu bemerken ist ferner, dass für die Verteilung der Stichprobenfunktion nicht a priori eine Normalverteilung angenommen werden kann. Tatsächlich sind die Ableitungen allgemeiner mit der t -Verteilung vorzunehmen. Bei großen Proben, welche bei den vorliegenden Untersuchungen in aller Regel

vorliegen, lässt sich die t -Verteilung allerdings durch die standardisierte Normalverteilung approximieren. Ist der Probenumfang aber kleiner als $n = 30$, dann ist diese Approximation nicht zulässig und es muss die t -Verteilung verwendet werden.

Die aufgeführten Zusammenhänge sind z.B. bei Beitz & Grote [19] oder Schubert et al. [285] in komprimierter Form beschrieben. Eine ausführlichere und umfassendere Zusammenstellung findet man z.B. bei Strom [312] und Bronstein & Semendjajew [34]. Es ist zu erwähnen, dass Kohnen [157] analoge Überlegungen auch bei seinen Untersuchungen zum Konvergenzverhalten von gekoppelten Zweiphasenströmungen durchgeführt hat.

5.2.6 Ermittlung einer ausreichenden Anzahl an repräsentativen Teilchen

Die Ermittlung einer ausreichenden Anzahl an repräsentativen Teilchen gestaltet sich aufgrund der in Abschnitt 5.2.5 zusammengefassten Ableitungen schwierig. Mit Hilfe von Gl. 5.14 lässt sich zwar für gegebene statistische Sicherheit und maximal zulässigem relativen Fehler eine Abschätzung für die mindestens benötigte Anzahl an Parcels ableiten (Gl. 5.15), aber es wird schnell klar, dass diese Beziehung nur für relativ homogene Strömungszustände Sinn macht. Da die Mindestanzahl an Parcels sowohl vom ermittelten Mittelwert als auch von der Varianz in den einzelnen Kontrollvolumen abhängt, ist eine globale Aussage nur bei sehr gleichmäßiger Strömung möglich.

$$n_{min} = \varepsilon_{rel}^2 z_{\alpha}^{-2} s_x^{-2} \bar{x}^2 \quad (5.15)$$

Für komplexere Verhältnisse kann die Beziehung nur als grobe Abschätzung dienen, da die Unterschiede zwischen den einzelnen Kontrollvolumina sehr groß sein können und eine Betrachtung der ungünstigsten Kontrollvolumina zur Bestimmung eines globalen Wertes für die Mindestanzahl an unabhängigen Parcelereignissen je Kontrollvolumen nicht zielführend sein muss. Neben der Problematik der Ermittlung der ungünstigen Kontrollvolumina ist es gut vorstellbar, dass andere Kontrollvolumina von deutlich weniger Parcels durchströmt werden und somit aufgrund der ermittelten Mindestanzahl n_{min} die Anzahl an Partikeln pro Parcel reduziert werden muss um der Bedingung zu genügen. Dies hat natürlich eine Erhöhung der Berechnungszeit zur Folge, welche unter Umständen aus statistischen Gründen gar nicht nötig sein muss, da z.B. in diesen Kontrollvolumina die geforderte Genauigkeit bereits mit weniger Parcelereignissen realisiert werden könnte.

Ein anderer Weg zur Ermittlung einer ausreichenden Anzahl an Parcels ist die Betrachtung der Änderung von integralen Werten der Zweiphasenströmung bei einer Variation der Anzahl an Partikeln pro Parcel N_P . Bei einer stetigen Erniedrigung von N_P nähert sich der betrachtete integrale Wert aus statistischen Gründen einem Grenzwert an, dem realen integralen Wert. Eine Bewertung der Güte der Berechnung ist dann allerdings nur durch die Variation von N_P möglich. Bei der Berechnung

von vielen Parametervariationen (innerhalb eines nicht zu großen Variationsbereiches) reicht es in der Regel aber eine Bewertung der Berechnungsgüte für einen Referenzfall durchzuführen.

Die Wahl des integralen Bewertungsmaßes hängt stark von der zu untersuchenden Strömung ab. Eine allgemeine Empfehlung ist somit nicht möglich. An dieser Stelle sollen aber zwei allgemeine Maße zur Vermischung der Phasen aufgeführt werden, nämlich die Intensität und das lineare Längenmaß der Segregation.

Die Intensität der Segregation I_S ist ein Maß für die Gleichverteilung einer Mischung im gesamten betrachteten Bereich und wird nach Danckwerts [58] aus den lokalen Volumenanteilen der dispersen Phase φ_P wie folgt berechnet:

$$I_S = \frac{s_{\varphi_P}^2}{\langle \varphi_P \rangle (1 - \langle \varphi_P \rangle)} = \frac{\langle \varphi_P^2 \rangle - \langle \varphi_P \rangle^2}{\langle \varphi_P \rangle (1 - \langle \varphi_P \rangle)} \quad (5.16)$$

Dabei steht $\langle \dots \rangle$ für die räumliche Mittelung über das gesamte Strömungsgebiet. Für vollständige Segregation, d.h. vollständige Entmischung, gilt dann $I_S = 1$ und bei einer homogenen Verteilung ist $I_S = 0$. Da im Allgemeinen keine konstante Kontrollvolumengröße vorliegt, müssen die räumlichen Mittelungen volumengewichtet durchgeführt werden.

Das lineare Längenmaß der Segregation S_S ist ein Maß für die Größe von 'Konzentrationsballen', d.h. von lokalen Konzentrationserhöhungen, und wird nach Danckwerts [58] wie folgt bestimmt:

$$S_S = \int_0^\infty R(r) dr \approx \sum_{i=1}^{n_r} R(r_i) \Delta r_i \quad (5.17)$$

mit der Korrelationsfunktion

$$R(r = |\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|) = \overline{(\varphi_{P,A} - \langle \varphi_P \rangle)(\varphi_{P,B} - \langle \varphi_P \rangle)} s_{\varphi_P}^{-2} \quad (5.18)$$

und beliebigen Punkten A und B .

5.2.7 Parallelisierung

Für die Parallelisierung¹⁹ sind zwei prinzipielle Ansätze einsetzbar. Dies ist zum einen das Verfahren der Gebietszerlegung (dieses Verfahren wurde von Wassen [342] und Frank [96] intensiv untersucht) und die Verteilung der einzelnen Teilchen auf die zur Verfügung stehenden Prozessoren (dieses Verfahren wird vor allem durch *FAU-LSTM* und *MLU-MVT* vorangetrieben).

¹⁹Bei der parallelen Bearbeitung werden in der Regel Supercomputer oder Cluster (häufig auf Basis von handelsüblichen PC-Komponenten) verwendet. Eine gute Übersicht zum Einsatz von Supercomputern sowie eine Diskussion der verschiedenen Architekturen findet sich z.B. bei Bartels et al. [16]. Aktuell werden Parallel-Vektorcomputer als optimale Lösung angesehen.

Bei der Gebietszerlegung wird jedem Prozessor ein Teil des Strömungsgebiets zugeteilt. Dabei wird in der Regel die Zerlegung, welche bereits für die Berechnung der fluiden Phase vorgenommen wurde übernommen. Die Unterteilung ist somit für die Berechnung der kontinuierlichen Phase optimiert, d.h. die Teilgebiete sind (bei homogener Prozessorleistung) etwa gleich groß bzgl. der Anzahl an Kontrollvolumen. Die abgebildete geometrische Größe bleibt dabei unberücksichtigt. Diese ist aber im Zusammenhang mit den lokalen Strömungsbedingungen von zentraler Bedeutung für die Verweilzeit der Teilchen der dispersen Phase in den einzelnen Teilgebieten. Da jeder Prozessor nur die Teilchen berechnen kann, welche sich in seinem Berechnungsgebiet befinden, resultiert somit bei unbedachter Gebietszerlegung eine erhebliche Ungleichverteilung der Prozessorlast. Diese wird noch umso extremer, je separierter die Phasen vorliegen. Die Effizienz der Parallelisierung hängt also sehr stark von der Strömung selbst und der Gebietszerlegung ab. Als Vorteile sind zu nennen, dass der Kommunikationsaufwand gering ist und die Implementierung relativ einfach zu realisieren ist.

Um die Nachteile dieser statischen Gebietszerlegung (*Static Domain Decomposition - SDD*) zu reduzieren kann man Verfahren zur dynamischen Gebietszerlegung (*Dynamic Domain Decomposition - DDD*) einsetzen. Dabei erfolgt die Aufteilung auf die Prozessoren wiederholt während der Berechnung in Abhängigkeit von der aktuellen Prozessorauslastung. Die daraus resultierende verbesserte Prozessorauslastung geht aber einher mit einem erhöhten Kommunikationsaufwand zwischen den Prozessoren und zusätzlichen Rechenoperationen für die sich wiederholende Gebietszerlegung. Die optimale Frequenz der Reorganisation der Zerlegung muss somit in Abhängigkeit von der untersuchten Strömung bestimmt werden. Es ist zu bemerken, dass bei der *SDD* bei N Partitionen neben den N Prozessen für die eigentliche Berechnung der Trajektorien (diese benötigen primär Rechenzeit) noch einmal $N + 1$ Prozesse mit der optimalen Auslastung beschäftigt sind (diese sind weniger rechenintensiv, haben aber einen hohen Speicherbedarf). Bei aktuellen Rechnerarchitekturen ist häufig nur ein Prozess pro Prozessor erlaubt, so dass eine sehr ineffiziente Rechnerauslastung resultiert.

Die Konzentrationsverteilung im Strömungsgebiet hat den größten Einfluss auf die Effizienz der verschiedenen Verfahren. Da diese im Allgemeinen nicht a priori bekannt ist, lässt sich das optimale Verfahren vor Beginn der Simulation schwer vorhersagen. Eventuell lohnt eine für die disperse Phase optimierte Partitionierung. Bei stationären gekoppelten Problemen erfolgt die Annäherung an die tatsächliche Partikelverteilung aber iterativ, d.h. die optimale Partitionierung wird sich mit den Kopplungsiterationen ändern, so dass für eine optimale Effizienz das Gitter während der Berechnung angepasst werden müsste. Ähnlich verhält es sich bei der simultanen Berechnung aller Teilchen, welche inhärent instationär ist, so dass sich die Partikelverteilung während der Rechnung ständig ändern kann. In diesem Fall ist eine dynamische Umverteilung der Teilchen bei Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen schwierig, da zu jedem Zeitpunkt auch Informationen zu den Nachbarpartikeln benötigt werden und somit die Gefahr eines sehr hohen Kommunikationsaufwands gegeben ist.

Die *SDD* bietet sich z.B. für umfangreiche Parameterstudien an, bei denen keine gravierenden Änderungen der Randbedingungen vorliegen, so dass einmalig eine optimale Partitionierung vorgenommen werden kann um eine maximale Effizienz zu erzielen. Aufgrund der Unabhängigkeit der *DDD* von den physikalischen Eigenschaften der Strömung sowie der iterativen Entwicklung der Partikelverteilung ist die *DDD* genereller einsetzbar, aber mit größerem Kommunikationsaufwand verbunden.

Eine Zusammenstellung der Verfahrensdetails sowie die vergleichende Anwendung auf zwei Testfälle (horizontale und vertikale Rohrströmung) wurde von Wassen [342] durchgeführt. Er berichtet von sehr guter Skalierbarkeit bei bis zu acht Prozessoren, darüber geht die Effizienz zurück. Ab etwa 64 Prozessoren ist keine weitere Beschleunigung der Berechnung zu erzielen.

Beschreitet man den zweiten prinzipiellen Weg und verteilt nicht Gebiete auf die Prozessoren, sondern Teilchen, so lässt sich eine optimale Skalierbarkeit erreichen, da keinerlei Kommunikation zwischen den Prozessoren nötig ist. Dies setzt allerdings voraus, dass für die Berechnung einer Teilchentrajektorie keine Informationen über die anderen Trajektorien benötigt werden. Eine simultane Berechnung mit einer deterministischen Behandlung von Partikel-Partikel-Kollisionen macht hier also keinen Sinn. Ferner muss jedem Prozessor das gesamte Strömungsfeld vorliegen, so dass die Größe des betrachteten Problems durch den Speicherausbau der einzelnen Prozessoren bzw. Knoten begrenzt wird. Durch die Nutzung von Shared-Memory-Systemen kann dieses Problem auch nur bedingt umgangen werden, da hier unter Umständen mit Engpässen beim Speicherzugriff zu rechnen ist.

In Hinblick auf Effizienz ist das Verfahren der Partikelverteilung immer im Vorteil, da die natürliche Unterteilung des Systems genutzt wird. Sofern die Randbedingungen es erlauben, sind mit diesem Verfahren also die schnellsten Berechnungen zu erzielen.

5.3 Phasenkopplung

Bei der Berücksichtigung der Rückwirkung der dispersen Phase auf die fluide Phase mit dem in Abschnitt 4.4 vorgestellten *Particle-Source-in-Cell*-Verfahren ist insbesondere bei kopplungsintensiven Strömungsproblemen (dies bedeutet normalerweise bei einem erhöhten Massenanteil der dispersen Phase, welcher eine verstärkte Modifikation der Fluidströmung hervorruft) mit Instabilitäten bei der numerischen Simulation zu rechnen. Zur Erlangung einer konvergenten Lösung bei der iterativen Berechnung von zwei- oder mehrphasigen Strömungen müssen die Partikelquellterme somit in aller Regel unterrelaxiert werden. Dies bedeutet, die bei der aktuellen Iteration i berechneten Quellterme werden mit Hilfe der Quellterme der vorherigen Iteration $i - 1$ entsprechend Gl. 5.19 modifiziert.

$$S_{\phi,P}^{i(mod)} = f_{UR} S_{\phi,P}^i + (1 - f_{UR}) S_{\phi,P}^{i-1} \quad (5.19)$$

Damit lassen sich extreme Schwankungen aufgrund der sehr schlechten Kopplung zu Beginn der Iterationen dämpfen, wobei die Dämpfung umso stärker ausfällt,

je kleiner der Unterrelaxationsfaktor f_{UR} gewählt wird. Als weitere Konsequenz der Unterrelaxation erhöht sich die bis zur Konvergenz benötigte Anzahl an Iterationen, da die aktuellen Werte immer nur zu einem bestimmten Prozentsatz berücksichtigt werden. Die benötigte Stärke der Unterrelaxierung wurde bereits von Kohnen et al. [158][157] ausführlich diskutiert.

Der Volumeneffekt der dispersen Phase auf das Fluid wird bei den vorliegenden Berechnungen als vernachlässigbar angenommen. Bei kleinen bis moderaten Partikelkonzentrationen ist diese Annahme gut erfüllt, bei sehr hohen Konzentrationen ist aber mit einer reduzierten Genauigkeit zu rechnen.

Anmerkung zur Mischung von Eulerscher und Lagrangescher Betrachtungsweise:

Die Berechnung der fluiden Phase erfolgt in Eulerschen Koordinaten, d.h. die verschiedenen Fluideigenschaften (wie z.B. die Geschwindigkeit) liegen in Abhängigkeit vom Ort und der Zeit vor. Bei stationärer Betrachtung erfolgt eine Mittelung über die Zeit, so dass dann nur noch eine Ortsabhängigkeit vorliegt. Im Gegensatz dazu werden die Teilchen der dispersen Phase in Lagrangeschen Koordinaten instationär verfolgt, d.h. die Partikeleigenschaften (und dazu zählt hier auch der aktuelle Teilchenort) liegen als Funktion der Zeit vor. Eine Mittelung an bestimmten Orten kann daher nur als Ensemble-Mittelung erfolgen.

An der Schnittstelle zwischen den beiden Betrachtungsweisen, wie z.B. bei der Ermittlung und Berücksichtigung von Partikelquelltermen, ergibt sich dann das Problem, dass eine Verquickung der durch unterschiedliche Verfahren entstandenen Mittelwerte eigentlich nicht zulässig ist. Ein wichtiges Ergebnis der Ergodentheorie²⁰ besagt aber, dass bei kontinuierlichen Prozessen und unendlich vielen Realisationen in Lagrangeschen Koordinaten, d.h. bei der Betrachtung einer dispersen Phase die Berechnung von hinreichend vielen Teilchenbahnen, die Ensemble-Mittelwerte aus der Lagrangeschen Betrachtung mit den zeitlichen Mittelwerten aus der Eulerschen Betrachtung vergleichbar werden. Die Aussage der Ergodentheorie ist somit von zentraler Bedeutung für die Berechnung von Zweiphasenströmungen mit unterschiedlichen Betrachtungsweisen für die kontinuierliche und die disperse Phase. Generell wird in der vorliegenden Arbeit darauf geachtet bei der Ensemble-Mittelung hinreichend viele Trajektorien zu betrachten, so dass keine qualitative Unterscheidung zwischen der zeitlichen und der Ensemble-Mittelung vorgenommen werden muss.

5.4 Prinzipieller Programmablauf

Die aus verschiedenen Teilberechnungen bestehende Berechnung einer dispersen Zweiphasenströmung ist in Abb. 5.5 als schematischer Ablaufplan zusammengefasst.

Nach der Definition des betrachteten zweiphasigen Strömungsproblems steht als erster Schritt die Erstellung des Berechnungsgitters an. Dabei ist zunächst die Geome-

²⁰Eine Widerlegung der Ergodentheorie gibt es bisher nicht (s. Bradshaw[30]).

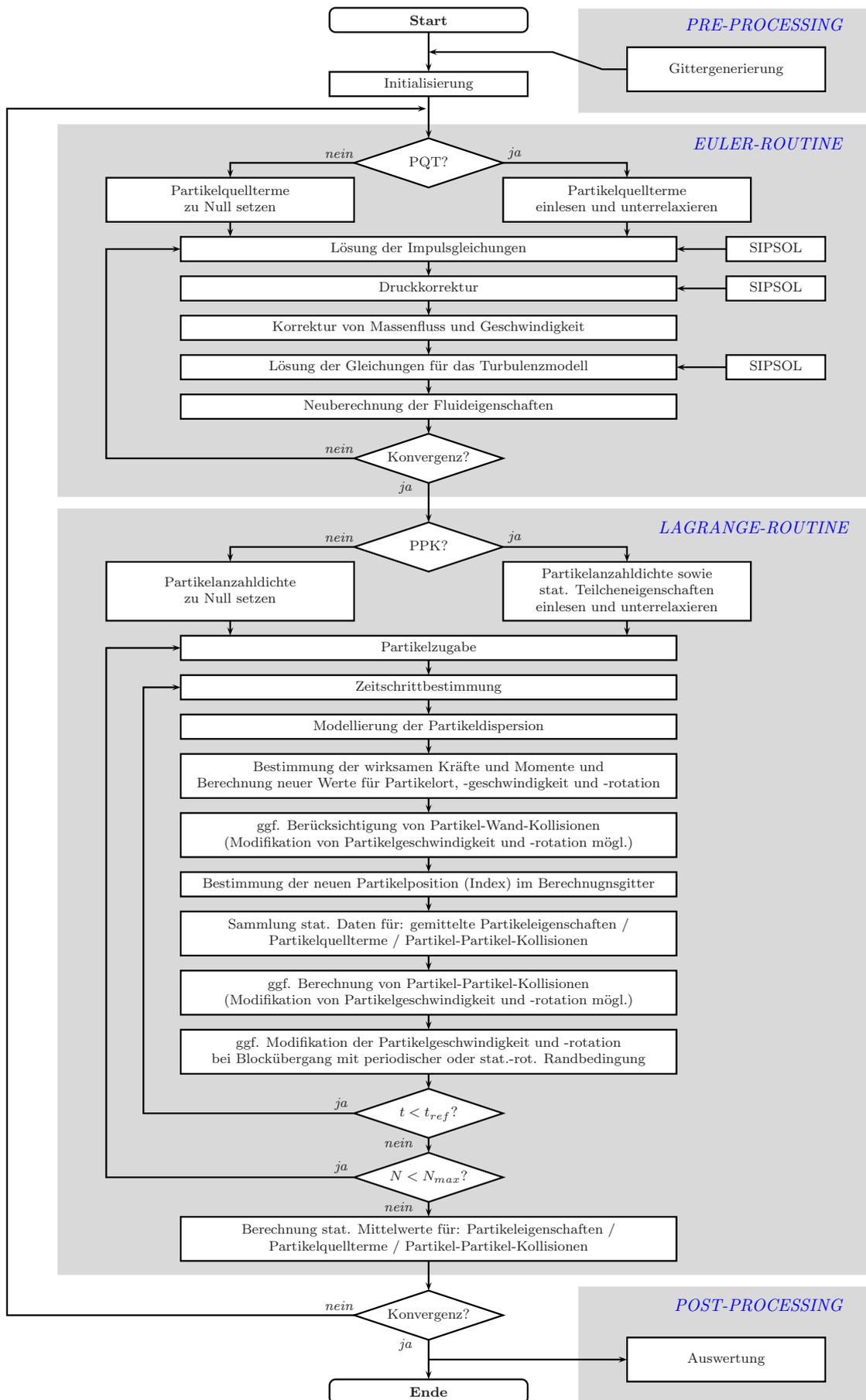


Abbildung 5.5: Programmablaufplan

trie, d.h. die Berandungen des Strömungsgebiets, zu modellieren, was üblicherweise mit Hilfe eines CAD-Programms erfolgt. Das somit definierte Strömungsgebiet wird dann im Anschluss unter Nutzung eines Vernetzungsprogramms in Kontrollvolumina unterteilt. Die sinnvolle Unterteilung des Strömungsgebiets ist dabei von zentraler Bedeutung für die Genauigkeit und Stabilität des gesamten weiteren Ablaufs, so dass ein erheblicher Aufwand bereits beim ersten Schritt unvermeidbar ist.

Es folgt die Initialisierung der Berechnung. Hier sind die Randbedingungen für die Strömungsberechnung, d.h. die Anfangsgeschwindigkeiten von Fluid und Teilchen am Einlass, die physikalischen Eigenschaften von Fluid und Teilchen, die Teilchengrößenverteilung usw., zu setzen.

Als erster Hauptblock der Berechnung schließt sich die Euler-Routine zur Berechnung der Fluidströmung an. Hier ist zunächst festzulegen, ob eine Berücksichtigung der Rückwirkung der dispersen Phase auf die fluide Phase über Partikelquellterme (PQT) nötig ist oder nicht. Zu vernachlässigen sind die Quellterme $S_{\phi,P}$ (s. Abschnitt 4.4) bei sehr geringer Konzentration an Partikeln, ansonsten sind die in der Lagrange-Routine ermittelten Quellterme einzulesen und in der Regel zu unterrelaxieren (s. Abschnitt 5.3). Zu Beginn der gekoppelten Berechnung liegen noch keine Informationen zu den Quelltermen vor, so dass sie zunächst zu Null gesetzt werden müssen. Nun kann das resultierende Gleichungssystem aufgesetzt und wie bereits in Abschnitt 5.1 beschrieben gelöst werden. Die Lösung der einzelnen Gleichungen erfolgt sequentiell mit einem *SIP*-Löser (*SIPSOL*), wobei zunächst die Impulsgleichungen gelöst werden und im Anschluss die Massenerhaltung über die Druckkorrektur berücksichtigt wird. Nach entsprechender Korrektur der Massenflüsse und der Geschwindigkeiten werden die Gleichungen für das Turbulenzmodell gelöst. Am Ende der Iterationsschleife werden die Fluideigenschaften unter Verwendung von Unterrelaxationsfaktoren neu gesetzt. Die iterative Lösung der Erhaltungsgleichungen erfolgt so lange, bis die Kopplung zwischen den Gleichungen hinreichend berücksichtigt und eine konvergierte Lösung des Systems erreicht ist.

Die Lagrange-Routine bildet den zweiten Hauptblock der Berechnung. Zu Beginn dieses Blocks muss festgelegt werden, ob Partikel-Partikel-Kollisionen (*PPK*) berücksichtigt werden sollen oder nicht. Auch hier ist die Teilchenkonzentration der entscheidende Parameter für eine Vernachlässigung oder Berücksichtigung (s. Abschnitt 4.5). Können die Kollisionen vernachlässigt werden, so lässt sich deren Modellierung durch Setzen der Partikelanzahldichte auf Null unterdrücken. Dürfen die Kollisionen nicht vernachlässigt werden, so müssen die bei der vorausgegangenen Iterationsschleife²¹ in der Lagrange-Routine statistisch ermittelten Partikelanzahldichten sowie die entsprechenden gemittelten Eigenschaften der dispersen Phase in den einzelnen Kontrollvolumen gesetzt werden. Analog zu der Berücksichtigung der Partikelquellterme in der Euler-Routine wird auch hier zur Stabilisierung eine Unterrelaxierung verwendet. Beim ersten Aufruf der Lagrange-Routine liegen noch keine statistischen Werte der dispersen Phase vor, so dass Partikel-Partikel-Kollisionen

²¹Die mittleren lokalen Werte der dispersen Phase sind a priori nicht bekannt, so dass eine Iteration analog zu der Berücksichtigung der Partikelquellterme nötig ist.

erst ab dem zweiten Aufruf berücksichtigt werden können.

Nach der Partikelzugabe²² erfolgt für jedes Parcel die Berechnung des maximal möglichen Zeitschritts unter Berücksichtigung der in Abschnitt 5.2.1 zusammengefassten Kriterien. Danach werden die aktuell auf die betrachteten Teilchen wirksamen Fluidkräfte bestimmt. Diese berechnen sich mit Hilfe der in Abschnitt 4.3 beschriebenen Modellierung für die Partikeldispersion. Basierend auf den vorliegenden fluiden Kräften und Momenten werden nun die während des betrachteten Zeitschritts resultierenden Änderungen der Teilcheneigenschaften (Partikelort, -geschwindigkeit und -rotation) berechnet. Durch die Änderung des Partikelortes besteht die Möglichkeit eines Wandkontakts, welcher dann durch Modifikation der Teilcheneigenschaften entsprechend Abschnitt 4.6 zu berücksichtigen ist. Aufgrund der Positionsänderung der Teilchen ist zu prüfen, ob sich die Positionen auch bzgl. des Berechnungsgitters verändert haben. Gegebenenfalls sind die Positionsindizes der Teilchen zu korrigieren (s. Abschnitt 5.2). Da sowohl für die Partikelquellterme als auch bei den Partikel-Partikel-Kollisionen statistische Informationen zu den Partikeleigenschaften in den einzelnen Kontrollvolumen benötigt werden, erfolgt für jeden Zeitschritt eine entsprechende Sammlung (Summation) mit Hinblick auf eine spätere Mittelung (s. Abschnitt 4.4 und 5.2.4). Natürlich sind diese gemittelten Daten auch für eine spätere Auswertung von großem Nutzen.

Neben den bereits erwähnten Partikel-Wand-Kollisionen können die Teilcheneigenschaften auch durch Partikel-Partikel-Wechselwirkungen modifiziert werden. Die dadurch resultierenden Änderungen berechnen sich mit Hilfe der in Abschnitt 4.6 beschriebenen Modellierung. Die Position dieser Modifikationen im Programmablauf erklärt sich dadurch, dass die Partikel-Partikel-Kollisionen zeitlich dem Ende des jeweiligen Zeitschritts zugeordnet sind, und somit erst für den nächsten Zeitschritt wirksam werden.

Schließlich ist zu prüfen, ob Transformationen von Geschwindigkeit und Rotation der Partikel aufgrund von Blockübergängen mit periodischer Randbedingung bzw. von Übergängen zwischen stationären und rotierenden Bereichen nötig sind, um diese gegebenenfalls durchzuführen (s. Abschnitt 5.2.2).

Für jedes Parcel wird nun geprüft, ob die akkumulierte Flugzeit t die definierte Referenzzeit t_{ref} bereits überschritten hat. Ist dies der Fall, so gilt die betrachtete Trajektorie an dieser Stelle für beendet²³. Ansonsten sind für die Trajektorienberechnung weitere Zeitschritte nötig, so dass im Ablaufplan eine entsprechende Schleife zur Zeitschrittbestimmung vorliegt.

²²Die Anzahl an gleichzeitig injizierten Teilchen ist abhängig von der Anzahl an zugelassenen parallelen Trajektorienberechnungen. In der Praxis hat sich bei den für diese Arbeit verfügbaren Rechnerarchitekturen eine Anzahl von etwa 300 als am effektivsten bzgl. Rechenzeit herauskristallisiert. Es ist allerdings zu bemerken, dass die optimale Anzahl an parallelen Trajektorien je nach verwendeter Rechnerarchitektur stark schwanken kann und somit der angeführte Wert nur als Richtwert zu sehen ist.

²³Bei offenen Systemen (wie z.B. Rohrströmungen - s. Abschnitt 6) greift dieses Kriterium nicht. Hier ist die Bedingung für das Ende der Trajektorienbetrachtung daher gleichbedeutend mit dem Verlassen des Berechnungsgebietes.

Ist eine Trajektorie abgeschlossen, so ist zu prüfen, ob bereits die geforderte Anzahl an Trajektorien N_{max} berechnet wurde oder nicht. Bei einer Trajektorienanzahl $N < N_{max}$ erfolgt eine weitere Partikelzugabe, während für den Fall $N = N_{max}$ keine weiteren Parcels zugeben werden und die gegebenenfalls noch nicht beendeten weiteren parallelen Trajektorien nur noch vervollständigt werden.

Im Anschluss wird der Lagrange-Block mit der Berechnung der statistischen Mittelwerte und Fluktuationen in den einzelnen Kontrollvolumen (s. Abschnitt 4.4 und 5.2.4) abgeschlossen.

Liegt nun bereits eine konvergente Lösung der Phasenkopplung vor (s. Abschnitt 6.3.2 und 7.14), so ist die Berechnung beendet und es schließt sich die Analyse der Ergebnisse an. Ansonsten ist wenigstens eine weitere Kopplungsiteration nötig, bei der dann die verbesserten Randbedingungen (die Partikelquellterme und die mittleren Teilcheneiwerdengenschaften zur Berechnung der Partikel-Partikel-Kollisionen unter Berücksichtigung geeigneter Unterrelaxierungen) aus der aktuellen Iteration zum Tragen kommen.

Es ist zu bemerken, dass es für einige Anwendungen durchaus Sinn macht, zusätzliche innere Iterationen für den Lagrange-Block durchzuführen, um zunächst die mittleren Teilcheneigenschaften zur Berechnung der Partikel-Partikel-Kollisionen zu verbessern, bevor eine erneute Berechnung des Fluids erfolgt (s. Abschnitt 7.14).

6 Validierung anhand einer zweiphasigen vertikalen Rohrströmung

Für die Validierung der verschiedenen Modelle bei der Berechnung der dispersen Phase nach dem Lagrangeschen Verfahren (insbesondere die Modellierung der Partikelkollisionen und der Phasenkopplung) wurde eine mit Partikeln beladene vertikale Rohrströmung gewählt. Die berechneten radialen Geschwindigkeitsprofile wurden dann mit den experimentellen Ergebnissen von Tsuji et al. [327] verglichen.

6.1 Beschreibung des Testfalls

Beim vorliegenden Testfall wird eine stationäre turbulente Strömung in einem Kreisquerschnitt betrachtet. Die Rohrströmung ist vertikal angeordnet und fördert gegen die Schwerkraft nach oben. Als Fluid kommt Luft zum Einsatz, welche mit inerten Feststoffteilchen beladen ist.

Die Ergebnisse der numerischen Berechnungen werden mit den experimentellen Ergebnissen von Tsuji et al. [327] verglichen. Die simultane Messung der Luft- und Partikelgeschwindigkeiten erfolgte dabei mit Hilfe der Laser-Doppler-Anemometrie. Die experimentellen Verfahren basieren auf vorausgegangenen Untersuchungen an einer horizontalen Rohrströmung (Tsuji & Morikawa [325]). Bei der vertikalen Anordnung erhält man aber im Gegensatz zur horizontalen Anordnung keine unsymmetrische Struktur der Profile durch Schwerkrafteinflüsse.

Ähnliche Versuche wurden auch von Maeda et al. [190] durchgeführt. Der Durchmesser der betrachteten Rohre war aber größer und die realisierten Geschwindigkeiten deutlich kleiner. Ferner kamen relativ kleine Glas- und Kupferteilchen zum Einsatz. Für die Validierung der Phasenkopplung und des Kollisionsmodells sind die Daten aber nicht geeignet, da ein zu kleiner Bereich von Beladungen untersucht wurde. Auch Lee & Durst [173] haben bei ihren Experimenten kleine schwere Teilchen bei relativ geringen Luftgeschwindigkeiten eingesetzt. Dabei wurden Massenbeladungen von bis zu $M = 3$ erreicht, welche aber aufgrund der schweren Teilchen relativ

geringen Volumenbelastungen entsprechen. Für den Vergleich der numerischen Berechnungen mit experimentellen Ergebnissen wurde daher die Arbeit von Tsuji et al. [327] als am geeignetsten erachtet¹.

Durch die Aufnahme der Messprofile in einer Entfernung von $L_R = 5.11$ m stromab von der Teilchenzugabe, d.h. einer Einlaufstrecke von mehr als $160 \cdot D_R$ bei einem Rohrinne Durchmesser von $D_R = 30.5$ mm, ist die Messung eines stationären Zustands sichergestellt. Überprüft und bestätigt wurde dies von Tsuji et al. [327] durch Druckverlustmessungen entlang des Rohres für verschiedene Luftgeschwindigkeiten.

Als Tracer für die Messung der Luftgeschwindigkeiten kam Salmiak (Ammoniumchlorid, NH_4Cl) mit Teilchendurchmessern von ca. $0.6 \mu\text{m}$ zum Einsatz. Es wurden neben einer zylindrischen Teilchenform vier verschiedene Teilchengrößenklassen von kugelförmigen Teilchen ($d = 0.2 \dots 3$ mm) aus Polystyrol bei Massenbelastungen von $M = 0 \dots 5$ untersucht. Um Effekte durch elektrostatische Aufladung (z.B. durch Wandreibung) zu verhindern, wurden die kleinen Teilchen speziell beschichtet. Die betrachteten querschnittsgemittelten axialen Luftgeschwindigkeiten lagen im Bereich von $U_{3,m} = 8 \dots 20 \text{ m s}^{-1}$. Damit berechnen sich mit Luft Reynoldszahlen von

$$\text{Re} = D_R |U_{3,m}| \rho \mu^{-1} = 16000 \dots 40000 \gg 2320 \quad (6.1)$$

(Bei Raumtemperatur gilt für Luft: $\rho = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ und $\mu = 18.24 \cdot 10^{-6} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$). Die Dicke der laminaren Grenzschicht lässt sich nach Prandtl wie folgt bestimmen:

$$\delta_\ell = 32.4 D_R \left(\frac{1}{2} \text{Re}\right)^{-0.875} \quad (6.2)$$

In den vorliegenden Fällen ergeben sich somit Grenzschichtdicken von $\delta_\ell = 0.4 \dots 0.18$ mm. Die Rauigkeitstiefen bei handelsüblichen Glasrohren sind immer kleiner als die ermittelten Grenzschichtdicken, so daß für die Strömung ein hydraulisch glattes Rohr vorliegt.

6.2 Theoretische radiale Profile der axialen Strömungsgeschwindigkeit

Nach Nikuradse läßt sich die axiale Geschwindigkeit im Rohr bei turbulenter Strömung in Abhängigkeit vom Radius r wie folgt approximieren:

$$U_3(r)/U_{3,c} = \left(1 - 2r D_R^{-1}\right)^n \quad (6.3)$$

wobei für die axiale Geschwindigkeit im Zentrum $U_{3,c}$, d.h. auf der Symmetrielinie, gilt:

$$U_{3,c}/U_{3,m} = \frac{1}{2}(n+1)(n+2) \quad (6.4)$$

¹Ein sehr guter Überblick über bereits durchgeführte experimentelle Untersuchungen im Bereich zweiphasiger Rohr- und Kanalströmungen wurde kürzlich von Sommerfeld [301] zusammengestellt.

Für die vorliegenden Bedingungen nimmt der Exponent n einen Wert von $1/7$ an. Die Beziehung von Gl. 6.3 wird daher oft auch als $1/7$ -Potenzgesetz bezeichnet. Gl. 6.4 reduziert sich dann zu $U_{3,c} = 1.224 \cdot U_{3,m}$. Zu erwähnen ist aber, dass der Exponent n sowohl von der Reynoldszahl als auch von der Wandrauhigkeit abhängt. In beiden Fällen führt ein Anstieg zu einer Erniedrigung des Exponenten n . In Tab. 6.1 ist die Abhängigkeit von der Reynoldszahl zusammengestellt.

| Re | n |
|--------------------------|--------|
| $\approx 4.0 \cdot 10^3$ | $1/6$ |
| $\approx 1.1 \cdot 10^5$ | $1/7$ |
| $\approx 3.2 \cdot 10^6$ | $1/10$ |

Tabelle 6.1: Abhängigkeit des Exponenten n (Gl. 6.3) von der Reynoldszahl Re

6.3 Numerische Berechnung und Vergleich mit Experimenten

6.3.1 Reine Luftströmung

Für die Berechnung der Rohrströmung wurde zur Reduzierung der Berechnungszeiten ein Rohrviertel mit symmetrischen Randbedingungen in tangentialer Richtung gewählt. Da im Vergleichsprofil ein stationärer Zustand vorliegt, konnte unter Verwendung von periodischen Randbedingungen in axialer Richtung (d.h. die Werte am Einlassrand werden unter Kontrolle des Massenflusses, welcher durch das Geschwindigkeitsprofil am Einlassrand zu Beginn der Berechnung definiert ist, nach jeder Iteration durch die Werte am Auslassrand ersetzt) die Rohrlänge stark verkürzt und damit nur ein Ausschnitt im stationären Bereich betrachtet werden.

Die Berechnung der turbulenten Rohrströmung erfolgt unter Nutzung des k - ε -Turbulenzmodells in Verbindung mit der logarithmischen Wandfunktion (s. auch Abschnitt 3.3). Damit ist zur realistischen Simulation der Wandgrenzschicht die Gitterauflösung an der Wand zu überprüfen. In Abb. 6.1 sind die vier Gittervarianten abgebildet, welche in Hinblick auf die Gültigkeit des logarithmischen Wandgesetzes untersucht wurden.

Zur korrekten Behandlung der Wandgrenzschicht muss der dimensionslose normale Wandabstand y^+ der wandnächsten Kontrollvolumenzentren im Bereich von $30 \dots 100$ (bzw. bei etwas großzügigerer Lesart im noch praktikablen Bereich von $10 \dots 300$) liegen.

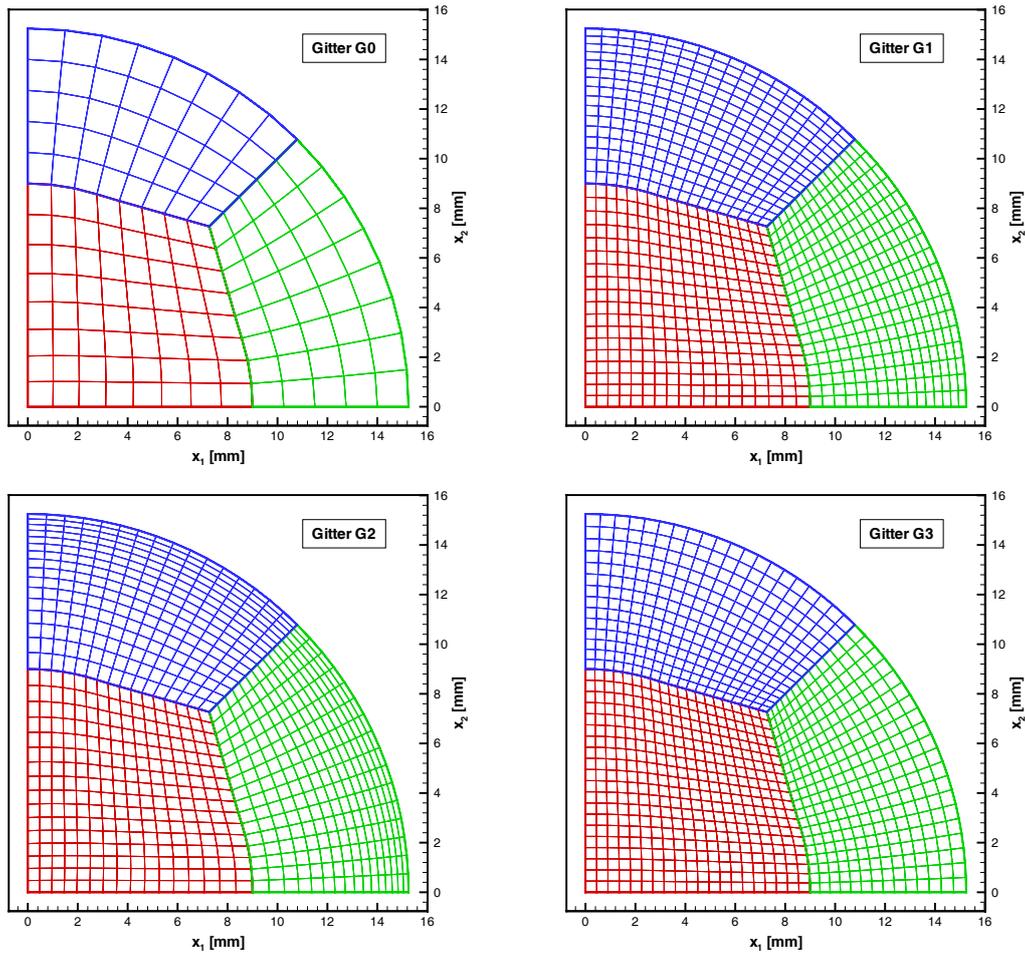


Abbildung 6.1: Auflösung der untersuchten Berechnungsgitter G0 - G3 in der Querschnittsebene

| Berechnungsgitter | Anzahl an Kontrollvolumen in der Querschnittsebene | y^+ der wandnächsten Kontrollvolumenzentren |
|-------------------|--|---|
| G0 | 144 | 24.6... 26.9 |
| G1 | 900 | 7.0... 7.6 |
| G2 | 768 | 5.0... 5.5 |
| G3 | 960 | 10.3... 11.1 |

Tabelle 6.2: Gitterauflösung und dimensionsloser normaler Wandabstand y^+ der wandnächsten Kontrollvolumenzentren bei den untersuchten vier Berechnungsgittern G0 - G3

Für die betrachteten Berechnungsgitter sind in Tab. 6.2 die Auflösung im Querschnitt sowie die für eine mittlere Luftgeschwindigkeit von $U_{3,m} = 11 \text{ m s}^{-1}$ berech-

neten dimensionslosen normalen Wandabständen y^+ der wandnächsten Kontrollvolumenzentren zusammengefasst.

Die Folgen einer fehlerhaften Auflösung in Wandnähe werden in Abb. 6.2 deutlich. Die aufgetragenen Profile der axialen Geschwindigkeit U_3 sind dabei Mittelwerte der fünf radialen Profile bei 15° , 30° , 45° , 60° und 75° . Die Mittelung ist allerdings nicht zwingend nötig, da sich bei der Betrachtung der einzelnen Profile praktisch keine Unterschiede gezeigt haben, d.h. der rotationssymmetrische Charakter der Strömung wird auch durch die 3-dimensionale Berechnung richtig wiedergegeben.

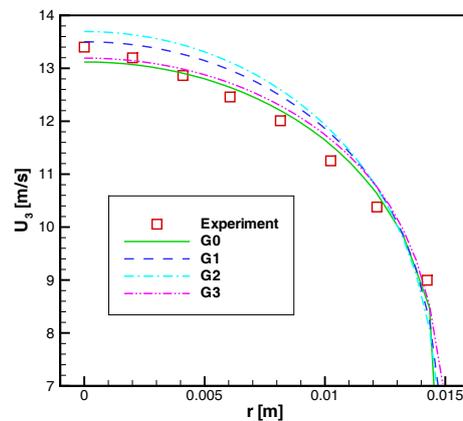


Abbildung 6.2: Vergleich der berechneten radialen Profile der vertikalen Fluidgeschwindigkeit U_3 mit den entsprechenden experimentellen Daten für die vier untersuchten Berechnungsgitter G0 - G3

Durch zu kleine Kontrollvolumen an der Wand werden die Haftkräfte an der Wand überbewertet, so dass für die axiale Geschwindigkeit im Kernbereich der Rohrströmung aufgrund der Kontinuität überhöhte Werte berechnet werden. Die Überhöhung ist dabei umso größer, je feiner die Auflösung an der Wand erfolgt (s. Gitter G1 und G2). Im Fall G3 liegen in den wandnächsten Kontrollvolumen y^+ -Werte der Größenordnung 10 vor und die Profile unterscheiden sich nur noch geringfügig von denen von Fall G0, bei dem nahezu ideale y^+ -Werte von ca. 25 berechnet werden. Dies unterstützt die These, dass auch bei y^+ -Werten im erweiterten Bereich von $10 \dots 300$ noch akzeptable Ergebnisse möglich sind. Aufgrund der Ergebnisse dieses Vergleiches wurde das Berechnungsgitter G0 für die weiteren Berechnungen gewählt.

Stellt man das gemessene und das berechnete Profil den theoretischen Profilen nach Gl. 6.3 bei variierenden Exponenten gegenüber (s. Abb. 6.3), so zeigt sich wie erwartet die beste Übereinstimmung für $n = 1/7$. Allerdings wird die maximale Geschwindigkeit im Zentrum bei der Berechnung nicht erreicht. Dies führt zu überhöht berech-

neten relativen Geschwindigkeiten in einem breiten Bereich (Abb. 6.3 rechts), obwohl an gleicher Stelle eine gute Übereinstimmung bei den vertikalen Geschwindigkeiten vorliegt (Abb. 6.3 links). Als Ursache für die Abweichungen des berechneten Profils von den theoretischen bzw. experimentell ermittelten Profilen ist die Voraussetzung von Isotropie der Schwankungsgeschwindigkeiten beim k - ε -Turbulenzmodell zu nennen. Diese These wird in Abschnitt 6.3.2 noch untermauert werden, da bei höheren Partikelbeladungen eine Isotropisierung der Strömung erfolgt und dadurch eine bessere Übereinstimmung erreicht wird.

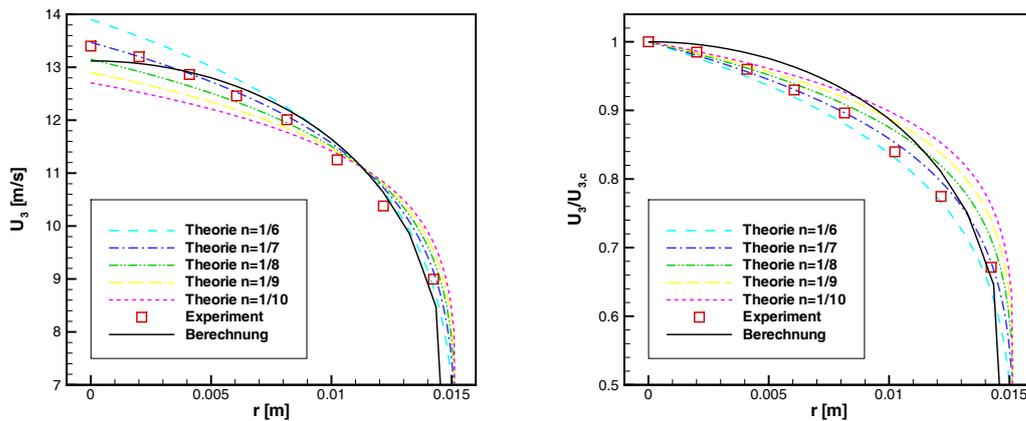


Abbildung 6.3: Vergleich der berechneten (Berechnungsgitters G0) radialen Profile der vertikalen Fluidgeschwindigkeit U_3 (links) und der auf die axiale Fluidgeschwindigkeit im Zentrum $U_{3,c}$ bezogene vertikale Fluidgeschwindigkeit (rechts) mit theoretischen Profilen nach Gl. 6.3 sowie den entsprechenden experimentellen Daten

6.3.2 Partikelbeladene Strömung

Auch bei der Berechnung der dispersen Phase kam ebenfalls eine periodische Randbedingung zum Einsatz. Dabei wurden die ersten 300 Teilchen an beliebiger Stelle im Querschnitt gestartet und die Partikelbahnen im Strömungsgebiet berechnet. Für alle weiteren Teilchen wurde die Startposition jeweils durch Verschiebung der Austrittsposition eines vorausgegangenen Teilchens in die Einlassebene ermittelt, um der Periodizität Rechnung zu tragen. Die Gesamtanzahl an zu berechnenden Partikelbahnen muss natürlich im Vergleich zur Anzahl an Startteilchen hinreichend groß gewählt werden, um einen Einfluss der beliebigen Startbedingungen auf das Berechnungsergebnis ausschließen zu können und einen stationären Zustand zu erreichen.

Für den Vergleich mit den Experimenten von Tsuji et al. [327] wurden mit monodispersen sphärischen Polystyrol-Teilchen ($d = 200 \mu\text{m}$, $\rho_P = 1020 \text{ kg m}^{-3}$) beladene Strömungen berechnet. Die betrachteten Beladungen sowie die dazugehörige querschnittsgemittelte axiale Luftgeschwindigkeit sind in Tab. 6.3 zusammengefasst.

| Fall | M | $U_{3,m} [\text{m s}^{-1}]$ |
|------|-----|-----------------------------|
| 1 | 0.0 | 11.0 |
| 2 | 0.5 | 11.0 |
| 3 | 1.3 | 11.0 |
| 4 | 1.9 | 11.0 |
| 5 | 3.2 | 11.0 |
| 6 | 1.0 | 18.9 |
| 7 | 2.1 | 17.4 |
| 8 | 4.2 | 14.6 |

Tabelle 6.3: Betrachtete Fälle mit den Beladungen M und den dazugehörigen querschnittsgemittelten axialen Luftgeschwindigkeiten $U_{3,m}$ Tab. 6.2

Zu Beginn der Berechnung der fluiden Phase wurde am Einlass ein Blockprofil mit $U_3 = U_{3,m}$ und $U_1 = U_2 = 0 \text{ m s}^{-1}$ angenommen. Ferner wurde für die turbulente kinetische Energie $k = 1 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$ und die Dissipationsrate $\varepsilon = k^{3/2}/\ell$, wobei $\ell = D_R/2$, gesetzt. Für Berechnungen, welche auf bereits bestehende Berechnungen aufbauen, d.h. im Verlauf der Phasenkopplungsiterationen, haben diese Einstellungen aufgrund der periodischen Randbedingung in axialer Richtung keinen Einfluss auf die Berechnungen, da die Datenfelder mit bereits vorliegenden, besseren (d.h. realitätsnäheren) Werten initialisiert werden.

Die Unterrelaxierung bei der iterativen Lösung der Fluidströmung lag im üblichen Bereich, d.h. Unterrelaxierungsfaktoren von 0.3 für die Massenerhaltung bzw. 0.6 für alle weiteren Variablen. Bei der Phasenkopplung, d.h. bei der Ermittlung der Partikelquellterme, als auch bei der Bestimmung der räumlich aufgelösten zeitlich gemittelten Partikeleigenschaften in den jeweiligen Kontrollvolumen (welche für die Berechnung der Partikel-Partikel-Kollisionen benötigt werden) wurde bei allen Variablen mit 0.1 unterrelaxiert.

Bei der Berechnung der Fluidströmung wurden maximal 3000 Iterationen durchgeführt. Eine konvergente Lösung wurde bei Erreichen der normierten Residuen von 10^{-6} angenommen. Für eine konvergente Zweiphasenströmung waren bis zu 40 Kopplungsiterationen nötig.

Bei jeder Kopplung wurden 10^5 Partikelbahnen berechnet. Die Anzahl wurde durch Vorversuche festgelegt, bei denen sich gezeigt hat, dass bei der Berechnung von zu wenigen Teilchenbahnen statistisch unwahrscheinliche, aber durchaus existierende,

Ausreißer ein zu hohes Gewicht haben. Diese repräsentieren dann eine zu große Masse und erzeugen somit relativ große Störterme in Form von Partikelquelltermen. Diese wiederum wirken sich sehr ungünstig auf die Konvergenz bei der Phasenkopplung aus.

Mit 10^5 berechneten Partikelbahnen durchlaufen im Mittel jedes Kontrollvolumen etwa 800 Teilchen. Bei den Berechnungen hat sich gezeigt, dass die Anzahl an durchlaufenden Teilchen aufgrund der statistischen Natur der Lagrangeschen Berechnungen im Bereich von ca. 500 bis etwa 1200 liegt. Damit beruht die statistische Mittelung auf wenigsten 500 unabhängigen Ereignissen. Die Gesamtanzahl an Ereignissen ist aber noch deutlich höher, da ein Teilchen innerhalb eines Kontrollvolumens in der Regel mindestens 10 Zeitschritte ausführt.

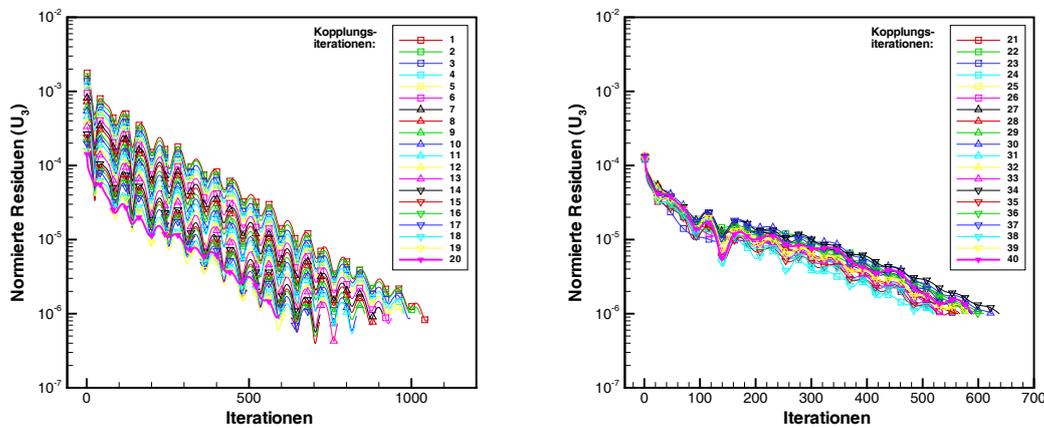


Abbildung 6.4: Residuenverläufe der vertikalen Fluidgeschwindigkeit U_3 bei zunehmender Anzahl von Kopplungsiterationen (links sind die ersten 20 und rechts die folgenden 20 Kopplungsiterationen aufgetragen) für Fall 6, d.h. $M = 1.0$

In Abb. 6.4 sind die Residuenverläufe in Abhängigkeit von den Kopplungsiterationen für Fall 6, d.h. einer moderaten Massenbelastung von $M = 1.0$, dargestellt. Wie zu erwarten war, wird das geforderte Grenzresiduum von 10^{-6} mit zunehmender Anzahl von Kopplungsiterationen bei der Berechnung der Fluidströmung immer schneller erreicht (s. Abb. 6.4 links - Darstellung der ersten 20 Kopplungsiterationen) und das Niveau der Residuen fällt stetig. Nach einer gewissen Anzahl an Kopplungen (hier ca. 20), wird keine weitere Beschleunigung mehr erreicht. Die Residuenverläufe bewegen sich dann innerhalb eines Schwankungsbandes (s. Abb. 6.5 rechts - Darstellung der folgenden 20 Kopplungsiterationen), welches sich durch den statistischen Charakter der Berechnung der dispersen Phase erklärt. Die Kopplung kann nun als konvergiert bezeichnet werden. Bei der sequentiellen Darstellung der Residuenverläufe (s. Abb. 6.5) kann sowohl die oben beschriebene Beschleunigung als auch das

Erreichen der Kopplungskonvergenz besonders leicht verdeutlicht werden. Anfangs wird das Grenzresiduum von der vertikalen Geschwindigkeit (s. Abb. 6.5 rechts) und der Masse bzw. dem Druck (s. Abb. 6.5 links) abwechselnd zuerst erreicht. Der Wiederanstieg der Residuen nach jeder Kopplung nimmt kontinuierlich ab, bis bei etwa Kopplungsiteration 22 ein Plateau erreicht wird. Der Knick im Verlauf markiert den Übergang zur konvergierten Zweiphasenströmung. Ab diesem Zeitpunkt wird das Erreichen des Grenzkriteriums praktisch nur noch von U_3 bestimmt.

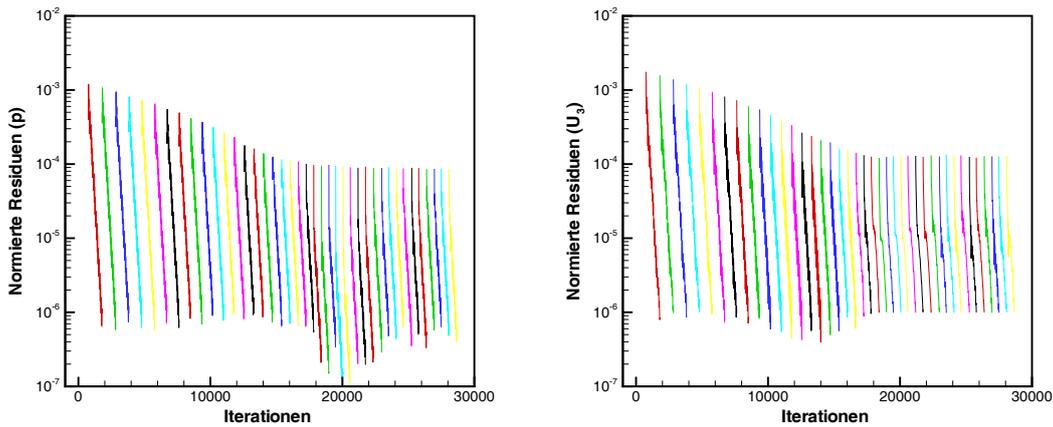


Abbildung 6.5: Sequentielle Darstellung der Residuenverläufe des Druckes bzw. der Masse (links) und der vertikalen Fluidgeschwindigkeit U_3 (rechts) für 40 Kopplungsiterationen (Fall 6, d.h. $M = 1.0$)

Die Residuen bei den weiteren Variablen verlaufen analog, jedoch ist zu bemerken, dass das geforderte Grenzresiduum von 10^{-6} bei konvergierter Kopplung von U_1 , U_2 und k deutlich schneller, nämlich bereits nach ca. 100 Iterationen, erreicht wird. Der Knick beim Übergang zur konvergierten Zweiphasenströmung ist bei den Turbulenzvariablen k und ε weniger deutlich ausgeprägt. Bei der turbulenten kinetischen Energie zeigen sich auch nach dem Erreichen der Kopplungskonvergenz Unterschwinger im Residuumverlauf während der ersten Fluiditerationen mit darauf folgendem temporären Wiederanstieg. Dies lässt auf eine starke Wirkung der statistischen Schwankungen bei der Berechnung der Partikelbahnen auf die Berechnung der turbulenten kinetischen Energie schließen.

Bei weniger günstigen Startbedingungen, d.h. ohne Nutzung vorheriger Berechnungen als Startlösung, ergibt sich erwartungsgemäß ein verzögertes Erreichen der konvergenten Zweiphasenströmung. In Abb. 6.6 ist dies exemplarisch für eine Massenbeladung von $M = 1.3$ wiedergegeben. Die absolute Anzahl an Iterationen ohne Berücksichtigung der Startlösung erlaubt somit keine Aussage über den Grad der Konvergenz. Ferner ist zu bemerken, dass der weiter oben beschriebene Knick im Residuenverlauf bei günstiger Startbelegung schwächer ausgeprägt ist.

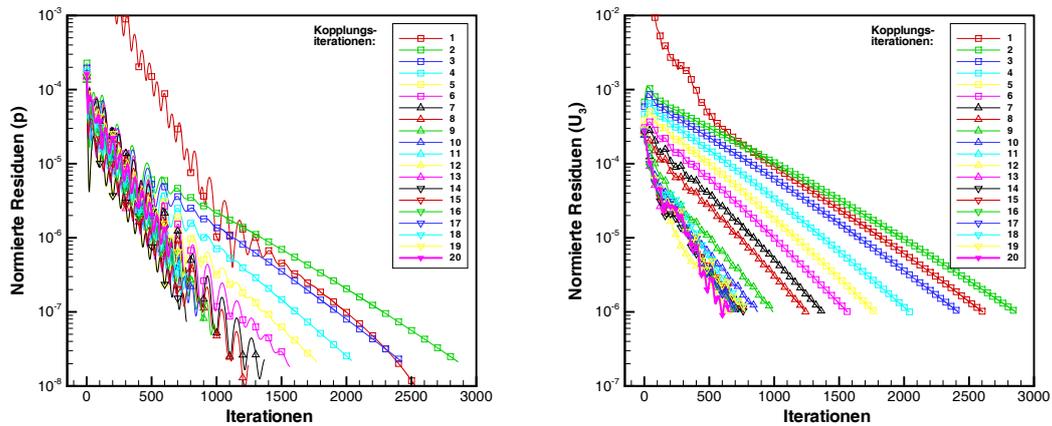


Abbildung 6.6: Residuenverläufe des Druckes (links) und der vertikalen Fluidgeschwindigkeit U_3 (rechts) bei zunehmender Anzahl von Kopplungsiterationen für Fall 3, d.h. $M = 1.3$

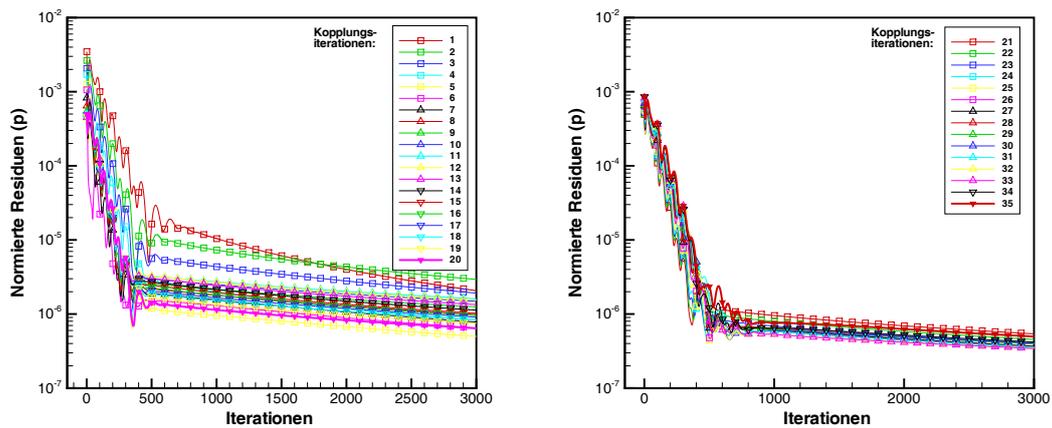


Abbildung 6.7: Residuenverläufe des Druckes bei zunehmender Anzahl von Kopplungsiterationen (links sind die ersten 20 und rechts die folgenden 15 Kopplungsiterationen aufgetragen) für Fall 8, d.h. $M = 4.2$

Ein ähnliches Verhalten erhält man bei der Berechnung mit höheren Beladungen, wie es in Abb. 6.7 für den Residuumverlauf des Druckes bei den ersten 20 (links) und den folgenden 20 Kopplungsiterationen dargestellt ist. Festzuhalten ist, dass das Erreichen der Konvergenz bei der vertikalen Geschwindigkeit (nicht dargestellt) hier, wie auch bereits bei Fall 3 zu erkennen (Abb. 6.6), deutlich langsamer erfolgt.

Generell ist zu bemerken, dass sich der beschriebene Schwankungsbereich bei bereits erreichter Kopplungskonvergenz durch die Berechnung von einer noch größeren An-

zahl von Partikelbahnen als auch durch eine stärkere Unterrelaxierung bei der Kopplung weiter einengen läßt. Der Nutzen im Hinblick auf das berechnete Strömungsfeld wird aber als gering erachtet und steht in keinem Verhältnis zum wesentlich höheren Berechnungsaufwand. Mit der beschriebenen Konfiguration lässt sich ein Kopplungsschritt, d.h. eine Berechnung der Fluidströmung und eine Berechnung der dispersen Phase, auf einer Workstation (SUN, Ultra-Sparc, 300MHz) innerhalb von etwa zwei Stunden berechnen.

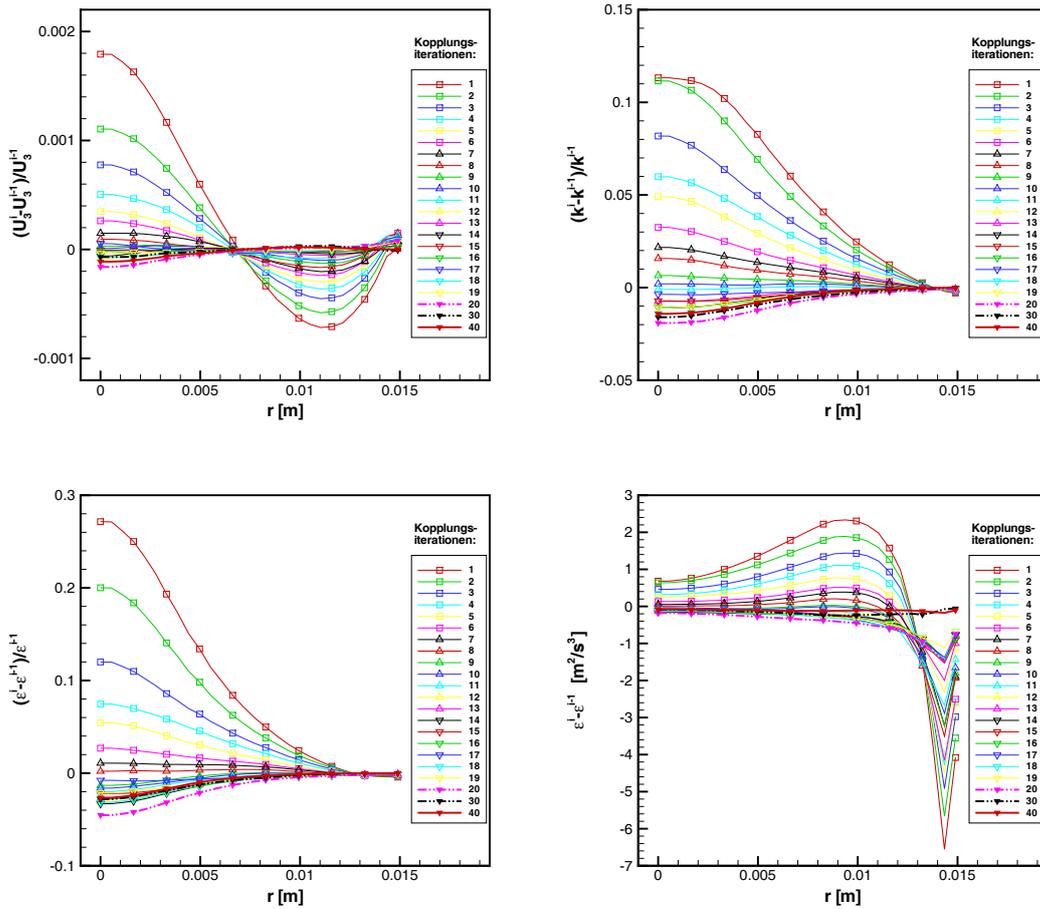


Abbildung 6.8: Relative Änderung der vertikalen Geschwindigkeit U_3 (oben links), der turbulenten kinetischen Energie k (oben rechts) und der Dissipationsrate ϵ (unten links) sowie absolute Änderung der Dissipationsrate ϵ (unten rechts) in Abhängigkeit von der Anzahl an Kopplungsiterationen i für Fall 6, d.h. $M = 1.0$

Exemplarisch ist in Abb. 6.8 die Entwicklung einiger Variablenwerte entlang radialer Profile (wobei jeweils eine Mittelung über fünf Profile bei verschiedenen Winkeln vorgenommen wurde) dargestellt. Es wird deutlich, dass die Änderungen ab

einer gewissen Anzahl von Kopplungen nur noch gering ausfallen und sich auch hier, wie beim Verlauf der Residuen, die Profile innerhalb eines gewissen Schwankungsbereiches bewegen. Für die vertikale Geschwindigkeit (wie auch für die beiden nicht dargestellten Geschwindigkeitskomponenten U_1 und U_2) schwanken die relativen Änderungen im konvergierten Bereich nur noch um weniger als 0.02%. Bei der turbulenten kinetischen Energie belaufen sich die Abweichungen auf weniger als 2%. Dies ist aber in Relation zu sehr kleinen absoluten Werten im Kern der Rohrströmung zu sehen. Verdeutlicht wird dies am Beispiel der Dissipationsrate, bei der in der Mitte des Rohres verhältnismäßig große relative Abweichungen vorliegen, während an der Wand praktisch keine Änderungen mehr vorliegen. Die Änderungen der absoluten Werte sind aber bis zum Erreichen der Konvergenz in Wandnähe am größten (da hier auch die höchsten absoluten Werte vorliegen), während im Zentrum die Änderungen sehr schnell praktisch auf Null abfallen.

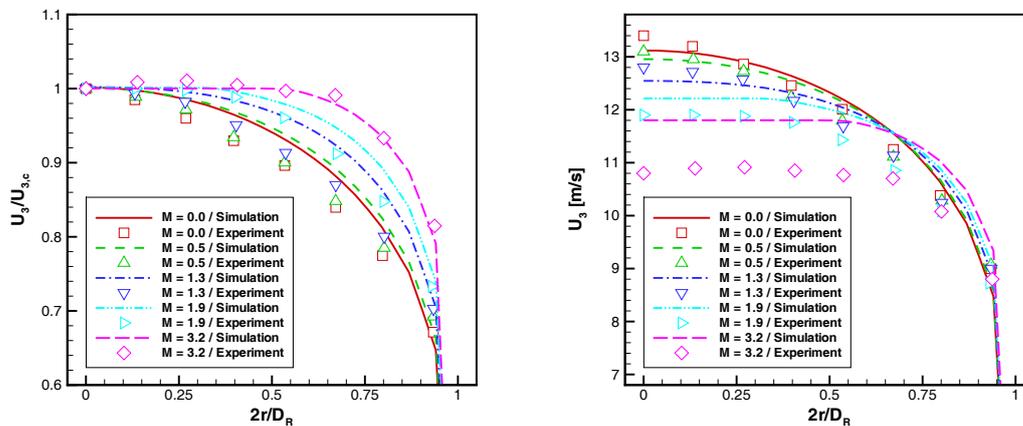


Abbildung 6.9: Vergleich der berechneten radialen Profile der vertikalen Fluidgeschwindigkeit U_3 (rechts) bzw. U_3 relativ zur axialen Fluidgeschwindigkeit im Zentrum $U_{3,c}$ (links) mit den entsprechenden experimentellen Daten bei variierender Beladung (Fälle 1-5)

In Abb. 6.9 sind nun die berechneten Profile der vertikalen Geschwindigkeit (hier ebenfalls, wie auch im folgenden, über fünf Profile bei verschiedenen Winkeln gemittelt) dargestellt. Qualitativ wird die Tendenz durch zunehmende Beladung sowohl normiert als auch absolut korrekt wiedergegeben. Allerdings muss festgehalten werden, dass bei der normierten Betrachtung die berechneten Profile bei den mittleren Beladungen etwas zu hoch liegen. Dies erklärt sich bei der Betrachtung der absoluten Werte aufgrund der etwas zu niedrig berechneten Geschwindigkeiten in der Rohrmitte. Ursache hierfür ist die Voraussetzung von Isotropie der Schwankungsgeschwindigkeiten beim $k-\varepsilon$ -Turbulenzmodell. Dafür spricht auch die gute Übereinstimmung der normierten Profile bei der höchsten betrachteten Beladung (Fall 8), da hier durch

die Anwesenheit von sehr vielen Teilchen eine Isotropisierung stattfindet. Die Abweichungen bei den absoluten Geschwindigkeiten bei den höheren Beladungen beruhen wahrscheinlich auf Ungenauigkeiten bei den angenommenen mittleren axialen Geschwindigkeiten $U_{3,m}$. Aufgrund mangelnder Angaben in der Veröffentlichung von Tsuji et al. [327] wurde die mittlere axiale Geschwindigkeit $U_{3,m}$ in den Fällen 2-5 identisch mit der Geschwindigkeit in Fall 1 angenommen.

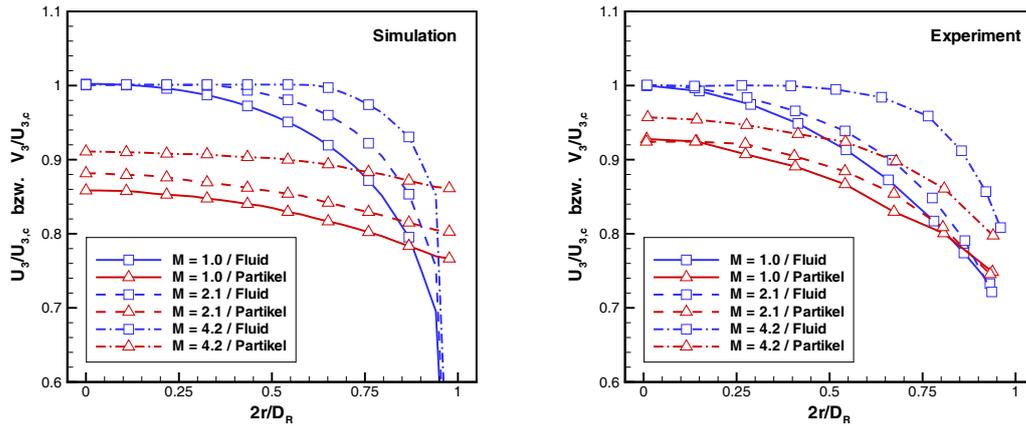


Abbildung 6.10: Vergleich der berechneten radialen Profile der vertikalen Fluid- und Partikelgeschwindigkeit, U_3 bzw. V_3 , (jeweils relativ zur axialen Fluidgeschwindigkeit im Zentrum $U_{3,c}$) (links) mit den entsprechenden experimentellen Daten (rechts) für die Fälle 6-8, d.h. für $M = 1.0$, $M = 2.1$ und $M = 4.2$

Die Ergebnisse der Simulation sowohl für die Partikel- als auch für die Fluidgeschwindigkeit sind in Abb. 6.10 den entsprechenden experimentellen Ergebnissen gegenübergestellt. In Abb. 6.11 erfolgt dann noch ein direkter Vergleich für die einzelnen Fälle. Für die Fluidströmung lassen sich die oben aufgeführten Bemerkungen ebenso für die Fälle 6-8 angeben. Bei den Partikelprofilen ist ebenfalls eine gute qualitative Übereinstimmung zu erkennen, allerdings liegen die Geschwindigkeiten insgesamt niedriger als bei den Messungen. Ferner ist der Geschwindigkeitsabfall zur Wand hin bei den Simulationen deutlich schwächer ausgeprägt als bei den Experimenten. Testrechnungen mit etwas größeren Teilchen haben gezeigt, dass der Einfluss der Partikelgröße auf die Geschwindigkeitsprofile erheblich ist. Daher wird die Annahme von monodispersen Teilchen als Hauptfehlerursache angenommen. Leider konnte bei den Berechnungen keine Partikelgrößenverteilung berücksichtigt werden, da die entsprechenden Informationen nicht zur Verfügung standen.

Unter den gegebenen Umständen lässt sich insgesamt eine sehr gute Erfassung der Tendenzen durch zunehmende Partikelbeladung der Strömung durch die numerische Berechnung festhalten. (Vergleichbare Ergebnisse wurden auch von Berlemont

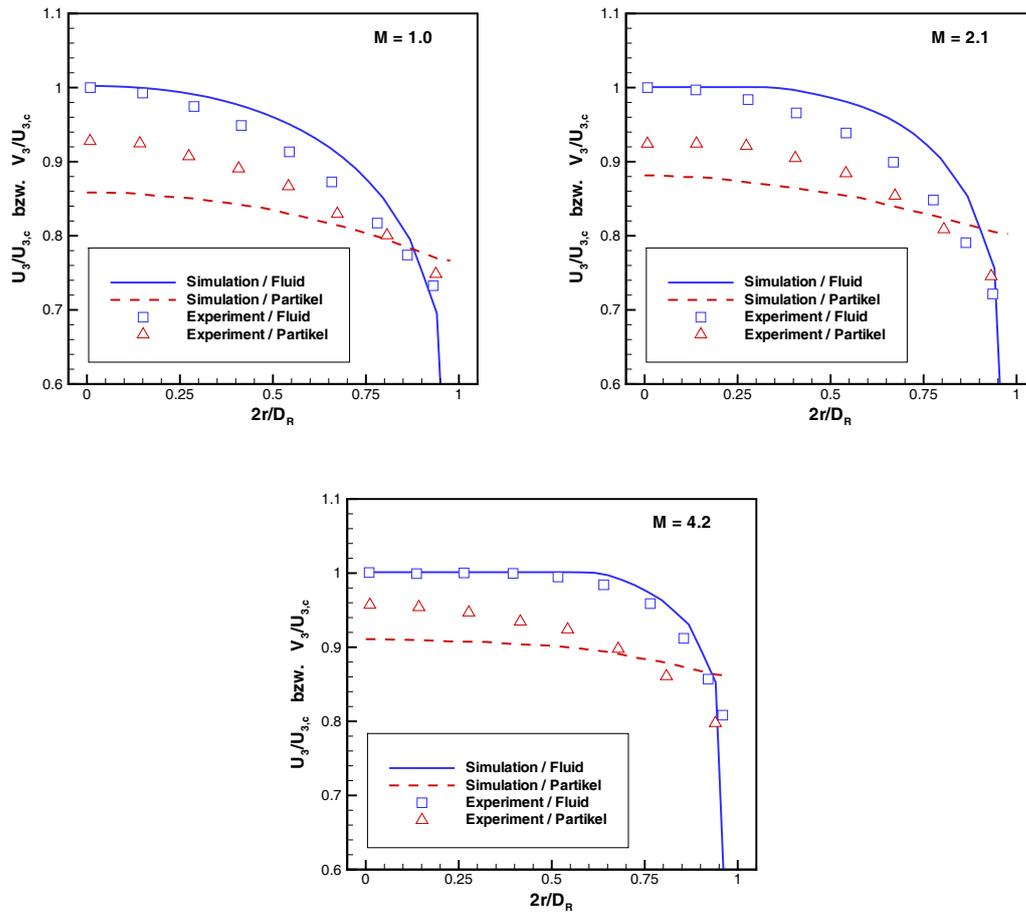


Abbildung 6.11: Berechnete und gemessene radiale Profile der vertikalen Fluid- und Partikelgeschwindigkeit, U_3 bzw. V_3 , (jeweils relativ zur axialen Fluidgeschwindigkeit im Zentrum $U_{3,c}$) für die Fälle 6-8, d.h. für $M = 1.0$ (oben links), $M = 2.1$ (oben rechts) und $M = 4.2$ (unten)

et al. [22] und Berlemont & Achim [20] gefunden, wobei die letztgenannten ein Turbulenzmodell zweiter Ordnung verwendeten und somit die Anisotropie der Strömung besser auflösen konnten.) Die Ursachen für die vorliegenden Abweichungen bei den normierten bzw. absoluten Werten, sind primär bei den nicht ausreichend genauen Randbedingungen zu suchen. Die Validierung der verwendeten Berechnungsmodelle kann somit als erfolgreich eingestuft werden.

7 Suspendieren im Rührkessel

Die Strömungsstruktur im Rührkessel ist bei üblicher Drehzahl (d.h. turbulenter Strömung) stark dreidimensional und komplex. Das Fluid zirkuliert aufgrund der rotierenden Bewegung des Rührers, wobei die Stromstörer einer Festkörperrotation vorbeugen und somit den Mischprozess unterstützen. Hinter den Rührerblättern bilden sich im Nachlauf dreidimensionale Wirbelstrukturen (siehe z.B. Yianneskis et al. [350] und Schäfer et al. [283]). Diese Wirbel gehen einher mit hohen Scherraten und starker turbulenter Aktivität (Lee & Yianneskis [172]). Sie erhalten ihre Struktur für eine gewisse Zeitspanne und wirken somit nicht nur in unmittelbarer Nähe des Rührers. Daher spielen sie auch eine wichtige Rolle beim Gesamtprozess Mischen. Derksen & Van den Akker [70] konnten die Nachlaufwirbel mit *LES* sehr gut abbilden. Aber auch mit einfacheren Ansätzen lassen sich die Wirbel bereits gut wiedergeben (Wechsler et al. [343]).

Zur Beschreibung der Strömung im Rührkessel lassen sich integrale Kenngrößen, wie z.B. die Newtonzahl, heranziehen, allerdings wird im modernen Chemieingenieurwesen der Bedarf an lokalen Strömungsinformationen immer größer. Bei vielen Anwendungen spielen die Scherraten eine zentrale Rolle und die relevanten Abmessungen sind sehr klein. So ist z.B. beim Tröpfchenzerfall die Scherung im Bereich der Tröpfchendimensionen sowie die kinetische Energie in diesen Wirbelskalen bestimmend (Zhou & Kresta [355]). Ähnlich sieht es bei der Kristallisation aus, da auch hier die Strömung um die Teilchen entscheidend für die Agglomeration ist (von Smoluchowski [338]). Ebenso wird das Mikromischen stark beeinflusst durch die Größe der Skalen, bei denen die Dissipation der turbulenten kinetischen Energie erfolgt (Bakker [11]).

Die aktuelle Messtechnik erlaubt aufgrund des sehr hohen Aufwands (z.B. *LDA*) nur begrenzten Einblick in die Bereiche der kleinen Skalen, so dass die numerische Simulation als zusätzliches Analysewerkzeug hilfreiche Dienste leisten kann. Ferner stößt die Messtechnik bei der Betrachtung von Suspensionen schnell an die Grenzen der Machbarkeit und experimentelle Ergebnisse sind nur schwer oder gar nicht zu erzielen. Die folgenden Abschnitte beschäftigen sich daher mit der Anwendung des Euler-Lagrange-Verfahrens auf die Berechnung von Suspensionen im Rührkessel. Zunächst werden die grundlegenden Kenngrößen erläutert um danach eine Beschreibung der verschiedenen Suspendierzustände zu liefern. In Abschnitt 7.3 wird dann eine Übersicht relevanter bisherigen Arbeiten gegeben. Im Anschluss wird die in der vorliegenden Arbeit betrachtete Geometrie beschrieben sowie erste Parameter

für die Berechnung erläutert (Abschnitt 7.4). Danach erfolgt eine Beschreibung der Vergleichsmessungen (Versuchsaufbau, Randbedingungen usw.), welche für eine entsprechende Datenbasis zur Validierung sorgen (Abschnitt 7.5). Da die Turbulenzmodellierung bei Rührkesselströmungen ein wichtiges Thema ist und dabei gerade die Behandlung der Wandgrenzschicht hohe Bedeutung hat, wird zunächst diese Thematik in Abschnitt 7.6 diskutiert. Im Anschluss folgt eine Analyse der Diskretisierung der konvektiven Flüsse sowie eine Bewertung der Gitterauflösung (Abschnitt 7.7). Die verschiedenen Ergebnisse werden hier bereits mit den experimentellen Daten verglichen. In Abschnitt 7.8 werden dann verschiedene Möglichkeiten zur Visualisierung der Strömung vorgestellt und beschrieben. Zur Untersuchung der Skalierbarkeit wird in Abschnitt 7.9 die Rührerdrehzahl variiert. Zur Bewertung der Bedeutung von Partikel-Partikel-Kollisionen wird im Anschluss die lokale Stokeszahl abgeschätzt und analysiert (Abschnitt 7.10). Für einen ersten Eindruck der Bewegung der Teilchen im Rührbehälter werden in Abschnitt 7.11 exemplarisch einige Partikelbahnen untersucht. Im Anschluss erfolgt eine Bewertung des Fehlers durch die Reduzierung auf die Betrachtung von repräsentativen Teilchen (Abschnitt 7.12). Dabei steht ein sinnvoller Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenaufwand im Fokus. Der folgende Abschnitt 7.13 beschäftigt sich mit der Ermittlung der Newtonzahl, welche (neben weiteren Kriterien) bei der Bewertung der Konvergenz der Phasenkopplung (Abschnitt 7.14) gute Dienste leistet. In Abschnitt 7.15 werden dann die Fluid- und die Teilcheneigenschaften einer Zweiphasenströmung gegenüber gestellt. Hier erfolgt auch die Validierung der Partikeldaten. Der Effekt von Parametervariationen insbesondere auf die Feststoffverteilung im Rührkessel wird anschließend in Abschnitt 7.16 analysiert. Schließlich wird in Abschnitt 7.17 die Bedeutung von Phasenkopplung und Partikel-Partikel-Kollisionen für gerührte Suspensionen quantifiziert.

7.1 Grundlegende Kenngrößen für eine Strömung im Rührkessel

Für die Charakterisierung von Rührwerksströmungen hat sich ein Satz dimensionsloser Kennzahlen (resultierend aus der Dimensionsanalyse auf Basis der relevanten physikalischen Größen) eingebürgert. Die wichtigsten Parameter sind die primäre Geometrie des Rührsystems (Behälterdurchmesser D , Füllhöhe H , Rührerdurchmesser d_R , Einbauhöhe des Rührers h_R , Bodenform, Bewehrung), die Rührerdrehzahl n_R , die Stoffwerte der Flüssigkeit (Dichte ρ , Viskosität μ) und der Leistungseintrag P_R .

Die wichtigsten Kenngrößen für eine einphasige Rührkesselströmung sind somit die auf den Behälterdurchmesser normierten Geometrien ($d_R D^{-1}$, $h_R D^{-1}$, $H D^{-1}$), die Reynoldszahl¹ ($Re = d_R^2 |n_R| \nu^{-1}$) zur Beschreibung des Strömungszustands,

¹Weitere Ausführungen s. Abschnitt 7.9.

die Newtonzahl² ($Ne = P_R \rho^{-1} |n_R|^{-3} d_R^{-5}$) zur Erfassung des charakteristischen Leistungsbedarfs in Abhängigkeit von den Prozessgrößen und die Froudezahl ($Fr = n_R^2 d_R |g|^{-1}$) zur Beschreibung des Verhältnisses von Zentrifugal- und Erdbeschleunigung. Im Falle von trombenfreier Strömung, d.h. bei hinreichender Bewehrung, kann die Froudezahl allerdings unberücksichtigt bleiben (Zlokarnik [360]).

Für die Auslegung von Rührsystemen ist die Korrelation zwischen Re und Ne von großer Bedeutung, da hiermit ein Zusammenhang zwischen Strömungszustand, Prozessparametern und Leistungsbedarf hergestellt wird³. Die benötigten Daten sind in aller Regel gut experimentell zu ermitteln, was den traditionell hohen Stellenwert der Ne - Re Beziehung unterstreicht. Weitere wichtige Kennzahlen sind die spezifische mittlere Rührleistung ($P_R V_{RG}^{-1}$ oder $P_R m_{RG}^{-1}$), welche Bedeutung bei der Maßstabsübertragung hat, die Volumenstromkennzahl zur Beschreibung der Leistungsfähigkeit eines Rührorgans sowie die Förder- und Umwälzmenge (s. z.B. Hentrich [120]).

Für ein tieferes physikalisches Verständnis der Strömungszustände im Rührkessel reichen die beschriebenen traditionellen Kenngrößen allerdings nicht aus. Daher wurden ergänzend die in den folgenden Abschnitten zusammengestellten detaillierten Untersuchungen mit Hilfe der bereits beschriebenen numerischen Methoden bei hoher räumlicher Auflösung durchgeführt.

7.2 Beschreibung des Suspendierzustands

Zur Beschreibung des Suspendierzustands haben sich in der Fachliteratur verschiedene Kriterien eingebürgert, deren charakteristische Erscheinungsformen und messtechnische Erfassung z.B. von Einenkel [83] ausführlich beschrieben und diskutiert werden. In Abhängigkeit vom Leistungseintrag ergeben sich verschiedene charakteristische Suspendierzustände.

Reicht der Energieeintrag für die Aufwirbelung des Feststoffs nicht oder nur bedingt aus, so befinden sich noch abgelagerte Teilchen am Boden des Rührkessels und man spricht von unvollständiger Suspension. Dieser Zustand ist allerdings nur für die instationären Phasen des Betriebs von Relevanz.

Durch Erhöhung der eingebrachten Rührerleistung verringern sich die Feststoffablagerungen man erreicht schließlich den Betriebspunkt vollständige Suspension. In diesem Fall werden alle Partikel von Flüssigkeit umspült (ein längeres Absetzen

²Oft wird die Newtonzahl in der Literatur auch als Leistungsbeiwert oder Eulerzahl bezeichnet. Weitere Erörterungen s. Abschnitt 7.13.

³Ist im Rührbehälter eine hohe Scherung erforderlich (z.B. bei der Erzeugung von Ölemulsionen), so sind große Newtonzahlen, d.h. starke Dissipation, erwünscht, während bei scherempfindlichen Systemen (z.B. Flockensystemen oder Suspensionen mit Enzymbestandteilen) kleine Newtonzahlen nötig sind.

findet nicht statt) und können somit optimal an Wärme- und Stoffaustauschprozessen teilnehmen. Im oberen Bereich des Rührkessels bildet sich in der Regel bei vollständiger Suspension noch ein klare Zone ohne Teilchen. Mit Hilfe verschiedener Kriterien ist eine genauere Spezifikation bzw. Unterteilung dieses Betriebspunktes möglich.

Als zeitliches Kriterium hat sich das 1s-Kriterium durchgesetzt, welches auf die Arbeiten von Zwietering [361]⁴ zurück geht. Dieses Kriterium ist erfüllt, wenn sich die suspendierten Teilchen maximal eine Sekunde am Behälterboden aufhalten und danach wieder aufgewirbelt werden⁵. Für Prozesse mit Wärmeübertragung, beim Auflösen von Feststoffen oder dem Einsatz von Feststoffkatalysatoren stellt dieser Betriebspunkt ein Optimum dar. Die messtechnische Erfassung erfolgt rein visuell mit Hilfe eines Behälterbodens aus Glas, so dass zwar keine Störung der Strömung oder der Partikelverteilung vorliegt, aber die Messpunkte aufgrund der subjektiven Erfassung vom Experimentator abhängen, d.h. das Konfidenzintervall ist relativ groß. Zwietering [361] gibt eine Messwiederholgenauigkeit bei identischem Beobachter von 2-3% an, Bohnet & Niesmak [25] sprechen von einer Genauigkeit von 2-5%, wobei die Messung mit zunehmender Konzentration immer schwieriger wird. Eine Bewertung erfolgt nur anhand der Beobachtungen des Bodenbereichs, d.h. die Verteilungsgüte im Rest des Behälters wird nicht betrachtet. Besteht beim Rührprozess die Gefahr von Agglomeration, so dürfen die Teilchen auch nicht kurzzeitig am Boden verweilen (wie dies beim 1s-Kriterium noch erlaubt ist), sondern müssen immer suspendiert sein. Staudinger & Moser [308] sprechen dann von einer 100%-Suspension.

Beim 90%-Schichthöhenkriterium wird der prozentuale Anteil der Suspension an der Füllhöhe des Behälters für die Beurteilung herangezogen. Die Schichtung ist besonders bei hohen Konzentrationen stark ausgeprägt und die Trennlinie kann bei Behältern mit optischen Zugang visuell bestimmt werden. Damit resultieren die gleichen Vor- und Nachteile⁶ wie beim 1s-Kriterium. Das 90%-Schichthöhenkriterium

⁴Zwietering hat in mehr als 1000 Experimenten $n_{R,1s}$ bei Variation einer Vielzahl von Parametern ($D = 0.154 \dots 0.6$ m, radial und axial fördernde Rührer, $d_R = 0.05 \dots 0.224$ m, Gewichtsanteil des Feststoffs von 0.5...20%, $d = 0.125 \dots 0.85$ mm, $\rho_P = 2160 \dots 2600$ kg m⁻³, $\rho = 790 \dots 1600$ kg m⁻³, $\nu = 0.39 \dots 11.1 \cdot 10^{-6}$ m² s⁻¹ mit $H = D$, $n_{SS} = 4$, konstantem h_R/D und primär flacher Behälterböden) ermittelt. Seine Ergebnisse hat er dann mit Hilfe der Dimensionsanalyse zu folgender Beziehung zusammengefasst:

$$n_R d_R^{0.85} = K (D d_R^{-1})^a d^{0.20} (100M)^{0.13} \nu^{0.10} [|\mathbf{g}| (\rho_P - \rho) \rho^{-1}]^{0.45},$$

mit vom Rührertyp abhängigen Variablen a und K . Der Einfluss der Bodenform ist gering, wobei der Feststoff mit gewölbten Boden leichter suspendiert. Für die Maßstabsübertragung muss dann $n_R d_R^{0.85}$ konstant gehalten werden.

⁵Neben bzw. nach Zwietering [361] haben sich sehr viele Forschungsarbeiten dem Thema $n_{R,1s}$ gewidmet, d.h. dem gerade vollständig suspendierten Bereich. So finden sich ausführliche Beschreibungen z.B. auch bei Baldi et al. [12] oder Liepe et al. [179]. Ein umfangreiche Zusammenfassung verschiedenster Korrelationen für $n_{R,1s}$ wurde z.B. von Poirier et al. [244] zusammengetragen.

⁶Beim Vergleich von Ergebnissen verschiedener Autoren erhält man in der Regel eine recht große Streubreite, welche nicht unerheblich durch die unscharfe Definition des 1s-Kriteriums sowie des 90%-Schichthöhenkriteriums verursacht wird. Bohnet & Niesmak [25] betonen aber auch die starke Abhängigkeit von nicht exakt definierten experimentellen Rahmenbedingungen. Die

ist erfüllt, wenn die mehr oder weniger deutlich ausgeprägte Trennlinie im Mittel 90% der Füllhöhe erreicht. Da die benötigte Rührerdrehzahl beim 90%-Schichthöhenkriterium $n_{R,1s}$ in der Regel höher liegt als die beim 1s-Kriterium $n_{R,90\%}$ (wie Kraume & Zehner [161] ausführen ist unter bestimmten Randbedingungen auch $n_{R,1s} < n_{R,90\%}$ möglich), wird dieser Betriebszustand häufig auch als 100%ige Suspension bezeichnet und bei Gefahr der Bildung von Konglomeraten am Behälterboden eingesetzt.

Bei weiterer Steigerung des Leistungseintrags reduziert sich die partikelfreie Zone und verschwindet schließlich. Man spricht dann von homogener Suspension, bei der im Idealfall überall im Behälter identische lokale Partikelkonzentrationen vorliegen. Eine möglichst optimale Verteilung ist besonders wichtig bei der Kristallisation, um einheitliche Wachstumsbedingungen zu gewährleisten. Große Homogenität wird auch benötigt, wenn der Rührkessel z.B. zum Zudosieren einer Suspension in einen chemischen Reaktor benutzt wird. Die Bestimmung der Verteilungsgüte, d.h. die Ermittlung der lokalen Konzentrationen, lässt sich z.B. durch Probennahme (Bourne & Sharma [27] oder Barresi & Baldi [14]) oder durch die Messung mit Hilfe von Sonden (Musil & Vlk [212] und Kipke [151] nutzten dazu die Abhängigkeit der Leitfähigkeit von der Partikelkonzentration) realisieren. In beiden Fällen kann ein Einfluss des Messverfahrens auf die Strömung bzw. Teilchenverteilung nicht ausgeschlossen werden, was als erheblicher Nachteil zu werten ist. Bohnet & Niesmak [25] bestimmten die axiale Konzentrationsverteilung über Lichtabsorption, indem sie den Rührbehälter in verschiedenen Höhen mit einem Laserstrahl durchdrangen und auf der gegenüberliegenden Seite eine Fotozelle positionierten (die Feststoffkonzentrationen muss daher relativ gering sein), um das transmittierte Licht zu messen. Dabei wurde allerdings angenommen, dass innerhalb einer bestimmten Schichthöhe die Konzentration konstant ist. Von ähnlichen Messungen berichteten auch Ayazi Shamlou & Koutsakos [5] und Godfrey & Zhu [104], wobei Godfrey & Zhu eine Brechungsindexanpassung verwendeten und so bei Konzentrationen bis $\varphi_P = 0.3$ messen konnten (s. auch Abschnitt 7.3).

Es ist zu bemerken, dass die Erhöhung der Rührerdrehzahl nicht automatisch zu einer besseren Feststoffverteilung führt, da diese auch die Förderleistung des Rührers und die Zentrifugalkräfte in der Nähe des Rührers verstärkt und damit Segregation auftreten kann. Da die Leistungsaufnahme mit dem Quadrat der Rührerdrehzahl steigt, ist es umso wichtiger die optimale Drehzahl (über die hinaus keine Verbesserung zu erreichen ist) zu ermitteln. Generell erhält man bei Erfüllung des 90%-Schichthöhenkriteriums eine für die meisten Anwendungen ausreichende Verteilung des Feststoffs.

Die Varianz der lokalen Feststoffkonzentrationen eine weitere Möglichkeit zur Beschreibung der Verteilungsgüte (s. z.B. Einenkel [83]). Diese beschreibt die Variation des auf die mittlere Konzentration $\overline{\varphi_P}$ bezogenen lokalen Partikelvolumenanteils φ_P und lässt sich bei einer gleichmäßigen Unterteilung des Strömungsgebiets in n Teil-

se zeigte sich z.B. beim Vergleich einer Reihe von in der Literatur verfügbaren empirischen Berechnungsvorschriften für $n_{R,1s}$ mit den von ihnen experimentell ermittelten Werten.

bereiche wie folgt definieren:

$$s_{\varphi_P}^2 = (n - 1)^{-1} \sum_{k=1}^n (\varphi_P / \overline{\varphi_P} - 1)^2 \quad (7.1)$$

Die Varianz ist bezüglich ihrer Aussagekraft mit der Intensität der Segregation (s. Abschnitt 5.2.6) vergleichbar und ermöglicht im Vergleich zum 1s- und 90%-Schichthöhenkriterium eine bessere Beschreibung des Suspendierzustands. Schwierigkeiten ergeben sich allerdings bei der Bestimmung, da die lokalen Partikelvolumenanteile experimentell schwer zugänglich sind. Oft wird bei der Ermittlung der Varianz nur ein Messpunkt pro Schichthöhe als ausreichend erachtet und die dreidimensionale Verteilung vernachlässigt. Nach Einenkel [83] liegt bei $s_{\varphi_P}^2 = 0.97$ vollständige Suspension vor, bei $s_{\varphi_P}^2 = 0.7$ umfasst die Zweiphasenzone den gesamten Behälter und bei $s_{\varphi_P}^2 = 0.5$ wird die Suspension als homogen bezeichnet.

Die Varianz hat einen Grenzwert für den Fall, dass alle Teilchen am Boden liegen. Dieser ist allerdings abhängig von der globalen Konzentration. Für eine bessere Vergleichbarkeit verschiedener Suspensionen haben Bohnet & Niesmak [25] und Niesmak [217] daher die auf diesen Grenzwert bezogene Standardabweichung als Bewertungsgröße vorgeschlagen.

Die systematische Untersuchungen von Einenkel [83] zeigten wie erwartet eine höhere erforderliche Rührerdrehzahl bei Zunahme des Feststoffvolumenanteils, der Partikelgröße und der Dichtedifferenz. Beim Vergleich der Ergebnisse von Einenkel [83], Bohnet & Niesmak [25] und Niesmak [217] ergibt sich, dass mit sehr kleinen Teilchen Homogenitätsgrade erreichbar sind, die mit großen Teilchen auch mit hohem Leistungseintrag nicht realisierbar sind. Eine vergleichbare Aussage zu der Bedeutung der Teilchengröße und -dichte wurde auch bereits von Zwietering [361] berichtet.

7.3 Bisherige Arbeiten

In der Vergangenheit waren die Zielgrößen der Untersuchungen⁷ von gerührten Suspensionen primär die Definition von Suspendiercharakteristiken, deren Einflussgrößen und der erforderliche Leistungseintrag. Meist stand dabei die Entwicklung von Regeln zur Maßstabsübertragung im Hintergrund. Später konzentrierten sich die Aktivitäten stärker auf die detaillierte Messung der Strömung, wobei im Bereich von Suspensionen mit höherer Konzentration die Messtechnik auch Heute noch schnell an ihre Grenzen gerät. Zur Bestimmung der Geschwindigkeiten in Rührbehältern wurden bereits viele verschiedene Messverfahren eingesetzt (fotografische Methoden (siehe z.B. Cutter [57]), Drucksonden, Hitzdraht- oder Heißfilm-Anemometer

⁷Traditionell erfolgte die Untersuchung von Rührwerksströmungen aufgrund ihrer hohen Komplexität mit experimentellen Ansätzen. Dabei sind die Maßstabsübertragung, der hohe Zeitaufwand für die Versuchsdurchführung sowie meist hohe Investitionskosten für die Versuchsstände wichtige Faktoren.

(siehe z.B. Thomae [323] oder Lohr [180]⁸), Lichtschnitte usw.). Bei jüngeren Untersuchungen dominiert allerdings ganz klar die *LDA* (siehe z.B. Wu & Patterson [347], Höfken [128], Wächter [339], Kohnen [156], Schäfer [281] usw.), da eine berührungslose und hoch aufgelöste Geschwindigkeitsmessung möglich ist⁹. Im Gegensatz zu k , welche aus den Schwankungsgeschwindigkeiten berechnet werden kann, lässt sich ε nur indirekt bestimmen (siehe z.B. Wu & Patterson [347], Kresta & Wood [164], Kresta [162], Höfken [128] usw.). Für die Entwicklung der numerischen Berechnungsprogramme war die Verfügbarkeit von detaillierten Datensätzen für die Validierung (und auch für Rührerrandbedingungen) von zentraler Bedeutung.¹⁰

Die relativ später Etablierung der Strömungssimulation in der Rührtechnik erklärt sich durch die komplexe und hochgradig instationäre Strömung im Rührkessel, wodurch die numerische Berechnung stark erschwert wird. So generiert der rotierende Rührer eine periodische Strömung mit Separationen und Wirbelbildungen hinter den Rührerblättern. Diese Nachlaufwirbelpaare hinter jedem Rührerblatt sowie auch die durch die Periodizität entstehenden Schwankungen (diese werden häufig als Pseudoturbulenz bezeichnet) wurden bereits von Van't Riet et al. [335][334] charakterisiert¹¹. Yianneskis et al. [350] schlugen eine Unterteilung des Strömungsgebiets in zwei Zonen vor. Dies ist zum einen die Rührerzone mit periodischen Schwankungen und der daraus resultierenden Notwendigkeit von winkelaufgelöster Betrachtung¹² und zum anderen der restliche Bereich, in dem auch gemittelte Messungen möglich sind. Diese von Yianneskis et al. formulierte Trennung repräsentiert gewissermaßen die Basis für numerische Berechnungen mit mehreren Referenzkoordinatensystemen (s. Abschnitt 5.1.2). Sie bezifferten die Überhöhung der gemessenen turbulenten ki-

⁸Beide Autoren verwendeten relativ große Rührbehälter (1.6 m³). Thomae betrachtete allerdings den völlig unbewehrten Fall, während Lohr das dreidimensionale Strömungsfeld mit und ohne Bewehrung unter Einsatz von verschiedenen Rührern vermaß.

⁹Strömungsuntersuchungen in gerührten fest-flüssig Systemen mit Hilfe von optischen Methoden wie *LDA* und *PDA* sind aber eher selten. Bereits moderate Beladungen bereiten hier Schwierigkeiten beim optischen Zugang, so dass eine Brechungsindexanpassung nötig wird. Trotzdem ist mit zunehmender Eindringtiefe der Laserstrahlen mit erheblichen Streuverlusten zu rechnen, wodurch die stark Messzeiten steigen. Ferner ist zu bemerken, dass der Einsatz von Mehrkomponenten-Systemen mit unterschiedlichen Wellenlängen nur für sehr geringe Konzentrationen praktikabel ist, da die gleichzeitige Brechungsindexanpassung für alle Wellenlängen nicht realisierbar ist.

¹⁰Aufgrund der Vielzahl an experimentellen Arbeiten zum Thema Rühren und Suspendieren kann an dieser Stelle auf die einzelnen Arbeiten nicht im Detail eingegangen werden. Stellvertretend seien hier ergänzend zu den bereits genannten Arbeiten die Untersuchungen von Einkenel [83], Niesmak [217], Laufhütte [167], Geisler [102] und Ignatjew [134] erwähnt. Eine gute Übersicht zu Messungen im Rührkessel wurde z.B. von Wu & Patterson [347] zusammengestellt. Ein Vergleich der unterschiedlichen Messmethoden findet sich z.B. bei Rao & Brodkey [259], Mujumdar et al. [210] oder Höfken [128].

¹¹Wu & Patterson [347] teilten die gemessenen Schwankungsgeschwindigkeiten über eine Autokorrelationsfunktion in einen periodischen und einen turbulenten Anteil, um die Pseudoturbulenz zu extrahieren. Kresta [162] betrachtete das Problem im Frequenzraum und eliminierte die durch die Drehung des Rührorgans induzierten Frequenzen mit Hilfe eines Frequenzfilters.

¹²Die periodischen Schwankungen zeigen sich primär im Abströmbereich bis zu einer Entfernung von etwa $d_R/2$ vom Rührer (Kohnen [156]), während sie im Ansaugbereich von untergeordneter Bedeutung sind.

netischen Energie in Rührernähe aufgrund von Pseudoturbulenz auf bis zu 400%. Lee & Yianneskis [171] identifizierten später mit Hilfe von drehwinkelaufgelösten Messungen die Bereiche mit dominanter Periodizität. Weitere Untersuchungen der Nachlaufwirbel bei Scheibenrührern erfolgten z.B. von Yianneskis & Whitelaw [351] sowie Stoots & Calabrese [311] bzw. im Fall von Schrägblattrührern z.B. von Schäfer et al. [283].

In den letzten Jahrzehnten wurden verschiedene Verfahren zur Erfassung des Impulseintrags durch den Rührer vorgeschlagen (s. auch Abschnitt 5.1.2), wobei Berechnungen ohne Auflösung des Rührers noch vor wenigen Jahren die dominante Art der Modellierung darstellten. Da hier in der Regel experimentell ermittelte Daten als Randbedingungen (*IBC*-Verfahren¹³) benötigt werden, können sie nicht ohne Vorwissen eingesetzt werden. Meist erfolgt die Berechnung unter Nutzung des k - ε -Turbulenzmodells, so dass auch Randbedingungen für die Turbulenzwerte benötigt werden.

Erste *CFD*-Berechnungen von Rührkesselströmungen erfolgten bereits in den späten 1970er Jahren. Aufgrund der zu dieser Zeit vorhandenen Rechentechnik, beschränkten sich die frühen Untersuchungen auf stationäre zweidimensionale Berechnungen. Dies erforderte eine Umfangsmittelung und entsprechende Randbedingungen und/oder Quellterme für Rührer und Stromstörer. Aufgrund unvollständiger Messungen (detaillierte Messungen, z.B. mit *LDA*, waren erst später verfügbar) konnten in der Regel nicht alle Variablen auf Experimenten basierend gesetzt werden. Andere Variablen (insbesondere die Turbulenzgrößen) mussten anhand von empirischen oder einfachen theoretischen Modellen spezifiziert werden.

Harvey & Greaves [118][119] berechneten die turbulente Rührkesselströmung mit einem Scheibenrührer, wobei sie Axialsymmetrie annahmen. An der Berandung der von ihnen spezifizierten Rührerzone setzten sie entsprechend dem *IBC*-Ansatz experimentell basierte Randbedingungen, allerdings nur für die mittleren Geschwindigkeitskomponenten¹⁴. Innerhalb der Rührerzone wurde eine Festkörperrotation angenommen. Die Stromstörer wurden mit Hilfe von Impulsenken erfasst (so dass eine zweidimensionale Betrachtung möglich wurde) und die Turbulenzmodellierung erfolgte mit dem k - ε -Turbulenzmodell. Ihre Ergebnisse verglichen sie schließlich mit den Messungen von Günkler & Weber [108], welche Luft als gerührtes Fluid wählten. Die Übereinstimmung war qualitativ gut, hatte aber quantitativ noch große Schwächen.

Bei ebenfalls zweidimensionaler Betrachtung nutzten Placek et al. [243] ein Dreigliederturbulenzmodell von Hanjalić et al. [111] zur Berechnung einer Scheibenrührerströmung. Dabei wurde das k - ε -Turbulenzmodell erweitert, indem die Transportgleichung für k durch zwei Gleichungen (für die großen und kleinen turbulenten Wirbel) ersetzt wurde. Der Transport zwischen den beiden Skalen wurde

¹³*IBC* = Impeller Boundary Condition (s. Abschnitt 5.1.2)

¹⁴Die Werte für die turbulente kinetische Energie und die Dissipationsrate wurden von Harvey & Greaves [118][119] an der Berandung der Rührerzone zu Null gesetzt. Diese Vorgehensweise ist sehr zweifelhaft, da gerade in diesen Bereichen normalerweise die größten Werte vorliegen.

anhand von experimentellen Daten abgeschätzt. Die Rührerrandbedingungen wurden basierend auf den Daten von Placek & Tavlarides [242] gesetzt, wobei für k und ε konstante Werte verwendet wurden. Die Behandlung der Stromstörer wie auch die meisten numerischen Details wurden nicht beschrieben. Die Vergleiche mit Experimenten zeigten noch Fehler von bis zu 50%. Die Berechnungen zeigten sich sehr sensitiv auf die Wahl der Randbedingungen für den Rührer

Gewisse Verbesserungen konnten von Pericleous & Patel [239] durch die Anwendung aerodynamischer Theorien auf die Bewegung der einzelnen Rührerblätter erreicht werden. Hierbei wurden die Quellterme für den Rührerimpulseintrag nicht aus Experimenten sondern mit Hilfe eines theoretischen Modellansatzes ermittelt.

Später wurde das *IBC*-Verfahren auch auf dreidimensionale Berechnungen erweitert, wobei meist experimentelle Ergebnisse für die Spezifikation der Rührerquellen bzw. -randbedingungen verwendet wurden. Mit die ersten Veröffentlichungen zu 3d-Rechnungen im Rührkessel stammen von Middleton et al. [201][202]. Die stationäre Berechnung der mit einem Scheibenrührer¹⁵ erzeugten Strömung erfolgte mit Hilfe von umfangsgemittelten Rührer-Randbedingungen, welche sich aus *LDA*-Messungen ableiteten. Die Stromstörer konnten somit aufgelöst werden. Bei der Turbulenzmodellierung wurde, wie bei der Mehrzahl aller veröffentlichten Berechnungen, das k - ε -Turbulenzmodell eingesetzt. Bemerkenswert ist, dass Middleton et al. neben der Strömungsberechnung bei ihren Untersuchungen bereits Reaktionen berücksichtigten.

Die Arbeit von Bolour-Froushan [26] basierte auf den Methoden von Issa & Gosman [139], wobei das verwendete k - ε -Turbulenzmodell mit Hinblick auf die verbesserte Behandlung von gekrümmten Bahnlinien modifiziert wurde. Die beim benutzten *IBC*-Verfahren an den fiktiven Zylinderflächen der Rührerzone benötigten Profile für \mathbf{U} und k wurden allerdings basierend auf neueren *LDA*-Messungen von Yianneskis spezifiziert. Ferner wurde der *SIMPLE*-Algorithmus durch das *PISO*-Verfahren von Issa [136] ersetzt und die dadurch erhaltenen Verbesserungen aufgezeigt. Die Berechnungen für einen Standardrührkessel erfolgten mit moderaten Gittern ($2.6 \cdot 10^4$ Zellen) und wurden intensiv mit den Messungen von Yianneskis verglichen. Die berechnete Dissipationsrate zeigte im Vergleich zu der aus den Experimenten abgeschätzten Rate ein Defizit von ca. 15%. Vorausgegangene Arbeiten (insbesondere bei zweidimensionaler Betrachtung) zeigten hier deutlich höhere Abweichungen, was die Bedeutung einer korrekten Betrachtung der Stromstörer aufzeigte. Der Anteil an Energiedissipation im Abstromgebiet des Rührers wurde mit ca. 60% abgeschätzt.

Ranade & Joshi [255] simulierten die Rührkesselströmung (es wurde ein Scheibenrührer verwendet) unter Nutzung von Randbedingungen auf Basis der Experimente von Ranade & Joshi [254] sowie Wu & Patterson [347]. Dabei variierten sie

¹⁵Es ist zu bemerken, dass bei den meisten numerischen Untersuchungen ein Scheibenrührer zum Einsatz kommt. Dies liegt sicherlich primär an der großen Verbreitung dieses Rührertyps, aber auch die einfache geometrische Beschreibungsmöglichkeit dürfte eine Rolle spielen.

die Anordnung der Randbedingungen und die Behandlung der Rührerzone. Im ersten Fall wurden die Randbedingungen um die gesamte Rührerzone, welche dann bei der Berechnung ausgeklammert wurde, gelegt, während bei der zweiten Konfiguration nur an den vertikalen Begrenzungen der Rührerzone (ähnlich dem Vorgehen von Brucato et al. [37]) auf Experimenten basierte Randbedingungen spezifiziert wurden (die Erhaltungsgleichungen wurden dann auch in der Rührerzone gelöst). Der Vergleich zeigte die besseren Ergebnisse für den zweiten Fall. Mit analogem Vorgehen haben Ranade et al. [256] auch die Strömung mit einem Schrägblattrührer berechnet (s.u.).

Das phänomenologische *Swirling Radial Jet Model* von Kolar et al. [159] ermöglicht eine alternative Beschreibung der Rühreraktion. Der Ansatz ist zu den *IBC*-Verfahren zu rechnen und ist nur für Radialrührer einsetzbar. Kresta & Wood [163] (s. auch Kresta [162]) erweiterten das Modell um ein k - ε -Turbulenzmodell und konnten die Anzahl der verschiedenen Parameter auf zwei reduzieren (Spitzenabstömgeschwindigkeit und Abströmwinkel an den Rührerblattspitzen). Unter Berücksichtigung einer Vielzahl experimenteller Ergebnisse im Bereich des Rührers (meist *LDA*-Messungen) schlugen sie optimale Werte vor, welche dann nur noch von d_R und n_R abhängen. Die nötigen Vorkenntnisse für die Spezifikation der Rührerrandbedingungen¹⁶ konnten so stark verringert werden. Generell betonten die Autoren die große Bedeutung von genauen Rührerrandbedingungen aller Größen für eine exakte Simulation.

Bei den durchgeführten stationären dreidimensionalen Simulationen ($D = H = 0.456$ m, $n_{SS} = 4$, Scheibenrührer, $d_R = D/3$ bzw. $D/2$, $h_R = D/2$, $n_R = 950$ min⁻¹; Berechnet wurde ein 1/8 des Behälters, d.h. es wurde auch Symmetrie bzgl. der Rührerebene angenommen, mit $2.34 \cdot 10^4$ Zellen) konnte eine sehr gute quantitative Übereinstimmung mit den Messungen (Vergleiche der Strömungsdetails hinter den Stromstörern, Profile von U_r , k und ε an verschiedenen Stellen im Rührerstrom) erzielt werden. Dies war insbesondere bei den turbulenten Größen der Fall. Bei der Aufteilung der Energiedissipation berechneten Kresta & Wood: 54% der Energie dissipieren bereits innerhalb der Rührerzone und weitere 35% im Rührerstrom. Dies deckt sich nur bedingt mit den Ergebnissen anderer Autoren.

Eine andere Methode zur Berechnung der Strömung im Rührkessel, welche bereits das Potential bietet die beim Mischen wichtigen Nachlaufwirbel aufzulösen, nutzen Hutchings et al. [133]. Sie lösten die Erhaltungsgleichungen im rotierenden Koordinatensystem und konnten so die Geometrie des Rührers exakt auflösen. Die Stromstörer mussten dann allerdings mit Hilfe von umfangsgemittelten Quelltermen modelliert werden. Ein derartiges Vorgehen ist vorteilhaft, wenn ausschließlich die Strömung im Rührerbereich von primärem Interesse ist. Dong et al. [74][75] haben mit analogem Vorgehen die Strömung in einem unbewehrten Rührkessel berechnet¹⁷.

¹⁶Kresta & Wood [163] berechneten mit dem *Swirling Radial Jet Model* an den vertikalen Flächen der Rührerzone Werte für \mathbf{U} , k und ε , während an den horizontalen Flächen U_1 als konstant angenommen und durch eine Massenbilanz über die Rührerzone ermittelt wurde. U_t ergab sich aus der Annahme einer Festkörperrotation und U_r , k und ε wurden zu Null gesetzt.

¹⁷Mit gleichem Vorgehen haben z.B. Hiraoka et al. [125] und Abid et al. [1] die laminare Strömung

Für die korrekte geometrische Abbildung des gesamten Behälters (inklusive Rührer) war es hier nur nötig die Behälterwände entsprechend der Drehzahl des Rührers (und somit des Koordinatensystems) mit einer bewegten Wand Randbedingung zu belegen. Bei praktischen Anwendungen sind unbewehrte Rührkessel allerdings nahezu irrelevant.

Ohne Einschränkungen lässt sich die Geometrie auflösen, indem man zu einer transienten Berechnung übergeht. Perng & Murthy [240] stellten dazu das *MDM*-Verfahren¹⁸ vor, welches auf Arbeiten zu bewegten Gittern von Demirdžić & Perić [67] und Rosenfeld & Kwak [269] aufbaut. Prinzipiell liegt dabei ein Berechnungsgitter für den gesamten Bereich (inklusive bewegter und stationärer Teile) vor. Durch die Drehung des Gitterbereichs welcher dem Rührer zugeordnet ist, kommt es zu einer Deformation im Grenzbereich. Wird die Deformation zu groß, so wird das Gitter neu strukturiert sowie die Zelleigenschaften entsprechend transformiert (Interpolation). Lässt man eine zu starke maximale Deformation zu, so sind Probleme mit der Genauigkeit zu erwarten. Perng & Murthy [240] demonstrierten das Verfahren anhand von zwei Beispielen (zwei- und dreidimensionale Berechnung), wobei jeweils ein Vierblatt-Scheibenrührer und vier Stromstörer (die Berechnung erfolgte daher im 90°-Segment) verwendet wurden. Ein Vergleich der laminaren Berechnungen mit Experimenten wurde nicht vorgenommen. Später setzten Perng & Murthy [241] auch das *SM*-Verfahren¹⁹ für die transiente Berechnung ein. Dabei findet keine Deformation der Zellen statt und das Berechnungsgitter besteht aus zwei getrennten Teilen, welche sich gegeneinander verdrehen. Hervorgehoben wurde hier die große Bedeutung einer konservativer Interpolation zur Bestimmung der Flüsse durch die Grenzfläche zwischen rotierenden und stationären Gitter. Auch bei dieser Präsentation erfolgte lediglich eine Demonstration der Möglichkeiten anhand der laminaren Strömung in einem Rührkessel mit Scheibenrührer²⁰. Die Erweiterung auf unstrukturierte Gitter wurde dann von Murthy et al. [211] vorgestellt.

Luo et al. [188] berechneten die Strömung in einem vollbewehrten Behälter mit $D = 0.294$ m (bestückt mit einem Sechsbblatt-Scheibenrührer) mit dem *SM*-Verfahren. Unter Ausnutzung der Symmetrie erfolgte die transiente Berechnung in einem 180°-Segment. Ihre Ergebnisse verglichen sie dann mit Messungen von Yianneskis et al. [350], Nouri & Whitelaw [220] und Hockey [127]. Dabei konnten sie eine deutlich bessere Übereinstimmung mit den Experimenten erreichen als Politis [245] mit vergleichbaren stationären Berechnungen (*IBC*-Verfahren). Dies zeigt, dass die komplette geometrische Auflösung, insbesondere des Rührers, von zentraler Bedeutung für die verlässliche Berechnung von Rührwerksströmungen ist. Ferner konnten durch die Vermeidung von experimentellen Randbedingungen oder empirischen Parame-

mit hochviskosen Fluiden berechnet.

¹⁸*MDM* = *Moving Deforming Mesh* (s. Abschnitt 5.1.2)

¹⁹*SM* = *Sliding Mesh* (s. Abschnitt 5.1.2)

²⁰Bei der zweidimensionalen Berechnung verwendeten Perng & Murthy [240] einen Vierblatt-Scheibenrührer und vier Stromstörer, so dass die Berechnung im 90°-Segment erfolgte. Das dreidimensionale Beispiel berechneten sie in einem 60°-Segment (Sechsbblatt-Scheibenrührer und sechs Stromstörer).

tern starke Fehlerquellen eliminiert werden. Die Schattenseite dieser Vorteile sind die hohen Kosten bezüglich Speicherbedarf und Rechenzeit. Insbesondere die Berechnung der Anfahrphase benötigt viel Zeit.

Eine erhebliche Kostenreduzierung ist möglich, indem man die Berechnung trotz vollständiger geometrischer Auflösung stationär durchführt. Dazu ist eine relativ starke Trennung zwischen rotierenden und stationären Bereich nötig und im Übergangsbereich darf weder der Einfluss des Rührers noch der Einfluss der Stromstörer dominieren. Eine der ersten Anwendungen dieses Ansatzes wurde von Takeda et al. [316] vorgestellt. Sie benutzten ein dynamisches Mehrblock-Verfahren mit rotierenden und stationären Blöcken, welche durch ein Interpolationsverfahren gekoppelt wurden. Dabei ist eine beliebige Überlappung der Gitter möglich, so dass auch relativ einfach komplexere Mehrrührersysteme mit Zu- und Ablauf berechnet werden konnten. Die Beispielrechnungen wurden auf sehr groben Gittern unter Nutzung des k - ε -Turbulenzmodells durchgeführt und ein Vergleich mit Experimenten lag nicht vor. Details zum Verfahren wurden bei dieser Machbarkeitsstudie leider nicht angegeben. Ein ähnliches Verfahren wurde später von Brucato et al. [35] als iteratives *IO*-Verfahren²¹ vorgestellt²². Dabei ist die Wahl der fiktiven zylindrischen Berandung der rotierenden (inneren) Rührerzone wie auch der Abschluss der stationären äußeren Zone willkürlich. Die beiden Zonen können dabei ggf. stark überlappen. Durch eine Mittelung in Umfangsrichtung ist es auch möglich, dass die beiden Zonen unterschiedliche Winkelbereiche abdecken.

Auch bei Luo et al. [187] lag die Motivation für die stationäre Berechnung mit mehreren Referenzkoordinatensystemen (*MFR*-Verfahren²³) bei der potentiellen Reduzierung der Rechenzeit bei gleichzeitiger Beibehaltung der kompletten geometrischen Auflösung. Die Wahl der Grenze zwischen den Gültigkeitsbereichen der beiden Referenzkoordinatensystemen (rotierender und stationärer Bereich) wurde mit Hilfe der *SM*-Berechnungen von Luo et al. [188] festgelegt. Das Kriterium war eine möglichst geringe zeitliche Abhängigkeit auf beiden Referenzgittern. Die Parameter des untersuchten Systems wurden entsprechend derjenigen von Yianneskis et al. [350] gewählt ($D = 0.294$ m, Sechsstab-Scheibenrührer, turbulent, ...) und die Berechnung erfolgte im 180°-Segment mit $7.56 \cdot 10^4$ Kontrollvolumina. Die Rührerblätter und -scheibe sowie die Stromstörer wurden als infinitesimal dünne Wände angenommen. Die Berechnungsergebnisse zeigten eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messungen von Yianneskis et al. [350] und eine deutliche Verbesserung gegenüber den Berechnungen von Politis [245] mit dem *IBC*-Verfahren. Leider wurde kein direkter Vergleich mit den transienten *SM*-Berechnungen von Luo et al. [188] durchgeführt. Allerdings

²¹*IO* = Inner-Outer (s. Abschnitt 5.1.2)

²²Zur Demonstration des Verfahrens wurde ein vollbewehrter Rührkessel mit ebenem Boden eingesetzt. Der Impulseintrag erfolgte über einen Sechsstab-Scheibenrührer. Nähere Angaben zur Geometrie lagen nicht vor. Die Turbulenzmodellierung erfolgte mit dem Standard k - ε Modell und das numerische Gitter bestand aus $1.12 \cdot 10^5$ Zellen. Eine zufriedenstellende Konvergenz konnte bereits mit acht Kopplungsiterationen zwischen innerer und äußerer Zone erreicht werden. Vergleiche mit experimentellen Daten aus der Literatur zeigten eine gute Übereinstimmung.

²³*MFR* = Multiple Frames of Reference (s. Abschnitt 5.1.2)

lagen die Rechenzeiten bei der stationären Betrachtung etwa um den Faktor 10 niedriger als bei den *SM*-Berechnungen. Ein vergleichbares Verfahren wurde später auch von Harvey et al. [115] unter dem Namen *ASS*-Verfahren²⁴ eingesetzt.

Daskopoulos & Harris [60] verglichen mehrere kommerzielle Berechnungsprogramme unter Nutzung verschiedener Modellierungsansätze für den Rührer (*IBC*-, *IO*- und *SM*-Verfahren) und die Turbulenz. Die Messungen von Ranade & Joshi [253][254] (Schrägblatt- bzw. Scheibenrührer) dienen dabei sowohl als Vergleichsexperimente wie auch als Grundlage für die Ermittlung der Rührerrandbedingungen beim Einsatz des *IBC*-Verfahrens. Es wurden Standardgeometrien ($D = H$, $d_R = D/3$, $h_R = D/2$ beim Scheibenrührer bzw. $h_R = D/3$ beim Schrägblattrührer, $n_{SS} = 4$, Abdeckung um einen Blaseneinzug zu verhindern) für die Berechnungen verwendet.

Bei der Berechnung mit dem *IBC*-Verfahren und einem Scheibenrührer wurde ein Viertel der Geometrie mit 9200 Zellen vernetzt. Als Turbulenzmodelle kamen das Standard k - ε -Turbulenzmodell, eine *RNG*-Version des k - ε -Turbulenzmodells²⁵ und ein Standard *RS*-Modell²⁶ zum Einsatz²⁷. Bei den Berechnungen zeigten sich abwechselnde Vorteile der verschiedenen Modelle (bzgl. verschiedener Variablen und Orte), wobei insgesamt der quantitative Vergleich nicht zufriedenstellte. Eine Gitterverfeinerung für den Fall mit dem k - ε -Turbulenzmodell (knapp 64000 Zellen) brachte zum Teil eine Verbesserung, zum Teil aber auch eine Verschlechterung. Eine Vergleichsrechnung mit freier Oberfläche zeigte, dass sich eine Abdeckung praktisch nicht auf die Strömungszustände in der unteren Hälfte des Behälters auswirkt. Ein ähnliches Bild ergab sich bei der Berechnung mit einem Schrägblattrührer und dem *IBC*-Verfahren. Hier wurde ein Viertel der Geometrie mit knapp 64000 Kontrollvolumina diskretisiert. Zu Bemerkem ist, dass bei allen betrachteten Turbulenzmodellen die turbulente kinetische Energie im Rührerstrom erheblich zu klein berechnet wurde. Bei der Berechnung mit dem *IO*-Verfahren in Kombination mit einem Scheibenrührer (ein Viertel der Geometrie, knapp 26000 Zellen, k - ε -Turbulenzmodell) stimmten erneut die Geschwindigkeitsmittelwerte relativ gut, während die Schwankungen zu klein berechnet wurden. Eine analoge Aussage ergab

²⁴*ASS* = Approximate Steady-State (s. Abschnitt 5.1.2)

²⁵*RNG* = ReNormalisation Group

²⁶*RS* = Reynolds Stress

²⁷Zur Bewertung des Mikromischens, des Blasenzerfalls sowie der turbulenten Diffusion in Rührkesseln spielt die Energiedissipation eine wichtige Rolle. Anwendungen auf Reaktionen, welche in ihrer Geschwindigkeit durch das Mikromischen (im Gegensatz zum Makromischen, bei dem die Umwälzung des gesamten Kesselvolumens infolge der mittleren Strömungsgeschwindigkeiten maßgebend ist, sind beim Mikromischen die lokalen Verschiebungen von Fluidelementen durch turbulente Scherströmung (durch Wirbel verursachte statistische Schwankungsbewegung) relevant) limitiert sind, wurden z.B. von Ranade & Bourne [249] und Bakker & Fasano [7] vorgestellt. Die Messung der Energiedissipation erfolgt in der Regel immer indirekt, da die direkte Bestimmung die simultane Messung von neun unabhängigen Geschwindigkeitsgradienten je Messpunkt erfordern würde (s. Kresta & Wood [164]). Bei der Berechnung zeigt das k - ε -Turbulenzmodell aufgrund des isotropen Ansatzes Schwächen. Daher postulierten die Autoren, dass die Verwendung von anisotropen Turbulenzmodellen starke Verbesserungen bzgl. der Berechnung der Turbulenzgrößen bringt. Dies konnte, auch von anderen Autoren, nicht generell bestätigt werden.

sich bei der Berechnung mit einem Schrägblattrührer. Etwas bessere Ergebnisse als mit dem *IO*-Verfahren ergaben sich beim Einsatz der *SM*-Methode (Scheibenrührer, k - ε -Turbulenzmodell), aber die Werte für k und ε im Rührerstrom lagen immer noch deutlich zu niedrig. Insgesamt lagen für alle Fälle akzeptable Simulationen der Mittelwerte, aber erheblich zu klein berechnete Turbulenzgrößen vor. Der Übergang zu aufwendigeren Verfahren brachte nicht die erwarteten Verbesserungen. Die Ursache für die wenig zufriedenstellenden Resultate dürfte in erster Linie bei der zu geringen räumlichen Auflösung (insbesondere im Rührerbereich) zu suchen sein, welche bei der Bewertung der Ergebnisse zu berücksichtigen ist.

Tabor et al. [315] berechneten eine Rührkesselströmung mit einem Sechsstab-Scheibenrührer ($D = 0.27$ m, $d_R = D/3$, $h_R = D/3$, $n_{SS} = 4$, $Re = 2.9 \cdot 10^4$). Dabei kamen das *SM*-Verfahren nach Luo et al. [188] und die *ASS*-Methode nach Luo et al. [187] zusammen mit dem k - ε -Turbulenzmodell zum Einsatz. Der halbe Behälter wurde mit $1.2 \cdot 10^5$ Zellen aufgelöst und es konnte eine gute Übereinstimmung mit Geschwindigkeitsmessungen von Wu & Patterson [347] erzielt werden. Die transiente Berechnung lieferte allerdings eher zu hohe Werte für die tangentialen und radialen Geschwindigkeitskomponenten bei größeren Radien. Als mögliche Gründe gaben die Autoren numerische Fehler an, welche sich bei instationärer Betrachtung mit der Zeit integrieren, und eine ggf. schlechtere Anpassung des k - ε -Turbulenzmodells an instationäre Strömungen. Ein wichtiger Punkt dürfte aber auch die Verwendung von $\gamma_{CDS} = 0.8$ (s. Abschnitt 7.7) sein, welche ohne Angabe einer Begründung erfolgte. Die berechneten Nachlaufwirbel waren qualitativ vergleichbar zu den Ergebnissen von Yianneskis & Whitelaw [351] und Van't Riet & Smith [335]. Da mit der transienten Methode nur wenig direkte Interaktion zwischen Rührer und Stromstörern gefunden werden konnte, favorisierten die Autoren die *ASS*-Methode für den vorliegenden und vergleichbare Fälle.

Lee et al. [170] berechneten die Strömung eines Scheibenrührers ($D = H = 0.1$ m, $d_R = D/3$, $h_R = D/3$, $n_{SS} = 4$, Abdeckung um das Einsaugen von Luft zu verhindern²⁸) mit dem *SM*-Verfahren (in Kombination mit dem k - ε -Turbulenzmodell) und verglichen die Ergebnisse mit eigenen LDA-Messungen. Die Simulationen erfolgten mit verschiedenen Berechnungsgittern (mit $5.6 \cdot 10^4$, $1.49 \cdot 10^5$ und $2.41 \cdot 10^5$ Kontrollvolumina für ein 180° -Segment) bei einer Reynoldszahl von $4 \cdot 10^5$. Dabei zeigte sich die hohe Bedeutung einer ausreichenden räumlichen Auflösung, um Änderungen der Gradienten erfassen zu können. Das unstrukturierte Gitter sowie die lokale Verfeinerung im Rührerbereich erwies sich als vorteilhaft. Bei dieser Arbeit wurde erneut die große Bedeutung der Nachlaufwirbel (und somit ihrer Simulation) hervorgehoben.

Die Vergleiche von Rechnung und Messung wurden in der direkten Umgebung des Rührers durchgeführt, bzgl. einer Betrachtung der Globalströmung wurde auf ältere Arbeiten (z.B. Issa & Gosman [139]) verwiesen. Insgesamt wurde eine gute quan-

²⁸Nouri & Whitelaw [219] zeigten, dass eine Abdeckung des Rührkessels (keine freie Oberfläche mehr) zur Unterdrückung des Blaseneinzugs die Strömung nur in unmittelbarer Nachbarschaft beeinflusst, während im restlichen Behälter die Strömung nahezu derjenigen ohne Abdeckung entspricht.

titative Übereinstimmung bei den mittleren Geschwindigkeiten (bei hoher Gitterauflösung) gefunden. Für die turbulente kinetische Energie k erzielten sie eine qualitativ große Ähnlichkeit zwischen Rechnung und Messung, auch bei Verfeinerung des Gitters (welche nur noch eine geringfügige Verbesserung erbrachte) wurde k im Rührerstrom deutlich zu klein berechnet (um ca. 50%), was ein generelles Phänomen darstellt. Mit zunehmender Entfernung vom Rührer vergleichmäßigen sich die k -Werte und werden deutlich kleiner.

Die Messfehler wurden von den Autoren im Falle der mittleren Geschwindigkeit auf ca. 1% der Rührerumfangsgeschwindigkeit (bei starken Gradienten bis zu 3%) und bei den turbulenten Fluktuationen auf ca. 5-10% geschätzt. Abweichungen zwischen Rechnung und Messung können zum Teil auch durch Interpolationen aufgrund unterschiedlicher Datendichte entstanden sein. Ferner wurde als Fehlerquelle die Isotropieannahme bei der Turbulenzmodellierung angeführt. Das k - ε -Turbulenzmodell wurde nicht für den gesamten Rührkessel als angemessen angesehen. Turbulenzmodellen ohne Isotropieannahme wurde mehr Potential eingeräumt als einer weiteren Gitterverfeinerung.

Aufbauend auf die Arbeit von Lee et al. [170] berechneten Ng et al. [216] ebenfalls die Strömung eines Scheibenrührers (gleiche Vorgehensweise und Geometrie wie bei Lee et al. [170]). Im Fokus stand dabei die Genauigkeit von Messung und Berechnung. Die Übereinstimmung von Rechnung und Messung war insgesamt sehr gut, allerdings lagen noch Unterschiede bei der turbulenten kinetischen Energie in der Nähe der Rührerblätter vor. Auch hier brachte eine Verfeinerung des Gitters (bis zu $2.41 \cdot 10^5$ Kontrollvolumina) keinen großen Benefit bzgl. k im Rührerstrom.

Als möglicher Fehler bei den Messungen wurde die Winkelaufweitung bei der Verwendung von Zylinderkoordinaten genannt. Abschätzungen zeigten, dass davon die Schwankungsgeschwindigkeiten stärker betroffen sind als die mittleren Geschwindigkeiten. Weiterhin führt eine variable Datenrate und damit unterschiedliche lokale Statistik (die benötigte Anzahl an Daten hängt primär von der lokalen Turbulenzintensität ab) zu Fehlern. Ferner ist eine Erhöhung der gemessenen turbulenten kinetischen Energie durch instationäre Schwankungen von Umdrehung zu Umdrehung (Fehler analog zur Pseudoturbulenz) zu beachten, welche z.B. von Yianneskis & Whitelaw [351] beobachtet wurde. Die Autoren schätzten allerdings die Effekte dieser Fehler als gering ein. Die Fehlerquellen bei der Berechnung sind primär bei der räumlichen und zeitlichen Auflösung, der Wandrandbedingung und dem Turbulenzmodell zu suchen. Weiterhin ergeben sich numerische Fehler durch Diskretisierung und numerische Diffusion.

Die Autoren erwarten keine Verbesserung durch eine weitere Erhöhung der Auflösung in Raum und Zeit, allerdings sehen sie aufgrund der vorliegenden Anisotropie im Rührerbereich Potential bei der Verwendung eines RS -Modells. (Andere Autoren, wie z.B. Daskopoulos & Harris [60], konnten aber keine erheblichen Vorteile dieses Modellierungsansatzes feststellen.) Für eine Reduzierung der Fehler bei der Wandbehandlung wurde die Verwendung eines Zwei-Schichten Ansatzes als sinnvoll erachtet.

Neben einer sehr guten Übersicht von bisherigen Messungen und Simulationen von Rührkesselströmungen veröffentlichten Brucato et al. [36] einen umfangreichen Vergleich der *IBC*-, *IO*- und *SM*-Methode. Dabei wurde primär ein Sechsstab-Scheibenrührer betrachtet ($D = H$, $d_R = D/3$, $n_{SS} = 4$, $h_R = D/2$ bzw. $h_R = D/3$, je nach experimentellen Vergleichsdaten) und die Reynoldszahl lag immer über $3 \cdot 10^4$. Zur Demonstration wurden auch Strömungen mit Axialrührer und Mehrfachrührern mit dem *IO*-Verfahren berechnet.

Beim Einsatz des *IBC*-Verfahrens wurde deutlich, dass bei den verschiedenen experimentellen Ergebnissen (z.B. Wu & Patterson [347]) signifikante Unterschiede vorliegen. Die Randbedingungen für einen Standardrührer wurden daher auf Basis einer Kombination verschiedener Messungen gesetzt. Dabei ist zu beachten, dass alle (auch die periodischen) Schwankungen bei der Randbedingung für die Turbulenzgrößen berücksichtigt werden. Das Berechnungsgitter erfasste aus Symmetriegründen ein Viertel des Behälters und bestand aus $1.6 \cdot 10^4$ bzw. $2.7 \cdot 10^4$. Insgesamt wurde eine gute globale Übereinstimmung mit den Experimenten erzielt. Allerdings zeigten sich die Berechnungsergebnisse sehr sensitiv gegenüber Variationen der Rührerrandbedingungen (auch bereits im Bereich der Streuung der verschiedenen Messwerte!). Universale Randbedingungen wurden daher nicht als sinnvoll erachtet, wodurch immer eine sehr starke Abhängigkeit von experimentellen Daten und deren Genauigkeit besteht. Interessanterweise fanden Brucato et al. [36] bei ihrer Untersuchung verschiedener Diskretisierungsverfahren bei ausreichender Gitterauflösung keine signifikante numerische Diffusion aufgrund des Upwind-Verfahrens, was sie mit einer Dominanz von turbulenter Diffusion erklärten.

Bei der Verwendung des *IO*-Verfahrens umfasste das äußere Gitter den gesamten Behälter, während das innere Gitter eine um den Rührer angeordnete Untermenge darstellte. Die Gitterabhängigkeit war bei diesem Verfahren etwas größer als beim *IBC*-Verfahren. Für einen Viertelbehälter reichten aber (basierend auf verschiedenen Kriterien) nach Brucato et al. [36] bereits $2.9 \cdot 10^4$ Zellen, um eine Gitterunabhängigkeit zu erreichen. Die turbulente Strömung in Rührernähe wird korrekt wiedergegeben, allerdings wurde die turbulente kinetische Energie zu klein berechnet. Auch die Nachlaufwirbel waren viel zu schwach ausgebildet. Dies kann ein Hinweis darauf sein, dass die Gitterauflösung für dieses Kriterium noch nicht ausreichend war. Zusammenfassend zeigen die Ergebnisse aber die gute Vorhersagequalität des Verfahrens. Die Verbesserung gegenüber dem *IBC*-Verfahren musste aber mit erhöhtem Rechenaufwand erkaufte werden. Gute Ergebnisse konnten auch bei den Zweirührerberechnungen (hier sind z.B. universelle Rührerrandbedingungen nicht einsetzbar) vorgestellt werden. Die Ergebnisse mit einem Schrägblattrührer blieben aus Mangel an experimentellen Vergleichsdaten praktisch ohne Bewertung.

Die Berechnungen mit dem *SM*-Verfahren wurden für ein 180° -Segment mit $5.4 \cdot 10^4$ Zellen durchgeführt. Dabei wurde der Zeitschritt so gewählt, dass eigentlich ein *CM*-Verfahren²⁹ vorlag. Das berechnete Strömungsfeld ließ sich in drei konzentrische Regionen einteilen. Der innerste Bereich ist an die Rührer angekoppelt, während

²⁹*CM* = *C*licking *M*esh (s. Abschnitt 5.1.2)

die äußerste Zone durch die Stromstörer bestimmt wird. Dabei war die Strömung in den jeweiligen Referenzsystemen stationär. Dazwischen befindet sich eine Pufferzone, welche praktisch für beide Zonen stationär ist. Das Niveau der turbulenten kinetischen Energie wurde signifikant zu klein berechnet, wobei die Unterschätzung noch stärker als beim *IO*-Verfahren ausfiel. Zu kleine k -Werte wurden auch von anderen Autoren, wie z.B. Lee et al. [170] oder Tabor et al. [315], berichtet. Die Berechnungsergebnisse sind insgesamt etwas besser als die Ergebnisse mit dem *IO*-Verfahren, lösen die Nachlaufwirbel aber ebenfalls nicht auf. Dies dürfte allerdings ebenso wie beim *IO*-Verfahren an der noch zu klein gewählten Gitterauflösung liegen. Die beste Vorhersage im Vergleich erforderte erwartungsgemäß auch den größten Rechenaufwand. Damit resultiert bei einer Kosten-Nutzen Abwägung aufgrund der relativ geringen Unterschiede eine Präferenz für das *IO*-Verfahren. Insgesamt sind die Ergebnisse aufgrund der deutlich höheren geometrischen Auflösung erheblich besser als jene von Daskopoulos & Harris [60], welche nicht zufriedenstellen konnten.

Obwohl die Popularität des *IBC*-Verfahrens über die Jahre stark abgenommen hat, kommt es auch in jüngster Zeit noch zum Einsatz. Ein Beispiel hierfür sind die Arbeiten von Yoon et al. [353], welche vollständige und detaillierte Randbedingungen um die gesamte Rührerzone mit Hilfe eines Stereo-*PIV*-Verfahrens in Kombination mit einem theoretischen Rührermodell ermittelten. Als Testfall wurde ein unbewehrter Rührkessel ($D = 0.100$ m, $h_R = d_R = D/2$, $Re = 4 \cdot 10^3$) mit Scheibenrührer gewählt. Interessanterweise wurde die Simulation dann im rotierenden Koordinatensystem bei relativ hoher Auflösung ($5.18 \cdot 10^4$ Zellen für ein 60° -Segment) durchgeführt.

Montante et al. [204] untersuchten den Einfluss der Rührereinbauhöhe ($D = H = 0.29$ m, $n_{SS} = 4$, Sechsstab-Scheibenrührer, $d_R = D/3$, h_R/D variierte zwischen 0.12 und 0.33, $Re = 4 \cdot 10^4$) auf die Struktur der Hauptwirbel³⁰. Dazu wurde sowohl das *SM*-Verfahren (180° -Segment, $8 \cdot 10^4$ Zellen) als auch das *IO*-Verfahren (innen 60° -Segment, außen 90° -Segment, insgesamt $5.2 \cdot 10^4$ Zellen, ca. 10 Kopplungsiterationen) eingesetzt. Zu bemerken ist, dass bei der Bestimmung der Randbedingungen für die äußere Zone die periodischen Schwankungen ebenfalls mit eingerechnet wurden. Der Effekt stellte sich allerdings als vernachlässigbar heraus. Die Turbulenzmodellierung erfolgte primär mit dem k - ε Modell und die freie Oberfläche wurde als Symmetrieebene approximiert. Insgesamt waren die Ergebnisse der beiden Verfahren vergleichbar (auch bei der Berechnung von k), so dass das *IO*-Verfahren als gute ökonomische Alternative zum *SM*-Verfahren bestätigt werden konnte.

Der Umschlag von zwei auf einen Ringwirbel lag bei den Berechnungen im Bereich von $h_R/D = 0.15 \dots 0.2$, was sich sehr gut mit experimentellen Beobachtungen deckte. Auch der Vergleich mit *LDA*-Messungen zeigte eine gute Übereinstimmung beim

³⁰Mit abnehmender Rührereinbauhöhe wird die Strömungsstruktur immer stärker auch durch die Behälterwände beeinflusst, so dass auch bei radial fördernden Rührern die vertikale Geschwindigkeitskomponente verstärkt wird. Wird eine bestimmte Einbauhöhe unterschritten, so findet ein Umschlag von zwei Ringwirbeln (jeweils über und unter der Rührerebene) zu einem einzigen Ringwirbel statt.

Niveau der mittleren Geschwindigkeiten sowie der periodischen Schwankungen. Die turbulenten Schwankungen wurden, wie auch bei vielen anderen Untersuchungen, zu klein berechnet. Eine weitere Ursache für diese Unterschiede könnte auch das merkliche Flattern der Rührerwelle bei den Messungen gewesen sein. Der Abströmwinkel am Rührer wurde überbestimmt, d.h. die Abströmung war in Realität horizontaler, was sich durch eine Verschiebung der Geschwindigkeitsprofile äußerte. Falls also die Geschwindigkeit am Behälterboden eine zentrale Rolle spielt, wie z.B. beim Suspensieren von Feststoffteilchen, so ist Vorsicht geboten.

Eine Gitterverfeinerung ($SM: 4.5 \cdot 10^5$ Zellen, $IO: 1.9 \cdot 10^5$ Zellen) brachte keine Verbesserung bei den mittleren Geschwindigkeiten (und damit dem Abströmwinkel), während k deutlich stärker reagierte (das k -Niveau stieg). Die Autoren bezweifelten aber, dass durch eine weitere Gitterverfeinerung die Lücke zu den Experimenten geschlossen werden kann. Im Rahmen der Zellenanzahlerhöhung wurden auch die realen Dicken von Rührerblättern und -scheibe sowie der Stromstörer berücksichtigt. Die resultierenden Verbesserungen fielen allerdings gering aus, so dass der Effekt als vernachlässigbar erachtet wurde.

Eine Variation des Turbulenzmodells ($RNG\ k-\varepsilon$, RS -Modell) brachte praktisch keine Verbesserung bei den mittleren Geschwindigkeiten bzw. des Abströmwinkels. Die Werte für k wurden zum Teil sogar noch niedriger berechnet als mit dem $k-\varepsilon$ -Turbulenzmodell. Schwächen der verwendeten Wandfunktion bei der Ermittlung der exakten Wandreibung konnten als Ursache für Abweichungen des Rührerabströmwinkels ausgeschlossen werden, so dass die Ergebnisse auf einen Bedarf für weitere Verbesserungen bei der Turbulenzmodellierung schließen lassen.

Revstedt et al. [262] berechneten eine Rührkesselströmung bei einer Reynoldszahl von $6 \cdot 10^4$ (Sechsstab-Scheibenrührer, $D = H = 0.444$ m, $d_R = D/3$, $h_R = D/2$, $n_{SS} = 4$) mit Hilfe der LES ³¹. Damit waren sie in der Lage Fehler durch die Turbulenzmodellierung zu reduzieren. Die Autoren bemerkten aber, dass die LES aufgrund des hohen Rechenaufwands³² aktuell noch als Werkzeug für die Forschung zu bezeichnen ist. Es wird allerdings allgemein angenommen, dass in absehbarer Zukunft auch der Einsatz bei Ingenieursaufgaben erfolgen wird. Die Berechnung erfolgte auf einem stationären kartesischen Gitter mit einer maximalen Auflösung von 64^3 sowie lokaler Verfeinerung im Rührerbereich ($26 \times 74 \times 74$). Die zylindrische Form des Rührbehälters wurde durch Ausblocken von Randzellen realisiert. Die Modellierung des Impulseintrags durch den Rührer erfolgte analog zu dem Vorgehen von Eggels [81] durch zeitabhängige Quellterme in den Erhaltungsgleichungen. Dabei wurden die Quellen jeweils an der aktuellen Position der Rührerblätter eingebracht (analog zum stationären CS -Verfahren³³) und entsprechend der Rotation des Rührers für jeden Zeitschritt modifiziert. Der Betrag der Quellterme wurde über

³¹ $LES = Large Eddy Simulation$ (s. Abschnitt 3.3)

³² LES -Daten machen nur bei statistischer Betrachtung Sinn, so dass eine hinreichend lange Integration durchgeführt werden muss, was eine lange Rechenzeit zur Folge hat. Dafür erhält man allerdings eine deutlich schwächere Abhängigkeit vom Turbulenzmodell und die Möglichkeit einer Spektralanalyse.

³³ $CS = Computational Snapshot$ (s. Abschnitt 5.1.2)

die Betrachtung der Geschwindigkeitsdifferenz zwischen Rührerblätter und Fluid bestimmt, so dass keine experimentellen Daten für die Spezifikation der Randbedingungen benötigt wurden. Insgesamt wurden ca. 43 Umdrehungen berechnet (d.h. $3 \cdot 10^4$ Zeitschritte).

Die Autoren erreichten eine gute qualitative und im Wesentlichen auch quantitative Übereinstimmung ihrer Berechnungen mit den Messungen von Stoots & Calabrese [311], Yianneskis et al. [350], Costes & Couderc [49][50] und Wu & Patterson [347] sowie den Berechnungen von Eggels [81]. Die Geschwindigkeitsfluktuationen zeigten aber insbesondere im Bereich des Rührers Abweichungen von den Messungen. Es wurde angenommen, dass die Ursache bei Geometrieunterschieden zwischen Simulation und Messung bzw. bei einer noch nicht hinreichend genauen Modellierung des Impulseintrags durch den Rührer zu suchen ist.

Auch Derksen & Van den Akker [70] berechneten die Strömung im Rührkessel (Sechsstab-Scheibenrührer, $D = H$, $d_R = D/3$, $h_R = D/3$, $n_{SS} = 4$) mit *LES*. Dabei bauten die Berechnungen auf die Arbeit von Eggels [81] auf, welcher als erster über *LES*-Berechnungen im Rührkessel berichtete. Zum Vergleich mit ihren eigenen *LDA*-Messungen (winkelaufgelöst mit Schwerpunkt im Rührerbereich) sowie den Experimenten von Wu & Patterson [347] bzw. Stoots & Calabrese [311] realisierten sie eine Reynoldszahl von $2.9 \cdot 10^4$. Aufgrund der hohen Effizienz und der sehr guten Parallelisierbarkeit wurde das Lattice-Boltzmann-Verfahren für die Berechnung eingesetzt. Der Rührer und die Behälterwände wurden mit der *AFFT*³⁴ diskretisiert. Dabei werden definierte Strömungsbedingungen an bestimmten Punkten im Raum gesetzt und ggf. zeitabhängig modifiziert. Diese Vorgehensweise ermöglicht eine hohe Flexibilität bei der Beschreibung des Rührers sowie der Wände. Es wurde ein kubisches Berechnungsgitter mit 120^3 bzw. 180^3 Zellen eingesetzt und zur Definition der Behälterwände, der Stromstörer, des Rührers und der Welle waren rund $1.7 \cdot 10^5$ Punkte nötig. Die Dicke der Rührerblätter und der Stromstörer entsprach einer Zellenweite, d.h. $D/120$ bzw. $D/180$. Es ist zu bemerken, dass aufgrund der vorliegenden Definition der Behälterwände für die Strömungsberechnung nur $\pi/4$ der eingesetzten Zellen relevant sind, d.h. maximal $4.58 \cdot 10^6$ Zellen. Insgesamt wurden 50 Umdrehungen gerechnet, wofür auf einem Parallelrechner mit 4 Prozessoren ein Monat Rechenzeit benötigt wurde.

Die Berechnungsergebnisse stimmten insgesamt sehr gut mit den Experimenten überein. Sie zeigten deutliche Nachlaufstrukturen hinter den Rührerblättern und unregelmäßige Strukturen außerhalb der Rührerbereichs. Die Pfade der Nachlaufwirbel (bestimmt nach Yianneskis et al. [350]) wurden durch die Berechnung gut abgebildet. Auch die ermittelte Newtonzahl passte gut zu den experimentellen Werten. Die Übereinstimmung der maximalen radialen Geschwindigkeit war gut und die Werte der maximalen tangentialen Geschwindigkeit lagen um ca. 15% zu hoch. Das Abstromgebiet des Rührers wurde insgesamt zu breit berechnet. Auch bei der turbulenten kinetischen Energie stimmten die Maximalwerte gut mit den Experimenten überein. Die Energiedissipation erfolgte nach den Berechnungen zu ca. 80%

³⁴*AFFT* = Adaptive Force-Field Technique (s. Abschnitt 5.1.2)

im Rührerbereich bzw. in dessen Abstromgebiet³⁵.

Im Gegensatz zu den meisten bisherigen Anwendungen von *LES* in Rührkesseln, kam bei den Berechnungen von Yeoh et al. [349] die Finite-Volumen-Methode in Kombination mit dem *MDM*-Verfahren sowie dem Standard Smagorinsky Modell zum Einsatz. Eine Impulsmodellierung wie bei der *AFFT* war somit nicht nötig. Das Nachlaufwirbelpaar wurde über die Wirbelstärke erkannt und deren Ursprung an der oberen und unteren Rührerblattkante lokalisiert. Bei der Betrachtung der für das Mischen wichtigen turbulenten kinetischen Energie konnte das Nachlaufwirbelpaar ebenfalls bestimmt werden, allerdings mit deutlich schlechterer Auflösung. Der Vergleich der Ergebnisse der Simulation ($D = H = 0.1$ m, $n_{SS} = 4$, Sechsstab-Scheibenrührer, $d_R = h_R = D/3$, $Re = 4 \cdot 10^4$, $4.9 \cdot 10^5$ Zellen, wobei sowohl die Blattdicke des Rührers als auch die Dicke der Stromstörer aufgelöst wurde) mit *LDA*-Messungen zeigte insgesamt eine sehr gute Übereinstimmung bei den mittleren Geschwindigkeiten sowie den Turbulenzgrößen, wobei sich die Autoren auf das Abströmgebiet des Rührers konzentrierten. Lediglich k wurde noch etwas zu klein berechnet (evtl. war die geometrische Auflösung noch zu gering), im Vergleich zu entsprechenden *RANS*-Berechnungen (mit k - ε -Turbulenzmodell) aber wesentlich besser³⁶.

Kürzlich wurde von Ertem-Müller & Schäfer [90][89] eine *DNS*-Berechnung³⁷ für eine Rührkesselströmung mit Scheibenrührer ($D = 152$ mm) vorgestellt. Zur Realisierung einer moderaten Reynoldszahl von 7280 kam bei der Berechnung ein Gitter mit knapp 16 Millionen Kontrollvolumina zum Einsatz. Ertem-Müller berichtete von einer Berechnungszeit von über 80 Tagen bei der Nutzung von 8 Prozessoren. Dies unterstreicht die bereits in Abschnitt 3.3 beschriebene Limitierung des *DNS*-Einsatzes auf akademische Untersuchungen. Allerdings konnte mit der berechneten Newtonzahl ($Ne = 4.3$) eine nur geringe Abweichung vom experimentell bestimmten Wert ($Ne = 4.5$, Schäfer [281]) erreicht werden.

Für den eben beschriebenen Fall wurden von Ertem-Müller [89] auch *LES*-Berechnungen durchgeführt und der Vergleich ergab, dass mit beiden Verfahren die Strömung gut vorausgesagt werden kann, sofern eine adäquate Gitterauflösung verwendet wird. So liegt z.B. die berechnete Newtonzahl bei $Ne = 4.2$, wobei allerdings im Vergleich zur *DNS* nur etwa ein Achtel der Kontrollvolumina und ca. eine Woche Rechenzeit benötigt wurde.

Obwohl Schrägblattrührer in der Industrie sehr verbreitet und bedeutend sind, sind Veröffentlichungen zur Berechnung mit diesem Rührertyp vergleichsweise selten. Ra-

³⁵Zum Vergleich: Cutter [57] ermittelte folgende Verteilung für die Energiedissipation: ca. 20% im Rührorgan, ca. 50% im Rührerfreistrahl und ca. 30% in den restlichen Bereichen. Wu & Patterson [347] quantifizierten die anteilige Energiedissipation im Rührer sowie in dessen Abstromgebiet mit 60%.

³⁶In Rührernähe ist die Strömung generell stark anisotrop, inhomogen und gekrümmt, d.h. die Voraussetzungen für das k - ε -Turbulenzmodell sind prinzipiell nicht erfüllt. In anderen Bereichen des Rührkessels sind die Annahmen des k - ε -Turbulenzmodells aber wiederum gut erfüllt und die Ergebnisse unterscheiden sich kaum von denen mit aufwendigeren Ansätzen.

³⁷*DNS* = Directe Numerical Simulation (s. Abschnitt 3.3)

nade et al. [256] haben aufbauend auf Messungen von Ranade & Joshi [253] die mit einem Schrägblattrührer erzeugte Rührkesselströmung stationär unter Nutzung von Rührerrandbedingungen (*IBC*-Verfahren) berechnet. Für die Beschreibung der turbulenten Strömung verwendeten sie bei ihrer dreidimensionalen Berechnung das k - ε -Turbulenzmodell. Später erweiterten Ranade et al. [250] das Berechnungsverfahren zur Untersuchung des Mischverhaltens eines inerten Tracers.

Fokema et al. [93] verwendete ebenfalls experimentell (*LDA*-Messungen) ermittelte Randbedingungen für die Rührerzone (*IBC*-Verfahren). Die Berechnungen mit Schrägblattrührer wurden mit Hilfe des k - ε -Turbulenzmodells bei einer Variation der Rührereinbauhöhe durchgeführt. Dabei hat sich gezeigt, dass die für eine bestimmte Konfiguration gemessenen Randbedingungen nicht universell, sondern nur für sehr ähnliche geometrische Anordnungen einsetzbar sind. Eine Variation der Einbauhöhe des Rührers ist also nicht uneingeschränkt möglich, sofern nicht entsprechende Messungen für modifizierte Randbedingungen verfügbar sind. Dies ist als eine erhebliche Schwäche des *IBC*-Verfahrens zu bewerten.

Armenante et al. [4] untersuchten die Strömung in einem unbewehrten Rührkessel³⁸ ($D = 0.29$ m, $H = 0.32$ m, flacher Boden und Abschluss nach oben, $6 \times 45^\circ$ -Schrägblattrührer, $d_R/D = 0.35$, $h_R/H = 0.2$, $n_R = 300$ min⁻¹ und Wasser als Fluid) mit Hilfe von *LDA* und *CFD*. Die Messungen dienten sowohl zur Bestimmung der nötigen Randbedingungen für den Rührer (es wurde das *IBC*-Verfahren eingesetzt) als auch zur Verifikation der Berechnungen. Die Simulationen erfolgten im stationären Koordinatensystem mit $2.5 \cdot 10^4$ Zellen unter Variation des Turbulenzmodells und der Randbedingungen für den Rührer, welcher durch ein Zylindervolumen repräsentiert wurde. Bei der vorliegenden stark gerichteten Strömung (da keine Stromstörer vorlagen, war die tangentiale Geschwindigkeitskomponente dominant und die Art des Rührers spielte eine untergeordnete Rolle), ist die Annahme von isotroper Wirbelviskosität (k - ε -Modell) zweifelhaft, so dass das verwendete algebraische Spannungsmodell (welches einen anisotropen Wirbelviskositätsansatz verfolgt) im Vorteil war und im Vergleich mit den Experimenten eine wesentlich bessere Übereinstimmung liefert. Ferner machte es sich bei den Berechnungen positiv bemerkbar, wenn die Rührerrandbedingungen nicht nur an der Abströmseite des Rührers gesetzt wurden, sondern auch an der Anströmseite. Im besten Fall konnte so insgesamt eine gute Übereinstimmung mit den Messungen erzielt werden.

Harvey et al. [115] nutzten die *ASS*-Methode zur Berechnung der durch einen Schrägblattrührer erzeugten laminaren 3d-Strömung. Sie führten auch eine detaillierte Untersuchung zur Bedeutung der Gitterauflösung durch. Ferner ist bemerkenswert, dass sie die Dicke der Rührerblätter geometrisch auflösten. Ein Vergleich der stationären *ASS*-Methode mit transienten laminaren Berechnungen erfolgte dann durch Harvey & Rogers [116]. Dabei wurden sowohl Scheiben- als auch Schrägblattrührer in einem Behälter mit $D = 0.15$ m betrachtet. Die freie Oberfläche wurde durch eine Symmetrieebene angenähert und die Validierungsexperi-

³⁸Unbewehrte Rührkessel erlauben aufgrund ihrer einfachen Geometrie einen leichteren Vergleich zwischen Simulation und Experiment, sind für praktische Anwendungen aber weniger relevant.

mente stammten von Harvey et al. [115]. Aufgrund der laminaren Betrachtung (die Reynoldszahl lag im Bereich von 5 bis 45) konnten Fehler durch die Turbulenzmodellierung eliminiert werden und die berechneten Newtonzahlen stimmten sehr gut mit den experimentell ermittelten Werten überein. Die Autoren konnten zeigen, dass mit der *ASS*-Methode eine ebenso gute Übereinstimmung mit den exp. Daten erreicht werden kann wie mit der transienten Berechnung, so dass die stationäre Betrachtung aufgrund der wesentlich kürzeren Rechenzeiten in den meisten Fällen als sinnvoller einzustufen ist. Die Umsetzung der *ASS*-Methode auf Mehrrührersysteme (ebenfalls laminar) wurde später von Harvey et al. [117] durchgeführt.

Xu & McGrath [348] führten Berechnungen im turbulenten Bereich unter Verwendung eines Impulsquellenmodells durch. Experimentelle Daten wurden hier zwar nicht benötigt, aber es erfolgte eine Verschmierung in Umfangsrichtung, so dass die Nachlaufwirbel nicht aufgelöst werden konnten. Eine Untersuchung verschiedener Turbulenzmodelle für die Berechnung von Rührkesselströmungen mit Schrägblattrührern wurde von Bakker et al. [10] durchgeführt. Dabei zeigten sich nur geringe Unterschiede bei der Variation der Turbulenzmodelle. Erste Simulationen der turbulenten Strömungscharakteristik innerhalb eines Schrägblattrührers wurden von Ranade & Dommeti [252] veröffentlicht. Dabei handelt es sich um eine stationäre Berechnung mit voller geometrischer Auflösung, d.h. der Betrachtung eines bestimmten Zeitpunkts. Umgesetzt wurde dies mit dem *CS*-Verfahren, d.h. die Berechnung erfolgte im Stationären und es wurden Quellterme an den Oberflächen der Rührerblätter verwendet, um den resultierenden Drehimpuls zu berücksichtigen. Berechnungen mit dem *SM*-Verfahren wurden von Bakker et al. [9] vorgestellt. Sie betonten die hohen Kosten und bemerkten, dass bis zu 35 Umdrehungen nötig sind, um einen voll entwickelten periodischen Zustand zu erreichen.

Wechsler et al. [343] berechneten die von einem $4 \times 45^\circ$ -Schrägblattrührer erzeugte Strömung sowohl instationär als auch stationär und verglichen die Berechnungen mit entsprechenden experimentellen Untersuchungen von Schäfer et al. [283] ($D = 0.152\text{ m}$, $d_R = D/3$, $h_R = D/3$, $n_{SS} = 4$, Abdeckung um einen Blaseneinzug zu verhindern). Bei der transienten Rechnung kommt das *CM*-Verfahren während im stationären Fall das *ASS*-Verfahren (ähnlich dem Verfahren von Harvey et al. [115], welche allerdings nur laminare Rührkesselströmungen berechnet haben) zum Einsatz kommt. In beiden Fällen erfolgt die Turbulenzmodellierung mit dem Standard $k-\varepsilon$ -Turbulenzmodell.

Beim Vergleich der beiden Verfahren mit den Experimenten lag eine Reynoldszahl von 7280 (mit dem bei den Experimenten verwendeten Silikonöl ließ sich aufgrund der relativ hohen Viskosität nur eine limitierte Reynoldszahl einstellen) vor. Bei den Berechnungen wurde die Symmetrie genutzt, d.h. ein 90° -Segment betrachtet. Für die Untersuchung der Gitterabhängigkeit kamen drei Gitterauflösungen mit bis zu 10^6 Kontrollvolumina zum Einsatz, wobei dem Bereich um den Rührer besondere Aufmerksamkeit galt (ca. 20% des Volumens aber etwa 50% der Gitterpunkte).

Durch die Lösung der Erhaltungsgleichungen im rotierenden Koordinatensystem konnten die Nachlaufwirbel des Rührers sowohl mit der transienten als auch mit

der stationären Berechnung aufgelöst werden. Ferner stimmen die Ergebnisse der beiden Berechnungsverfahren für die untersuchte Rührkesselströmung ausgezeichnet überein (kleine Unterschiede liegen lediglich bei der turbulenten kinetischen Energie vor), wobei allerdings die stationären Berechnungen in einem Bruchteil der Zeit und mit geringeren Anforderungen an die Ressourcen realisierbar waren.

Da mit zunehmender Gitterauflösung in Wandnähe die y^+ -Werte zu klein werden (der Gültigkeitsbereich der logarithmischen Wandfunktion wurde bei den Rechnungen mit einer Reynoldszahl von 7280 erheblich verletzt) und damit die Scherspannung zu groß gerechnet wird, wurden die Untersuchungen zur Gitterabhängigkeit mit einer Reynoldszahl von 2.910^4 durchgeführt. Da Schäfer et al. [283] für die rührernahe Strömung aber zeigen konnten, dass die mit der Rührerumfangsgeschwindigkeit normierten Strömungseigenschaften bereits für $Re > 5.5 \cdot 10^3$ unabhängig von der Reynoldszahl sind, ist ein Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen trotzdem möglich³⁹.

Insgesamt liegt eine sehr gute Übereinstimmung mit den Experimenten (insbesondere für die radiale und die tangential Geschwindigkeit) vor, welche bereits ohne Modifikation des k - ε -Turbulenzmodells erreicht wurde. Leichte Abweichungen gibt es bei der axialen Geschwindigkeitskomponente, welche im Rührerstrom zu groß berechnet wird. Diese erhöhte Pumpleistung führen die Autoren primär auf die bei der Berechnung verwendeten infinitesimal dünnen Rührerblätter zurück. Rutherford et al. [274] haben den Einfluss der Rührerblattdicke untersucht und einen Effekt bei der mittleren sowie der Schwankungsgeschwindigkeit in Rührernähe gefunden. Bei ihren Untersuchungen mit Scheibenrührern fanden sie eine signifikante Erhöhung des Förderbeiwerts bei einer Reduzierung der Rührerblattdicke. Bei der turbulenten kinetischen Energie zeigt sich eine relativ starke Gitterabhängigkeit, wobei sie prinzipiell eher zu klein berechnet wird. Werden die Berechnungen also mit unzureichender Gitterauflösung durchgeführt, so neigt man aufgrund der zu klein berechneten k -Werte zu einer Überbetonung der Unzulänglichkeiten des Turbulenzmodells.

Aufbauend auf die Arbeiten von Wechsler et al. [343] führten Bartels et al. [16] Vergleichsrechnungen mit *DNS* und *RANS* (*ASS*-Ansatz in Kombination mit dem k - ε -Turbulenzmodell) durch. Die Behältergeometrie und die Randbedingungen wurden analog zu denen von Wechsler et al. [343] gewählt, allerdings kam ein Sechsstab-Scheibenrührer zum Einsatz. Die Berechnungen erfolgten für ein 180° -Segment mit $2 \cdot 10^6$ Kontrollvolumina. Die Ergebnisse mit *DNS* zeigen beim Vergleich mit Experimenten die bessere Übereinstimmung, aber auch der wesentlich einfachere Ansatz (*RANS* und *ASS*) liefert bereits gute Vorhersagen. Es ist aber festzuhalten, dass die *DNS*-Berechnungen auf relativ kleine Reynoldszahlen limitiert sind (bei den hier durchgeführten Berechnungen wurde eine Reynoldszahl von 7275 realisiert), während der Einsatz des k - ε -Turbulenzmodells voll entwickelte Turbulenz (und damit höhere Reynoldszahlen) voraussetzt (s. auch Abschnitt 3.3). Ein Vergleich ist

³⁹Andere Autoren, wie z.B. Liepe et al. [179] sprechen erst bei einer Reynoldszahl von $4 \cdot 10^4$ und mehr von voll entwickelter Turbulenz. Dabei beziehen sie aber den gesamten Rührbehälter in die Betrachtung ein.

daher nur bedingt möglich.

Die Untersuchung von Zweiphasenströmungen in Rührkesseln ist ungleich schwieriger und experimentelle Vergleichsdaten sind in der Literatur nur selten zu finden.

Von Neeße et al. [215] wurden die Schwankungsgeschwindigkeiten an zwei Punkten in der Nähe des Rührers mit Hilfe einer Drucksonde gemessen. Das Ziel war dabei die Ableitung charakteristischer Längenmaße sowie des Energiespektrums. Es konnten sehr hohe Konzentrationen realisiert werden, wobei aber die Nachteile einer Sonde (Störung der Strömung, Messung von nur einer Strömungsrichtung usw.) in Kauf genommen wurden. Ferner war eine getrennte Betrachtung der Phasen nicht möglich.

Barresi & Baldi [14] untersuchten die Verteilung von suspendierten Glaskügelchen in gerührten Behältern ($D = 0.390$ m, $H/D = 1.19$, $n_{SS} = 4$, Schrägblatt- und Scheibenrührer, $d_R = h_R = D/3$, betrachtete Partikelgrößen im Bereich von $100 \dots 500 \mu\text{m}$ und Konzentrationen von $M = 0.5 \dots 5.1$) bei Variation des Rührers sowie der Teilchengröße und der Konzentration sowohl experimentell als auch mit einem relativ einfachen Modell. Die Konzentrationsmessung erfolgte mit Hilfe von Probenahmen (welche überwiegend in der Nähe der Behälterwand, 20 mm Wandabstand, erfolgten), wobei sich die radialen Profile generell ziemlich flach darstellten⁴⁰, so dass eine eindimensionale Betrachtung/Modellierung als angemessen erachtet wurde. Die Form der Röhrrchen zur Probennahme zeigte leider einen erheblichen Einfluss auf das Ergebnis. Ferner lag eine Abhängigkeit von der Strömungsrichtung vor. Die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse lag bei ca. 10% und bei einer Integration der Messwerte in axialer Richtung ergab sich eine Abweichung von der tatsächlich zugegebenen Partikelmenge von 10-20%. Insgesamt resultierten also erhebliche Ungenauigkeiten bei der Messung der Konzentrationsprofile. Die eindimensionale Modellierung deckte bereits grundlegende Zusammenhänge ab, konnte aber aufgrund der starken Vereinfachungen keine vollständige Beschreibung liefern.

Bohnet & Niesmak [25] bestimmten Konzentrationsprofile über die Höhe eines Rührbehälters ($D = 0.29$ m, $n_{SS} = 4$, ebener Boden, Zweiblatt-Propellerrührer, $d_R = 0.1$ m, $h_R = D/6$) mit Hilfe von Lichtabsorption, d.h. der Behälter wurde mit einem Laserstrahl in verschiedenen Höhen durchleuchtet und an der gegenüberliegenden Seite das transmittierte Licht mit einer Fotozelle gemessen (s. auch Abschnitt 7.2). Dadurch ist das Verfahren nur bei relativ geringen Feststoffkonzentrationen einsetzbar. Es wurde angenommen, dass innerhalb einer bestimmten Schichthöhe die Konzentration konstant ist und damit eine Messung pro Höhenschicht reicht. Eine Aussage zu lokalen Größen war somit nicht möglich. Neben der Verteilung über die Höhe wurde auch $n_{R,90\%}$ und die Newtonzahl bei verschiedenen Drehzahlen, Konzentrationen (bis $\varphi_P = 0.02$), Teilchenmaterialien und -größen (Styroporkügelchen mit $d = 1.15$ mm, Glaskügelchen mit $d = 0.2$ mm und $d = 0.7$ mm sowie Bronzekügelchen mit $d = 0.1$ mm) ermittelt. Es zeigte sich, dass

⁴⁰Insbesondere bei axialen Rührern ergaben sich sehr flache radiale Konzentrationsprofile. Mit zunehmender Teilchengröße nahmen die Gradienten aber zu. Bei radial fördernden Rührern lagen größere Konzentrationsgradienten im Bereich unterhalb des Rührers vor.

für schwere Teilchen wesentlich höhere Drehzahlen benötigt werden. Für alle untersuchten Feststoffe konnten Rührerdrehzahlen ermittelt werden, bei denen die Standardabweichung der Konzentration minimal wurde. Die Variation von φ_P zeigte eine abnehmende Verteilungsgüte mit zunehmendem Partikelvolumenanteil. Ferner lieferte die Variation von d_R und h_R beste Ergebnisse für $d_R = D/3$ und $h_R = D/6$.

Analog zu Bohnet & Niesmak untersuchten auch Ayazi Shamlou & Koutsakos [5] die axiale Konzentrationsverteilung einer Suspension aus Glaskügelchen und Wasser in einem Rührkessel ($D = 0.225$ m, $H/D \approx 3$, $n_{SS} = 4$, sphärischer Boden mit Umlenkkonus, $6 \times 45^\circ$ -Schrägblattrührer, $d_R = 0.065 \dots 0.1$ m) mit Hilfe von Lichtabsorption. Es wurden Messungen für verschiedenste Randbedingungen durchgeführt. Diese sind aber auch hier aufgrund der integralen Auswertung nur sehr bedingt aussagekräftig für lokale Größen. Ferner wurde bei den Messungen ein sehr unübliches Verhältnis von H/D verwendet.

Auch Godfrey & Zhu [104] setzten dieses berührungslose Verfahren zur Messung axialer Konzentrationsprofile in gerührten Suspension ein. Durch eine Brechungsindexanpassung⁴¹ des Partikel-Fluid-Gemisches waren sie aber in der Lage im betrachteten System ($D = H = 0.154$ m, $n_{SS} = 4$, Abschluss nach oben, $4 \times 45^\circ$ -Schrägblattrührer, $d_R = D/3$ und $n_R = 600 \dots 1600$ min⁻¹) Messungen im Bereich von $\varphi_P = 0.002 \dots 0.3$ durchzuführen. Prinzipbedingt nimmt die maximal messbare Konzentration aber mit zunehmender Behältergröße ab. Eine perfekte Anpassung war nicht zu realisieren, so dass an Stelle von Streuteilchen die unvermeidbare Restabsorption gemessen wurde. Die Kalibrierung erfolgte durch Referenzgemische, welche durch hohe Rührerdrehzahlen im Rührkessel hergestellt wurden. Dabei wurde angenommen, dass sich bei hinreichender Drehzahl eine homogene Verteilung einstellt. Für relativ kleine Beladungen wurde die Brechungsindexanpassung durch ein Absenken der Temperatur verschlechtert, um eine hinreichende Absorption zu erreichen. Für verschiedene Beladungen waren also unterschiedliche Kalibrierungen nötig, wodurch eine weitere Fehlerquelle entstand. Vorgestellt wurden Messungen bei Variation der Teilchengröße (je kleiner die Teilchen, desto gleichmäßiger ist die Verteilung über die Höhe), der Konzentration (mit Zunahme der Konzentration nimmt die vertikale Gleichverteilung zunächst ab, wird später aber wieder besser) und der Rührerdrehzahl (je höher die Drehzahl, desto besser die Verteilung), wobei sich bei allen Parametern ein signifikanter Einfluss zeigte. Wie bereits erwähnt lassen sich mit dem Verfahren nur integrale Messwerte ermitteln. Die Anordnung des Laserstrahls wurde nur für die Höhe spezifiziert, nicht aber bzgl. der Lage in der Horizontalen.

Nouri & Whitelaw [221] untersuchten eine gerührte Suspension ($D = H = 0.294$ m, $n_{SS} = 4$, Sechsstab-Scheibenrührer, $d_R = D/3$, $h_R = D/4$) mit Hinblick auf die Teilchengeschwindigkeit. Die Messungen erfolgten mit *LDA* bei verschiedenen

⁴¹Für die Brechungsindexanpassung war es nicht möglich kommerzielle Glaskügelchen zu verwenden (z.B. wegen Gaseinschlüssen). Daher wurde gebrochenes Flachglas verwendet, welches durch Siebung klassiert wurde (drei Klassen: $d = 212 \dots 250$ μm , $355 \dots 425$ μm und $600 \dots 710$ μm). Sphärische Teilchen waren somit also nicht verfügbar.

Rührerdrehzahlen ($n_R = 150 \dots 313 \text{ min}^{-1}$). Mit Brechungsindexanpassung konnten Volumenkonzentration bis $\varphi_P = 0.025$ (Limitierung durch Lufteinschlüsse in den Teilchen) realisiert werden, während ohne Anpassung nur eine Konzentration von $\varphi_P = 0.0002$ (d.h. Konzentration und Kollisionen spielen keine Rolle⁴²) verwendet wurde. In beiden Fällen wurden ähnliche Trends beobachtet. Je nach Bewegungsrichtung wurden positive oder negative Relativgeschwindigkeiten⁴³ gemessen (z.B. eilten bei abwärts gerichteter Strömung die Teilchen aufgrund der Schwerkraft der Strömung voraus, allgemein waren aber die Relativgeschwindigkeiten umso größer, je näher am Rührer gemessen wurde), wobei diese bei den betrachteten Glasteilchen deutlich größer waren als bei den Teilchen aus Polymethylmethacrylat. Die Fluktuationengeschwindigkeiten waren bei den Partikeln generell kleiner als beim Fluid, insbesondere im Rührerstrom, bei gerichteten Geschwindigkeiten an der Wand bzw. bei schweren Teilchen (d.h. bei hoher Relativgeschwindigkeit). Die mittlere Partikelgeschwindigkeit sank mit zunehmender Konzentration um bis zu 10%, während die Schwankungsgeschwindigkeiten etwa gleich blieben. Der Einfluss der Teilchengröße war gering. Die lokale Verteilung von φ_P wurde indirekt über Blaseneinschlüsse entlang einer vertikalen Linie bei $r = 20 \text{ mm}$ gemessen. Unterhalb der Rührerebene wurde eine starke Abnahme von φ_P mit steigender Höhe festgestellt (die maximale Konzentration lag bei ca. $5 \varphi_{P,M}$), während oberhalb der Rührerebene die Abnahme nur noch schwach ausfiel (die minimale Konzentration lag bei ca. $0.5 \varphi_{P,M}$).

Bei der Berechnung von Zweiphasenströmungen in Rührkesseln mit *CFD* kam bisher nahezu ausschließlich das Euler-Euler-Verfahren zum Einsatz. Dies war normalerweise mit verschiedenen Vereinfachungen (Vernachlässigung einer Teilchengrößenverteilung, einfache Modelle zur Berücksichtigung von turbulenter Dispersion usw.) verbunden.

Die wahrscheinlich erste veröffentlichte Arbeit zu diesem Thema stammt von Issa & Gosman [139]. Sie benutzten die *FVM* zur dreidimensionalen Berechnung von turbulenten Ein- und Zweiphasenströmungen (gas-flüssig) im vollbewehrten Rührkessel ($H = D$, $n_{SS} = 4$, Scheibenrührer, $h_R = H/3$, $n_R = 1000 \text{ min}^{-1}$ bzw. $n_R = 180 \text{ min}^{-1}$ im zweiphasigen Fall). Berechnet wurde ein 90° -Segment, wobei die Stromstörer infinitesimal dünn modelliert (die Rührerwelle und die Gaszuführung wurden ganz vernachlässigt) und der Rührerbereich als Zylinder mit poröser Oberfläche (*IBC*-Verfahren) betrachtet wurde. Sie nutzten das k - ε -Turbulenzmodell (in Kombination mit einer Wandfunktion und ohne Modifikationen für den zweiphasigen Fall), d.h. am Ausströmrand des fiktiven Rührerzylinders (welcher nicht mitgerechnet wurde) waren empirische Werte für U_t , U_r und k zu setzen. Die Impulsgleichung der dispersen Phase wurde stark vereinfacht und die turbulente Dispersion der Blasen ($d = 0.5 \text{ mm}$) vernachlässigt. Der Impulsaustausch zwischen den Phasen erfolgte ausschließlich über die Widerstandskraft, wobei der Widerstandsbeiwert von Einzelblasen angesetzt wurde. Da der Schwerpunkt der Untersuchungen bei der Be-

⁴²Nach Lumley [183] werden Partikel-Partikel-Wechselwirkungen ab einer Volumenkonzentration von $\varphi_P = 0.003$ signifikant.

⁴³Die Messung von Partikel- und Fluidgeschwindigkeit konnte nicht parallel realisiert werden, d.h. die Fluidgeschwindigkeit wurde mit einer korrespondierenden einphasigen Strömung ermittelt.

wertung des Schemas zur Zweiphasenberechnung lag, wurde die Gitterauflösung sehr gering gewählt (lediglich 280 Zellen im zweiphasigen und 2912 Zellen im einphasigen Fall). Unter Berücksichtigung der vielen Unsicherheiten bei den Berechnungen (z.B. Randbedingungen und grobes Gitter) war die Übereinstimmung mit Experimenten bereits sehr ermutigend. Auch wenn Vergleichsmöglichkeiten bzgl. der Gasphasenverteilung aufgrund fehlender detaillierte Messungen nicht gegeben waren, so zeigte sich doch bereits das große Potential.

Looney et al. [181] präsentierten ein vollständiges Zweiphasenturbulenzmodell und einen impliziten numerischen Algorithmus zur Beschreibung von fest-flüssig Systemen in Rührkesseln. Die Berechnungen wurden auf relativ grobem Gitter (2240 Zellen) durchgeführt und die Ergebnisse in Form von Vektordarstellungen, Profilen der axialen und radialen mittleren Geschwindigkeit beider Phasen sowie Verteilungen des lokalen Feststoffanteils dargestellt. Der Vergleich mit experimentellen Daten von Nouri lieferte qualitative Übereinstimmung. Der quantitative Vergleich fiel wegen der geringen Gitterauflösung weniger gut aus.

Die Weiterentwicklung sowie umfangreichere Untersuchungen auch bei feineren Gittern (90°-Segment mit $1.59 \cdot 10^4$ Zellen) sowie Vergleiche wurden später von Politis [245] veröffentlicht. Er setzte für seine stationären Berechnungen ($D = H = 0.294$ m, $n_{SS} = 4$, flacher Boden, ebene freie Oberfläche, Sechsstab-Scheibenrührer, $d_R = h_R = D/3$, Vernachlässigung der Rührerwelle, $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $Re = 4.8 \cdot 10^4$) das *IBC*-Verfahren aufbauend auf *LDA*-Messungen von Yianneskis ein, wobei im Gegensatz zu den Berechnungen von Bolour-Froushan [26] U_t , k und ε über Skalierungsfunktionen im gesamten fiktiven Rührerzylinder spezifiziert wurden. Ferner erweiterte Politis das *PISO*-Verfahren von Issa [136] (Bolour-Froushan [26] wendete dieses bereits bei einphasigen Rührkesselströmungen an) für zweiphasige Strömungen. Betrachtet wurden monodisperse Glaskügelchen mit $d = 0.23$ mm bei einer sehr kleinen Konzentration von $\varphi_{P,M} = 2 \cdot 10^{-4}$. Daher war es möglich für beide Phasen ein gemeinsames Druckfeld anzunehmen, d.h. Partikel-Partikel-Kollisionen blieben unberücksichtigt. Der Impulsaustausch zwischen den Phasen erfolgte nur über die Widerstandskraft, alle anderen Kräfte auf die Teilchen wurden vernachlässigt. Zur Berücksichtigung des sogenannten *Crossing Trajectory Effects* wurde ein *Particle-Eddy Interaction Model* eingebaut. Die Partikelfluktuationen wurden dabei als Funktion der Fluidfluktuationen formuliert, so dass kein turbulenter Diffusionskoeffizient zu spezifizieren war. Das verwendete *k-ε*-Turbulenzmodell wurde um einige zweiphasige Terme erweitert, die Konstanten blieben aber gegenüber dem einphasigen Fall unverändert.

Der Vergleich der einphasigen Berechnungen mit *LDA*-Messungen von Yianneskis zeigte eine gute Übereinstimmung der meisten Strömungsstrukturen. Die maximale radiale Geschwindigkeit im Rührerstrom wurde allerdings nicht erreicht (als Ursache hierfür wurden Schwächen des Turbulenzmodells sowie numerische Diffusion⁴⁴ angenommen). U_t wurde im oberen Behälterteil stets zu klein und im untern systematisch zu groß berechnet, wodurch mit einer Verfälschung der anderen Kompo-

⁴⁴Die Diskretisierung der konvektiven Terme in der Impulsgleichung erfolgte rein mit *UDS*.

menten zu rechnen war. Wie bereits vielfach berichtet, wurde auch hier k (außer im Rührerstrom) zu klein bestimmt. Insgesamt zeigten sich Schwächen insbesondere in Bereichen mit kleineren Geschwindigkeiten.

Die mittleren Partikelgeschwindigkeiten konnten im Vergleich zu *LDA*-Daten von Nouri [218]⁴⁵. Auch die Reduzierung der Schwankungen im Rührerstrom bei ansonsten vergleichbarer Größenordnung, wurde wie im Experiment erfasst, allerdings lag das Niveau, wie auch beim Fluid, insgesamt zu niedrig, was an der relativ geringen Auflösung gelegen haben könnte. Dies verdeutlicht, dass die erfolgreiche Berechnung der dispersen Phase immer durch die Güte der Berechnung der fluiden Phase limitiert ist. Fehler an der Wand wurden primär der vereinfachten Wandrandbedingung für die disperse Phase zugeordnet. Die Relativgeschwindigkeiten waren insgesamt sehr klein und die Vektoren lagen nahezu stets parallel zu \mathbf{g} . Ein Einfluss der Teilchen auf die Turbulenzgrößen wurde erwartungsgemäß nicht gefunden.

Ein Abgleich der berechneten φ_P -Profile erfolgte aufgrund fehlender experimenteller Daten nicht. Qualitativ wurde die Konzentration im oberen Behälterteil deutlich kleiner berechnet als im unteren. Die maximalen Konzentrationen befanden sich am Behälterboden. Lokale Überhöhungen lagen auch an den Stromstörern vor.

Die Arbeit von Gosman et al. [106] wird allgemein als wichtiger Schritt für die Berechnung von zweiphasigen Strömungen erachtet. Die Berechnungen stimmten trotz mancher Vereinfachung bei der Modellierung bereits erstaunlich gut mit Messungen (Nouri & Whitelaw [221]) überein. Gosman et al. setzten für die Berechnung einer turbulenten zweiphasigen Rührkesselströmung (Scheibenrührer) die Umfangsgeschwindigkeit und die Turbulenzgrößen im Rührergebiet fest (*IBC*-Verfahren), während die restlichen Variablen im gesamten Gebiet gelöst wurden. Die Euler-Euler-Berechnung erfolgte mit Hilfe des k - ε -Turbulenzmodells bei geringer Beladung ($\varphi_P = 2 \cdot 10^{-4}$). Damit ergab sich eine vernachlässigbare Rückkopplung und kein Blasenzerfall und/oder -koaleszenz.

Bakker [6] berechnete begaste Rührkesselströmungen ($D = H = 0.444$ m, $n_{SS} = 4$, flacher Boden, freie Oberfläche) mit Radial- und Axialrührern (Sechsblatt-Scheibenrührer, $4 \times 45^\circ$ -Schrägblattrührer und ein optimierter Axialrührer (Lightnin A315) mit $d_R = 0.4D$ und $h_R = 0.3H$ bzw. $0.4H$). Zur Simulation lokaler und globa-

⁴⁵Gemessen wurden V_3, v'_3, V_r, v'_r in einer vertikalen Ebene mittig zwischen zwei Stromstörern, d.h. die entsprechenden Fluidgeschwindigkeiten mussten über einen eigenen Versuch ermittelt werden. Dabei wurde angenommen, dass die Partikel die Fluidströmung nicht beeinflussen. Neben n_R, d_R und h_R variierte Nouri [218] auch die Partikelgröße ($0.2 \text{ mm} < d < 0.8 \text{ mm}$) und das Teilchenmaterial (Polymethylmethacrylat und Glas). Die mittlere Partikelkonzentration war in allen Fällen sehr klein, da das Messverfahren auch bei Brechungsindexanpassung nur geringe Konzentrationen erlaubte, und die Konzentrationsprofile wurden lediglich visuell erfasst. Nouri fand eine reduzierte Partikelturbulenz (im Vergleich zum Fluid) im Rührerstrom (bis zu 28%) sowie an der Behälterwand (bis zu 15%). In den übrigen Gebieten waren die Schwankungen von Fluid und Teilchen etwa gleich groß. Die Relativgeschwindigkeiten waren aufgrund der Teilchengrößen und -dichten relativ klein (maximal 0.2 m s^{-1} , in der Regel aber deutlich kleiner). Die vertikale Relativgeschwindigkeit war immer positiv, d.h. die Teilchen eilten bei abwärts gerichteter Strömung dem Fluid voraus, während sie bei einer Aufwärtsströmung nachliefen.

ler Werte für Gasgehalt (Blasenverteilung), Blasengröße, Phasenaustauschfläche und Stoffübergang nutzte er das Programm *GHOST!* (*Gas-Holdup Simulation Tool!*), welches er im Rahmen seiner Arbeit entwickelte. Dieses basiert auf Massen- und Impulserhaltungen, einem Kräftegleichgewicht an den Blasen und den vorab berechneten Geschwindigkeits- und Turbulenzdaten der einphasigen Strömung.

Daher wurden zunächst stationäre einphasige Berechnungen (Wasser, $h_R = 0.3D$, $n_R = 180 \text{ min}^{-1}$ (Radialrührer) bzw. $n_R = 360 \text{ min}^{-1}$ (Axialrührer)) sowohl zwei- als auch dreidimensional durchgeführt (verschiedene Gitter mit maximal $2.5 \cdot 10^4$ Zellen für ein 90° -Segment). Die Rührermodellierung erfolgte mit dem *IBC*-Verfahren, wobei die Randbedingungen auf *LDA*-Messungen aufbauten⁴⁶. Die Validierung der Berechnungen erfolgte mit an verschiedenen Stellen im Rührkessel gemessenen Profilen von V_3 , wobei eine gute Übereinstimmung erreicht werden konnte. Insgesamt wurde die große Bedeutung einer dreidimensionalen Betrachtung, der Turbulenzmodellierung mit einem anisotropen Ansatz⁴⁷ sowie einer genauen geometrischen Abbildung der Stromstörer herausgearbeitet. Eine Gitterunabhängigkeit wurde nicht getestet und der Bedarf von gemessenen Geschwindigkeitsprofilen wurde bereits als erheblicher Nachteil des *IBC*-Verfahrens betont.

Bei der Berechnung der dispersen Phase mit *GHOST!* war neben der Berücksichtigung von elliptischen Blasen⁴⁸ auch bereits die Modellierung von Blasenzerfall und -koaleszenz (basierend auf k und ε) integriert. Allerdings wurde angenommen, dass die Blasen nicht auf das Fluidgeschwindigkeitsfeld rückwirken, d.h. ein hinreichend kleiner Gasgehalt vorliegt. Die Fluiddaten wurden proportional zur Änderung der Newtonzahl für den begasten Fall skaliert. *GHOST!* basiert auf Ansätzen der kinetischen Gastheorie und \mathbf{w} wurde aus einer Kräftebilanz an den Blasen bestimmt. Schwarmeffekte erfasste Bakker bei c_D über eine effektive Viskosität. Die Ermittlung der vier besten Modellparametern erfolgte durch Parametervariation und entsprechenden Abgleich mit Messungen. Das Modell wurde mit lokalen experimentellen Daten von Gasgehalt und Blasengröße⁴⁹ sowie verschiedenen globalen Größen (z.B. Stoffübergang) validiert. Insgesamt zeigte sich eine ziemlich gute Übereinstimmung, die Abweichungen waren aber zum Teil noch im Bereich von $\pm 20\%$.

Verbesserungen im Bereich begaste Rührkessel (Scheibenrührer) konnten später durch Ranade & Van den Akker [258] mit Hilfe des *CS*-Verfahrens erreicht werden. Dabei wurden die stationären dreidimensionalen Erhaltungsgleichungen (k - ε -

⁴⁶Beim Scheibenrührer wurden Profile von V_3 , V_r , V_t , k und ε an der vertikalen Abströmfläche des Rührers entsprechend den Daten von Ranade & Joshi [254] spezifiziert. Die Randbedingungen bei den Axialrührern (an der horizontalen Abströmfläche der Rührer) basierten auf eigenen *LDA*-Messungen (V_3 , V_t , k). Werte für ε wurden über das Taylorsche Makromaß der Turbulenz abgeschätzt.

⁴⁷Im Vergleich zum k - ε -Turbulenzmodell zeigten Rechnungen mit einem algebraischen Spannungsmodell eine um etwa 15% höhere Gesamtdissipation.

⁴⁸Die Berechnungen zeigten aber nur ein geringer Einfluss der Abweichung von der Kugelform.

⁴⁹Die Messungen von Gasgehalt und Blasengröße erfolgten mit optischen Sonden. Blasen kleiner als 1.4 mm konnten allerdings wegen der vorliegenden Sondengeometrie nicht gemessen werden. Ebenso musste die Sonde in den Hauptblasenstrom positioniert werden, so dass schließlich nur in der Nähe der freien Oberfläche die Blasengröße gemessen werden konnte.

Turbulenzmodell) für einen bestimmten Zeitpunkt gelöst. Ranade & Van den Akker erzielten damit gute Ergebnisse bei den mittleren Geschwindigkeiten, aber deutliche Abweichungen bei den Schwankungen. Die Änderung der Newtonzahl durch die Gasphase wurde korrekt berechnet und die Gasanreicherungen in den Niederdruckbereichen hinter den Rührerblättern konnten erfasst werden. Ähnliche Simulationen folgten von Ranade & Deshpande [251] sowie Ranade et al. [257] mit erhöhter Auflösung. Vergleiche mit entsprechenden *PIV*-Messungen zeigten gute Übereinstimmungen, wobei k allerdings nach wie vor zu klein berechnet wurde.

Morud & Hjertager [209] berechneten ebenfalls einen begasten Rührkessel ($D = H = 0.222$ m, $n_{SS} = 4$, Sechsstab-Scheibenrührer, $d_R = D/3$, $h_R = 0.47D$, $n_R = 360 \dots 720$ min⁻¹) und verglichen die Ergebnisse mit eigenen *LDA*-Messungen (mittlere Blasengeschwindigkeiten und Fluktuationen), wobei eine gute Übereinstimmung der radialen Gasgeschwindigkeiten vorlag aber die axialen Komponenten wurden meist zu groß berechnet wurden. Untersucht wurde auch der Effekt des Gasvolumenstroms und der Rührerdrehzahl auf die Blasenströmung. Aufgrund der zweidimensionalen Modellierung (k - ε -Turbulenzmodell, 1128 Zellen) mussten sowohl der Rührer als auch die Stromstörer modelliert werden. Hierzu wurden entsprechend dem Ansatz von Pericleous & Patel [238] Quellterme bzw. Senken bei der tangentialen Impulsgleichung verwendet. Der Impulsaustausch zwischen den Phasen erfolgte nur über die Widerstandskraft und die k - und ε -Gleichung wurde nur für die flüssige Phase gelöst. Die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experimenten war trotz der vielen Vereinfachungen bei der Modellierung insgesamt qualitativ gut, an einigen Stellen allerdings ungenügend.

Friberg [99] führte die Arbeit von Morud & Hjertager [209] fort (Übergang von 2d nach 3d, Verbesserung der Rührer- und Turbulenzmodellierung) und berechnete verschiedene Vorstufen (Blasensäule, ein- und zweiphasige Rührkesselströmung⁵⁰ im Labormaßstab) um schließlich einen begasten gerührten Bioreaktor industrieller Größe ($D = 2.09$ m, $H = 3D$, $n_{SS} = 4$, flacher Boden, 4 Sechsstab-Scheibenrührer, $d_R = D/3$, Rührerabstand $0.7D$, $n_R = 115$ min⁻¹, 180°-Segment mit $6.5 \cdot 10^4$ Zellen, *SM*-Verfahren) zu simulieren. Für die Verteilung der dispersen Phase war nur ein qualitativer Vergleich möglich (Gasansammlungen hinter den Rührerblättern konnten z.B. aufgelöst werden). Das biochemische Verhalten des Fermenters konnte sehr gut vorhergesagt werden, obwohl bei den Geschwindigkeiten im Rührkessel zum Teil deutliche Abweichungen von entsprechenden Messwerten vorlagen. Ferner verglich Friberg im einphasigen Fall verschiedene Ansätze für die Rührer- und Turbulenzmodellierung. Dabei erwies sich das *IBC*-Verfahren (auf 3d erweitertes Modell von Morud & Hjertager [209]) als nicht schlecht, aber weniger geeignet als das *SM*- und

⁵⁰Die Geometrie bei den einphasigen Berechnungen entsprach der von Ranade & Joshi [254]: $D = H = 0.3$ m, $n_{SS} = 4$, ebener Boden, Sechsstab-Scheibenrührer, $d_R = D/3$, $h_R = H/2$, $n_R = 300$ min⁻¹, 180°-Segment mit $1.77 \cdot 10^4$ Zellen. Bei den zweiphasigen Rechnungen wurde die gleiche Geometrie wie von Morud & Hjertager [209] berechnet: $D = H = 0.222$ m, $n_{SS} = 4$, flacher Boden, Sechsstab-Scheibenrührer, $d_R = D/3$, $h_R = 0.47D$, $n_R = 360$ min⁻¹, 180°-Segment mit $2.48 \cdot 10^4$ Zellen, *SM*-Verfahren.

das *CS*-Verfahren⁵¹, welche ähnlich gute Ergebnisse lieferten. Bei der Turbulenzmodellierung zeigte sich das Chen-Kim k - ε -Turbulenzmodell dem Standard k - ε Modell überlegen, da Rezirkulationen besser abgebildet wurden. Insgesamt erzielte er eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen für U_3 und U_t (etwas schlechter für U_r). Auch k stimmte erstaunlich gut mit den Messungen überein. Im zweiphasigen Testfall konnte eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messungen (Blasengeschwindigkeiten) von Morud & Hjertager [209] erzielt werden. Diese war deutlich besser als bei deren eigenen Berechnungen.

Auch Deen et al. [66] (s. auch Deen [65]) untersuchten einen begasten Rührkessel ($D = H = 0.222$ m, $n_{SS} = 4$, Sechsbblatt-Scheibenrührer, $d_R = D/3$, $h_R = D/2$) und verwendeten dazu das *SM*-Verfahren (durch die Zeitschrittwahl resultierte ein *CM*-Verfahren) in Kombination mit dem k - ε -Turbulenzmodell. Berechnet wurde ein 180°-Segment mit bis zu $3.7 \cdot 10^5$ Zellen, wobei bemerkenswert ist, dass die Dicke von Rührerscheibe und -blättern geometrisch aufgelöst wurde. Zur Berücksichtigung der Blaseninduzierten Turbulenz wurde das Modell von Sato & Sekoguchi verwendet. Neben der Schwerkraft wurde nur noch die Widerstandskraft berücksichtigt. Bei den verschiedenen Berechnungen erfolgte eine Variation des Modells für den Widerstandsbeiwert, der Blasengröße sowie der Gitterauflösung.

Insgesamt erzielten Deen et al. eine gute Übereinstimmung (sowohl bei den durchgeführten einphasigen als auch bei den zweiphasigen Berechnungen) mit entsprechenden experimentellen Ergebnissen⁵², wobei die größten Abweichungen bei der axialen Gasgeschwindigkeit vorlagen und sich insbesondere für die Fluktuationsgeschwindigkeiten eine starke Gitterabhängigkeit zeigte. Gasansammlungen hinter den Rührerblättern wurden ebenso wie die durch die Gasphase bedingte Ablenkung des Rührerstroms nach oben korrekt vorhergesagt. Die im einphasigen Fall vorliegenden Nachlaufwirbel wurden im begasten Fall praktisch nicht mehr gefunden. Auch die Periodizität war weniger stark ausgeprägt. Beides deckt sich mit experimentellen Erkenntnissen.

Bakker et al. [8] untersuchten den Zusammenhang zwischen Strömungsstruktur und Partikelverteilung für verschiedene axial fördernde Rührer (auch Mehrrührersysteme). Neben der fotografischen Auswertung der Experimente erfolgten auch entsprechende numerische Berechnungen mit *CFD* (wobei sowohl Konzentrationsberechnungen mit dem Euler-Euler-Verfahren als auch Berechnungen einzelner Partikelbahnen durchgeführt wurden). Bakker et al. simulierten einen Rührkessel mit $D = 0.29$ m und $H = 0.51$ m unter Nutzung des *IBC*-Verfahrens (mit *LDA*-Messungen als Basis). Die Berechnung der räumlichen Verteilung der dispersen Phase ($\rho_P = \text{rhof}$) erfolgte mit *GHOST!* (s. Bakker [6]), einem eigenständigen Programm auf Basis von Massen- und Impulserhaltung. Zu bemerken ist, dass die Relativgeschwindigkeit zwischen Partikeln und Fluid als konstant angenommen wur-

⁵¹Beim *CS*-Verfahren wurde ein Mittelwert über sieben verschiedene Winkelstellungen des Rührers berechnet.

⁵²Die Messung winkelaufgelöster Werte für \mathbf{U} und \mathbf{u}' erfolgte mit einem auf zwei Kameras basierenden *PIV*-System.

de. Ebenso blieben Partikel-Partikel-Wechselwirkungen sowie die Rückkopplung der Partikelphase auf das Fluid unberücksichtigt.

Bei einer Veränderung der Strömung (d.h. Änderung von d_R/D oder h_R/D) resultierte ein starker Einfluss auf die Feststoffverteilung. Bei zu kleinem Verhältnis von h_R/D bildeten sich Sekundärströmungen und die Teilchen wurden nicht ausreichend vom Boden aufgewirbelt. Die Variation von d_R/D ergab ein Optimum bzgl. Leistungsaufnahme für $d_R/D \approx 0.35$.

Ein zweiter Rührer auf gleicher Welle förderte das Aufwirbeln praktisch nicht, konnte aber die Homogenität der Teilchenverteilung über die Höhe verbessern. War der Rührerabstand zu groß, so bildeten sich über die Höhe mehrere Ringwirbel. Die Grenzzone wirkte für die Teilchen wie eine Barriere. Dies konnte sowohl mit Laserschnitten als auch mit den Simulationen gezeigt werden, woraus die Brauchbarkeit der Berechnung für schnelle Untersuchungen abgeleitet wurde.

Weitere Euler-Euler-Berechnungen von gerührten Suspensionen erfolgten durch Micalé et al. [200] und Montante & Magelli [205], wobei nur die Widerstandskraft und die Gewichtskraft berücksichtigt wurden. Die Modifikation der Turbulenz durch die dispersen Teilchen blieb unberücksichtigt. Das primäre Ziel der Berechnungen war die Ermittlung der vertikalen Konzentrationsverteilung für Ein- und Mehrührersysteme. Montante & Magelli [205] setzten bei ihren Berechnungen⁵³ neben verschiedenen Rührermodellen auch unterschiedliche Modelle für die Zweiphasenströmung ein⁵⁴. Zur Vermeidung von unrealistisch hohen lokalen Konzentrationen verwendeten sie einen sogenannten *Solid-Pressure Term*. Die Berechnungen wurden dann mit einphasigen *LDA*-Messungen verglichen, da bei der moderaten Beladung kein signifikanter Einfluss der Teilchen auf die Fluidströmung erwartet wurde. Ebenso wie bei den berechneten Newtonzahlen war die Übereinstimmung bei den Geschwindigkeiten zufriedenstellend. Wie erwartet (vgl. Nouri & Whitelaw [221]) waren die berechneten Schlupfgeschwindigkeiten sehr klein und die Unterschiede bei den eingesetzten verschiedenen Berechnungsprogrammen vernachlässigbar. Der einfachste Zweiphasenansatz (Homogenes Modell) liefert ebenso gute Ergebnisse wie das deutlich aufwendigere Heterogene Modell, während das disperse Modell eine deutlich schlechtere Übereinstimmung mit den Messungen der Feststoffverteilung⁵⁵

⁵³Montante & Magelli [205] simulierten einen vollbewehrten Behälter ($D = H = 0.49$ m, $n_{SS} = 4$) mit flachem Boden und Abdeckung nach oben, welcher mit einem $4 \times 45^\circ$ -Schrägblattrührer ($d_R/D = 0.40$, $h_R = D/3$, $n_R = 390 \text{ min}^{-1}$) bestückt war. Die disperse Phase bestand aus Glaskügelchen mit $d = 330 \mu\text{m}$ und hatte eine Konzentration von bis zu $\varphi_P = 0.04$. Unter Ausnutzung der Symmetrie berechneten sie ein Viertel des Behälters mit $1.42 \cdot 10^5$ Zellen. Die disperse Phase bestand aus Glaskügelchen mit $d = 330 \mu\text{m}$

⁵⁴Die Rührermodellierung erfolgte mit dem stationären *ASS*-Verfahren und dem instationären *SM*-Verfahren. Für die Modellierung der Zweiphasenströmung wurde ein homogenes Modell (k und ε für beide Phasen gleich), ein disperses Modell (k und ε werden nur für das Fluid gelöst, für Feststoffphase erfolgt eine vereinfachte Berechnung) sowie ein heterogenes Modell (k und ε werden jeweils für beide Phasen gelöst) eingesetzt.

⁵⁵Die Messung der lokalen Konzentrationen erfolgte mit einer optischen Sonde (Durchmesser 8 mm, optische Länge 24 mm), welche über seitliche Zuführungen im Rührkessel positioniert wurde (15 Höhen, 4 Radien). Die Konzentrationen wurden auf der Schnittebene mittig zwischen zwei

zeigte. Die transiente Berechnung brachte nur eine geringfügige Verbesserung. Die Autoren betonten die große Bedeutung der korrekten Berechnung des Fluids (d.h. einer bedachten Wahl der Grenze zwischen stationären und instationären Gitterbereichen) sowie der sinnvollen Wahl der Parameter für die Euler-Euler Modellierung.

Kohnen [156] berechnete eine gerührte Suspension ($D = H = 0.22$ m, $n_{SS} = 4$, Klöpferboden, dreiflügliger Propellerrührer, $d_R = 0.43D$, $h_R = H/3$, $n_R = 650$ min⁻¹, $\varphi_P = 0 \dots 0.15$) mit dem Euler-Euler-Verfahren⁵⁶ und verifizierte die Ergebnisse mit eigenen *LDA*-Messungen der Fluidgeschwindigkeiten. Der Impulsaustausch erfolgte rein über die Partikelwiderstandskraft, welche für höhere Konzentrationen modifiziert wurde. Die Partikeldispersion durch die Turbulenz sowie Partikel-Partikel-Kollisionen blieben unberücksichtigt. Primär wurde ein 120°-Segment (d.h. $n_{SS} = 3!$) in Kombination mit dem Standard k - ε -Turbulenzmodell (ohne Modifikation für den zweiphasigen Fall) berechnet. Die Rührermodellierung erfolgte mit dem *SM*- und dem *ASS*-Verfahren (stationäre Betrachtung, d.h. die Aufwirbelung wurde nicht untersucht), wobei die Dicke von Rührerblättern und Stromstörern nicht aufgelöst wurde.

Die Übereinstimmung des Leistungseintrags (bestimmt über die am Rührer angreifenden Kräfte) mit der Leistung aus der Energiedissipation (summiert über den gesamten Behälter)⁵⁷ wurde als Maß für die Güte der Berechnungen herangezogen. Die Differenz der beiden Leistungswerte war bei ungenügender Auflösung der Wirbel hoch. Sie sank mit zunehmender Gitterauflösung und Verbesserung der Diskretisierung. Im besten Fall lag eine Differenz von ca. 25% vor. Kohnen stellte für das 120°-Segment bereits ab $9.4 \cdot 10^4$ Zellen eine Gitterunabhängigkeit fest, so dass für den Vergleich mit einem Vollmodell $3 \cdot 10^5$ Zellen verwendet wurden. Dabei zeigten sich nur geringe Unterschiede bzgl. des Leistungseintrags (wie auch bei den betrachteten Geschwindigkeitsprofilen⁵⁸). In etwa ebenso gering war die Differenz zwischen den betrachteten Rührermodellen (*SM*- und *ASS*-Modell), so dass die Verwendung der jeweils einfacheren Modellierung als gerechtfertigt erachtet wurde. Eine Modellierung der Turbulenz mit einem *RS*-Modell resultierte in einem erhöhten Fehler bei der Leistungsberechnung sowie einer höheren Instabilität und Rechenzeit. Das *RS*-Modell wurde daher als ungeeignet für Rührwerksströmungen eingestuft.

Die berechnete Feststoffverteilung wurden mit Literaturdaten für Propellerrührer (Zlokarnik [360] bzw. Einkenel [83]) verglichen. Dabei konnte im axialen Profil bei

Stromstörern ermittelt. Das vertikale Profil resultierte schließlich aus den über den Radius gemittelten Werten. Im Gegensatz zum Fall mit mehreren Rührern (Montante et al. [207]) wurde im vorliegenden Fall kein besonders prägnantes Konzentrationsprofil erhalten, d.h. die Abweichung von der Gleichverteilung war gering.

⁵⁶Das Euler-Lagrange-Verfahren wurde wegen der betrachteten Volumenanteile von über 10% direkt ausgeschlossen.

⁵⁷Entsprechende Vergleiche der Leistungswerte wurden auch in der vorliegenden Arbeit durchgeführt (s. Abschnitt 7.13).

⁵⁸Bei der Betrachtung von k zeigte sich, dass die Gitterauflösung von geringerer Bedeutung ist als das Diskretisierungsschema. Die Berechnungen mit dem Vollmodell lieferten ein etwas niedrigeres k -Niveau.

$2r/D = 0.54$ eine gute qualitative Übereinstimmung erreicht werden. Unterhalb des Rührers (Rückstromgebiet) waren die berechneten Konzentrationen sehr hoch und mit zunehmender Konzentration vergleichmäßigte sich das vertikale Profil. Die Simulation zeigte neben einer Abhängigkeit der Konzentration von der axialen Position auch eine starke Variation in radialer Richtung. Die Annahme einer gradientenlosen Verteilung in radialer Richtung, wie sie bei vielen Modellierungen getroffen wird (meist motiviert durch die begrenzte Auflösung der verwendeten Messverfahren), steht daher im Widerspruch zu den Berechnungsergebnissen.

Zur Validierung führte Kohnen auch *LDA*-Messungen der kontinuierlichen Phase bei ein- und zweiphasigen Strömungen durch. Die disperse Phase wurde nicht direkt erfasst. Sowohl die Teilchen (Duran-Bruch mit durch Erhitzung geglätteten Kanten, $d = 0.3 \dots 1$ mm) als auch der Rührer und die Stromstörer waren durch die Verwendung eines Ölgemisches (bei $n_R = 650 \text{ min}^{-1}$ wurde so eine Reynoldszahl von $Re = 9 \cdot 10^3$ erreicht) brechungsindexangepasst. Als Tracerteilchen kamen metallbeschichtete Glaskügelchen mit $d = 10 \mu\text{m}$ zu Einsatz⁵⁹. Die *LDA*-Messungen erfolgten drehwinkelaufgelöst und der Leistungseintrag wurde über das Drehmoment bestimmt. Aufgrund von Streuung des Laserlichts durch Ungenauigkeiten bei der Indexanpassung (lange Messzeiten) wurde die Anzahl an Messpunkten bei der Messungen in der Suspension auf sechzehn pro Winkel reduziert. Bei $\varphi_P > 0.07$ waren dann nur noch in den Außenbereichen des Behälters Messungen möglich.

Periodische Schwankungen wurden im Bereich von ca. $2r/D = 0.1 \dots 0.65$ und $x_3/H = 0.1 \dots 0.5$ gefunden, welcher deutlich größer war als z.B. von Geisler [102] angenommen wurde. Mit zunehmender Feststoffkonzentration nahm die axiale Geschwindigkeit unterhalb des Rührers aufgrund der Schwerkraft zu, die Erhöhung der tangentialen Geschwindigkeit im Bereich um das Rührorgan resultierte aus einer erhöhten Suspensionsviskosität. Die Schwankungsgeschwindigkeiten wurden mit steigender Konzentration primär gedämpft, lediglich in der Nähe des Behälterbodens kam es zu einer Anfachung, da sich dort bei der Umlenkung der Strömung die Trägheit der Teilchen bemerkbar machte. Das Niveau der Schwankungsgeschwindigkeiten war stark ortsabhängig, die einzelnen Komponenten waren aber von etwa gleicher Größenordnung, so dass lokale Isotropie angenommen werden konnte.

Der mit der Konzentration steigende gemessene Leistungseintrag stimmte mit den entsprechenden Simulationen gut überein. Auch die berechneten Geschwindigkeiten im einphasigen Fall passten gut zu den gemessenen Werten, wobei allerdings noch deutliche Abweichungen in der Umgebung des Rührers und der Stromstörer vorlagen. Die turbulente kinetische Energie wurde tendenziell zu klein berechnet (insbesondere im Rührerabstromgebiet). Im zweiphasigen Fall wurden die charakteristische Strömungsform sowie die Einflüsse der Konzentration auf die Strömung gut wiedergegeben. Größere Abweichungen lagen bei der Tangentialgeschwindigkeit vor. Bei der Volumenstromkennzahl konnten allerdings sehr gute Übereinstimmungen

⁵⁹Ein Problem, welches in der Arbeit nicht angesprochen wurde, kann entstehen, wenn die Tracerteilchen im Nachlauf der großen Teilchen eingefangen werden, so dass die gemessenen Werte unter Umständen nicht die Fluidgeschwindigkeit widerspiegeln.

erreicht werden. Die experimentelle Datenbasis für k war aufgrund unvollständiger Datensätze sehr klein. Insgesamt lag der berechnete Wert für k wie auch im einphasigen Fall besonders unterhalb des Rührers zu niedrig. Die Tendenzen durch eine Konzentrationszunahme konnten aber richtig erfasst werden. Bei ε fiel die Unterschätzung noch erheblich stärker aus und die Tendenzen durch die Teilchenzugabe wurden nur streckenweise richtig abgebildet. Ein erhebliches Verbesserungspotential wurde daher bei der Turbulenzmodellierung gesehen.

Von ersten Anwendungen des Euler-Lagrange-Verfahrens auf gerührte Suspensionen wurde von Decker & Sommerfeld [62][63][64] berichtet. Dabei wurde bereits auf die große Bedeutung von Partikel-Partikel-Kollisionen und die Phasenkopplung hingewiesen. In der vorliegenden Arbeit wurde die Modellierung aufbauend auf die genannten Arbeiten erweitert.

Auch Barrue et al. [15] analysierten die Strömung in einem Rührkessel (Sechsblatt-Scheibenrührer, $D = H = 0.294$ m, $d_R = D/3$, $h_R = D/2$, $n_{SS} = 4$, $Re = 2.5 \cdot 10^4$) mit Hilfe von Partikeltrajektorien (sowohl experimentell als auch simulativ). Allerdings war das Ziel dieser Arbeit nicht die Berechnung einer Zweiphasenströmung, als vielmehr die Analyse der Fluidbewegung⁶⁰. Barrue et al. konnten aber die Verlässlichkeit der berechneten Teilchenbahnen mit Hilfe von Poincaré-Schnitten⁶¹ aufzeigen.

Die Berechnung erfolgte mit dem *IBC*-Verfahren (in Kombination mit dem k - ε -Turbulenzmodell und einer Wandfunktion, was wie schon vielfach berichtet zu einer Unterschätzung des k -Niveaus führte) in einem 90° -Segment ($1.25 \cdot 10^4$ Zellen). Die Teilchen waren relativ groß ($d = 4 \dots 7$ mm) und hatten die Dichte des Fluids, da die Bewegung des Fluids abgebildet werden sollte. Bei der Partikelbewegung wurde nur die Widerstandskraft berücksichtigt. Zur Erfassung der Dispersion wurde ein *Random Walk* Modell eingesetzt. Die Berechnung einer Trajektorie von 20 min Länge ergab im Vergleich zum Experiment (dabei wurde der Weg eines Teilchens ebenso lange im Rührkessel verfolgt) eine etwas weniger ausgeprägte Verteilung.

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Teilchen im Raum hängt generell sowohl von der Häufigkeit an Trajektorien als auch von den jeweiligen Teilchengeschwindigkeiten ab. Die ermittelte Aufenthaltswahrscheinlichkeit war am Boden und an der freien Oberfläche klein, da diese Gebiete nur von wenigen Trajektorien erfasst werden, und in Rührerhöhe klein, da in diesem Bereich sehr hohe Geschwindigkeiten vorliegen. Insgesamt lag eine gute Übereinstimmung zwischen Experimenten und Berechnungen vor.

Eine Gleichverteilung der Wahrscheinlichkeit wurde nicht erreicht, da die Teilchen aufgrund ihrer Größe der Strömung nicht perfekt folgen konnten. Für ein perfek-

⁶⁰Besonders bei laminaren Mischvorgängen bietet die Lagrangesche Betrachtungsweise erhebliche Vorteile, da das Phänomen der numerischen Diffusion hier nicht auftritt.

⁶¹Poincaré-Schnitt: Darstellung der Durchdringungspunkte der Trajektorien in einer Schnittebene mit Symbolisierung des Vorzeichens. Die Anzahl der unterschiedlichen Punkte sowie deren räumliche Verteilung liefert Informationen zur Mischleistung des Rührers und ermöglicht die Lokalisierung von Zonen unterschiedlicher Zirkulation. Auch Totzonen und Wirbelzentren können so erkannt werden.

tes Folgeverhalten müsste die Teilchengröße im Bereich der kleinsten Längenskalen (für den betrachteten Fall errechnete sich mit einer mittleren Dissipationsrate η_K zu $68 \mu\text{m}$) liegen. Berechnungen mit kleineren Teilchen lieferten zwar andere Verteilungen, aber auch keine Gleichverteilung. Gerade bei den kleinen Teilchen sind aber Zweifel angebracht, da die Partikelbewegungsgleichung sehr stark vereinfacht wurde.

7.4 Geometrie und Berechnungsgitter

Bei den vorliegenden Untersuchungen wird ein Rührbehälter mit gewölbter Bodenform nach DIN 28011 (Klöpferboden) betrachtet. Für einen direkten Vergleich mit entsprechenden experimentellen Ergebnissen werden die Berechnungen mit den Versuchsdimensionen durchgeführt, d.h. der Rührbehälter hat einen Durchmesser von 400 mm. Als Rührorgan kommt ein $6 \times 45^\circ$ -Schrägblattrührer zum Einsatz, wobei im Standardfall eine Rührerdrehzahl von $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$ vorliegt. Das zu rührende Fluid ist Wasser bei Raumtemperatur (d.h. $\rho = 1000 \text{ kg m}^{-3}$ und $\nu = 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$) und die disperse Phase besteht aus Glaskügelchen ($\rho_P = 2500 \text{ kg m}^{-3}$), wobei die Teilchengröße im Bereich von $d = 100 \mu\text{m}$ bis $500 \mu\text{m}$ variiert. Die geometrischen Abmessungen des Suspendiersystems wurden primär nach den Empfehlungen von Liepe et al. [179] gewählt⁶² und orientieren sich am GVC-Standard. In Tab. 7.1 sind die entsprechenden Daten zusammengefasst und in Abb. 7.1 visualisiert.

Aufgrund der vorliegenden Symmetrie kann die voll entwickelte Strömung im Rührkessel mit der Hälfte des Strömungsgebietes hinreichend beschrieben werden. Die Berechnung erfolgt daher für alle betrachteten Fälle in einem 180° -Segment, wobei an den Grenzen in Umfangsrichtung periodische Randbedingungen vorliegen.

Untersucht werden drei Gitterauflösungen (G1, G2 und G3), wobei das Berechnungsgitter jeweils primär in den ersten beiden Oktanten des Koordinatensystems liegt. Kleine Bereiche des Gitters liegen aufgrund der Schrägstellung der Rührerblätter und die daraus resultierende Gitterverzerrung auch in den Oktanten drei und vier. Der Rührer dreht in allen betrachteten Fällen in positive Richtung um die x_3 -Achse.

In Tab. 7.2 sind die verwendeten Gitterauflösungen zusammengefasst. Das Berechnungsgitter G2 ergibt sich durch Halbierung der Auflösung von G3 und G1 entsprechend durch Halbierung der Auflösung von G2, d.h. die Anzahl an Kontrollvolumen der Berechnungsgitter unterscheidet sich jeweils durch einen Faktor von acht.

Die resultierende Winkelauflösung in Umfangsrichtung beträgt bei äquidistanter Einteilung der Kontrollvolumina (d.h. im gesamten Rührbehälter außer im Bereich

⁶²Im Vergleich dazu werden von Herndl [121] folgende Richtlinien bzw. Empfehlungen für das Suspendieren gegeben: Einsatz eines axial fördernden Rührers (z.B. Propellerrührer oder Schrägblattrührer), welcher üblicherweise nach unten fördernd betrieben wird; Geometrieverhältnisse: $d_R = D/3$, $h_R = D/3$, Klöpferboden, 4 Stromstörer mit $b_{SS} = D/10$, $a_{SS} = D/100$ und $h_{SS} > 2D/3$; Eventuell Einsatz eines Leitrohres (häufig bei Kristallstationen);

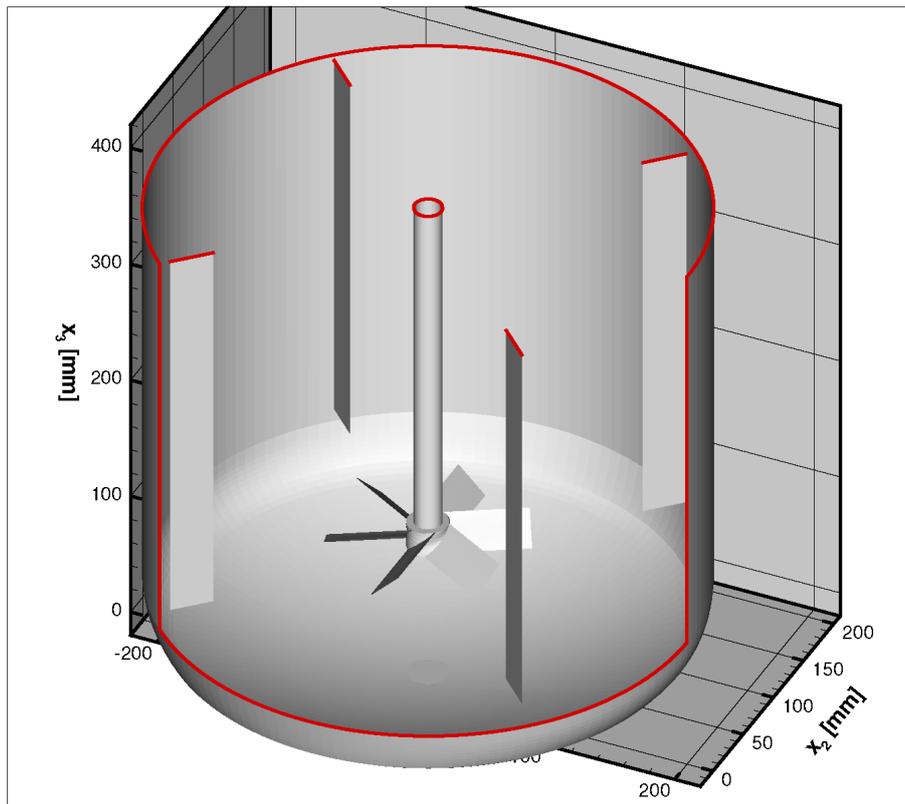


Abbildung 7.1: Geometrie des Rührbehälters und des Rührers

des Rührers) für G1 konstant 5° , für G2 2.5° und für G1 1.25° .

Das Berechnungsgebiet ist in allen drei Fällen in 36 Blöcke unterteilt, welche jeweils aus Hexaedern bestehende strukturierte Teilgitter bilden.

In Abb. 7.2 ist das Berechnungsgitter G2 grafisch dargestellt, wobei der rotierende Bereich farblich abgesetzt ist. Die resultierende Grenzfläche zwischen stationärem und rotierendem Berechnungsgitter ist in Abb. 7.3 noch einmal explizit dargestellt. Sie liegt an der Kontaktfläche von Block 1 zu Block 2 (d.h. bei $r = 116$ mm), bzw. Block 32 zu Block 3 ($x_3 = 180$ mm) und Block 29 zu Block 20 ($x_3 = 30 \dots 40$ mm). Zum rotierenden Bereich gehören also die Blöcke 2-28, alle anderen Blöcke sind stationär. Zur Verdeutlichung ist die verwendete Blockeinteilung in Abb. 7.4 für zwei Schnittebenen dargestellt.

Die beiden aufgelösten Stromstörer befinden sich im Gitter bei 45° bzw. 135° und die die drei berücksichtigten Rührerblätter bei 30° , 90° und 150° . Die Rührerblätter sowie die Stromstörer sind infinitesimal dünn angenommen, d.h. die jeweilige Dicke ist mit Null diskretisiert. Bei entsprechenden Vorarbeiten mit geometrischer Auflösung ergaben sich erhebliche Schwierigkeiten bei der Einhaltung sinnvoller y^+ -Werte. Ferner war es nicht möglich ohne massive Erhöhung der Kontrollvolumenanzahl an den Rührerblattspitzen (zur Verbesserung der dort vorliegenden Seitenverhältnisse der

| | | |
|---------------------------------|----------------------|----------------|
| Rührkessel mit Klöpferboden | | |
| Durchmesser | $D =$ | 400.0 mm |
| Füllhöhe | $H =$ | $D = 400.0$ mm |
| Rührer | | |
| Durchmesser | $d_R = 0.36 D =$ | 144.0 mm |
| Anzahl an Rührerblättern | $n_{BL} =$ | 6 |
| Anstellwinkel der Rührerblätter | $\alpha_{BL} =$ | 45° |
| Rührerblattbreite | $b_{BL} = 0.2 d_R =$ | 28.8 mm |
| Einbauhöhe (bis Rührermitte) | $h_R = 0.3 D =$ | 120.0 mm |
| Durchmesser der Rührerwelle | $d_W = 0.05 D =$ | 20.0 mm |
| Durchmesser der Rührernabe | $d_N = 0.075 D =$ | 30.0 mm |
| Höhe der Rührernabe | $h_N =$ | 20.4 mm |
| Stromstörer | | |
| Anzahl an Stromstörern | $n_{SS} =$ | 4 |
| Höhe | $h_{SS} = 0.75 D =$ | 300.0 mm |
| Breite | $b_{SS} = 0.08 D =$ | 32.0 mm |
| Wandabstand | $a_{SS} = 0.02 D =$ | 8.0 mm |

Tabelle 7.1: Geometrische Daten des betrachteten Rührers bzw. Rührkessels

| Berechnungsgitter | Anzahl an Kontrollvolumen |
|-------------------|---------------------------|
| G1 | 30636 |
| G2 | 245088 |
| G3 | 1960704 |

Tabelle 7.2: Gitterauflösung der untersuchten Berechnungsgitter G1 - G3

Kontrollvolumina) das Strömungsproblem mit zunehmendem Anteil an Zentralfrequenzen (s. Abschnitt 7.7) bei der Diskretisierung der konvektiven Flüsse zur Konvergenz zu führen. Der dadurch resultierende erhöhte Berechnungsaufwand lässt sich aber aufgrund des geringen Einflusses der Blattstärke⁶³ nicht rechtfertigen, so dass

⁶³ Montante et al. [204] berücksichtigten bei ihren Berechnungen im Rahmen einer Zellenanzahl-erhöhung auch die realen Dicken von Rührerblättern und -scheibe sowie der Stromstörer. Die resultierenden Verbesserungen fielen allerdings gering aus, so dass der Effekt als vernachlässigbar erachtet wurde. Es soll aber nicht unterschlagen werden, dass z.B. Rutherford et al. [274] bei ihren Untersuchungen mit Scheibenrührern eine signifikante Erhöhung des Förderbeiwerts bei einer Reduzierung der Rührerblattstärke fanden.

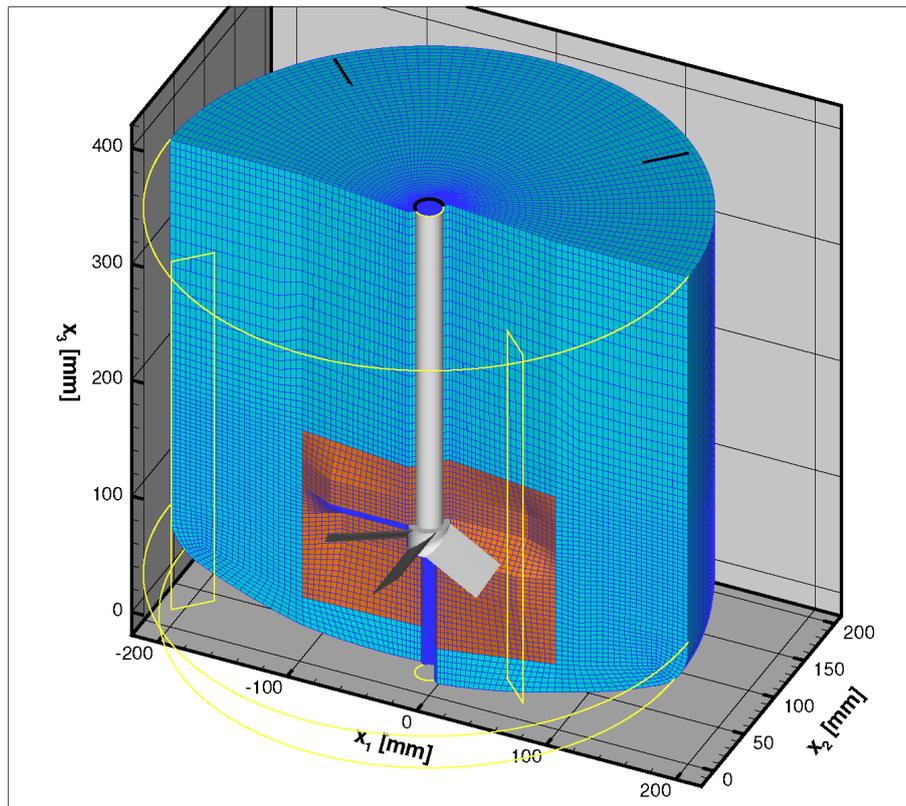


Abbildung 7.2: Berechnungsgitter G2

bei den vorliegenden Arbeiten von einer geometrischen Auflösung der Blattstärke des Rührers sowie der Dicke der Stromstörer abgesehen wurde.

Der Bereich unterhalb des Rührers, welcher dem Volumen einer durchgezogenen Rührerwelle entspricht, wurde nicht aufgelöst⁶⁴. An der dadurch resultierenden Grenzfläche wurde Symmetrie als Randbedingung angenommen. Ferner ist der Rührbehälter oben durch eine Scheibe abgeschlossen⁶⁵, d.h. es liegt eine Wand-Randbedingung und keine freie Oberfläche vor. Diese Anordnung wurde gewählt, um die Berechnungsergebnisse direkt mit entsprechenden experimentellen Untersuchungen (s. Abschnitt 7.5) vergleichen zu können. Es ist zu erwähnen, dass diese Wand-Randbedingung eine wichtige Vereinfachung darstellt, da die Berechnung einer freien Oberfläche sowohl bei Verwendung einer Gitteradaption als auch bei gitterunabhängiger Verfolgung der Phasengrenzfläche (z.B. VOF-Methode) eine erhebliche Erhöhung des Berechnungsaufwandes zu Folge hätte und damit eine Kom-

⁶⁴ Auch andere Autoren (z.B. Bakker [6]) benutzten wegen numerischer Probleme (unrealistische Strömungsstrukturen unterhalb des Rührers) eine durchlaufende Welle.

⁶⁵ Nouri & Whitelaw [219] zeigten, dass eine Abdeckung des Rührkessels (keine freie Oberfläche) zur Unterdrückung des Blaseneinzugs die Strömung nur in unmittelbarer Nachbarschaft beeinflusst, während im restlichen Behälter die Strömung nahezu derjenigen ohne Abdeckung entspricht. Daskopoulos & Harris [60] führten Vergleichsberechnungen mit und ohne Abdeckung durch und kamen zu einer ähnlichen Aussage wie Nouri & Whitelaw [219].

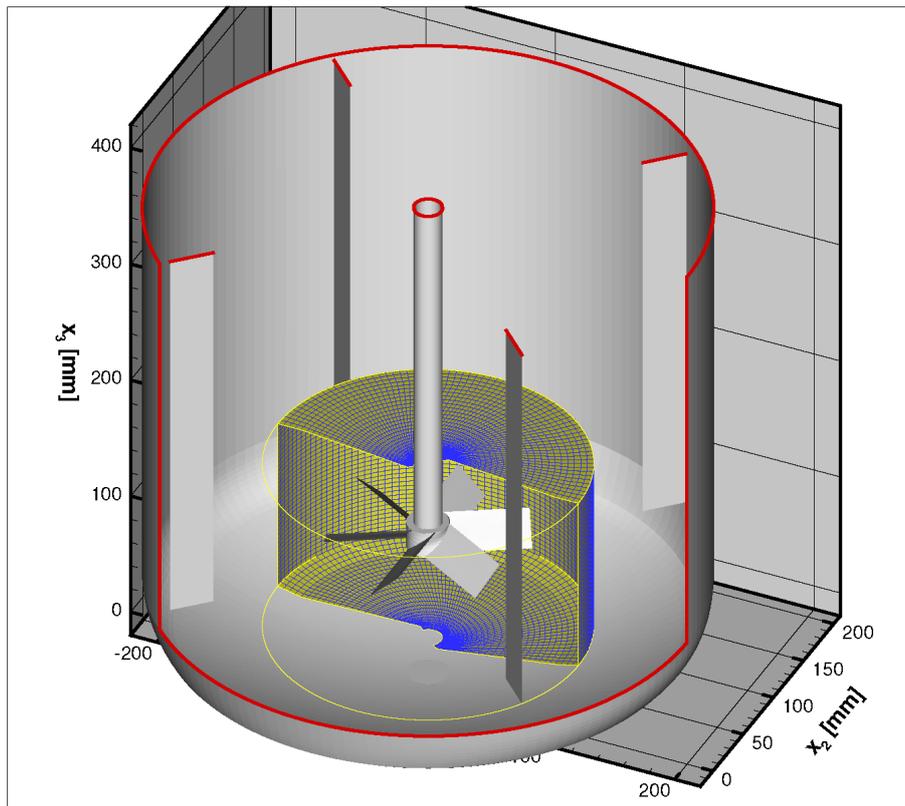


Abbildung 7.3: Rotierender Gitterbereich von Berechnungsgitter G2

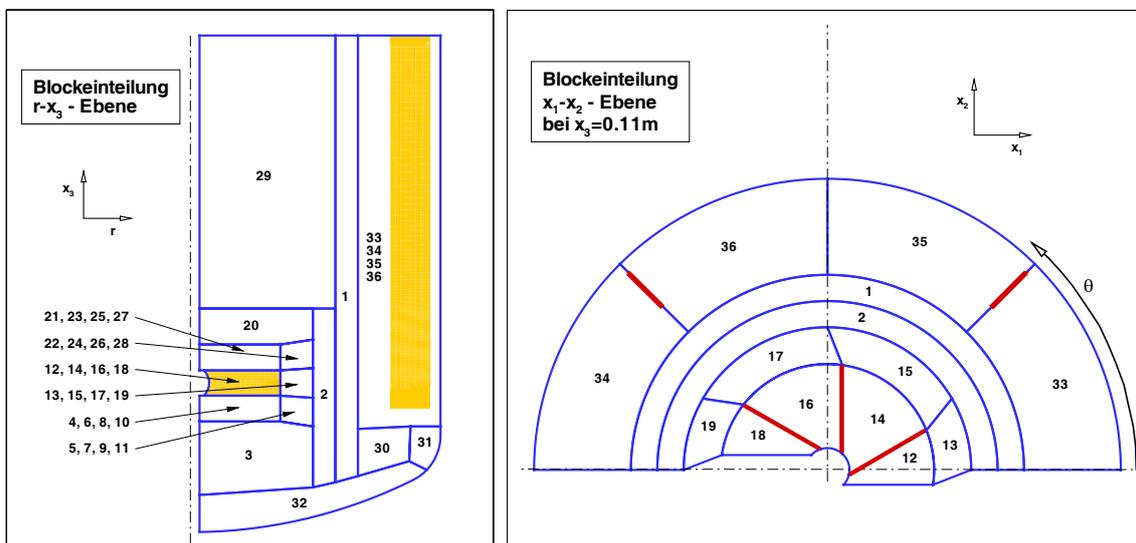


Abbildung 7.4: Blockteilung

ination mit dem Lagrangeschen Verfahren zur Berechnung der dispersen Phase nicht mehr sinnvoll wäre.

7.5 Vergleichsmessungen

Die numerischen Berechnungen wurden mit optischen Messungen verglichen, welche in einem Modellrührbehälter aus Glas durchgeführt wurden. In Abb. 7.5 ist der Versuchsstand schematisch dargestellt. Im Folgenden soll das Verfahren sowie die Versuchsanlage kurz beschrieben werden. Für Details des experimentellen Aufbaus sei auf Rother [270] verwiesen.

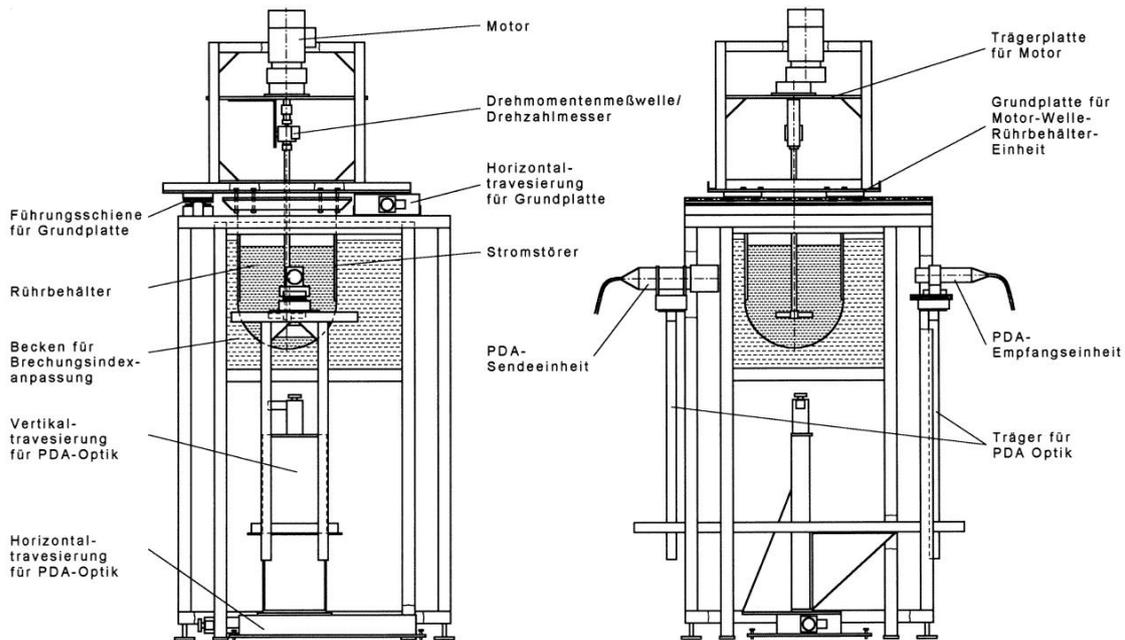


Abbildung 7.5: Schematische Darstellung der Versuchsanlage

Der Versuchsaufbau wurde ausgelegt für die berührungslose Drehmoment- und Drehzahlmessung mit einem induktiven Verfahren sowie für die Messung der Fluid- und Partikelgeschwindigkeit mit simultaner Erfassung der Teilchengröße mittels Phasen-Doppler Anemometrie (PDA). Ferner ermöglicht das Verfahren Rückschlüsse auf die Teilchenkonzentration über die Samplingrate und die Teilchengröße.

Die Anlage besteht aus einem Innengestell, in welchem das Becken für die Brechungsindexanpassung integriert ist, und einem Außengestell, welches als Träger für alle anderen Bauelemente dient. Die Grundplatte ist über eine Horizontaltraversierung und eine Führungsschiene mit dem Außengestell verbunden. Der Rührbehälter (ebenso wie das Becken für die Brechungsindexanpassung aus Duranglas gefertigt) ist von unten mit der Grundplatte verschraubt. Die vier eingespannten Stromstörer sind ebenfalls aus Duranglas. Der Rührbehälter ist über eine kreisrunde Öffnung in der Grundplatte zugänglich. Die Rührerwelle (aus Messing gefertigt) wird von oben mittels zweier Kugellager, welche sich in einem Lagerkasten befinden, fixiert. Um

eine mögliche Unwucht möglichst gering zu halten, ist der Lagerkasten größtenteils unterhalb der Grundplatte angebracht und mit dieser verschraubt. Am unteren Ende der Rührerwelle befindet sich der aus Edelstahl gefertigte Schrägblattrührer. Der Antrieb ist auf ein eigenes Gestell montiert, welches mit der Grundplatte verbunden ist. Zwischen Motor- und Rührerwelle ist der Rotor der Drehmomentmesswelle mit entsprechenden Kupplungen eingebaut. Der Rotor wird vom Stator der Messwelle, welcher an der Trägerplatte für den Motor befestigt ist, berührungslos umhüllt. Bei einer horizontalen Traversierung werden also alle auf der Grundplatte befestigten Bauelemente verfahren, d.h. der Rührbehälter bewegt sich innerhalb des Beckens für die Brechungsindexanpassung. Dadurch wird eine Nachjustierung der optischen Einheiten bei einer horizontalen Traversierung vermieden, sofern der Brechungsindex innerhalb des Beckens konstant ist. Sowohl der Rührbehälter wie auch das Becken zur Brechungsindexanpassung sind mit Dimethylsulfoxid (DMSO) gefüllt. Über eine Heizmatte unterhalb des Anpassungsbeckens lässt sich die Temperatur im Behälter so regeln, dass die Flüssigkeit den Brechungsindex von Duranglas ($n_B = 1.473$) annimmt. Ferner hat DMSO sehr wasserähnliche Eigenschaften ($\rho = 1103 \text{ kg m}^{-3}$ und $\mu = 2.2 \cdot 10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$), so dass sich leicht praxisrelevante Strömungszustände, d.h. vollausgebildete turbulente Strömung, einstellen lassen.

Unterhalb der Gestelle ist eine weitere Horizontaltraversierung (um 90° verdreht zur oberen Horizontaltraversierung) angebracht. Darauf befindet sich eine Vertikaltraversierung an welcher die Träger für die PDA-Sende- und Empfangseinheit befestigt sind. Während die Sendeeinheit im 90° -Winkel zur Behälterwand des Ausgleichsbeckens angeordnet ist, befindet sich die Empfangseinheit um 30° aus der Achse gedreht, um das gestreute Licht optimal auswerten zu können.

Das Dantec Zweikomponenten-PDA-System besteht aus einem Argon-Ionen Laser mit einer Leistung von 300 mW. Der Laserstrahl wird über einen Strahlteiler in zwei Teilstrahlen mit den Wellenlängen $\lambda = 488 \text{ nm}$ und $\lambda = 514.5 \text{ nm}$ aufgeteilt, welche jeweils erneut in zwei Teilstrahlen unterteilt werden. Mittels zweier Bragg-Zellen werden die jeweils gleichfarbigen Teilstrahlen in ihrer Frequenz verschoben und dann in Glasfasern eingekoppelt. In der Sendeeinheit werden die vier Teilstrahlen mit Hilfe einer Linse auf einen Punkt (dem Messvolumen) fokussiert. Durch die drei Traversierungen ist das Messvolumen beliebig im Rührbehälter positionierbar. Die Empfangseinheit ist ebenfalls durch eine Linse auf das Messvolumen fokussiert und leitet das empfangene Streulicht, welches von sich durch das Messvolumen bewegenden Teilchen ausgeht, über Glasfasern zu Avalanche-Photodioden. Dort werden die Lichtimpulse in elektrische Signale umgewandelt, welche dann im PDA-Signalprozessor mittels einer Fast-Fourier-Transformation ausgewertet werden. Zur Erfassung der ermittelten Daten sowie zur automatisierten Ansteuerung der einzelnen Traversierungen ist ein PC angeschlossen.

Bei der Kreuzung zweier kohärenter Laserstrahlen entsteht im Schnittpunkt nach anschaulicher Beschreibungstheorie ein Interferenzstreifenmuster in der Ebene der beiden Strahlen. Bewegt sich ein Teilchen durch dieses Streifenmuster, so streut es Licht, dessen Intensität von der momentanen Position im Streifenmuster abhängt.

Das Streulicht eines durchquerenden Teilchens ist somit ein moduliertes Signal mit einer Gaußschen Glockenkurve als Einhüllenden. Die Frequenz dieses modulierten Signals heißt Doppler-Frequenz f_D und ist direkt proportional zur Geschwindigkeit v_{\perp} des Teilchens. Die Geschwindigkeitskomponente v_{\perp} ist dabei normal zu den Interferenzstreifen und in der Ebene der Laserstrahlen angeordnet.

$$v_{\perp} = \Delta x_S \cdot f_D \quad (7.2)$$

Die Proportionalitätskonstante Δx_S ist der Abstand der Interferenzstreifen im Messvolumen. Dieser Abstand lässt sich mit Hilfe des halben Winkels zwischen den sich kreuzenden Laserstrahlen Θ_L und deren Wellenlänge λ berechnen.

$$\Delta x_S = \frac{\lambda}{2 \sin \Theta_L} \quad (7.3)$$

Um der ermittelten Geschwindigkeitskomponente v_{\perp} eine Richtung zuzuordnen zu können, werden die Frequenzen der beiden kreuzenden Laserstrahlen gegeneinander verschoben, so dass sich das Interferenzstreifenmuster mit definierter Geschwindigkeit bewegt und die Verschiebungsfrequenz die Grenze zwischen negativen und positiven Geschwindigkeiten darstellt. Die gleichzeitige Erfassung von zwei Geschwindigkeitskomponenten wird durch die Verwendung von zwei Laserfarben ermöglicht. Durch entsprechende Filter an der Empfangsoptik lassen sich die im Streulicht enthaltenen Informationen zu den beiden Geschwindigkeitskomponenten wieder auftrennen. Die Bestimmung der Teilchengröße wird durch die bei der Lichtbrechung am Teilchen entstehende Phasenverschiebung ermittelt. Eine genauere Beschreibung des Messverfahrens findet sich z.B. bei Durst et al. [78] und Crowe et al. [55].

Es ist an dieser Stelle zu bemerken, dass die Handhabung von DMSO mit erheblichen Problemen verbunden ist. Die überragenden Lösungseigenschaften von DMSO (eine ausführliche Zusammenfassung der Stoffeigenschaften von DMSO findet man im CIVS, einer Datenbank des BfR [38]) führten zu Dichtungsproblemen an den Kanten des viereckigen Anpassungsbeckens. Die Dichtungsproblematik trat trotz der Verwendung von anorganischem Glaslot zur Verbindung der Glasplatten auf. Leider konnte im Rahmen der vorliegenden Arbeit kein zufriedenstellendes Dichtungsmittel gefunden werden. Als aussichtsreichste Variante hat sich die Verwendung geklemmter Neopren-Dichtungen herauskristallisiert. Damit ist allerdings eine Neukonstruktion großer Teile des Versuchsstandes nötig, so dass die Realisierung nur durch nachfolgende Forschungsarbeiten möglich ist.

Die bereits in Abschnitt 7.4 zusammengefassten geometrischen Abmessungen des Rührbehälters sowie des Rührers gelten auch für den experimentellen Aufbau. Natürlich sind aber in der Praxis weder die Rührerblätter noch die Stromstörer unendlich dünn realisierbar. Bei den Experimenten haben die Rührerblätter eine Dicke von 1.5 mm und die Stromstörer eine Dicke von 10 mm.

Da für die Vergleichsmessungen zunächst keine polydispersen Teilchen eingesetzt wurden, war keine Erfassung der Teilchengröße nötig. Für die Validierung der numerischen Berechnungen sind verschiedene Geschwindigkeitsprofile von zentraler Be-

deutung. Die in Wasser durchgeführten Messungen erfolgten in einer vertikalen Ebene bei $\theta = 90^\circ$, d.h. mittig zwischen zwei benachbarten Stromstörern. Dabei wurden radiale Profile der vertikalen und tangentialen Geschwindigkeitskomponente von Fluid und Partikeln in den Höhen $x_3 = 100, 120, 160$ und 260 mm aufgenommen. Ferner wurden Rührerdrehzahlen von $n_R = 200, 300$ und 400 min^{-1} vermessen. Es kamen verschiedene Teilchengrößen zum Einsatz ($d = 1, 200$ und $500 \mu\text{m}$), wobei in allen Fällen eine geringe Partikelkonzentration ($\varphi_P = 0.01\%$) realisiert wurde. Bei den Einzelmessungen wurde die jeweilige Lage in Relation zu den Rührerblättern nicht berücksichtigt, so dass die Messwerte in Rührernähe als umfangsgemittelt zu bewerten sind.

Der Vergleich zwischen den numerischen Berechnungen und den experimentellen Daten erfolgt thematisch eingeordnet in den folgenden Abschnitten.

7.6 Analyse des dimensionslosen normalen Wandabstands

Für die Berechnung der turbulenten Strömung wird, wie bereits in Abschnitt 6.3 für die Berechnung der vertikalen Rohrströmung, das k - ε -Turbulenzmodell in Verbindung mit der logarithmischen Wandfunktion (vgl. Abschnitt 3.3) eingesetzt. Für die korrekte Behandlung der Wandgrenzschicht ist es somit auch hier unerlässlich die vorliegenden dimensionslosen normalen Wandabstände y^+ unter Berücksichtigung des Gültigkeitsbereiches des logarithmischen Wandgesetzes ($10 < y^+ < 300$, vgl. Abschnitt 3.3 und Abschnitt 6.3) zu analysieren.

| Berechnungsgitter | y^+ der wandnächsten Kontrollvolumenzentren |
|-------------------|---|
| G1 | 21 ... 694 |
| G2 | 7 ... 384 |
| G3 | 3 ... 208 |

Tabelle 7.3: Dimensionsloser normaler Wandabstand y^+ der wandnächsten Kontrollvolumenzentren bei den untersuchten Berechnungsgittern G1 - G3

In Tab. 7.3 sind die Bereiche der in den wandnächsten Kontrollvolumenzentren auftretenden y^+ -Werte (bei $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$) für die verschiedenen Gitterauflösungen zusammengefasst. Erwartungsgemäß liegen beim größten Gitter (G1) die höchsten y^+ -Werte vor, während sich mit zunehmender Verfeinerung das Niveau hin zu kleineren Werten verschiebt. In Abb. 7.6 links sind die jeweiligen Verteilungen der y^+ -Werte für die einzelnen Gitter grafisch aufgetragen. Die Verteilung in den einzelnen Blöcken ist Abb. 7.6 rechts zu entnehmen. Die geometrische Bedeutung bzw. Lage

der einzelnen Blöcke kann Abb. 7.4 entnommen werden.

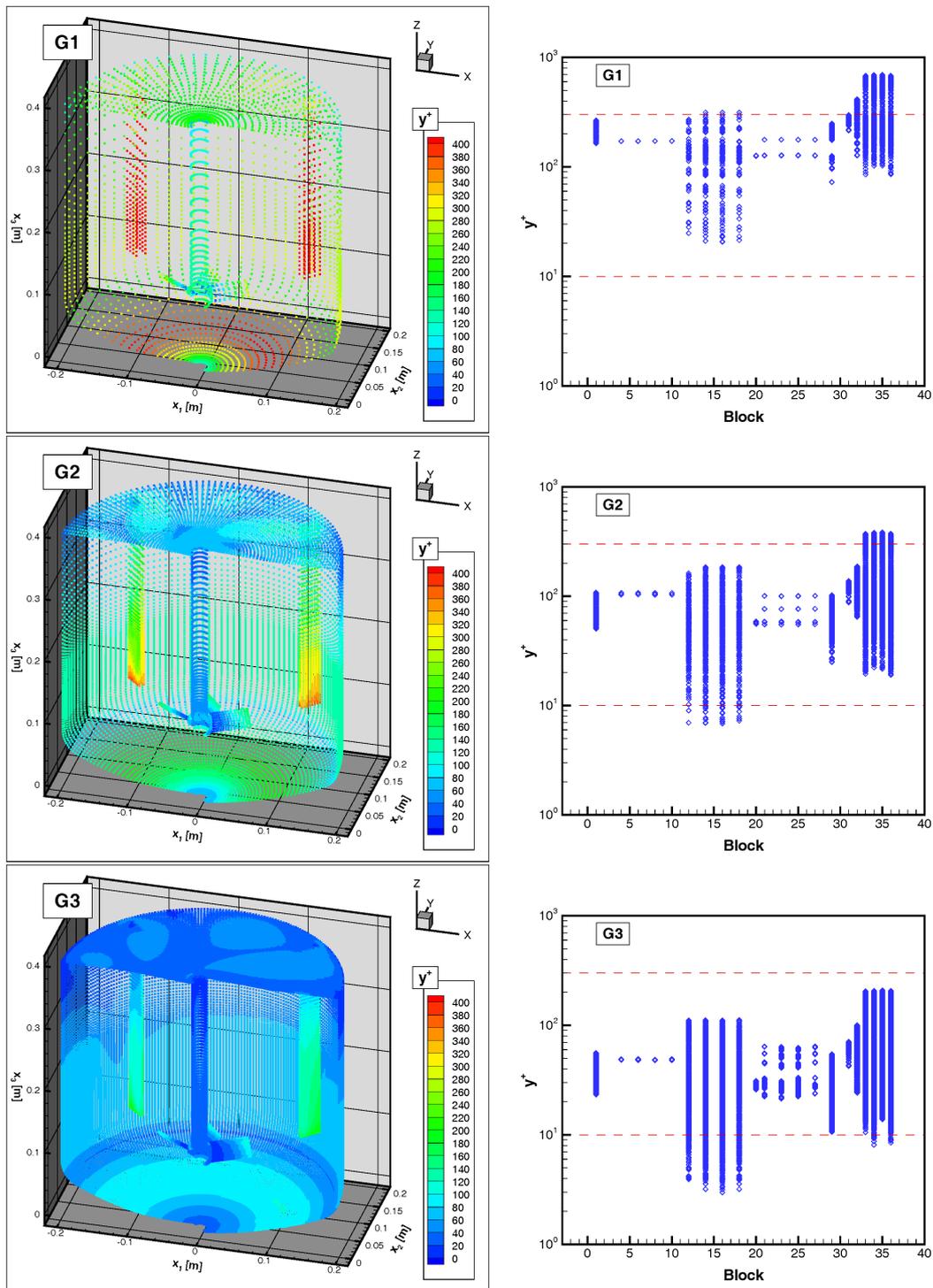


Abbildung 7.6: Dimensionsloser normaler Wandabstand y^+ der untersuchten Berechnungsgitter G1 - G3 für das gesamte Berechnungsgebiet (links) sowie die Verteilung in den einzelnen Blöcken (rechts)

Von zentraler Bedeutung für die Strömung im Rührbehälter sind die dimensionslosen normalen Wandabstände y^+ an den Rührerblättern, da die Fördermenge des Rührers sowie die Ausbreitungsrichtung des Impulsstroms (und damit die Globalströmung im Rührbehälter) direkt mit der Hafttrandbedingung an den Rührerblättern und dadurch mit der Ausbildung der Wandgrenzschicht verbunden sind. Die entsprechenden y^+ -Werte am Rührer sind daher in Abb. 7.7 noch einmal vergrößert dargestellt.

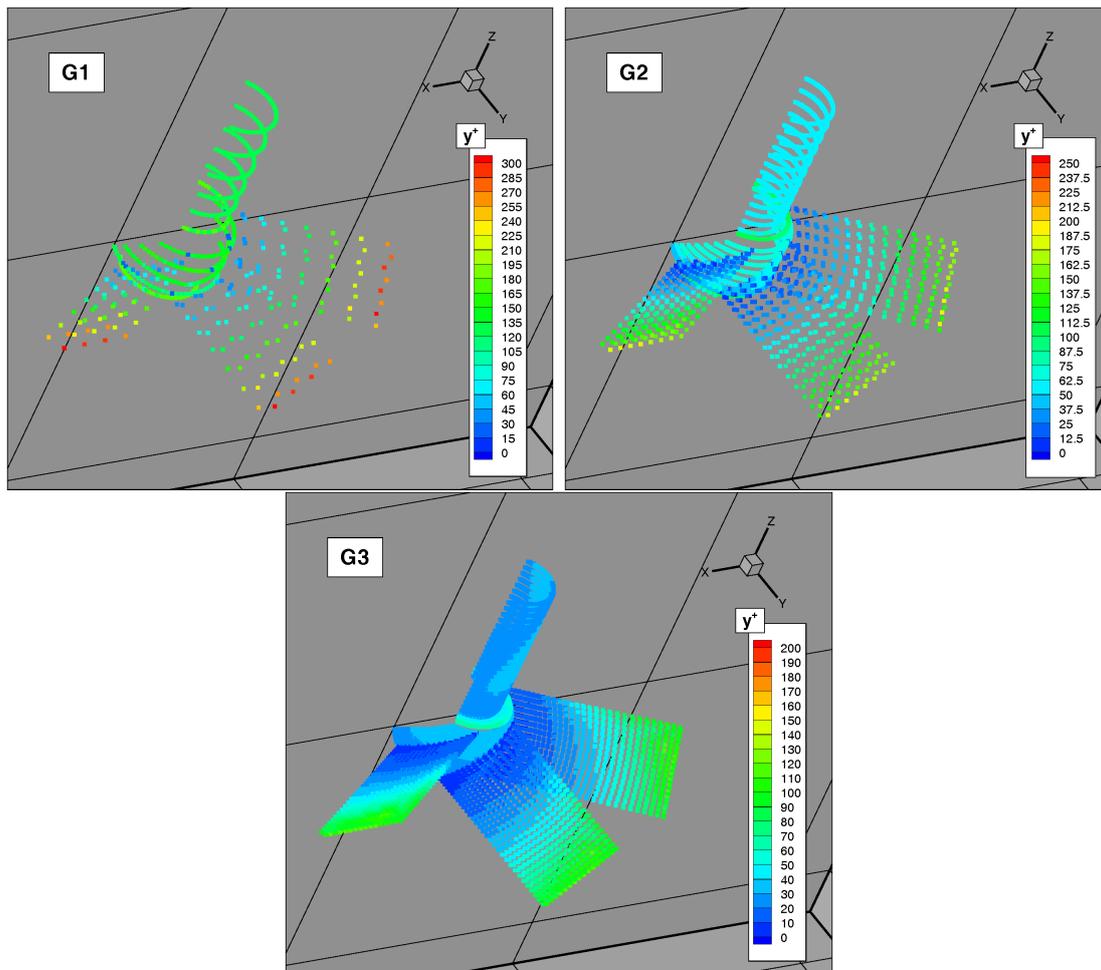


Abbildung 7.7: Dimensionsloser normaler Wandabstand y^+ der untersuchten Berechnungsgitter G1 - G3 im Rührerbereich

Während an den Behälterwänden bzw. an den Stromstörern prinzipiell eher zu hohe Werte für y^+ vorliegen (besonders ausgeprägt beim größten Gitter), können an den Rührerblättern in Nabennähe zu kleine Werte vorkommen. In Richtung Blattspitzen nimmt die Relativgeschwindigkeit aber so stark zu, dass dort eher zu hohe Werte vorliegen. Bei den untersuchten Gittern wird der Gültigkeitsbereich des logarithmischen Wandgesetzes aber selbst im kritischsten Fall (Gitter G1) nicht nach oben überschritten (s. auch Abb. 7.6 rechts, Blöcke 12, 14, 16 und 18). Bei einer Gitter-

verfeinerung verschieben sich die y^+ -Werte immer in Richtung kleinerer Werte, so dass im Fall von Gitter G2 bereits ein kleiner Teil der vorkommenden y^+ -Werte (ca. 2% der Randkontrollvolumina auf den Rührerblättern) unterhalb von 10 und damit außerhalb des Gültigkeitsbereiches liegt. Bei weiterer Verfeinerung (G3) wächst dieser Anteil auf etwa 9% an. Allerdings befinden sich die Kontrollvolumina mit zu niedrigen y^+ -Werten alle in unmittelbarer Nachbarschaft zur Nabe. Hier liegen aber im Vergleich zu den Bereichen in der Umgebung der Blattspitzen erheblich geringere Umfangsgeschwindigkeiten vor, so dass der Beitrag der Bereiche um die Nabe zur Fördermenge bzw. zum Impulsstrom des Rührers sehr gering ist. Die bei zunehmender Gitterauflösung resultierenden Ungenauigkeiten in Nabennähe sind somit im Vergleich zum generellen Gewinn an Genauigkeit aufgrund der erhöhten Auflösung im gesamten Rührbehälter vernachlässigbar.

In Abb. 7.8 sind die Prozentsätze an Randkontrollvolumina in den einzelnen y^+ -Bereichen für die drei betrachteten Berechnungsgitter zusammengefasst.

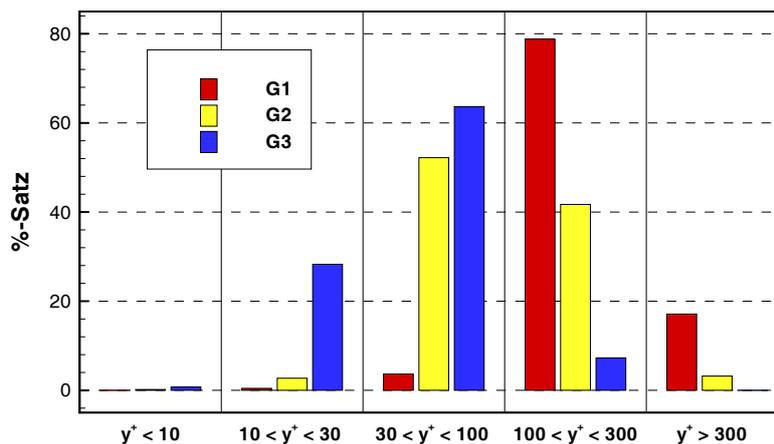


Abbildung 7.8: Prozentuale Verteilung des dimensionslosen normalen Wandabstandes y^+ in den verschiedenen y^+ -Bereichen für die untersuchten Berechnungsgitter G1 - G3

Im gesamten Berechnungsgebiet liegt nur ein geringer Teil der Randkontrollvolumina unterhalb der Grenze von $y^+ = 10$ (G1: 0%, G2: ca. 0.2% und G3: ca. 0.8%). Der Anteil von Randkontrollvolumina mit $y^+ > 300$ ist besonders bei der niedrigen Gitterauflösung (G1) mit ca. 17% deutlich höher. Mit zunehmender Auflösung sinkt der Anteil aber stark ab (G2: ca. 3% und G3: 0%).

7.7 Analyse der Diskretisierung der konvektiven Flüsse und der Gitterauflösung

Wie bereits in Abschnitt 5.1.1 erwähnt, werden bei der vorliegenden Arbeit die konvektiven Flüsse mit der Fluss-Korrektur-Methode (*Deferred-Correction Approach*) diskretisiert. Zur Erläuterung der verschiedenen Abbruchfehler von *UDS*- bzw. *CDS*-Methode soll hier zunächst die erste Ableitung einer beliebigen Funktion $\phi(z)$ für die verschiedenen Approximationsmethoden hergeleitet werden.

Jede in der Nähe von $z = z_i$ n -fach differenzierbare Funktion $\phi(z)$ lässt sich in einem kleinen Bereich um z_i durch eine Taylorreihe ausdrücken:

$$\begin{aligned}\phi(z) &= \phi(z_i) + (z - z_i) \left(\frac{\partial \phi}{\partial k} \right)_i + \frac{(z - z_i)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right)_i \\ &\quad + \frac{(z - z_i)^3}{6} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial z^3} \right)_i + \dots + \frac{(z - z_i)^n}{n!} \left(\frac{\partial^n \phi}{\partial z^n} \right)_i + H_n \\ &= \sum_{k=0}^n \frac{(z - z_i)^k}{k!} \left(\frac{\partial^k \phi}{\partial z^k} \right)_i + H_n\end{aligned}\quad (7.4)$$

Dabei steht H_n für nicht näher spezifizierte Terme höherer Ordnung. Betrachtet man die benachbarten Punkte $z = z_{i+1}$ bzw. $z = z_{i-1}$ mit positiver bzw. negativer Abweichung von z_i , so erhält man mit Gl. 7.4 und der Vereinfachung $\phi_j = \phi(z_j)$ die folgenden Beziehungen:

$$\phi_{i+1} = \phi_i + \sum_{k=1}^n \frac{(z_{i+1} - z_i)^k}{k!} \left(\frac{\partial^k \phi}{\partial z^k} \right)_i + H_n \quad (7.5)$$

$$\phi_{i-1} = \phi_i + \sum_{k=1}^n \frac{(z_{i-1} - z_i)^k}{k!} \left(\frac{\partial^k \phi}{\partial z^k} \right)_i + H_n \quad (7.6)$$

bzw. durch Auflösen nach der ersten Ableitung:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{z_{i+1} - z_i} - \sum_{k=2}^n \frac{(z_{i+1} - z_i)^{k-1}}{k!} \left(\frac{\partial^k \phi}{\partial z^k} \right)_i + H_n \quad (7.7)$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_i = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{z_i - z_{i-1}} + \sum_{k=2}^n (-1)^k \frac{(z_i - z_{i-1})^{k-1}}{k!} \left(\frac{\partial^k \phi}{\partial z^k} \right)_i + H_n \quad (7.8)$$

Entsprechend erhält man durch Subtraktion der Gl. 7.6 von Gl. 7.5 eine weitere Beziehung für die erste Ableitung:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{z_{i+1} - z_{i-1}} - \sum_{k=2}^n \frac{(z_{i+1} - z_i)^k - (z_{i-1} - z_i)^k}{(z_{i+1} - z_{i-1}) k!} \left(\frac{\partial^k \phi}{\partial z^k} \right)_i + H_n \quad (7.9)$$

Reduziert man die exakten Gleichungen 7.7-7.9 durch Abschneiden der Ableitungsterme auf der rechten Seite, so erhält man Approximationsgleichungen für die erste Ableitung von $\phi(z)$ nach der *FDS*-Methode (*F*orward *D*ifference *S*cheme, Gl. 7.10), der *BDS*-Methode (*B*ackward *D*ifference *S*cheme, Gl. 7.11) sowie der *CDS*-Methode (*C*entral *D*ifference *S*cheme, Gl. 7.12).

$$FDS : \quad \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{z_{i+1} - z_i} \quad (7.10)$$

$$BDS : \quad \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_i \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{z_i - z_{i-1}} \quad (7.11)$$

$$CDS : \quad \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{z_{i+1} - z_{i-1}} \quad (7.12)$$

Der dadurch resultierende Abbruchfehler E berechnet sich bei äquidistanten Abständen von z , d.h. $z_{i+1} - z_i = z_i - z_{i-1} = \Delta z$, für die verschiedenen Approximationsverfahren zu:

$$E_{FDS} = \sum_{k=2}^n -\frac{\Delta z^{k-1}}{k!} \left(\frac{\partial^k \phi}{\partial z^k} \right)_i + H_n \quad (7.13)$$

$$E_{BDS} = \sum_{k=2}^n (-1)^k \frac{\Delta z^{k-1}}{k!} \left(\frac{\partial^k \phi}{\partial z^k} \right)_i + H_n \quad (7.14)$$

$$E_{CDS} = \sum_{k=1}^{n/2-1} -\frac{\Delta z^{2k}}{(2k+1)!} \left(\frac{\partial^{2k+1} \phi}{\partial z^{2k+1}} \right)_i + H_n \quad (7.15)$$

Die Ordnung des Abbruchfehlers E wird durch den Term bestimmt, welcher die kleinste Potenz von Δz aufweist, da dieser Term bei kleinen Δz den größten Beitrag zum Fehler liefert. Somit ist der Abbruchfehler bei der *CDS*-Methode also von zweiter Ordnung, während er bei der *FDS*- und *BDS*-Methode von erster Ordnung ist. Die *UDS*-Methode (*U*pwind *D*ifference *S*cheme), welche die transportiven Eigenschaften der Strömung nutzt (infolge von Konvektion kann ϕ nur stromab transportiert werden), greift je nach Strömungsrichtung entweder auf *FDS* oder *BDS* zurück und hat somit ebenfalls einen Abbruchfehler erster Ordnung.

Mit Hilfe der Ordnung des Abbruchfehlers lässt sich die Geschwindigkeit abschätzen, mit der sich der Fehler im Falle einer Gitterverfeinerung reduziert. Eine absolute Aussage über den Fehler ist aber nicht möglich. Generell gilt für hinreichend kleine Δz , wobei die Definition von hinreichend klein stark von der betrachteten Funktion $\phi(z)$ abhängt, bei einem Abbruchfehler der Ordnung m : Durch die Verdopplung der Gitterauflösung reduziert sich der Fehler um den Faktor 2^m .

Bei der Finite-Volumen-Methode werden zur Bestimmung der konvektiven Flüsse durch die *KV*-Flächen die Geschwindigkeitskomponenten in den Flächenmittelpunkten benötigt. Für die Approximation dieser Werte lassen sich analog zu den

obigen Ableitungen korrespondierende Interpolationsbeziehungen aufstellen:

$$FDS : \quad \phi_i \approx \phi_{i+1} \quad (7.16)$$

$$BDS : \quad \phi_i \approx \phi_{i-1} \quad (7.17)$$

$$CDS : \quad \phi_i \approx \phi_{i-1} + \gamma_i(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) \quad (7.18)$$

wobei der lineare Interpolationsfaktor γ_i durch folgende Beziehung definiert ist:

$$\gamma_i = \frac{z_i - z_{i-1}}{z_{i+1} - z_{i-1}} \quad (7.19)$$

Obwohl dabei keine Ableitungen beteiligt sind, haben sich für die entsprechenden Interpolationen die gleichen Bezeichnungen (*CDS*, *UDS*, usw.) eingebürgert, da die Beziehungen auf äquidistanten Gittern (dann gilt $\gamma_i = 0.5$) die gleiche algebraische Form annehmen.

Bei der Bestimmung der Flächenwerte mit der *CDS*-Methode können numerische Oszillationen in der Lösung (und im Extremfall Divergenz des iterativen Lösers) auftreten, wenn die vorliegenden Matrizen nicht diagonal dominant sind. Da sich die *UDS*-Methode uneingeschränkt stabil verhält, bietet sich eine Kombination von *UDS* und *CDS* zur Berechnung solcher Fälle an. Eine derartige Kombination ist die Fluss-Korrektur-Methode nach Khosla & Rubin [147] (s. Abschnitt 5.1.1). Dabei erfolgt die Approximation höherer Ordnung explizit (Gl. 7.20, 2. Term auf der rechten Seite), d.h. unter Nutzung der Ergebnisse der vorausgegangenen Iteration $i - 1$. Diese wird kombiniert mit einer implizit berechneten Approximation niedriger Ordnung (Gl. 7.20, 1. Term auf der rechten Seite). Die transportierte Größe ϕ (z.B. eine der Geschwindigkeitskomponenten) im Flächenmittelpunkt der *KV*-Seite j berechnet sich somit für die i -te Iteration zu:

$$\phi_j = (\phi_j^{UDS})_i + \gamma_{CDS} (\phi_j^{CDS} - \phi_j^{UDS})_{i-1} \quad (7.20)$$

Der Gewichtungsfaktor γ_{CDS} dient zur Unterdrückung von Oszillationen, welche beim Einsatz von Diskretisierungsverfahren höherer Ordnung auf zu groben Gittern auftreten können. Im Falle von Konvergenz und $\gamma_{CDS} = 1$ kürzen sich die *UDS*-Beiträge heraus und es resultiert eine reine *CDS*-Lösung. Im Folgenden wird der Gewichtungsfaktor γ_{CDS} daher vereinfachend auch als Anteil an *CDS* bezeichnet. Der Berechnungsaufwand bei der Fluss-Korrektur-Methode ist etwas größer als bei der reinen *UDS*-Methode, aber deutlich geringer als bei einer impliziten *CDS*-Approximation.

Verfahren mit einem Abbruchfehler erster Ordnung, dies entspricht $\gamma_{CDS} = 0$, sind relativ gut geeignet gerichtete Strömungen abzubilden. Dies gilt umso mehr, je besser das Gitter den Stromlinien folgt. Bei zunehmend chaotischen Strömungen lässt ihre Genauigkeit aber stark zu wünschen übrig. Der Abbruchfehler macht sich dann

in Form von künstlicher Diffusion (der dominante Term des Abbruchfehlers E hat die Form eines Diffusionsterms) bemerkbar, welche deutlich größer als die real vorliegende Diffusion sein kann. Gerade bei rotierenden Strömungen ist mit einem starken Einfluss der Diskretisierungsmethode für die konvektiven Terme zu rechnen. Daher wird im Folgenden der Einfluss auf die Strömung im Rührbehälter untersucht und die Berechnungen mit entsprechenden gemessenen Profilen verglichen.

In den Abbildungen 7.9-7.14 sind radiale Profile mit den Eigenschaften des Fluids unter einem Winkel von $\theta = 90^\circ$ aufgetragen, wobei die Höhe x_3 mit den Abbildungen variiert ($x_3 = 60 \text{ mm}$, 80 mm , 100 mm , 120 mm und 260 mm). In den einzelnen Abbildungen sind jeweils alle Variablen für die untersuchten Kombinationen von Gitterauflösung und Gewichtungsfaktor γ_{CDS} aufgetragen.

Die Profile der verschiedenen Fälle weisen praktisch im gesamten Strömungsgebiet eine starke Streuung auf. Besonders stark ist die Streuung erwartungsgemäß in der Nähe des Impulseintrags, d.h. im Bereich um den Rührer und dabei besonders im Abstrombereich.

Beim Vergleich der verschiedenen Strömungsgrößen zeigt die vertikale Geschwindigkeitskomponente U_3 die geringste relative Streubreite und die Form der Profile ändert sich durch die Wahl der Parameter nicht prinzipiell. Zu beachten ist hierbei aber das generell hohe Geschwindigkeitsniveau und die zentrale Bedeutung der vertikalen Geschwindigkeitskomponente bei Suspendierprozessen. Erhebliche Unterschiede ergeben sich in den Bereichen maximaler Geschwindigkeit, d.h. an der Behälterwand und im Bereich um die Spitzen der Rührerblätter. Die Maxima sind umso ausgeprägter, je größer der Gewichtungsfaktor γ_{CDS} und (mit deutlich schwächerer Korrelation) je höher die Gitterauflösung gewählt wird. Bei zu geringer Gewichtung von CDS , d.h. zu kleinen Gewichtungsfaktoren γ_{CDS} , werden die Profile zu stark geglättet und besonders die Übergänge an den Rührerblattspitzen verfälscht (s. Abbildungen 7.10-7.12). Im oberen Bereich des Rührbehälters (s. Abb. 7.14) verschiebt sich das Niveau der vertikalen Geschwindigkeitskomponente als Resultat der Veränderungen im Rührerbereich.

Die relative Streuung der radialen und tangentialen Geschwindigkeitskomponenten U_r , U_t ist deutlich größer und auch die Form der Profile variiert erheblich. Die stärksten Streuungen liegen auch bei diesen Komponenten im Bereich des Rührers vor. Mit zunehmendem Gewichtungsfaktor γ_{CDS} erfolgt die Abströmung vom Rührer deutlich vertikaler, so dass die radiale Umlenkung erst in größerer Entfernung vom Rührer erfolgt (s. Abb. 7.9). Die Profilform geht dabei von einer Einfachverteilung zu einer Doppelverteilung über. Außerhalb des Rührerstrahls reduzieren sich somit die radialen Geschwindigkeiten mit zunehmendem γ_{CDS} (s. Abbildungen 7.10-7.11). Mit steigender Gitterauflösung wird das seitliche Ansaugen des Rührers immer deutlicher zu erkennen (s. Abb. 7.11), während dieser Effekt bei kleinen γ_{CDS} gar nicht zu beobachten ist. In einer Höhe von $x_3 = 160 \text{ mm}$ wird die zur Welle hin gerichtete Strömung mit zunehmendem γ_{CDS} schwächer, da es zu einer Verschiebung nach oben kommt und die Rückströmung dann bei $x_3 = 260 \text{ mm}$ deutlicher ausfällt.

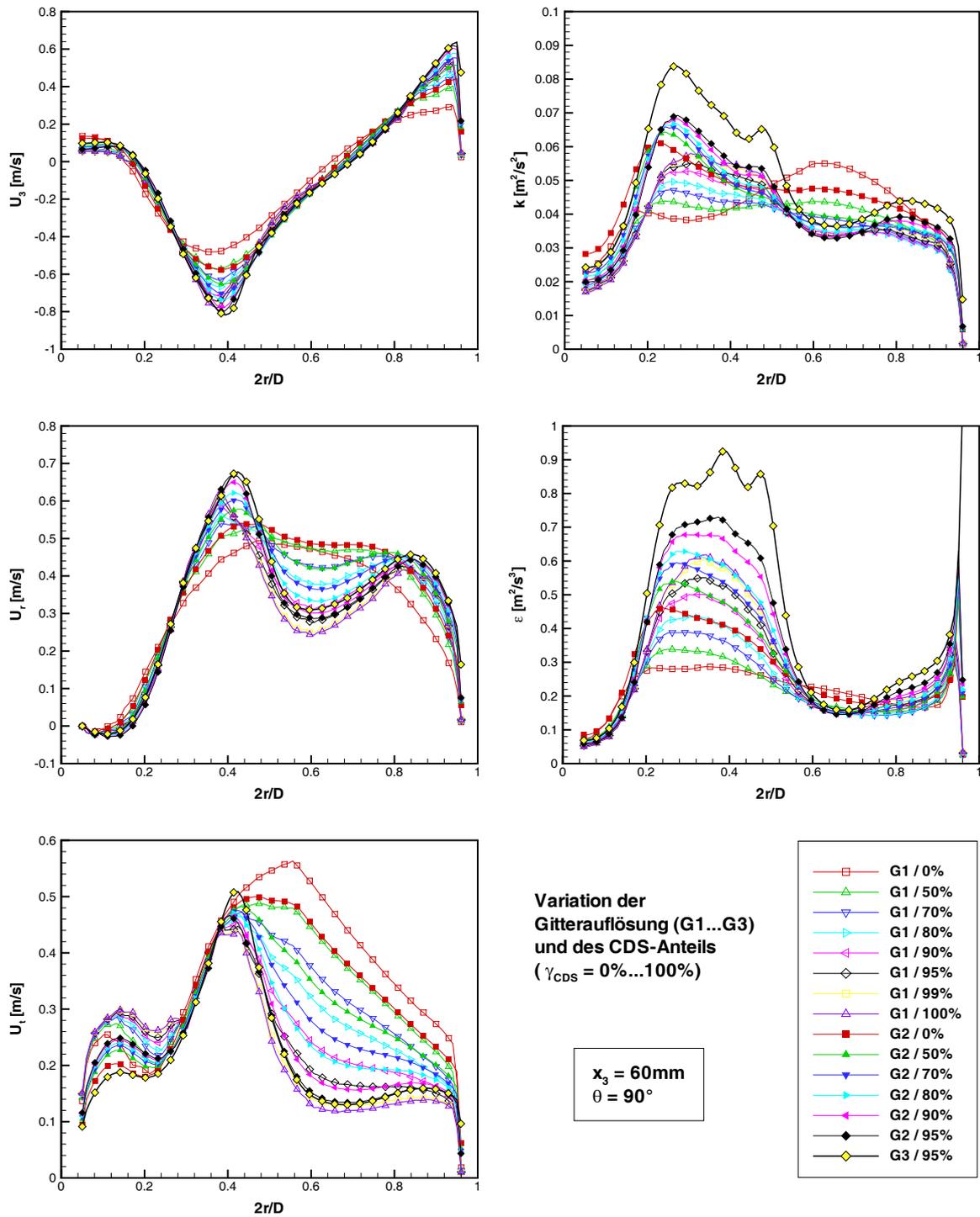


Abbildung 7.9: Fluideigenschaften auf radialen Profilen unter einem Winkel von $\theta = 90^\circ$ und in einer Höhe von $x_3 = 60\text{mm}$ (Variation der Gitterauflösung und des Gewichtungsfaktors γ_{CDS})

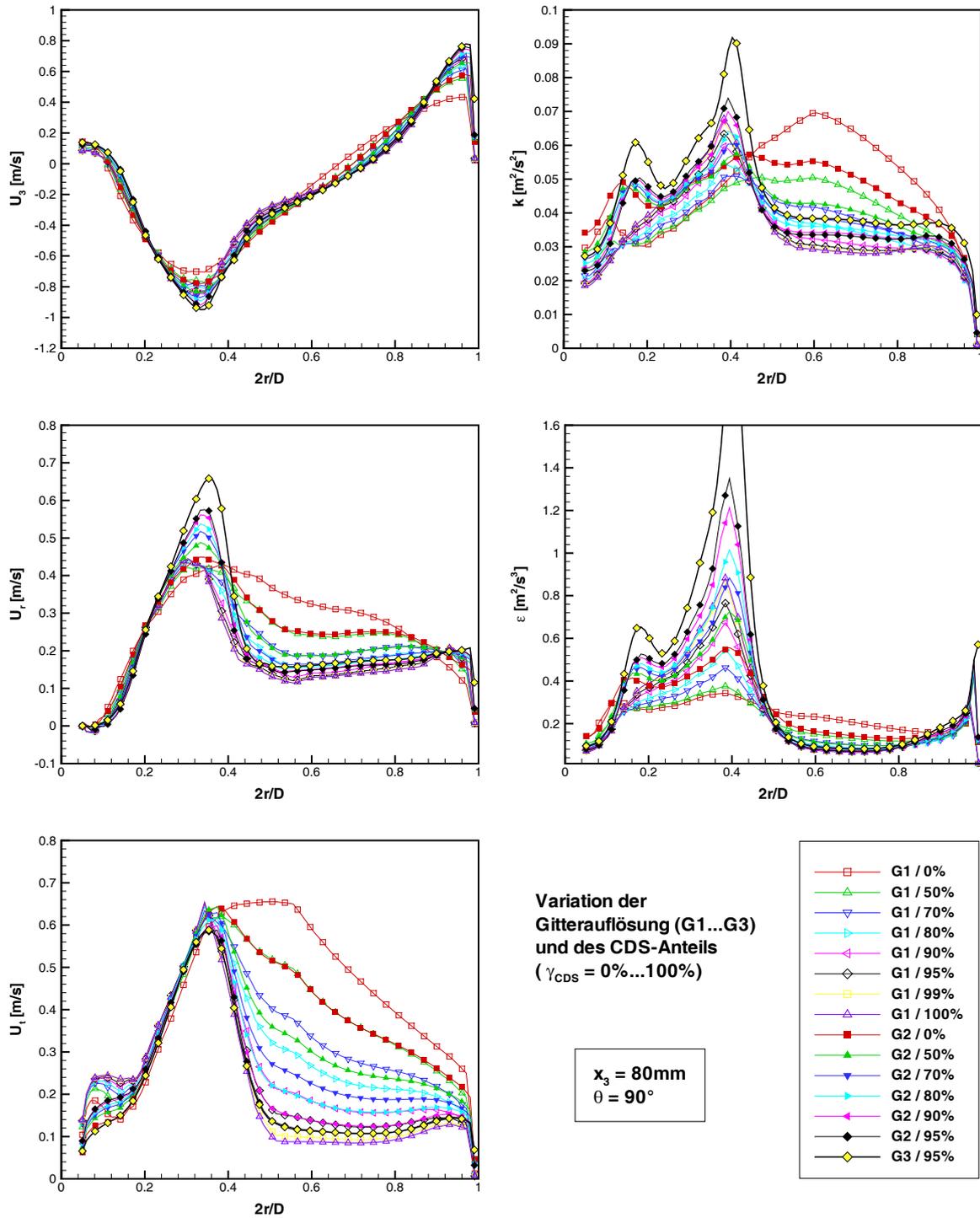


Abbildung 7.10: Fluidigenschaften auf radialen Profilen unter einem Winkel von $\theta = 90^\circ$ und in einer Höhe von $x_3 = 80\text{mm}$ (Variation der Gitterauflösung und des Gewichtungsfaktors γ_{CDS})

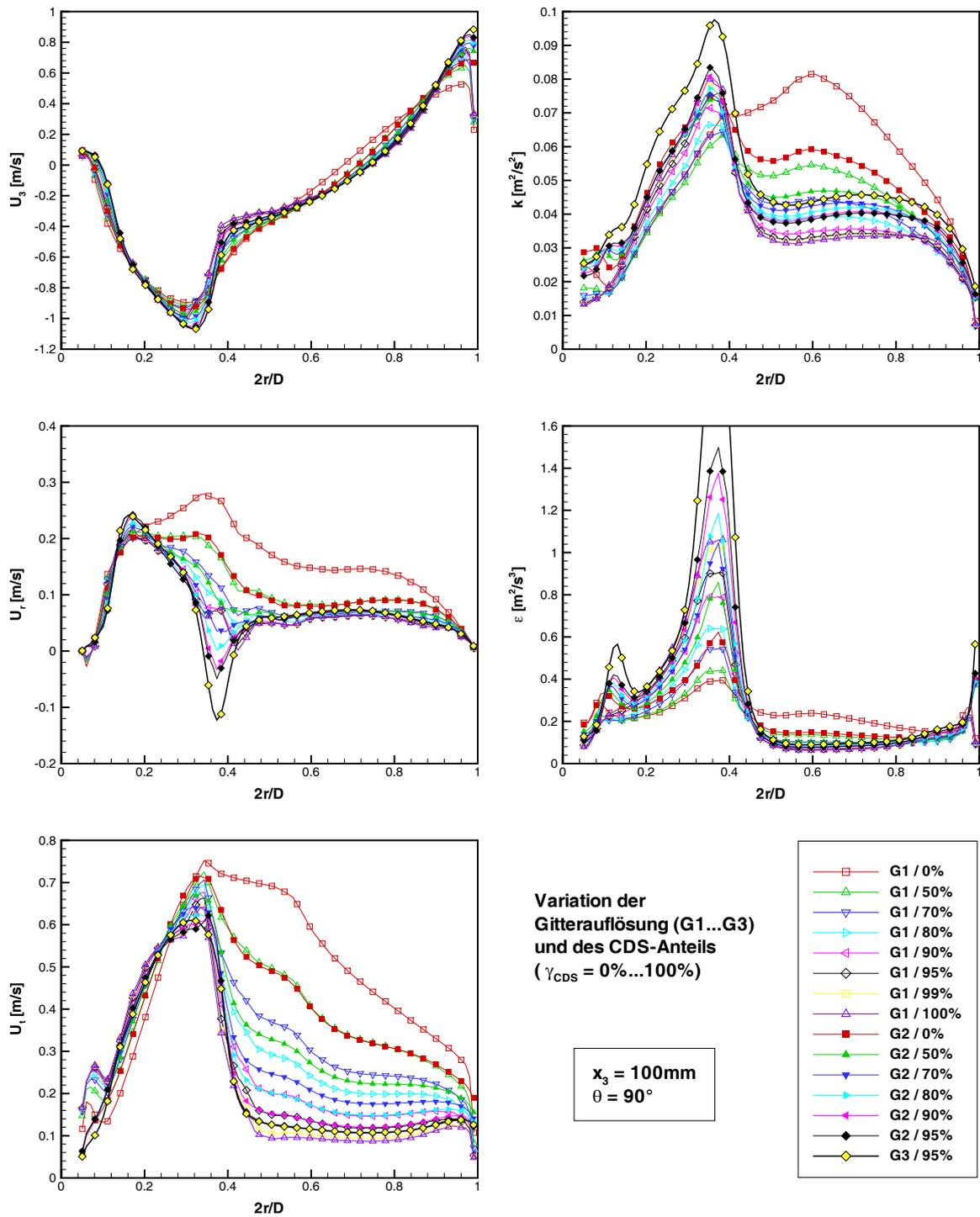


Abbildung 7.11: Fluideigenschaften auf radialen Profilen unter einem Winkel von $\theta = 90^\circ$ und in einer Höhe von $x_3 = 100\text{mm}$ (Variation der Gitterauflösung und des Gewichtungsfaktors γ_{CDS})

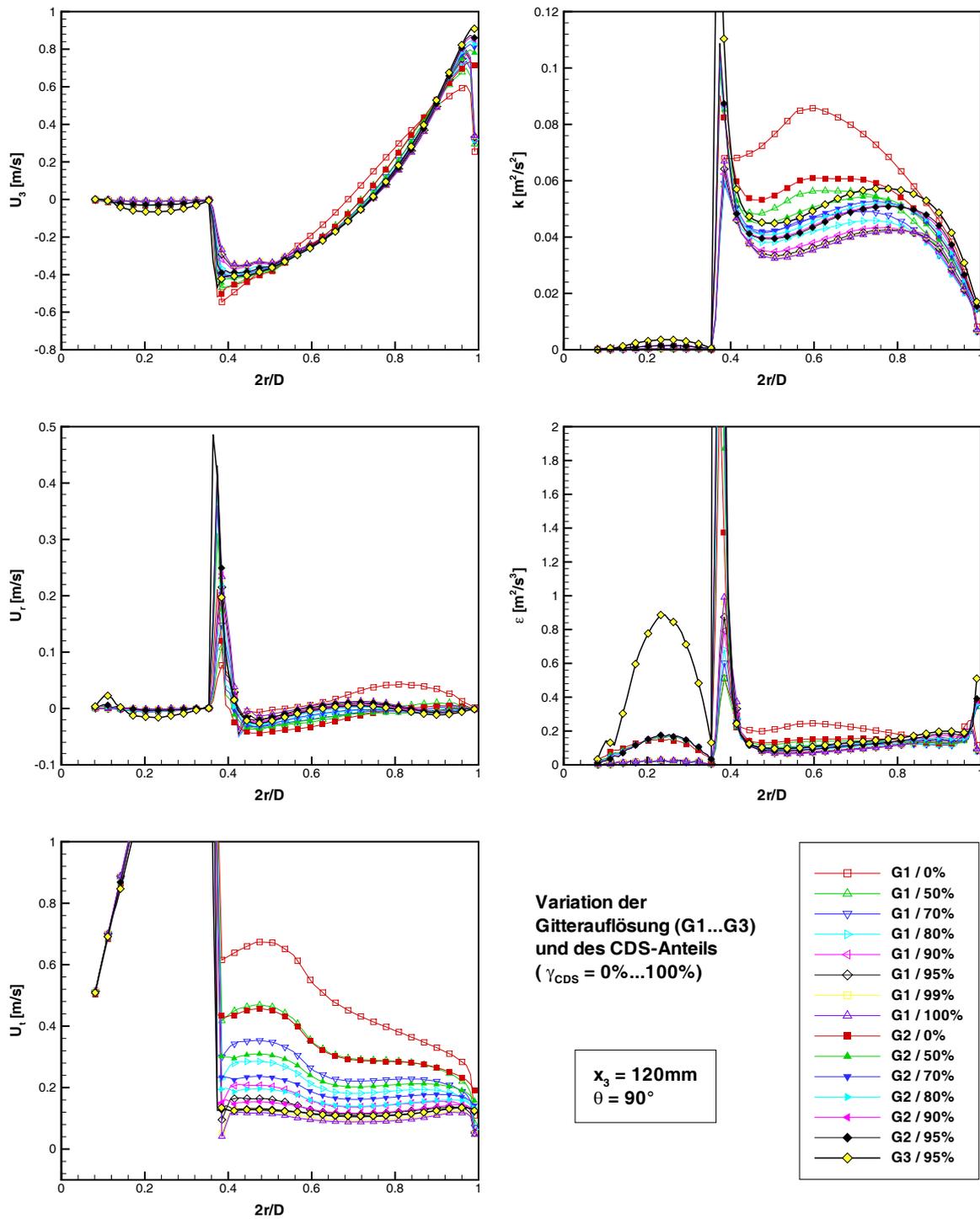


Abbildung 7.12: Fluideigenschaften auf radialen Profilen unter einem Winkel von $\theta = 90^\circ$ und in einer Höhe von $x_3 = 120\text{mm}$ (Variation der Gitterauflösung und des Gewichtungsfaktors γ_{CDS})

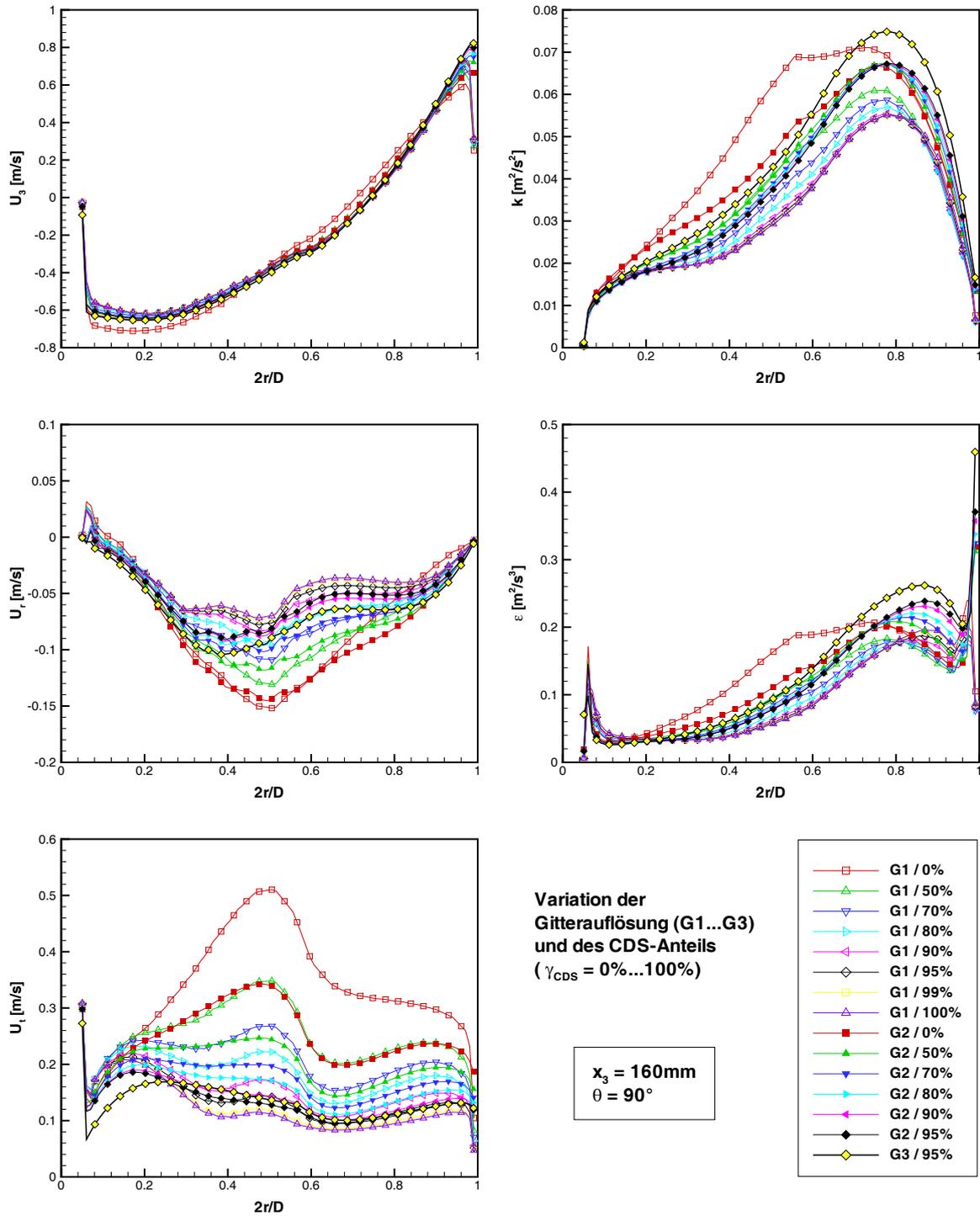


Abbildung 7.13: Fluideigenschaften auf radialen Profilen unter einem Winkel von $\theta = 90^\circ$ und in einer Höhe von $x_3 = 160\text{mm}$ (Variation der Gitterauflösung und des Gewichtungsfaktors γ_{CDS})

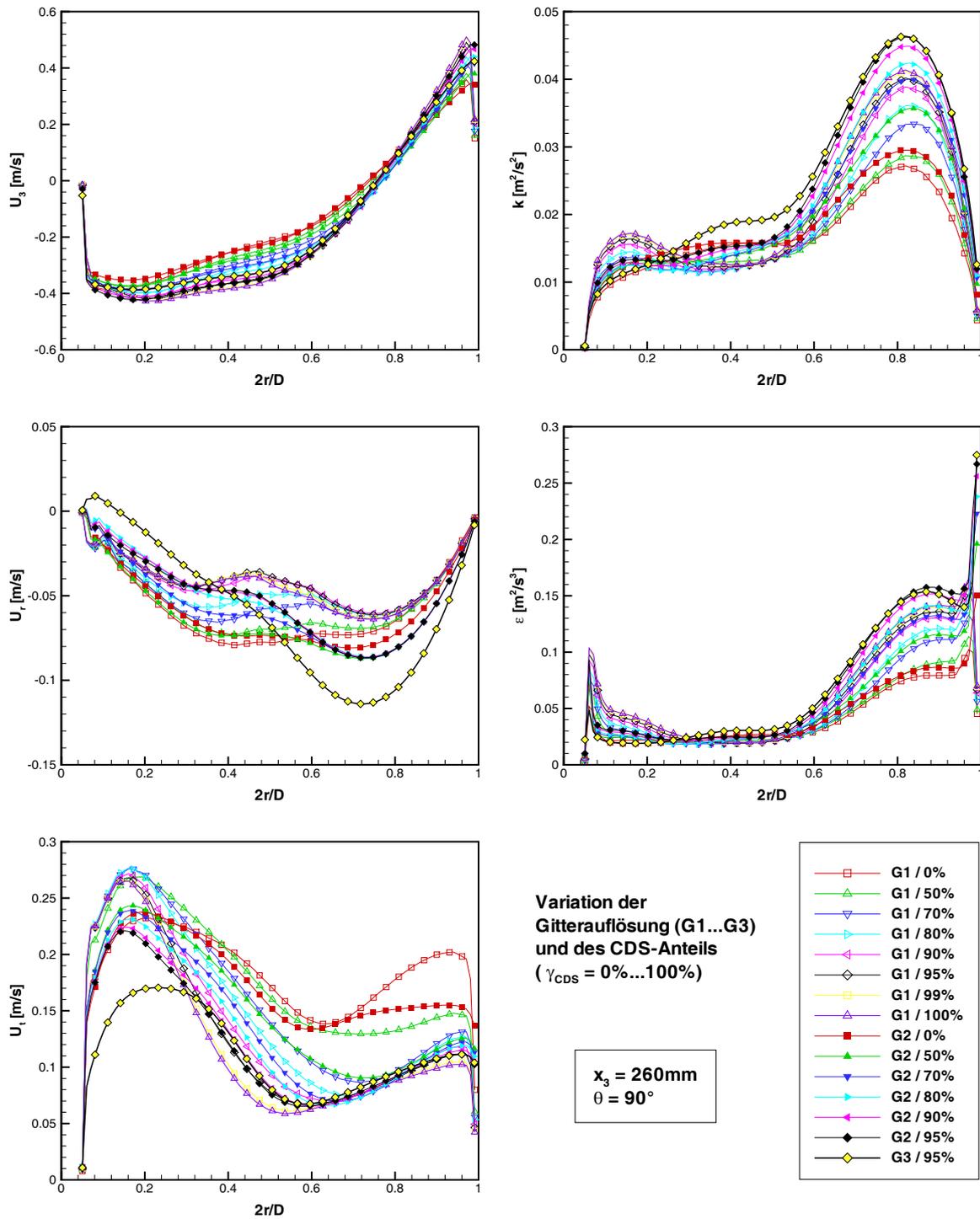


Abbildung 7.14: Fluideigenschaften auf radialen Profilen unter einem Winkel von $\theta = 90^\circ$ und in einer Höhe von $x_3 = 260\text{mm}$ (Variation der Gitterauflösung und des Gewichtungsfaktors γ_{CDS})

Bei der tangentialen Geschwindigkeitskomponente U_t liegt eine massive Abhängigkeit vom Gewichtungsfaktor γ_{CDS} vor. Praktisch über die gesamte Höhe des Rührbehälters werden bei kleinen γ_{CDS} -Werten für $r > 80$ mm viel zu hohe Tangentialgeschwindigkeiten berechnet. Durch eine Anhebung von γ_{CDS} reduziert sich die tangentiale Geschwindigkeitskomponente um bis zu 90% (s. Abbildungen 7.16-7.17). Auch in den Höhen $x_3 = 160$ mm und 260 mm ergeben sich bei kleinem γ_{CDS} noch zu hohe Tangentialgeschwindigkeiten. Die Ursache für die Überbewertung der tangentialen Geschwindigkeitskomponente im Fall von kleinen Gewichtungsfaktoren γ_{CDS} liegt bei der zu starken radialen Fortpflanzung des durch den Rührer eingebrachten Umfangsimpulses. Die Gitterauflösung hat, mit Ausnahme des Bereiches direkt unterhalb des Rührers, nur geringen Einfluss auf Geschwindigkeitsprofile der tangentialen Komponente.

Im Falle von turbulenter kinetischer Energie k und Dissipationsrate ε liegt eine starke Abhängigkeit sowohl vom Gewichtungsfaktor γ_{CDS} als auch von der Gitterauflösung vor⁶⁶. Beide Parameter beeinflussen sowohl die Form der Profile als auch die Ausprägung der Maximal- und Minimalwerte. Die Peak-Werte werden dabei umso größer, je höher γ_{CDS} und je besser die Gitterauflösung gewählt wird. In zunehmender Höhe x_3 wird die Variationsbreite geringer.

Es fällt auf, dass die Dissipationsrate ε in Abb. 7.12 bei einer Diskretisierung mit $\gamma_{CDS} = 0.95$ und der Gitterauflösung G3 im Bereich $r < 72$ mm, d.h. im Bereich des Rührorgans, erheblich höhere Werte annimmt als bei den anderen Fällen. Wegen der angenommenen Randbedingung für ε an Wänden, sollte in diesem Bereich bei allen dargestellten Fällen der Randbedingungswert $\varepsilon = 0 \text{ m}^2 \text{ s}^{-3}$ vorliegen, da die betrachteten Profile genau mit einem Rührerblatt zusammenfallen. Aufgrund der infinitesimalen Rührerblattstärke kommt es aber bei der Extraktion der Profile zu Ungenauigkeiten, so dass die Werte in unmittelbarer räumlicher Nachbarschaft bei der Profilbestimmung eingehen. Je besser die räumliche Auflösung an den Rührerblättern ist, d.h. je besser der steile Gradient von ε in Wandnähe aufgelöst wird, desto größere ε -Werte liegen in direkter Nachbarschaft vor und desto größere Ungenauigkeiten resultieren bei der Extraktion der Profile mit der vorliegenden Visualisierungssoftware. Der gleiche Effekt tritt in schwächerer Form auch bei den Geschwindigkeitskomponenten und der turbulenten kinetischen Energie auf. In den Abbildungen 7.21, 7.23, 7.24 und 7.26 ist dieses Phänomen ebenfalls zu beachten.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass für die einzelnen Fälle eine breite Streuung vorliegt, wobei der Gewichtungsfaktor γ_{CDS} einen sehr starken Einfluss sowohl auf die Form der Profile als auch auf die Ausprägung der Maxima und Minima hat. Die Gitterauflösung macht sich in erster Linie bei der Auflösung von Details und der Ausprägung der Profilverläufe bemerkbar. Die Profilform wird durch die Gitterauflösung deutlich weniger beeinflusst als durch die Variation von γ_{CDS} . Zur Verdeutlichung sind in den Abbildungen 7.15-7.18 nur die Profile bei Variation der Gitterauflösung und $\gamma_{CDS} = 0.95$ aufgetragen.

⁶⁶Wechsler et al. [343] haben bei der turbulenten kinetischen Energie k ebenfalls eine relativ starke Gitterabhängigkeit gefunden, wobei auch bei ihnen k prinzipiell eher zu klein berechnet wurde.

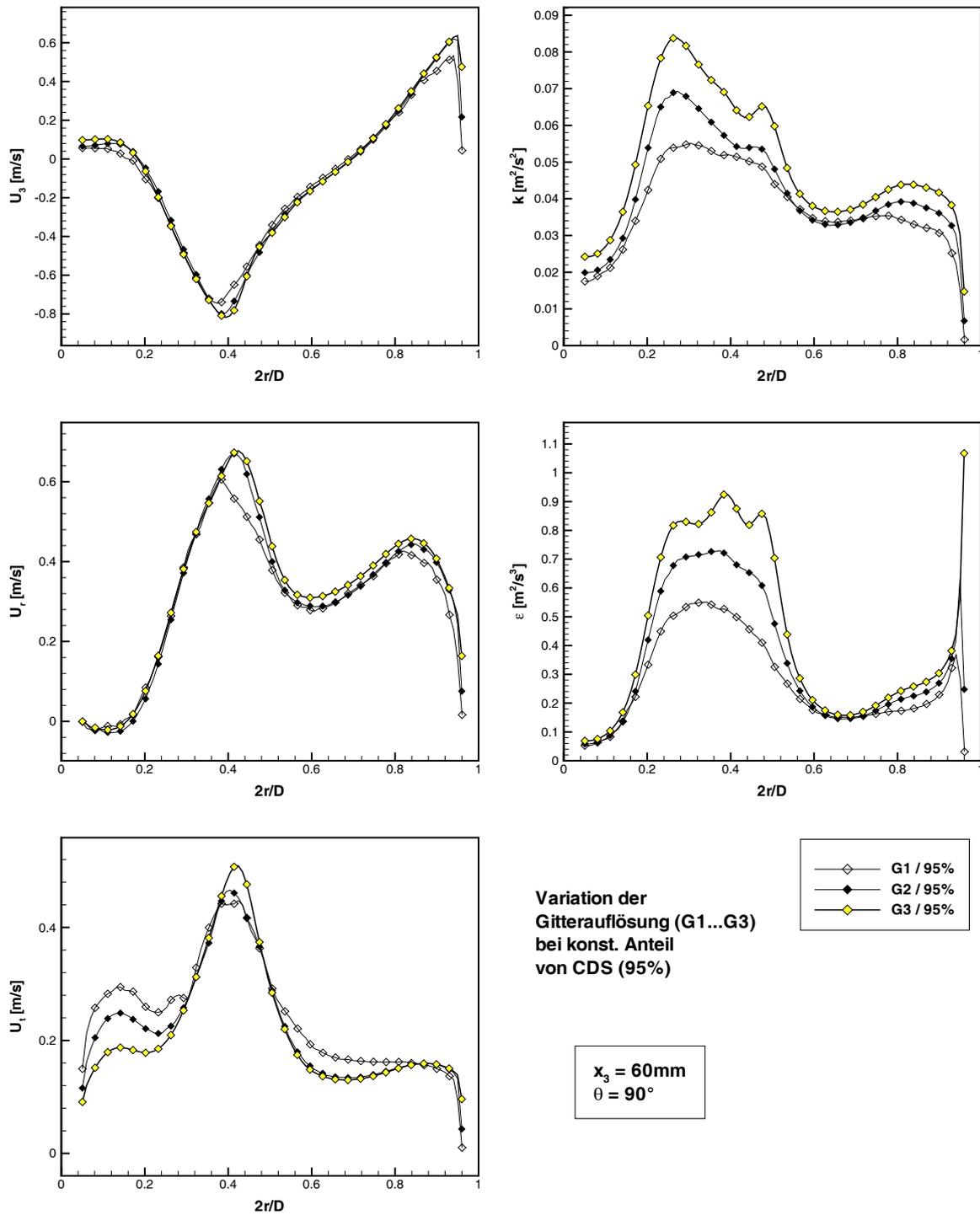


Abbildung 7.15: Fluidigenschaften auf radialen Profilen unter einem Winkel von $\theta = 90^\circ$ und in einer Höhe von $x_3 = 60\text{mm}$ bei konstantem Gewichtungsfaktor $\gamma_{CDS} = 0.95$ (Variation der Gitterauflösung)

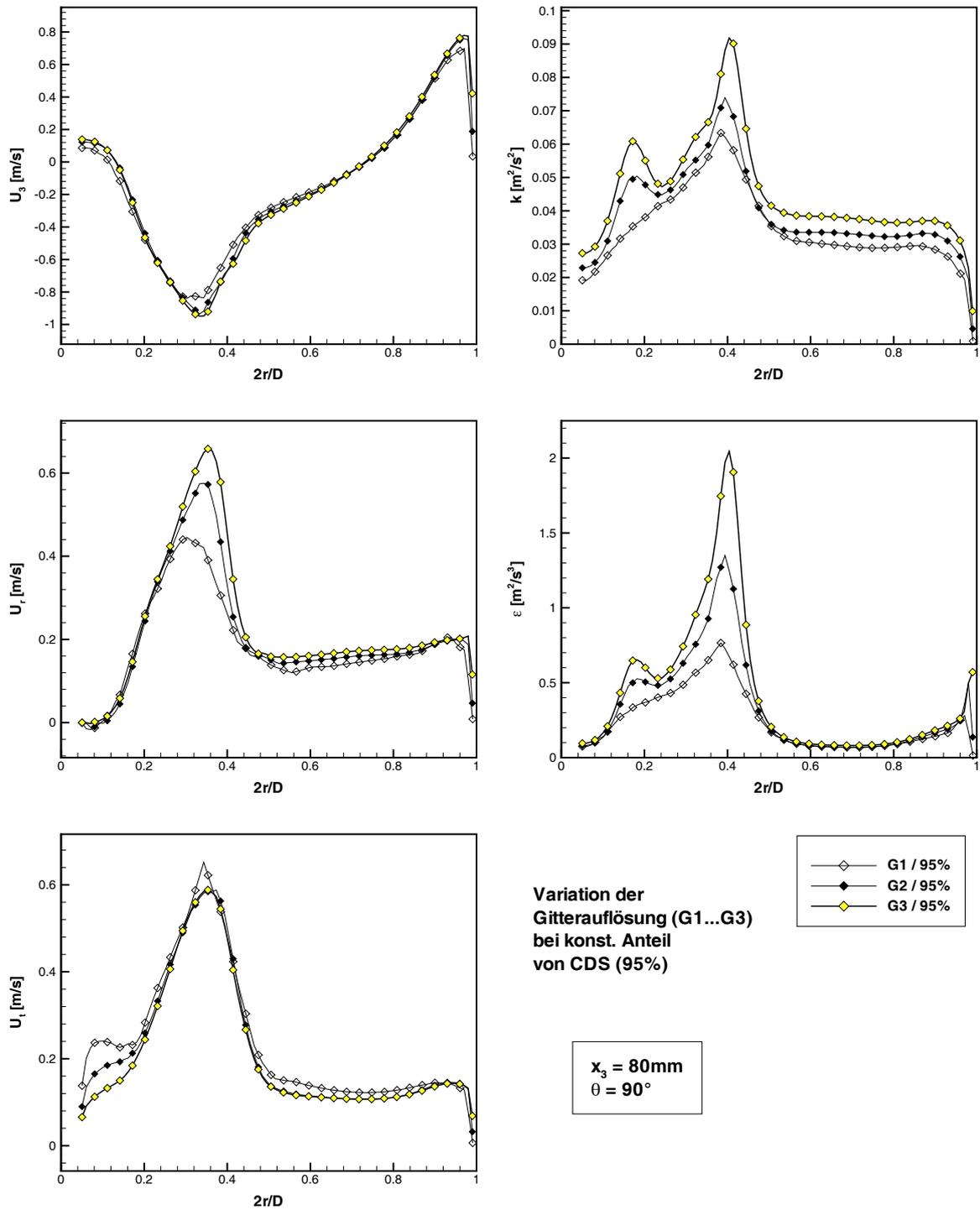


Abbildung 7.16: Fluideigenschaften auf radialen Profilen unter einem Winkel von $\theta = 90^\circ$ und in einer Höhe von $x_3 = 80\text{mm}$ bei konstantem Gewichtungsfaktor $\gamma_{CDS} = 0.95$ (Variation der Gitterauflösung)

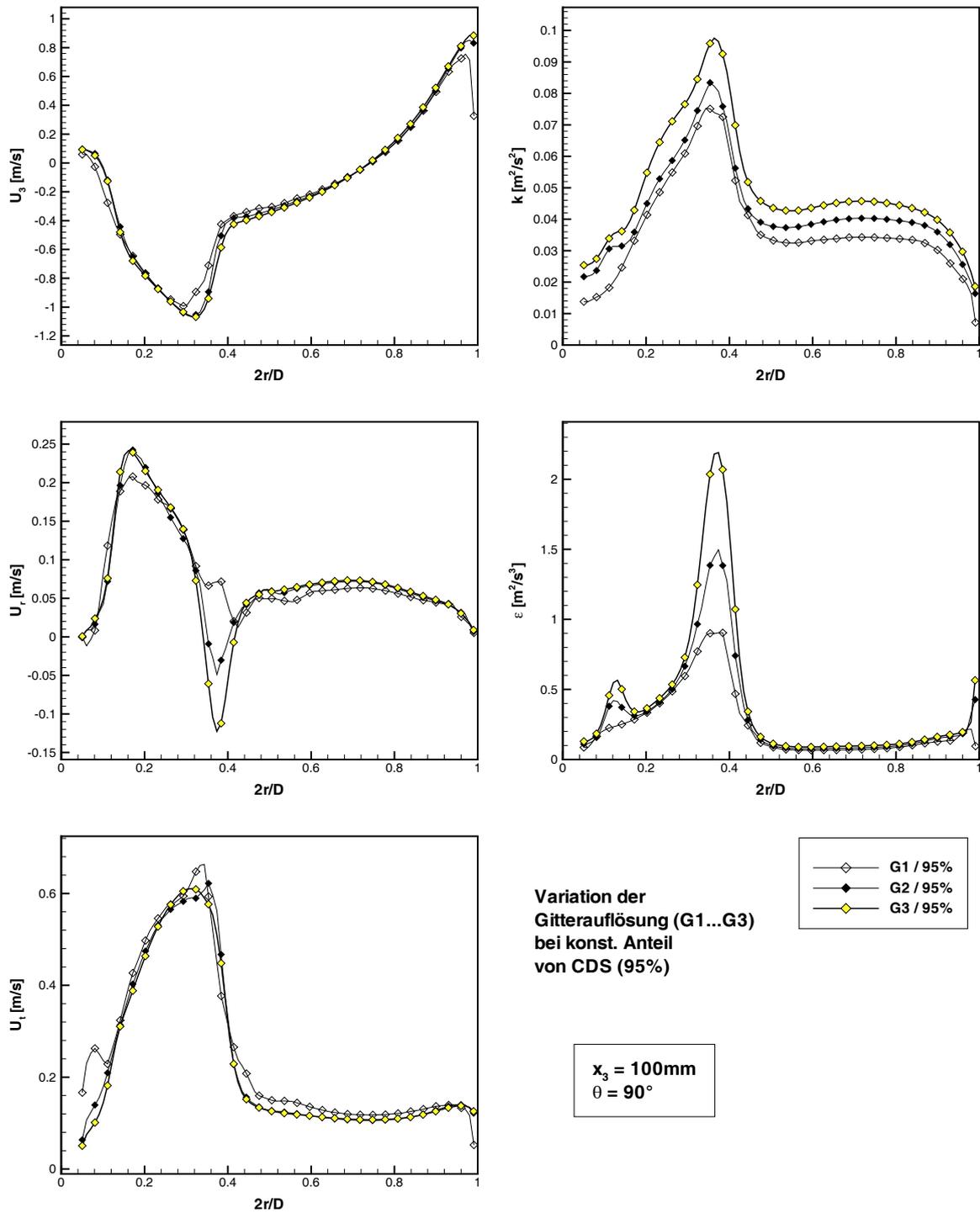


Abbildung 7.17: Fluideigenschaften auf radialen Profilen unter einem Winkel von $\theta = 90^\circ$ und in einer Höhe von $x_3 = 100\text{mm}$ bei konstantem Gewichtungsfaktor $\gamma_{CDS} = 0.95$ (Variation der Gitterauflösung)

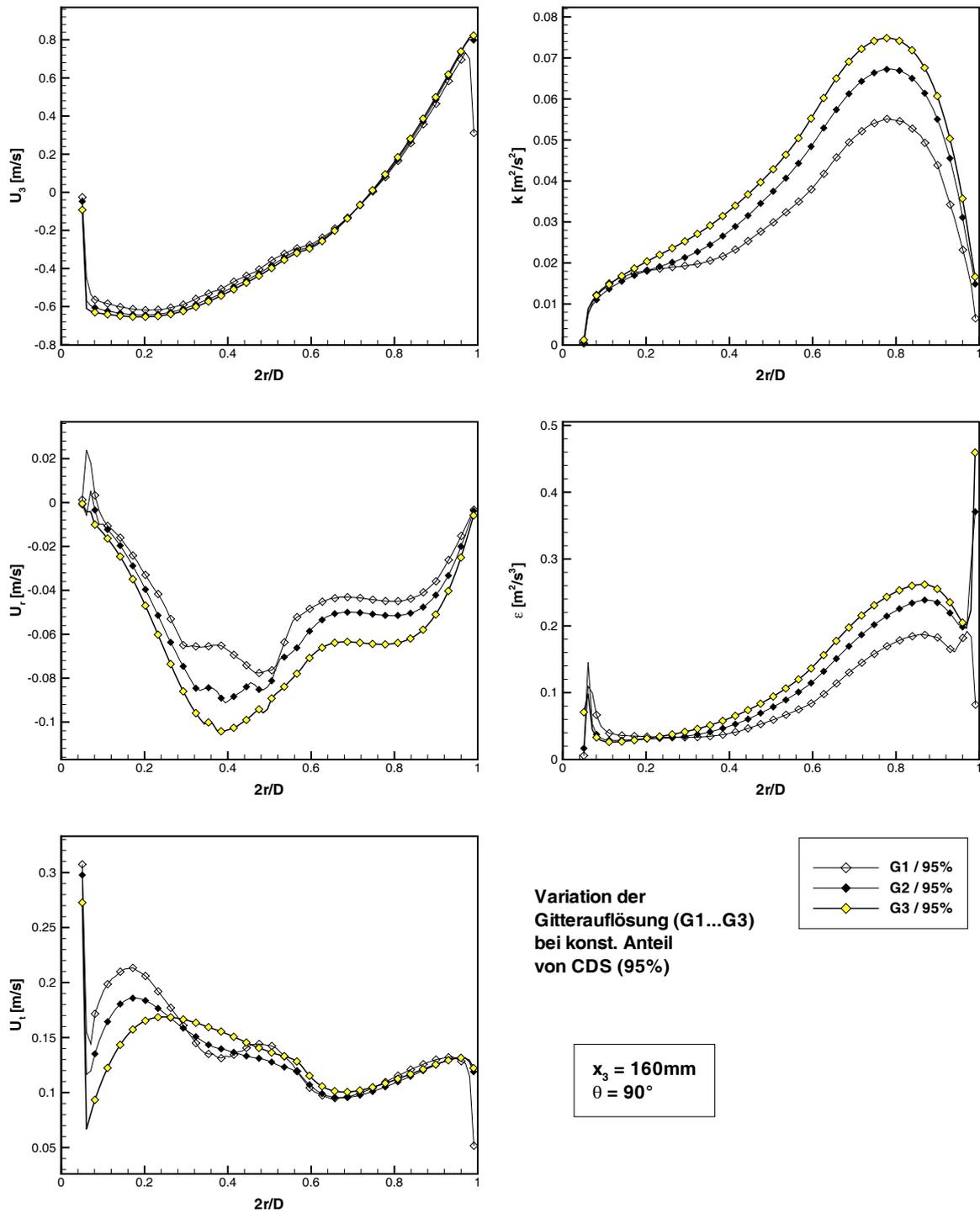


Abbildung 7.18: Fluideigenschaften auf radialen Profilen unter einem Winkel von $\theta = 90^\circ$ und in einer Höhe von $x_3 = 160\text{mm}$ bei konstantem Gewichtungsfaktor $\gamma_{CDS} = 0.95$ (Variation der Gitterauflösung)

Die Profile der vertikalen Geschwindigkeit U_3 stimmen, besonders für die Fälle G2 und G3, sehr gut überein und es liegt eine eher geringe Gitterabhängigkeit vor. Ähnlich verhält es sich bei der radialen Geschwindigkeitskomponente U_r . Allerdings sind noch deutliche Abweichungen zwischen G2 und G3 im Bereich der Rührerspitze (s. Abbildungen 7.16-7.17) festzuhalten. Hier kommt die höhere Detailauflösung bei G3 zum Tragen. Mit zunehmender Höhe wird das Niveau der Unterschiede dann immer kleiner. Auch bei der tangentialen Geschwindigkeit U_t ist eine Angleichung der Profile mit zunehmender Gitterauflösung festzustellen. Eine Ausnahme bildet der Bereich unterhalb der Rührernabe. Die detailreichen Wirbel in diesem Bereich können vermutlich erst mit hoher Anzahl an Gitterpunkten ausreichend aufgelöst werden.

Bei den turbulenten Größen k und ε zeigt sich im Gegensatz zu den Geschwindigkeitskomponenten U_3 , U_r und U_t beim Übergang von G2 nach G3 praktisch im gesamten betrachteten Höhenbereich noch keine Angleichung der Profile, so dass für diese Strömungsgrößen auch bei der höchsten betrachteten Gitterauflösung G3 noch keine Gitterunabhängigkeit angenommen werden kann. Besonders deutlich sind die Abweichungen bei der Dissipationsrate ε im Abstrombereich der Rührerspitzen (s. Abbildungen 7.16-7.17). Für Betrachtungen, bei denen die Dissipationsrate von zentraler Bedeutung ist (z.B. bei der Berechnung der Newtonzahl Ne durch Aufsummierung der Dissipationsrate im gesamten Rührbehälter), muss also für eine exakte Berechnung eine extrem hohe Gitterauflösung gewählt werden.

Generell ist noch zu bemerken, dass der Einfluss der Gitterauflösung auf die Strömungsgrößen im Bereich der Stromstörer im Vergleich zum Einfluss im Bereich der Rührerblätter deutlich geringer ausgeprägt ist.

In den folgenden Abbildungen 7.19-7.22 ist die Winkelabhängigkeit der Profile aufgetragen. Zusätzlich wurden zum Vergleich (wie auch in den Abbildungen 7.23-7.28) die entsprechenden umfangsgemittelten Profile der einzelnen Größen aufgetragen. Die Berechnung erfolgte dabei auf Basis von 144 radialen Profilen. Dies entspricht einer Winkelauflösung von 1.25° bzw. der maximal betrachteten Gitterauflösung G3, so dass die Mittelung mit Hilfe von Profilen einer integralen Mittelung entspricht und somit hinreichende Genauigkeit aufweist.

Bei den einzelnen Profilen wird die Periodizität von 60° in den rührernahen Bereichen bzw. von 90° in den durch die Stromstörer dominierten Bereichen an der Behälterwand sehr deutlich wiedergegeben. Die Winkelabhängigkeit der vertikalen Geschwindigkeitskomponente ist dabei im Gegensatz zu den radialen und tangentialen Komponenten im gesamten Höhenbereich relativ gering ausgeprägt. Die Ausnahme bilden erwartungsgemäß die Profile in Höhe des Rührers.

Deutlich zu erkennen ist das seitliche Ansaugen des Rührers in der Ebene $x_3 = 120$ mm, welches sich durch die negativen radialen Geschwindigkeiten bemerkbar macht. Dadurch entsteht auch ein Wirbel zwischen den Rührerblättern. Mit zunehmender Entfernung vom Rührer nimmt die periodische Schwankung rasch ab. So ist bereits in einer Entfernung von 40 mm (s. Abb. 7.19) stromab vom Rührer

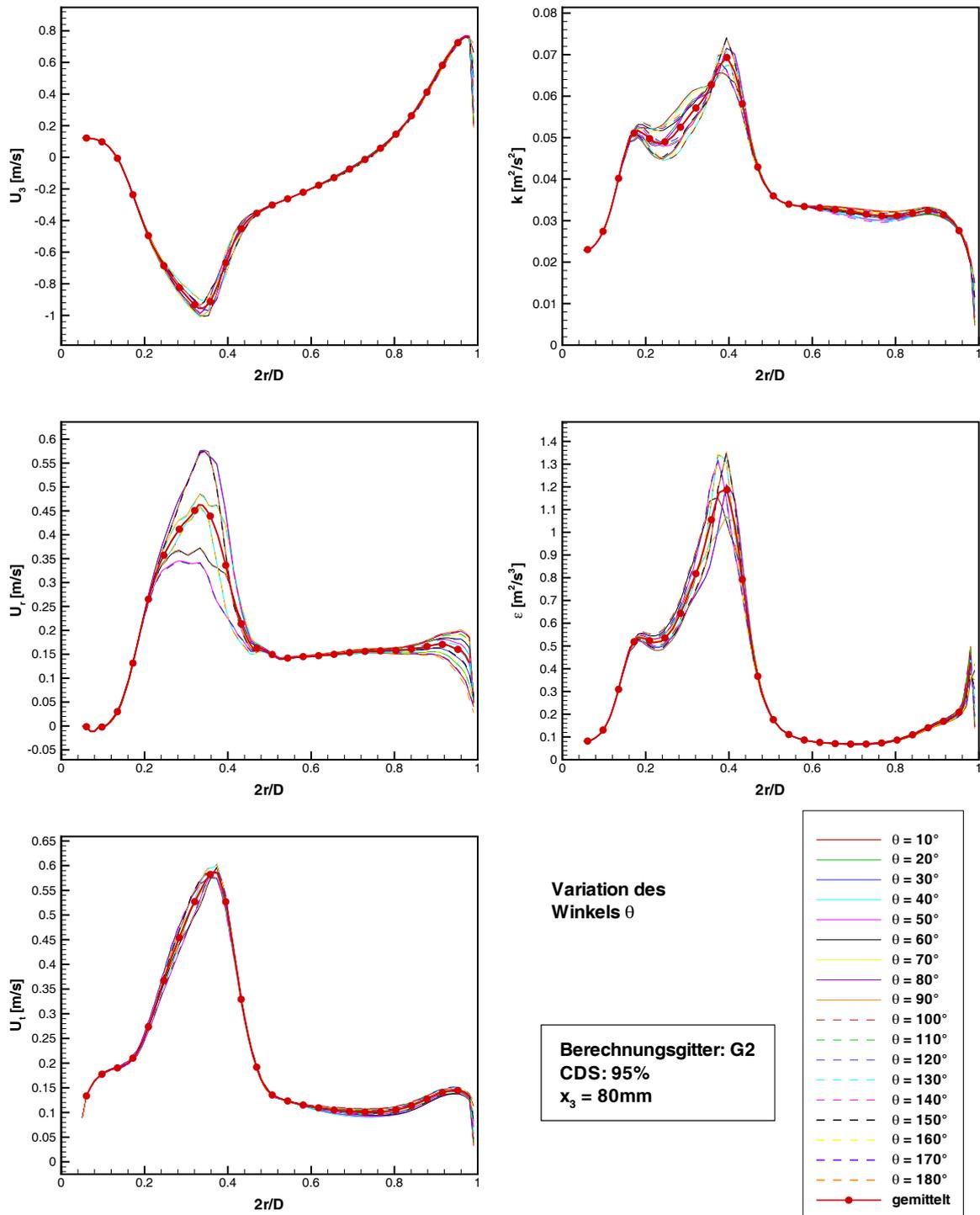


Abbildung 7.19: Fluideigenschaften auf radialen Profilen in einer Höhe von $x_3 = 80\text{ mm}$ bei Variation des Winkels θ und umfangsgemittelt (Gitterauflösung G2, Gewichtungsfaktor $\gamma_{CDS} = 0.95$)

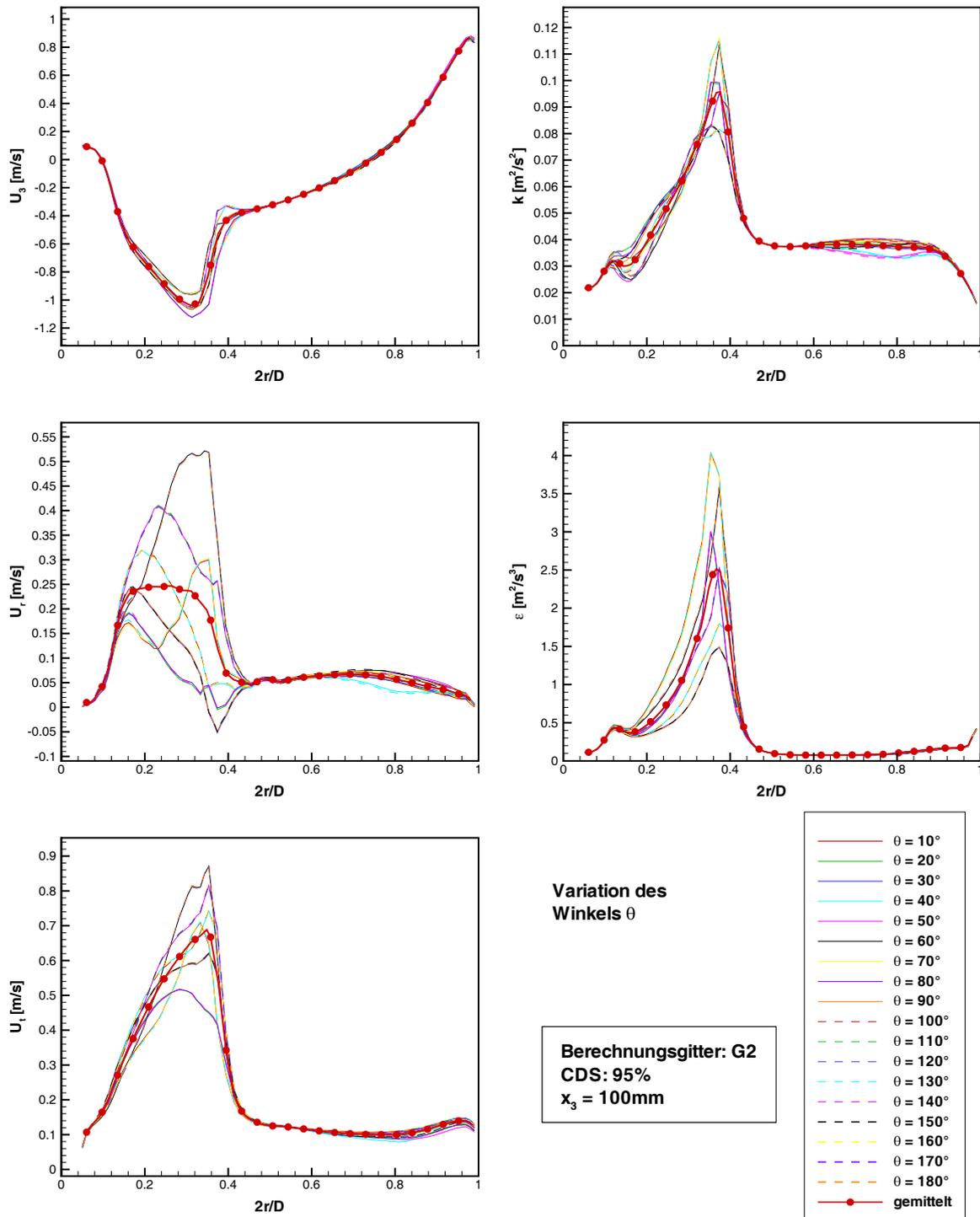


Abbildung 7.20: Fluideigenschaften auf radialen Profilen in einer Höhe von $x_3 = 100\text{mm}$ bei Variation des Winkels θ und umfangsgemittelt (Gitterauflösung G2, Gewichtungsfaktor $\gamma_{CDS} = 0.95$)

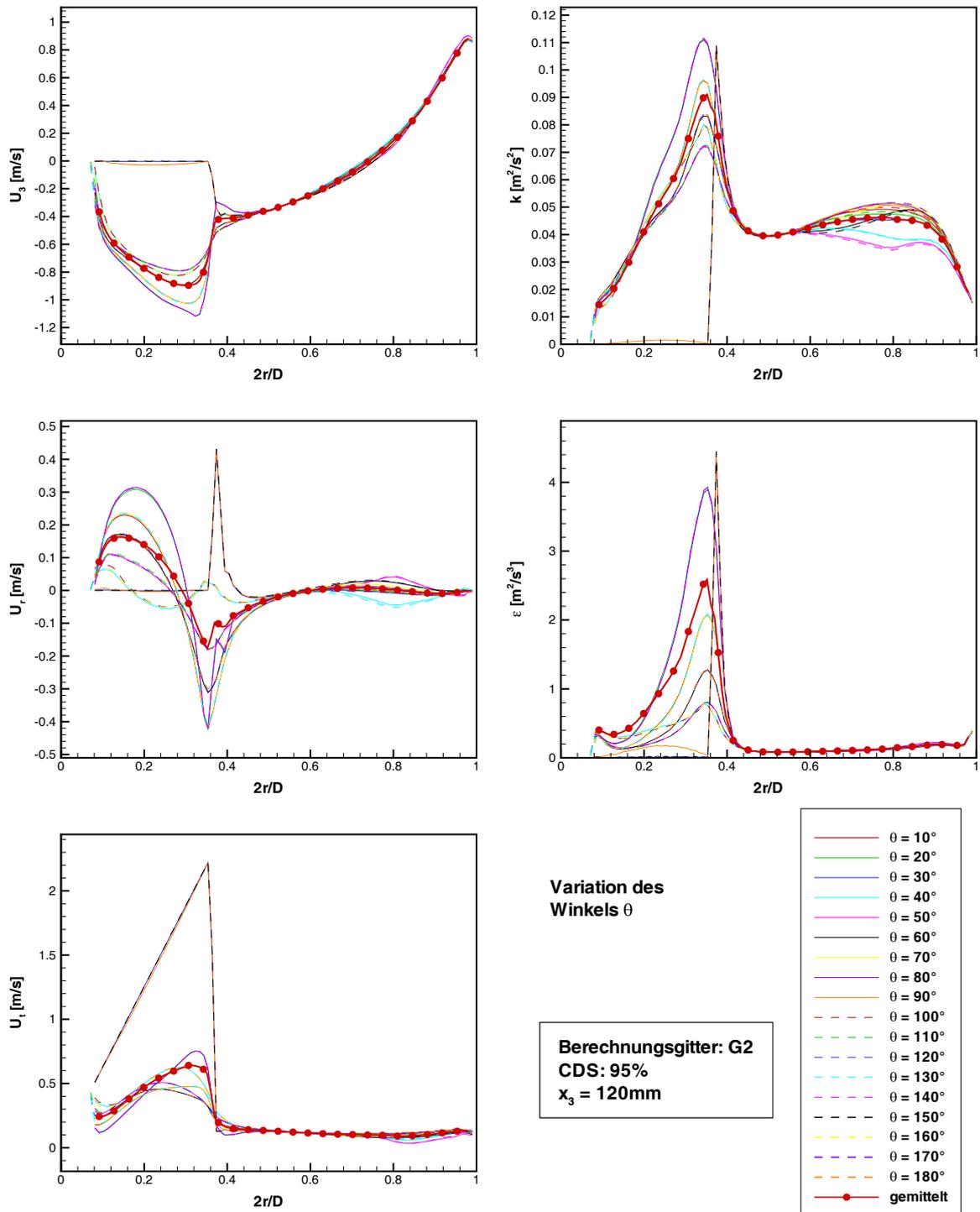


Abbildung 7.21: Fluideigenschaften auf radialen Profilen in einer Höhe von $x_3 = 120\text{mm}$ bei Variation des Winkels θ und umfangsgemittelt (Gitterauflösung G2, Gewichtungsfaktor $\gamma_{CDS} = 0.95$)

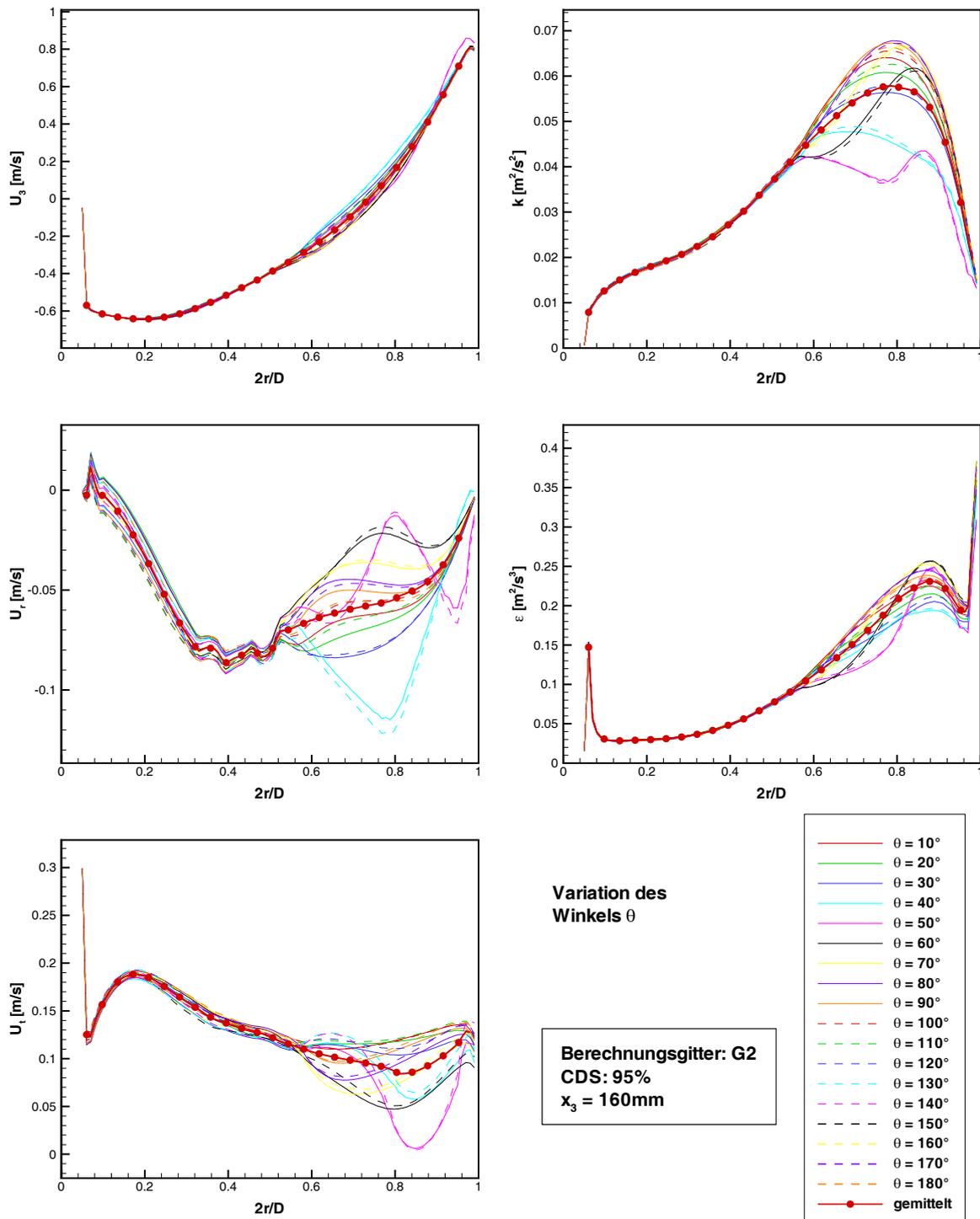


Abbildung 7.22: Fluideigenschaften auf radialen Profilen in einer Höhe von $x_3 = 160\text{mm}$ bei Variation des Winkels θ und umfangsgemittelt (Gitterauflösung G2, Gewichtungsfaktor $\gamma_{CDS} = 0.95$)

mit Ausnahme von geringen Schwankungen bei der radialen Geschwindigkeitskomponente nahezu keine rührerbedingte Profilabweichung mehr zu erkennen. Ähnlich verhält es sich oberhalb der Rührers. Die Stromstörer machen sich besonders bei der radialen und tangentialen Geschwindigkeitskomponente sowie der turbulenten kinetischen Energie bemerkbar (s. Abb. 7.22).

Da die im Folgenden dargestellten Messergebnisse nicht drehwinkelaufgelöst ermittelt wurden, muss ein Vergleich im Rührerbereich mit den umfangsgemittelten Profilen und in den anderen Bereichen (besonders in der Nähe der Behälterwand) mit den Profilen bei $\theta = 90^\circ$ vorgenommen werden. Aus den Messungen liegen Werte für die vertikale und die tangentiale Geschwindigkeitskomponente vor. Zum Vergleich der numerisch berechneten turbulenten kinetischen Energie k mit den experimentellen Ergebnissen wurde ein entsprechender Wert unter Annahme von Isotropie aus der Schwankungsgeschwindigkeit in axialer Richtung berechnet ($\frac{3}{2} \overline{u_3'^2}$) und in den Abbildungen 7.23-7.28 aufgetragen. Ein Vergleich ist aber nur sehr bedingt zulässig, da nur eine Richtungskomponente berücksichtigt wird und die Isotropieannahme sicher nicht erfüllt ist. Ferner sind in den experimentellen Schwankungsgeschwindigkeiten auch die periodischen Schwankungen durch die Rotationsbewegung des Rührers enthalten, welche bei der numerischen Berechnung von k implizit herausgefiltert werden. Die Schwankungen bei den Experimenten liegen daher deutlich höher.

In den Abbildungen 7.23-7.24 sind den experimentellen Ergebnissen die mit der Gitterauflösung G2 berechneten Profile (mit einem Gewichtungsfaktor von $\gamma_{CDS} = 0$ bzw. $\gamma_{CDS} = 0.95$) gegenübergestellt. Aufgetragen sind dabei alle Höhen ($x_3 = 60 \text{ mm}, 80 \text{ mm}, 100 \text{ mm}, 120 \text{ mm}, 160 \text{ mm}$ und 260 mm). Beim direkten Vergleich der beiden Abbildungen werden die Unzulänglichkeiten bei der Verwendung von zu kleinen Gewichtungsfaktoren γ_{CDS} verdeutlicht. Besonders bei der tangentialen Komponente U_t liegen die berechneten Profile erheblich über den gemessenen, da die Verwendung der UDS-Methode in einer Überschätzung von U_r und U_t in der Umgebung des Rührers führt. Mit einem Gewichtungsfaktor von $\gamma_{CDS} = 0.95$ erreicht man dagegen eine sehr gute Übereinstimmung der berechneten mit den gemessenen Profilen⁶⁷. Besonders im Rührerbereich wird die Strömung sehr gut wiedergegeben. Einzig die maximale vertikale Geschwindigkeit wird bei der Berechnung nicht ganz erreicht. In den höheren Bereichen des Rührbehälters kommt es zu leichten Verschiebungen der Profile, welche vermutlich durch Variationen in der Wirbelstruktur (deren Ursache beim verwendeten Turbulenzmodell zu suchen sein dürfte) begründet sind. Die aus den experimentellen Werten berechneten k -Werte liegen aufgrund der oben beschriebenen Gründe generell deutlich zu hoch.

In den Abbildungen 7.25-7.28 sind die gemessenen Profile noch einmal mit Berechnungen bei unterschiedlichen Gitterauflösungen verglichen.

⁶⁷Bei den folgenden Analysen kommt daher, sofern nicht anders vermerkt, ein Gewichtungsfaktor von $\gamma_{CDS} = 0.95$ zum Einsatz.

Im Gegensatz dazu verwendeten Luo et al. [187] lediglich einen Faktor von $\gamma_{CDS} = 0.6$ für die konvektiven Terme (ohne näher darauf einzugehen) und berichteten bereits von guten Ergebnissen. Tabor et al. [315] rechneten mit $\gamma_{CDS} = 0.8$ und begründeten dies ebenfalls nicht. Ihre transiente Berechnung lieferte eher zu hohe U_r - und U_t -Werte bei größeren Radien.

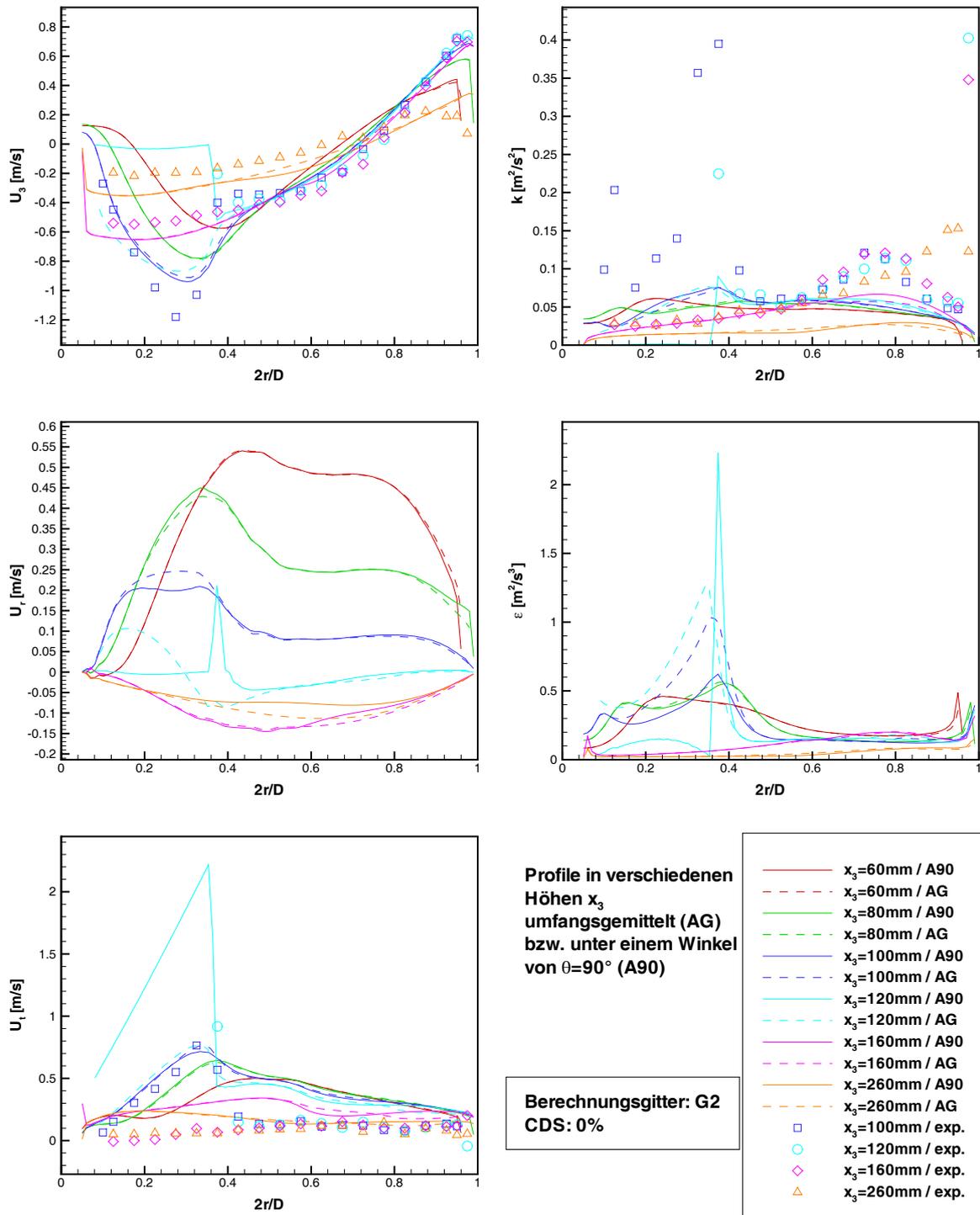


Abbildung 7.23: Berechnete und gemessene Fluideigenschaften auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) bei Variation der Höhe x_3 (Gitterauflösung G2, Gewichtungsfaktor $\gamma_{CDS} = 0$)

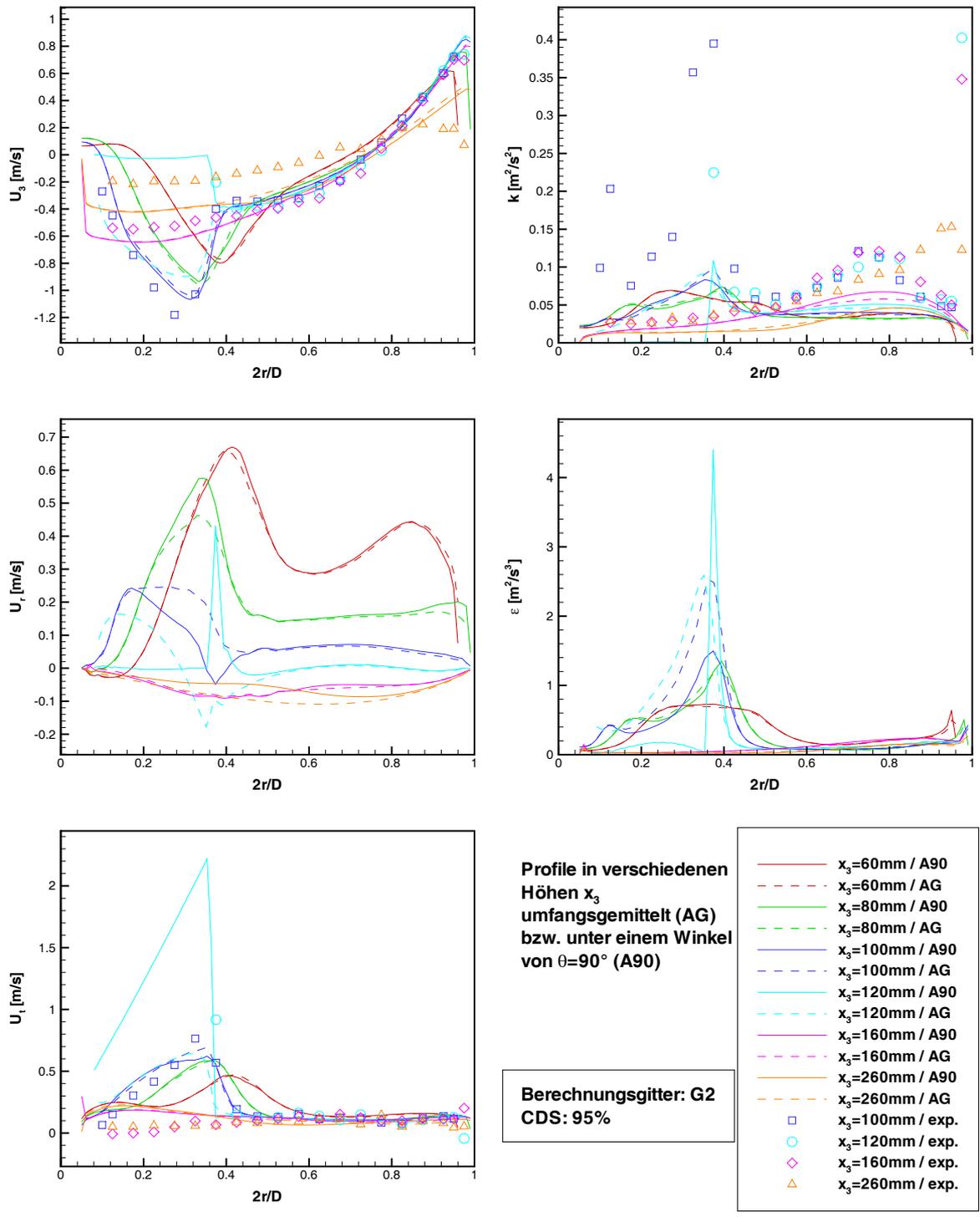


Abbildung 7.24: Berechnete und gemessene Fluideigenschaften auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) bei Variation der Höhe x_3 (Gitterauflösung G2, Gewichtungsfaktor $\gamma_{CDS} = 0.95$)

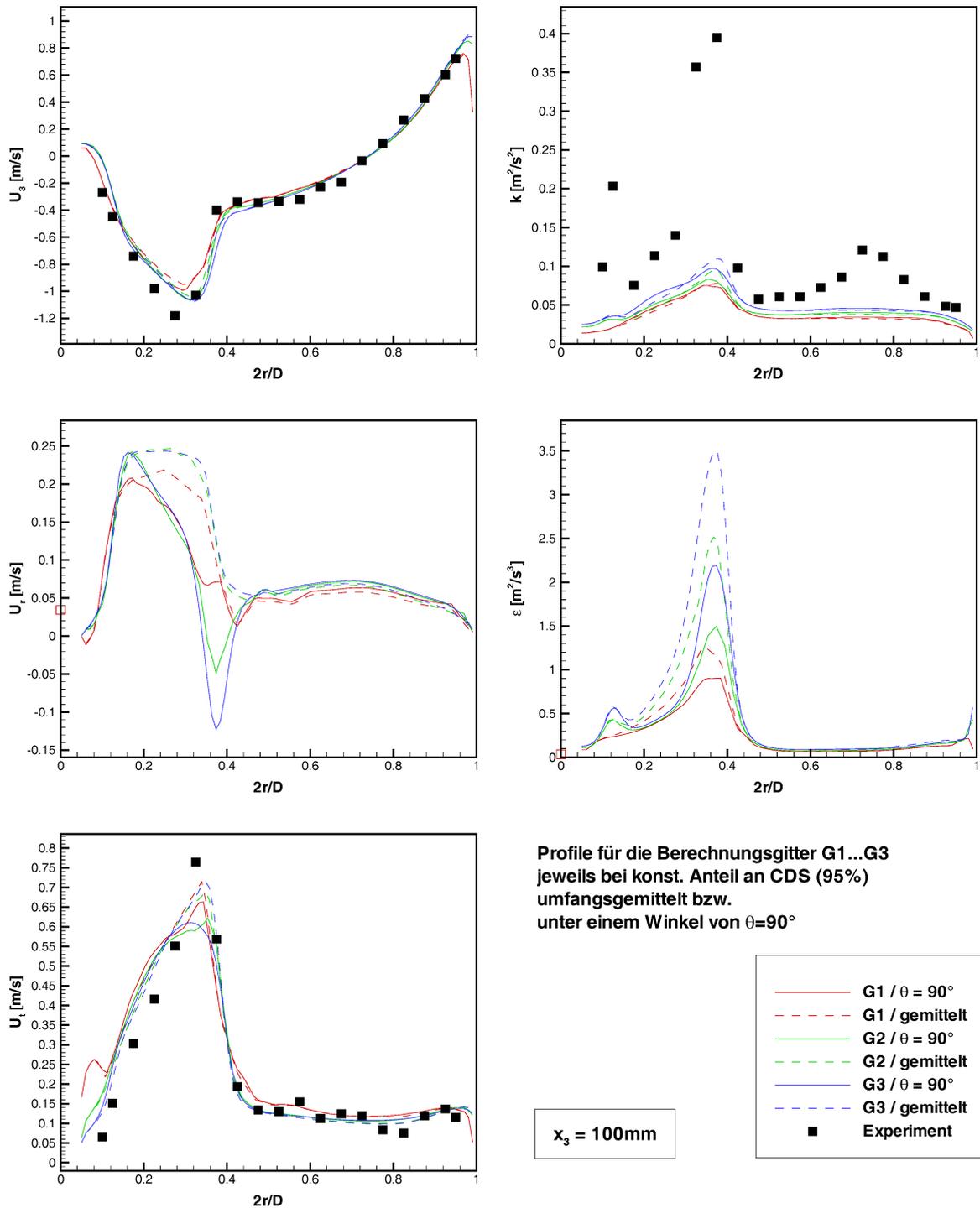


Abbildung 7.25: Berechnete und gemessene Fluideigenschaften auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) bei $x_3 = 100\text{mm}$ (Variation der Gitterauflösung, Gewichtungsfaktor $\gamma_{CDS} = 0.95$)

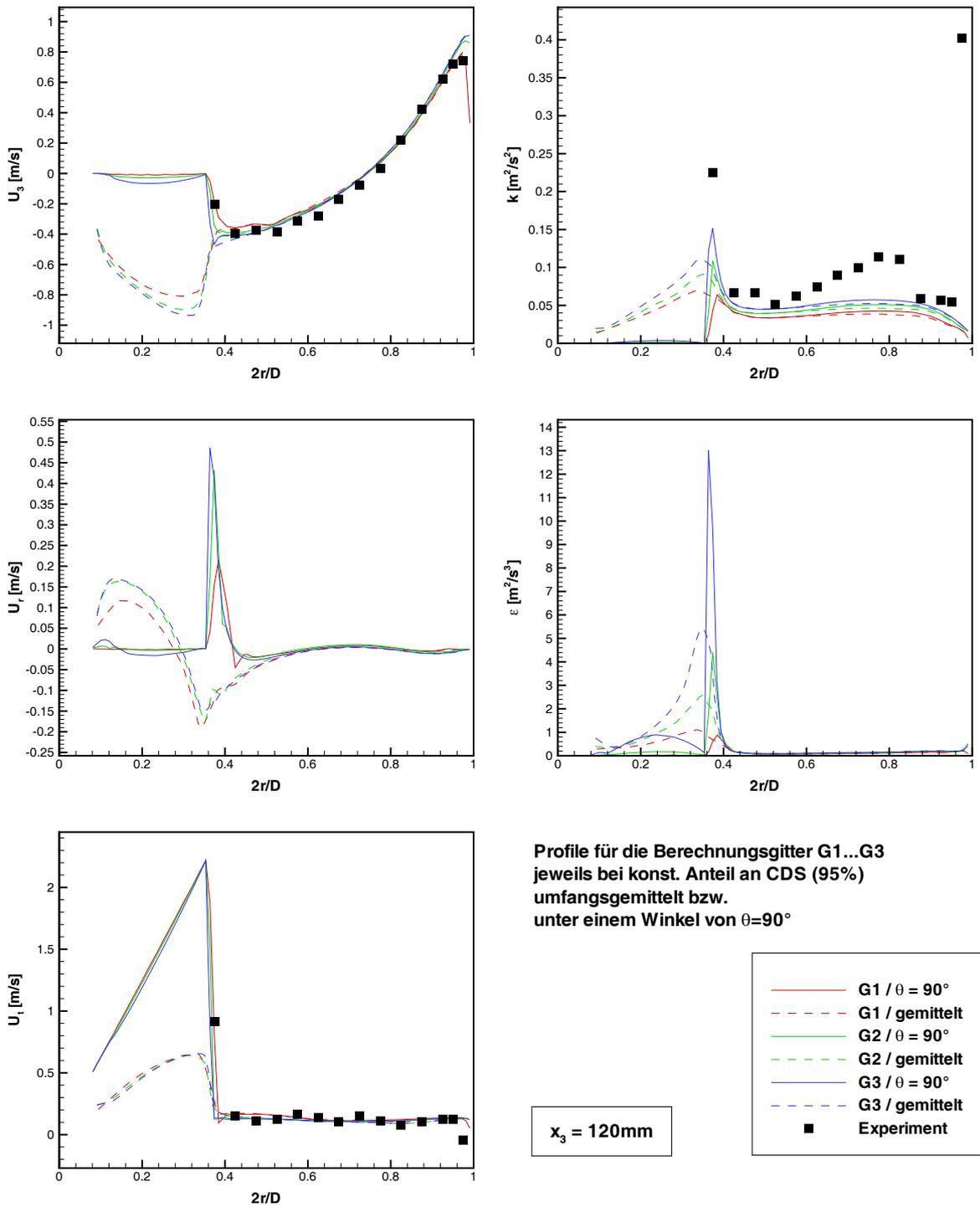


Abbildung 7.26: Berechnete und gemessene Fluideigenschaften auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) bei $x_3 = 120\text{mm}$ (Variation der Gitterauflösung, Gewichtungsfaktor $\gamma_{CDS} = 0.95$)

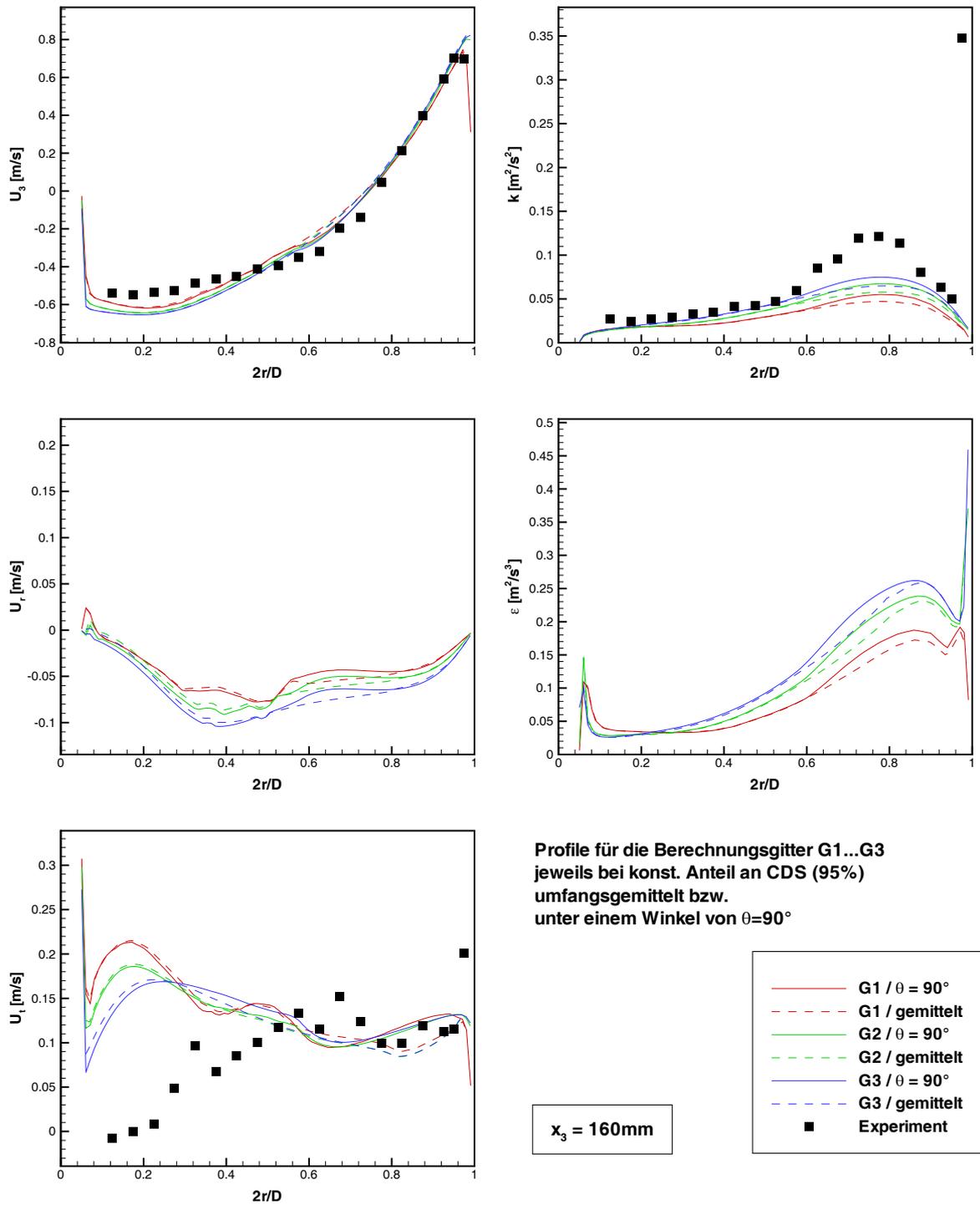


Abbildung 7.27: Berechnete und gemessene Fluideigenschaften auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) bei $x_3 = 160\text{mm}$ (Variation der Gitterauflösung, Gewichtungsfaktor $\gamma_{CDS} = 0.95$)

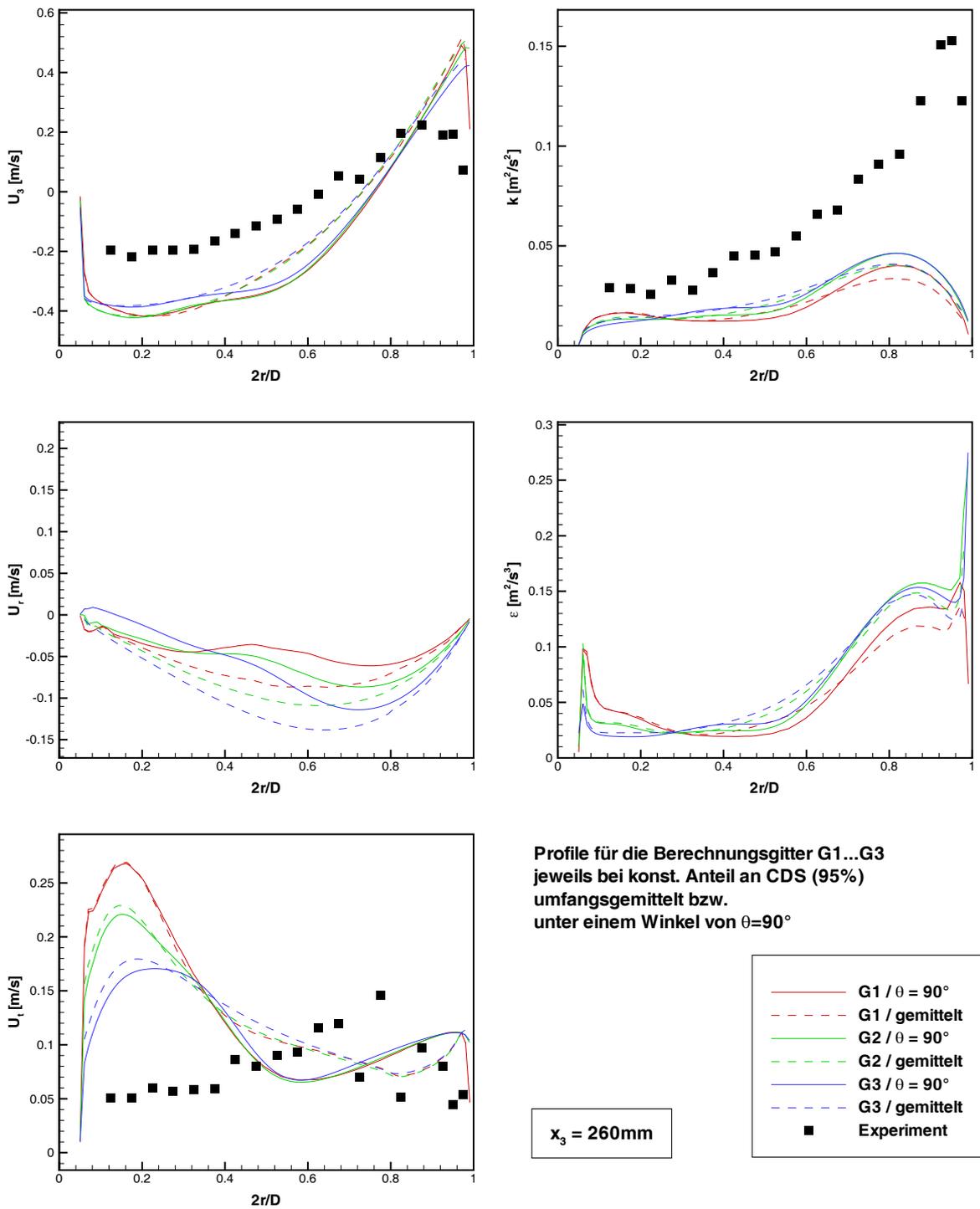


Abbildung 7.28: Berechnete und gemessene Fluideigenschaften auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) bei $x_3 = 260\text{mm}$ (Variation der Gitterauflösung, Gewichtungsfaktor $\gamma_{CDS} = 0.95$)

7.8 Visualisierung der Strömung

Für die grafische Darstellung der globalen Strömung im Rührkessel hat sich die Verwendung von Vektorgrafiken etabliert, da dadurch die Ausformung der Strömung im Rührkessel gut wiedergegeben werden kann. Beispielhaft sind in Abb. 7.29 für den Fall mit Berechnungsgitter G1 ($\gamma_{CDS} = 0.95$) die Geschwindigkeitsvektoren in einer vertikalen Schnittebene bei $\theta = 90^\circ$ und einer horizontalen Schnittebene durch die Rührermitte, d.h. bei $x_3 = 120 \mu\text{m}$, aufgetragen. Die Vektoren sind dabei mit konstanter Länge dargestellt (der Betrag der Geschwindigkeit ist über die Farbcodierung gegeben), so dass verkürzte Vektoren nur durch eine Strömung in oder aus der Zeichnungsebene entstehen können. Deutlich zu erkennen sind die für Rührkessel typischen großräumigen Wirbelstrukturen (ein großer Ringwirbel zwischen Rührer und Behälterwand sowie ein kleinerer Wirbel unterhalb des Rührorgans).

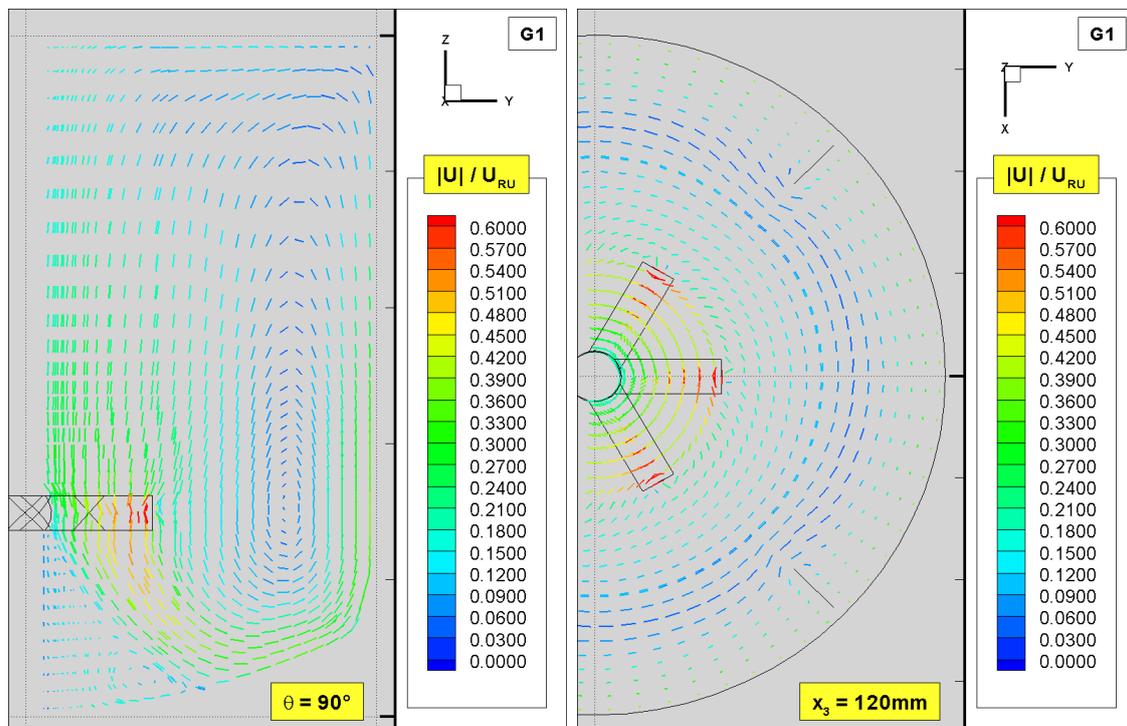


Abbildung 7.29: Geschwindigkeitsvektoren für den Fall mit Berechnungsgitter G1; vertikale Schnittebene bei $\theta = 90^\circ$ (links) und horizontale Schnittebene durch die Rührermitte, d.h. bei $x_3 = 120 \text{ mm}$ (rechts)

Es ist leicht nachvollziehbar, dass bei zunehmender Auflösung die Darstellung schnell unübersichtlich wird, so dass eine Datenreduktion unausweichlich wird. Auch ein Vergleich verschiedener Strömungsfälle ist mit der Darstellung von Vektoren nur bedingt möglich.

Zur Verbesserung der räumlichen Erfassung der Strömung eignet sich die dreidimensionale Darstellung der Geschwindigkeitsvektoren. In Abb. 7.30 wurde im Vergleich zu Abb. 7.29 lediglich die Perspektive variiert und der Gesamteindruck dadurch deutlich plastischer.

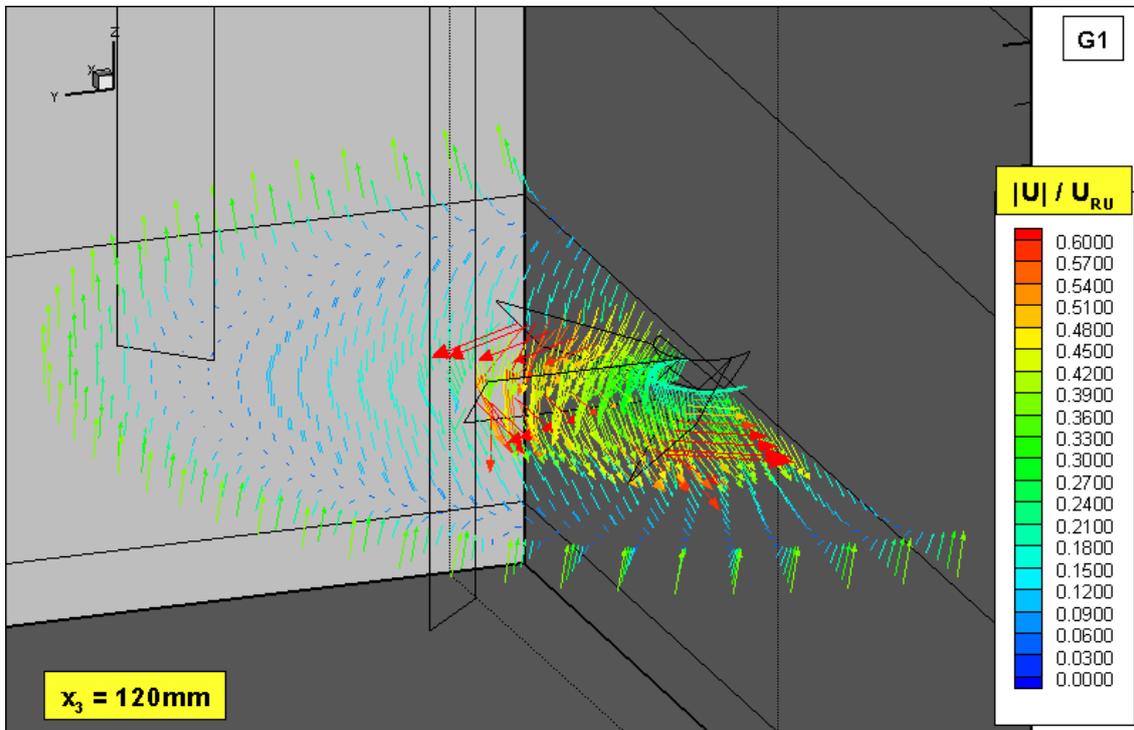


Abbildung 7.30: Dreidimensionale Geschwindigkeitsvektoren für den Fall mit Berechnungsgitter G1; horizontale Schnittebene durch die Rührermitte, d.h. bei $x_3 = 120$ mm

Insgesamt sind aber bei Vektordarstellungen Detailinformationen zur Strömung nur schwer zu erfassen, so dass auf jeden Fall ergänzende Darstellungen nötig sind, um die Strömung hinreichend zu analysieren.

In den Abbildungen 7.31 und 7.32 sind die verschiedenen Fluideigenschaften in vertikalen und horizontalen Schnittebenen (ebenfalls bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 120$ mm) für Berechnungsgitter G2 ($\gamma_{CDS} = 0.95$) als Konturdarstellungen aufgetragen⁶⁸. Die Normierung der Fluideigenschaften erfolgte dabei (wie auch in den weiteren dargestellten Fällen) entsprechend Tab. 7.4. Eine ergänzende Vergleichsdarstellung für die verschiedenen Berechnungsgitter G1, G2 und G3 befindet sich in Abschnitt A.5. Analoge Abbildungen kommen auch in den folgenden Abschnitten für verschiedenste Untersuchungen zum Einsatz (s. z.B. Abschnitt 7.10 für die Bewertung der lokalen

⁶⁸Eine Analyse der Bedeutung der einzelnen Geschwindigkeitskomponenten des Fluids in den verschiedenen Bereichen des Rührkessels ist in Abschnitt A.4 zusammengestellt.

Stokeszahl und Abschnitt 7.12 für die Fehlerabschätzung durch die Betrachtung repräsentativer Teilchen).

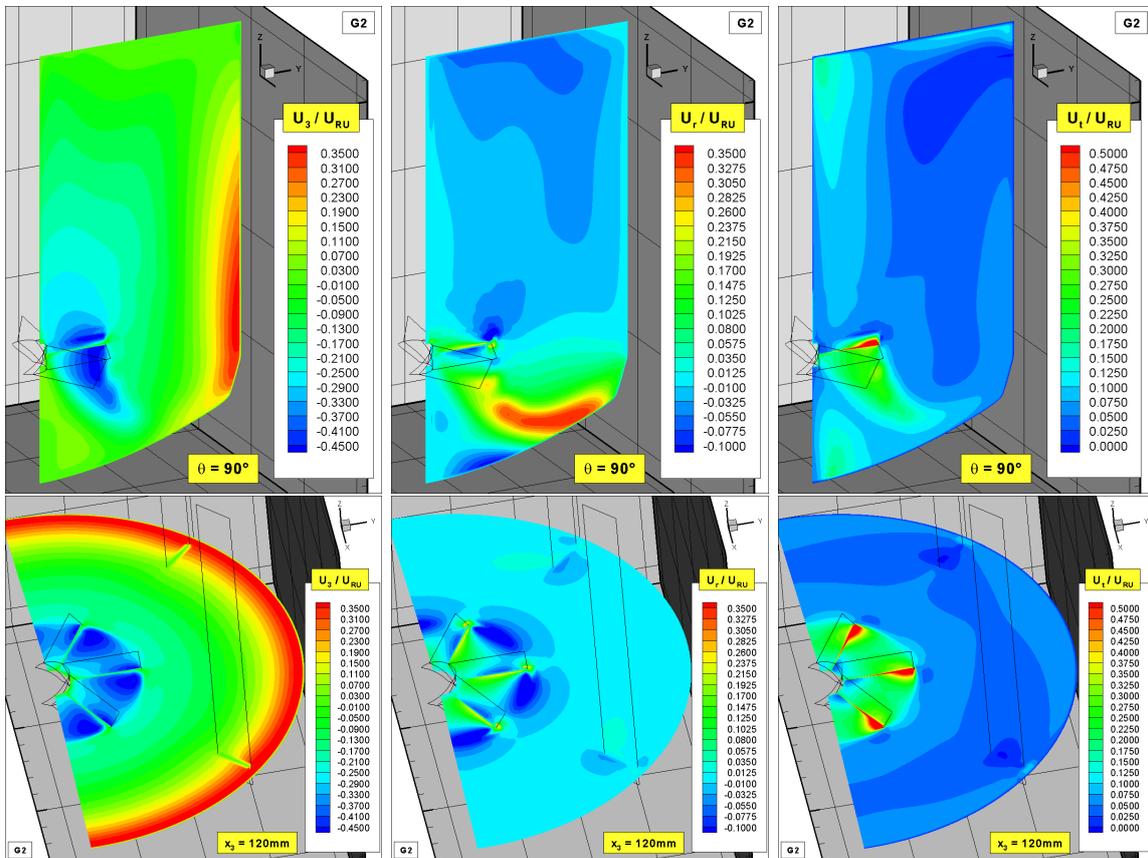


Abbildung 7.31: Räumliche Verteilung der normierten Geschwindigkeitskomponenten für den Fall mit Berechnungsgitter G2; Schnittebenen bei $\theta = 90^\circ$ (oben) und $x_3 = 120 \text{ mm}$ (unten)

Die Nachlaufwirbel hinter den Rührerblättern lassen sich grob durch die Darstellung der absoluten Geschwindigkeit bei $r = 70 \text{ mm}$, d.h. im Bereich der Rührerspitzen, visualisieren (s. Abb. 7.33).

Da sich die Gitterabhängigkeit besonders stark bei den turbulenten Eigenschaften widerspiegelt, sind in Abb. 7.34 Isoflächen bei $k/U_{RU}^2 = 0.02$ für die drei betrachteten Berechnungsgitter (s. Abschnitt 7.4) zusammengestellt. Dadurch werden die Bereiche hoher turbulenter kinetischer Energie im Bereich des Rührers visualisiert und die Vergrößerung der Bereiche mit steigender Gitterauflösung verdeutlicht (vgl. Profildarstellungen in Abschnitt 7.7).

Wie bereits in den vorausgegangenen Abbildungen deutlich wurde, liegen die Bereiche maximaler Geschwindigkeit, wie auch maximaler turbulenter kinetischer Energie und Energiedissipation, in der direkten Umgebung der Rührerblätter. Dieser Bereich

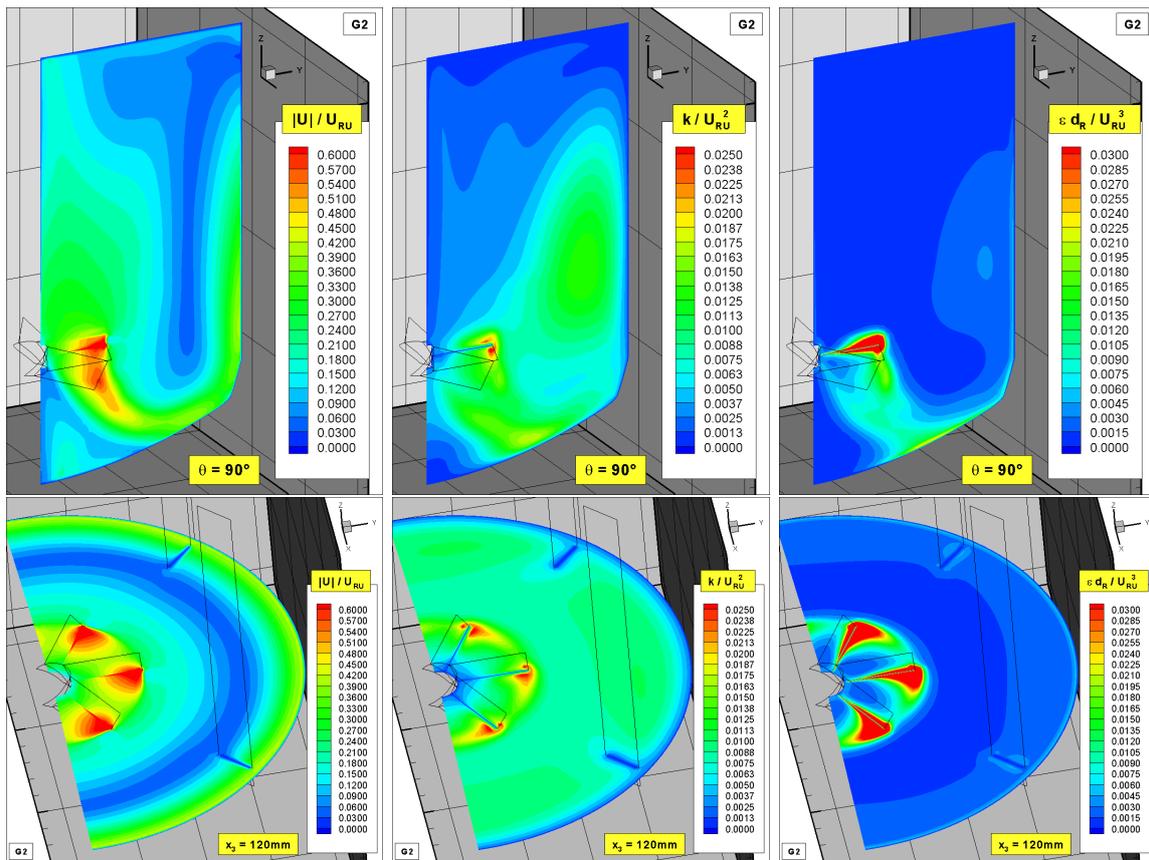


Abbildung 7.32: Räumliche Verteilung der absoluten Geschwindigkeit, der turbulenten kinetischen Energie sowie der Dissipationsrate (jeweils normiert) für den Fall mit Berechnungsgitter G2; Schnittebenen bei $\theta = 90^\circ$ (oben) und $x_3 = 120\text{ mm}$ (unten)

ist daher von zentraler Bedeutung für die gesamte Strömung im Rührkessel, so dass in Abb. 7.35 verschiedene Isoflächen für die absolute Geschwindigkeit, die turbulente kinetische Energie und die Energiedissipation (jeweils normiert) dargestellt wurden (Berechnungsgitter G3, $\gamma_{CDS} = 0.95$). Die höchsten Werte dieser Variablen finden sich in allen drei Fällen an der Rückseite der oberen Rührerblattspitzen. Stark erhöhte Werte liegen auch im Nachlauf der Rührerblätter vor.

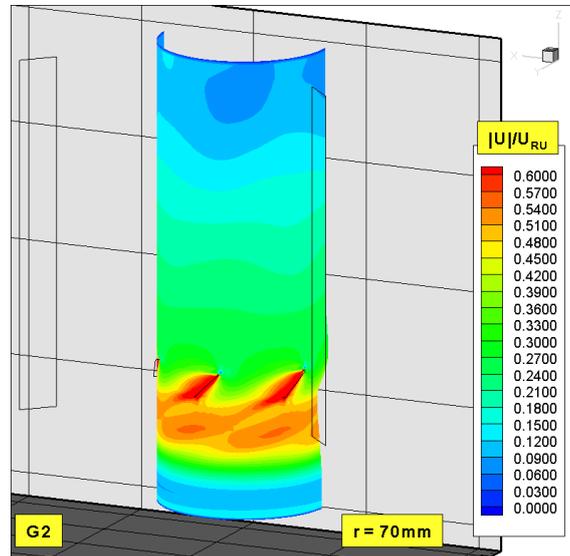


Abbildung 7.33: Räumliche Verteilung der normierten absoluten Geschwindigkeit bei $r = 70 \text{ mm}$

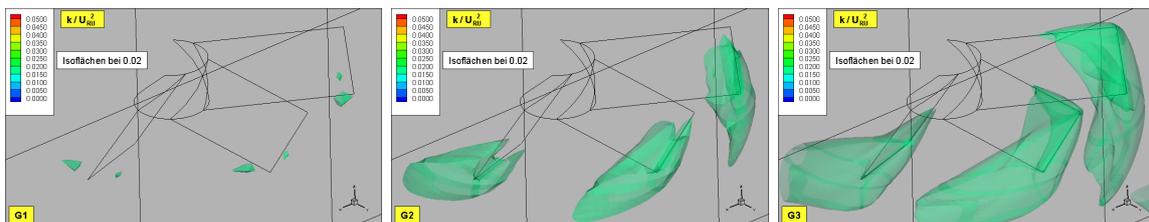


Abbildung 7.34: Isoflächen der normierten turbulenten kinetischen Energie ($k/U_{RU}^2 = 0.02$) für die drei betrachteten Berechnungsgitter G1 (links), G2 (mitte) und G3 (rechts)

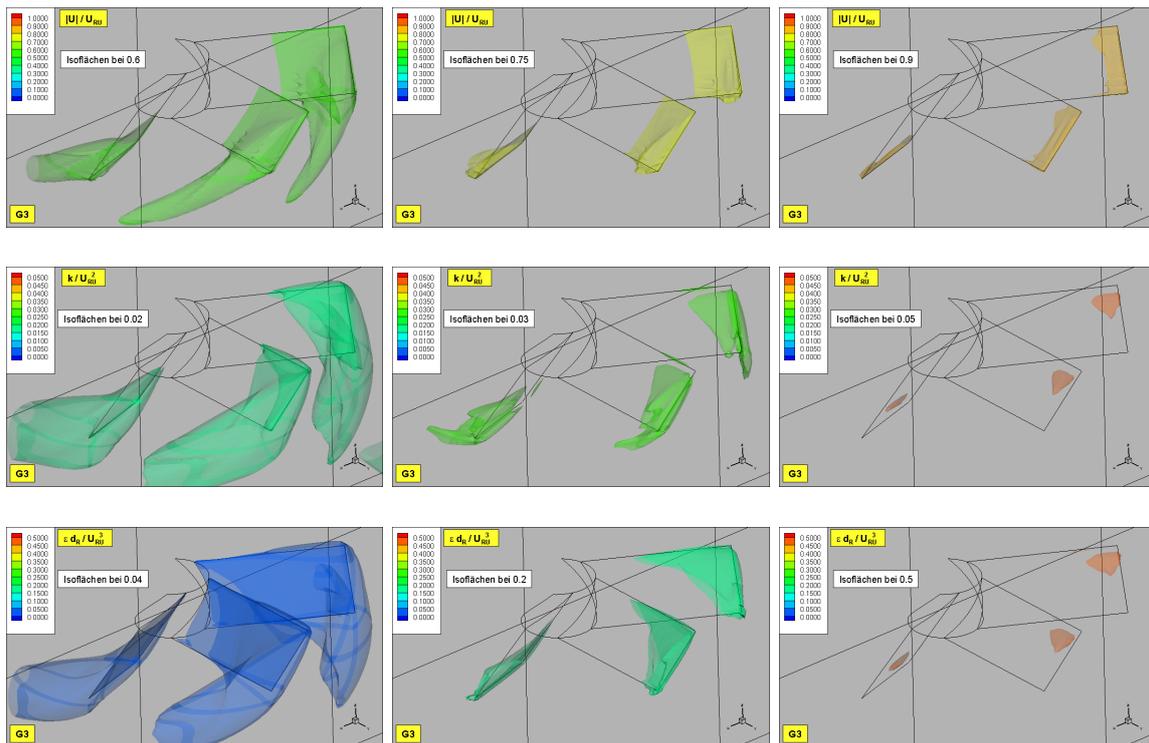


Abbildung 7.35: Verschiedene Isoflächen der normierten absoluten Geschwindigkeit (oben), der turbulenten kinetischen Energie (mitte) und der Dissipationsrate (unten) in der Umgebung des Rührers (Berechnungsgitter G3, $\gamma_{CDS} = 0.95$)

Eine weitere Möglichkeit zur Visualisierung der Strömung sind Stromlinien oder Partikelbahnen. Ähnlich wie bei den Geschwindigkeitsvektoren erhält man dadurch ebenfalls einen globalen Eindruck der Strömungsform, welcher sich allerdings auf einige wenige, nach Möglichkeit repräsentativen, Fluid- oder Partikelbahnen stützt. Informationen zu Details der Strömung sind in der Regel nicht extrahierbar. Weitere Ausführungen zu Partikeltrajektorien finden sich in Abschnitt 7.11, so dass an dieser Stelle ein Verweis genügen soll.

7.9 Variation der Rührerdrehzahl

Zur Untersuchung der Skalierbarkeit der Strömung im Rührbehälter wird im Folgenden die Drehzahl des Rührers n_R variiert und in den Abbildungen 7.36-7.39 die Wirkung auf die Strömung dargestellt⁶⁹. Bei den Berechnungen wird die Gitterauflösung G1 verwendet, da für die Analyse der Drehzahlabhängigkeit die exakte de-

⁶⁹Ergänzend zu den Abbildungen 7.36-7.39 sind in Abschnitt A.6 noch die entsprechenden Profile für $x_3 = 60$ mm, $x_3 = 80$ mm, $x_3 = 160$ mm und $x_3 = 260$ mm aufgetragen.

taillierte Auflösung des Strömungsgebietes von untergeordneter Bedeutung ist. Der für die Strömungsform bedeutsame Gewichtungsfaktor γ_{CDS} wird auf 0.95 gesetzt. Bei den durchgeführten Messungen und Berechnungen wird ein Drehzahlbereich von $n_R = 200 \dots 400 \text{ min}^{-1} = 3.33 \dots 6.67 \text{ s}^{-1}$ betrachtet, welcher einem Rührerumfangsgeschwindigkeitsbereich von $U_{RU} = \pi d_R n_R = 1.51 \dots 3.02 \text{ m s}^{-1}$ bzw. einem Winkelgeschwindigkeitsbereich von $\Omega_R = 2\pi n_R = 20.9 \dots 41.9 \text{ s}^{-1}$ entspricht.

Bei Rührwerksströmungen wird die Reynoldszahl üblicherweise mit dem Rührerdurchmesser d_R und der Rührerdrehzahl n_R (bzw. der Rührerumfangsgeschwindigkeit U_{RU} oder der Winkelgeschwindigkeit des Rührers Ω_R) berechnet.

$$\text{Re} = d_R^2 |n_R| \nu^{-1} = \pi^{-1} d_R |U_{RU}| \nu^{-1} = \frac{1}{2}\pi^{-1} d_R^2 |\Omega_R| \nu^{-1} \quad (7.21)$$

Manche Autoren (z.B. Wechsler et al. [343]) verwenden $\text{Re} = d_R |U_{RU}| \nu^{-1}$ oder auch $\text{Re} = d_R^2 |\Omega_R| \nu^{-1}$ zur Berechnung der Rührer-Reynoldszahl, wobei sich lediglich ein Unterschied im Faktor π^{-1} bzw. $\frac{1}{2}\pi^{-1}$ ergibt. In der vorliegenden Arbeit wird die Rührer-Reynoldszahl immer mit Gl. 7.21 berechnet.

Nach Liepe et al. [179] liegt bei einem Rührprozess eine vollausbildete turbulente Strömung vor, wenn die Reynoldszahl über $\text{Re}_{vt} \approx 2.5 \cdot 10^4 \dots 5 \cdot 10^5$ liegt. Der relativ breite Bereich ergibt sich durch die Berücksichtigung verschiedenster Rührertypen und der Unterscheidung zwischen rührernahen und rührerfernen Bereichen. Bei Rührwerken mit Schrägblattrührer und Stromstörern erhält man als Grenzwert im rührernahen Bereich $\text{Re}_{vt} = 2.5 \cdot 10^4$ bzw. $\text{Re}_{vt} = 4 \cdot 10^5$ im rührerfernen Bereich. Im Falle von vollausbildeter turbulenter Strömung im Rührbehälter hat die Reynoldszahl praktisch keinen Einfluss mehr auf die Ausbildung der Strömungsstrukturen, d.h. bei entsprechender Normierung erhält man z.B. bei verschiedenen Rührerdrehzahlen n_R gleiche Strömungszustände im Rührkessel.

Im hier betrachteten Drehzahlbereich berechnet sich die Rührer-Reynoldszahl zu $\text{Re} = 6.9 \cdot 10^4 \dots 1.4 \cdot 10^5$, d.h. im rührernahen Bereich liegt eine vollausbildete turbulente Strömung vor, während im rührerfernen Bereich das Kriterium für vollausbildete Turbulenz nicht ganz erreicht wird.

Die umfangsgemittelten Profile sind hier zur Übersichtlichkeit nicht noch einmal aufgetragen, da entsprechende Vergleiche sowie die Beschreibung der Zusammenhänge zwischen umfangsgemittelter und winkelfester Profile bei Messung und Berechnung bereits in Abschnitt 7.7 zusammengestellt wurden. Die relativen Änderungen bei Variation der Drehzahl sind davon unabhängig, so dass die Wahl der Vergleichsprofile für den Vergleich unerheblich ist. Tatsächlich liegen die Profile für $\theta = 90^\circ$ und die umfangsgemittelten Profile im Vergleichsbereich zwischen Messung und Rechnung nahezu übereinander (s. Abbildungen 7.25-7.26 bzw. für eine detaillierte Betrachtung der Winkelabhängigkeit s. Abbildungen 7.20-7.21). Lediglich die radialen Komponente der Fluidgeschwindigkeit wird durch die Wahl der Profile bei $\theta = 90^\circ$ etwas unterschätzt. Im Falle der Messwerte bei $x_3 = 120 \text{ mm}$ und minimalem Radius ist anzunehmen, dass eine Beeinflussung der Messung durch die Spitzen der Rührerblätter vorgelegen hat, da die Übereinstimmung mit den Berechnungen im

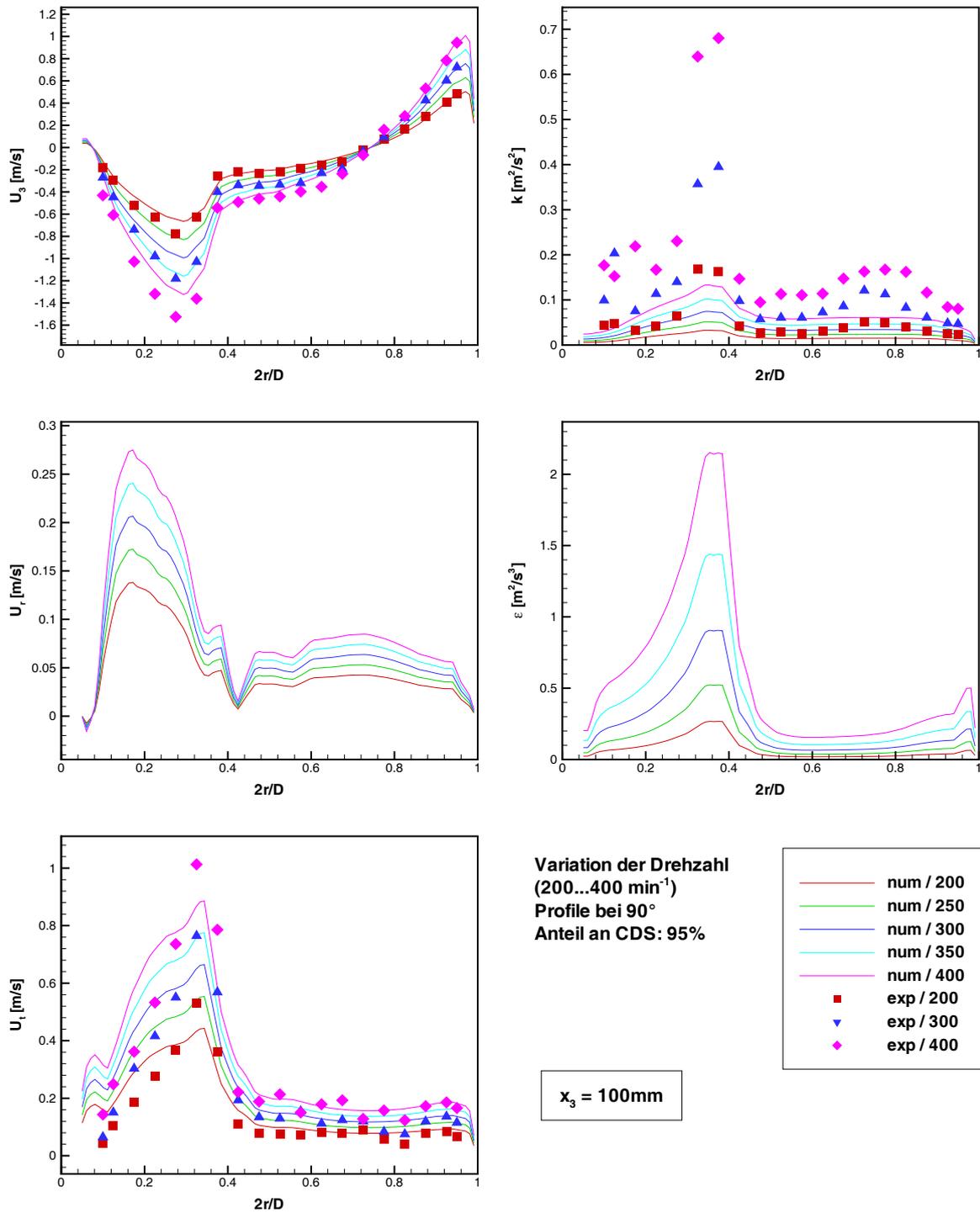


Abbildung 7.36: Berechnete und gemessene Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 100\text{mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1, $\gamma_{CDS} = 0.95$)

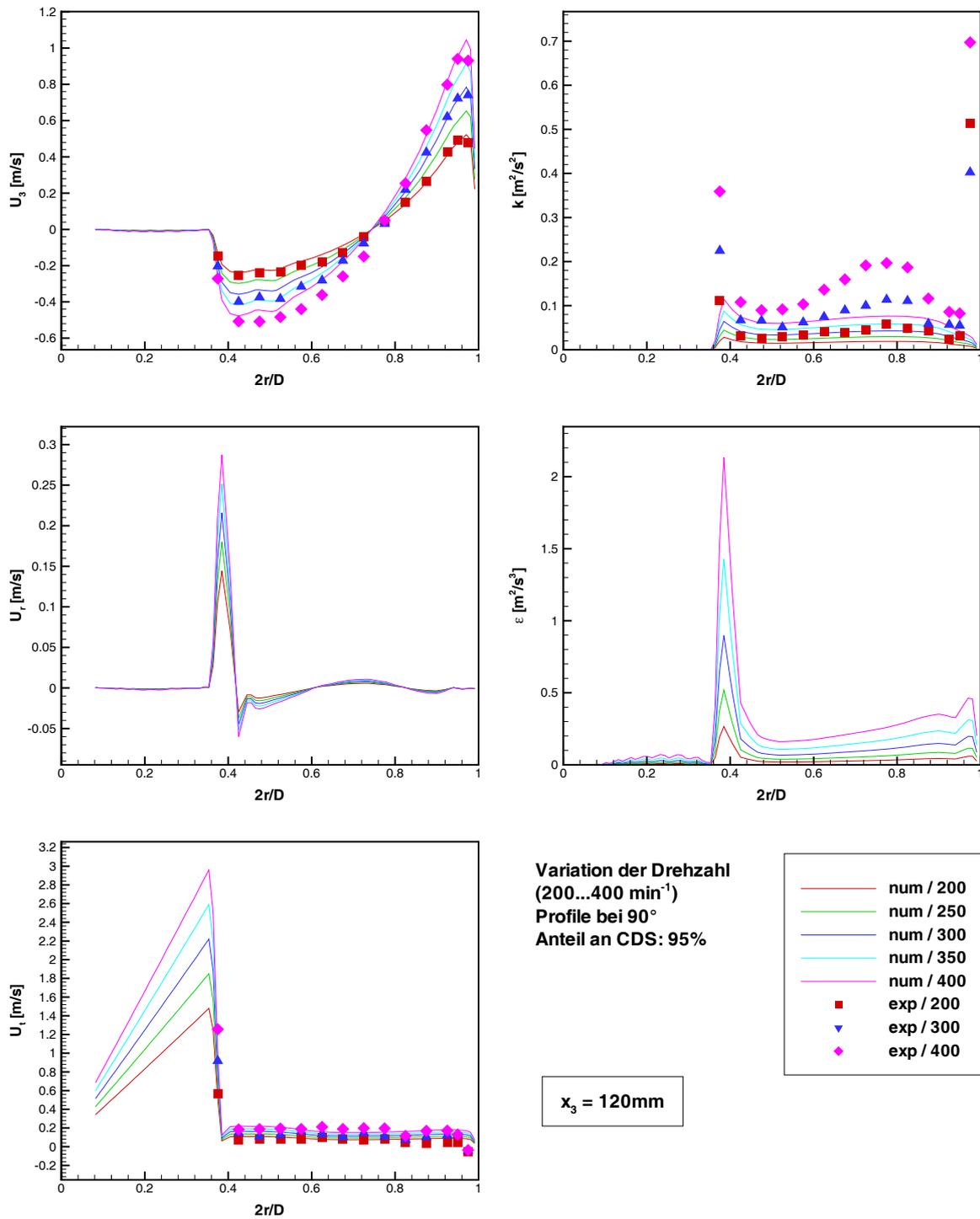


Abbildung 7.37: Berechnete und gemessene Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 120\text{mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1, $\gamma_{CDS} = 0.95$)

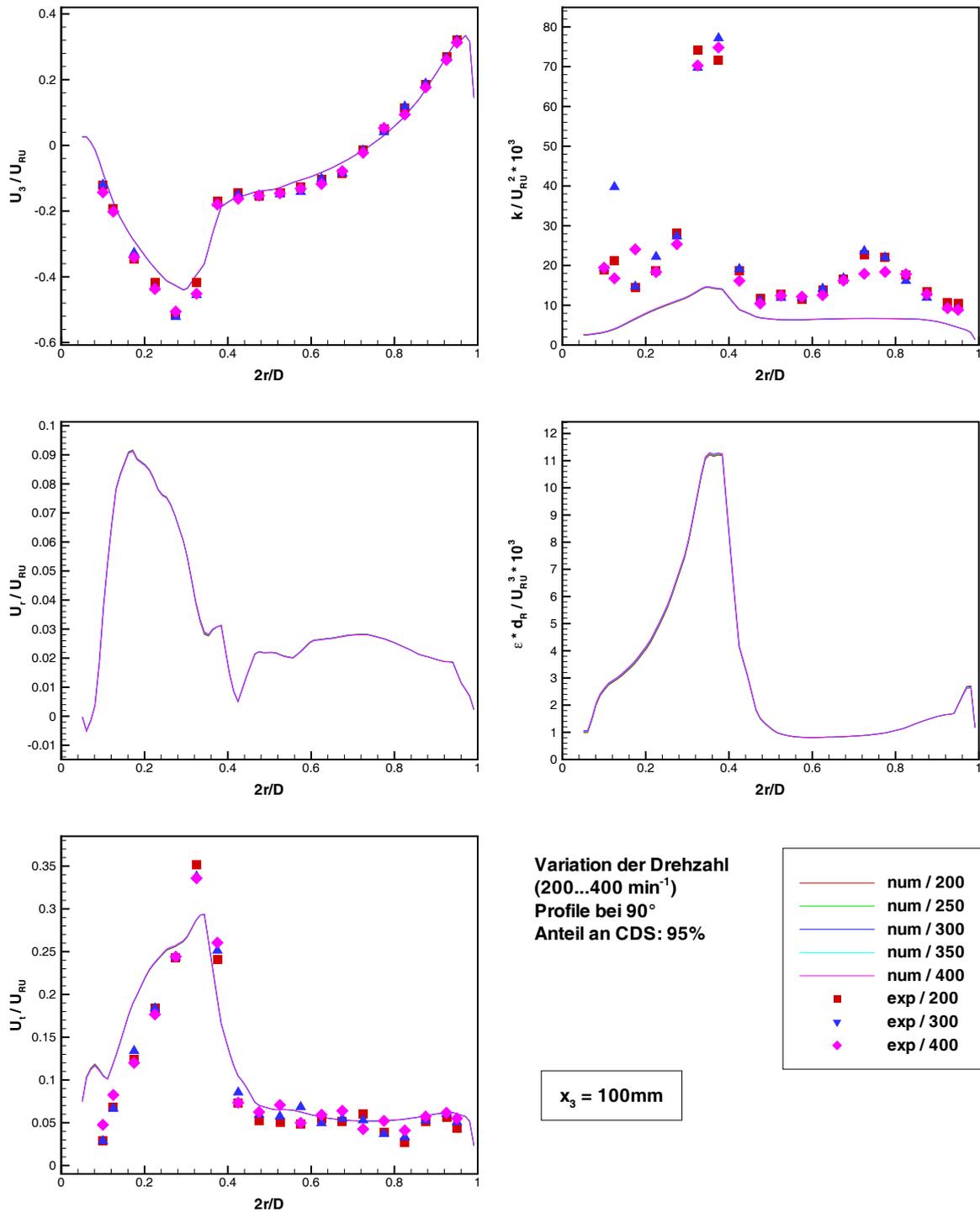


Abbildung 7.38: Berechnete und gemessene relative Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 100\text{mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1, $\gamma_{CDS} = 0.95$)

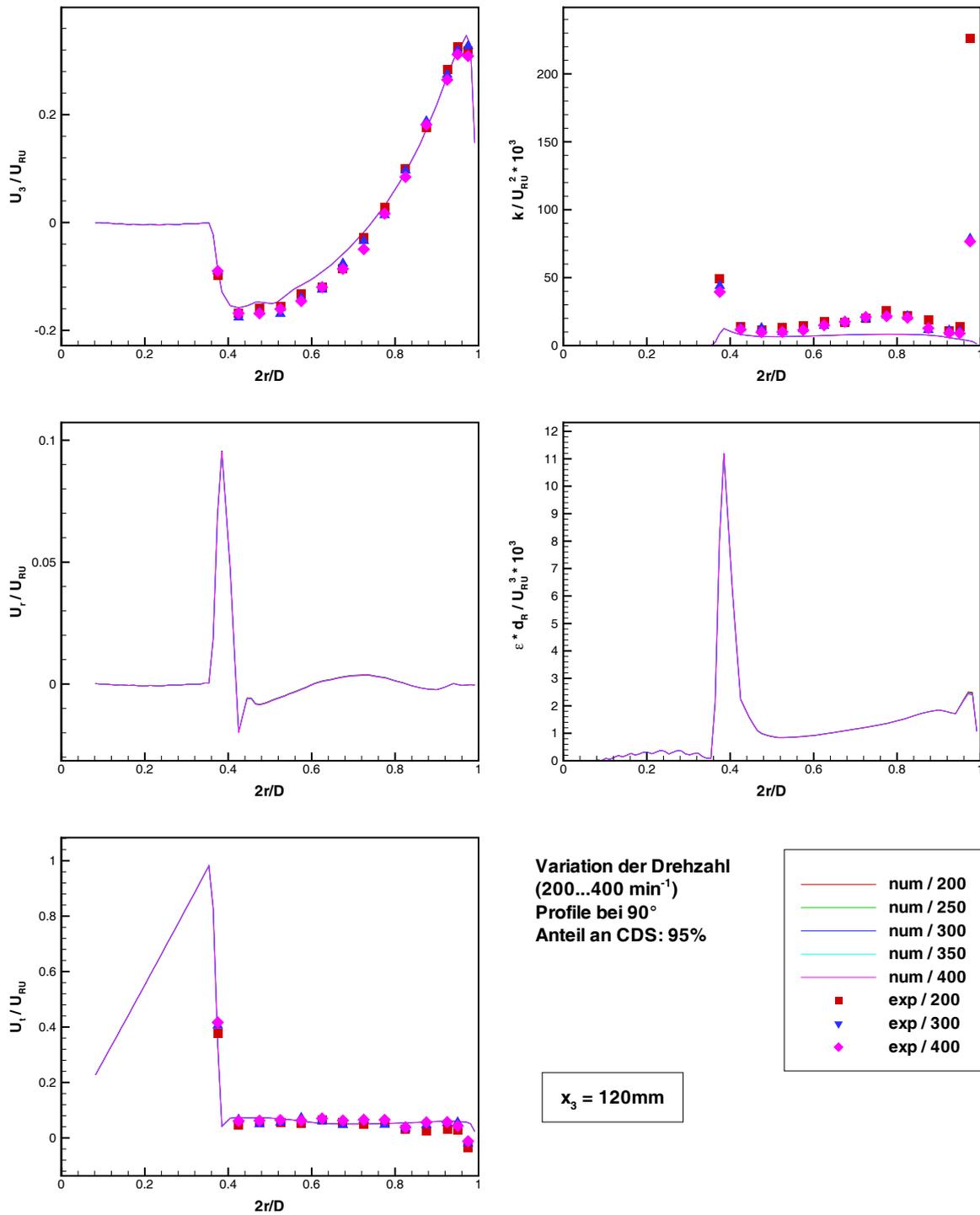


Abbildung 7.39: Berechnete und gemessene relative Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 120\text{ mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1, $\gamma_{CDS} = 0.95$)

Profil bei $\theta = 90^\circ$ (durch die Gittereinteilung, s. Abschnitt 7.4, befindet sich an dieser Winkelposition ein Rührerblatt) nahezu perfekt ist, während theoretisch die Übereinstimmung mit den Mittelwerten vorliegen sollte.

Die in den Abbildungen 7.36-7.37 aufgetragenen Profile zeigen bei Variation der Rührerdrehzahl wie erwartet keine Änderung der Profilform, sondern lediglich eine proportionale Erhöhung bzw. Erniedrigung bei größerer bzw. kleinerer Drehzahl. Zur exakten Bewertung der Skalierbarkeit der Strömung wurden die relativen Fluideigenschaften in den Abbildungen 7.38-7.39 aufgetragen. Die Fluidgeschwindigkeiten sowie die turbulenten Größen k und ε wurden dabei, wie in Tab. 7.4 zusammengefasst, mit Hilfe der Rührerumfangsgeschwindigkeit U_{RU} und dem Rührerdurchmesser d_R normiert⁷⁰.

| | | | |
|----------|-----------------------------|----------------------|------------------------------------|
| absolut | \mathbf{U} | k | ε |
| normiert | $\frac{\mathbf{U}}{U_{RU}}$ | $\frac{k}{U_{RU}^2}$ | $\frac{\varepsilon d_R}{U_{RU}^3}$ |

Tabelle 7.4: Verwendete Normierung der Fluidgeschwindigkeit, der turbulenten kinetischen Energie und der Dissipationsrate

Durch die Normierung liegen die einzelnen Profile der Berechnung nahezu perfekt übereinander und bei den gemessenen Profilen sind die Unterschiede, in Anbetracht der aus dem Messverfahren resultierenden Streuung, ebenfalls sehr gering. Dies gilt auch bei den hier nicht dargestellten Höhen, so dass im betrachteten Drehzahlbereich unter den gegebenen Randbedingungen (s. Abschnitt 7.4) Reynoldsunabhängigkeit, d.h. eine Unabhängigkeit von der Reynoldszahl, angenommen werden kann. Damit lässt sich die Strömung im Rührbehälter über die Drehzahl bzw. die Reynoldszahl skalieren.

Neben der Übertragbarkeit werden durch die vorgenommene Normierung auch die relativen Bedeutungen der einzelnen Geschwindigkeitskomponenten herausgearbeitet. In der Nähe der Behälterwand dominiert praktisch im gesamten Höhenbereich (mit Ausnahme von den Bereichen in Bodennähe) die vertikale Geschwindigkeitskomponente. Direkt im Rührerbereich (d.h. etwa bei $x_3 = 120$ mm und $r < 80$ mm) ist die radiale Komponente im Vergleich zu den beiden anderen Komponenten sehr klein, d.h. das seitliche Ansaugen fällt hier nicht ins Gewicht. Die tangentielle Kom-

⁷⁰Die gleiche Art der Normierung wurde auch z.B. von Kresta & Wood [163] verwendet. Im vollturbulenten Bereich wird somit eine von der Drehzahl unabhängig Darstellung möglich. Die Proportionalität gilt bei gleichen Geometrieverhältnissen auch für unterschiedliche Baugrößen (siehe z.B. Laufhütte [167]).

Im Gegensatz dazu verwendete Politis [245] die folgenden normierten Größen: $\mathbf{U}(n_R d_R/2)^{-1}$, $2k(n_R d_R/2)^{-2}$ und $2\varepsilon n_R^{-3}(d_R/2)^{-2}d_R^{-2}$. Damit ergeben sich konstante Umrechnungsfaktoren von $\pi/2$ für \mathbf{U} , $\pi^2/8$ für k und $\pi^3/8$ für ε .

ponente ist betragsmäßig etwa halb so groß wie die vertikale Komponente, in direkter Nachbarschaft zu den Rührerblättern allerdings dominant. Im Abstrombereich des Rührers gleichen sich die Komponenten mit zunehmender Entfernung vom Rührer größenordnungsmäßig immer mehr an. Oberhalb des Rührers, d.h. im Zustrombereich, ist die radiale Geschwindigkeitskomponente aufgrund der flächigen radialen Einwärtsströmung praktisch immer viel kleiner als die anderen Komponenten, wobei die vertikale Komponente etwa den doppelten Betrag der tangentialen Komponente hat. Dies gilt natürlich nur bis zu einer bestimmten Höhe, da an der oberen Behälterberandung die vertikale Komponente zu Null abfällt.

7.10 Abschätzung der lokalen Stokeszahl und deren Bedeutung für Partikel-Partikel-Kollisionen

Für die Berechnung der Stokeszahl wird neben der Partikelrelaxationszeit τ_P auch ein charakteristisches Zeitmaß der Strömung benötigt (s. Gl. 2.10). Dafür wurde bei der vorliegenden Abschätzung das Lagrangesche integrale Zeitmaß nach Gl. 4.48 verwendet. In erster Näherung lässt sich die Partikelrelaxationszeit für den Stokeschen Bereich (s. Gl. 2.7) benutzen (diese ist für die vorliegende Abschätzung hinreichend genau), so dass sich die lokale Stokeszahl wie folgt berechnet:

$$\text{St} = 0.347 \rho_P d^2 \mu^{-1} \varepsilon k^{-1} \quad (7.22)$$

In Abb. 7.40 ist die räumliche Verteilungen der Stokeszahl bei einer Teilchengröße von $d = 200 \mu\text{m}$ dargestellt. Bei einer Teilchengröße von $d = 100 \mu\text{m}$ liegt die Stokeszahl entsprechend um den Faktor 4 niedriger und im Falle von $d = 500 \mu\text{m}$ um den Faktor 6.25 höher. Die Drehzahl beträgt $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$.

Im größten Teil des Rührbehälters liegt die Stokeszahl unterhalb von 0.2. Höhere Werte finden sich im Abströmbereich des Rührers und Stokeszahlen größer als eins liegen nur in der Nähe der Rührerblätter, an der Behälterwand und der Rührerwelle vor. Verdeutlicht wird dies auch in Abb. 7.41 durch die Darstellung der Verteilung in verschiedenen Höhenschichten für G2. Mit zunehmender Gitterauflösung werden lokal immer höhere maximale Stokeszahlen erreicht (G1: $\text{St} \leq 3.4$, G2: $\text{St} \leq 7.6$ und G3: $\text{St} \leq 19.7$), während im überwiegenden Teil des Behälters praktisch kein Einfluss festzustellen ist. Die Erhöhung erklärt sich durch die verbesserte Auflösung der Scherschichten und damit verbunden einer genaueren Berechnung der Turbulenzgrößen k und ε (vgl. Abschnitt 7.7). Besonders deutlich zeigt sich der Effekt der verbesserten Auflösung im Bereich des Rührers (s. Isoflächen in Abb. 7.40).

Die Bedeutung der Stokeszahl für Partikel-Partikel-Kollisionen ergibt sich durch Gl. 4.63, welche die Geschwindigkeit zweier kollidierender Teilchen korreliert. Für $\text{St} = 0.2$ errechnet sich so die Korrelationsfunktion zu $R_{AB} = 0.75$ und entsprechend für $\text{St} = 1$ zu $R_{AB} = 0.58$. Liegen noch kleinere Stokeszahlen vor, so berechnen

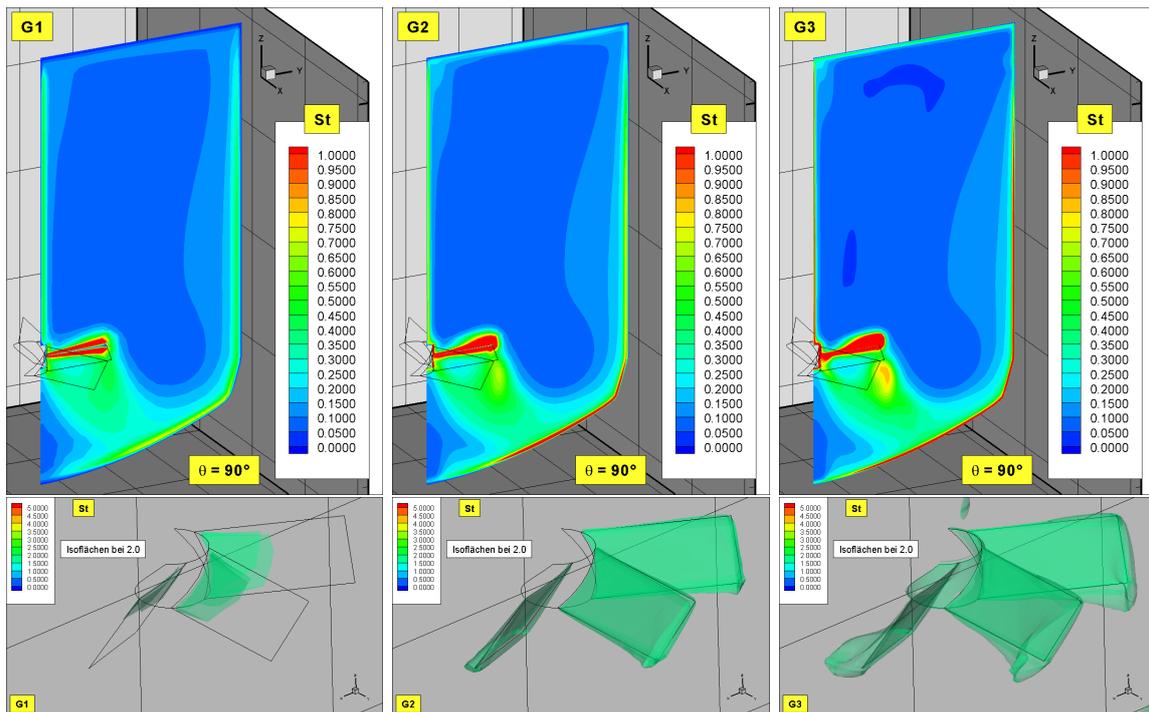


Abbildung 7.40: Räumliche Verteilung der Stokeszahl bei einer Teilchengröße von $d = 200 \mu\text{m}$ ($\implies St = 0.0347 \text{s} \cdot \varepsilon \text{k}^{-1}$) für Berechnungsgitter G1 (links), G2 (mitte) und G3 (rechts); Schnittebene bei $\theta = 90^\circ$ (oben) und Isofläche $St = 2$ um den Rührer (unten)

sich noch stärkere Korrelationen. Der Dispersionseffekt der Kollisionen ist somit praktisch im gesamten Rührbehälter (mit Ausnahme des Rührerbereichs und einer dünnen Zone an der Behälterwand) gering. Tatsächlich wird in dichten Strömungen die Dispersion aber maßgeblich durch Kollisionen gesteuert, so dass die direkte Anwendbarkeit von Gl. 4.63 in Bereichen mit relativ hohen Partikelbeladungen in Frage zu stellen ist. Gerade in Bereichen hoher Teilchenkonzentration oberhalb des Rührers ist die Verwendung der Korrelationsfunktion nicht sinnvoll, da dort praktisch überall sehr kleine Stokeszahlen vorliegen. Eine entsprechende Korrektur für höhere Beladungen bei Fest-Flüssig-Strömungen ist nicht bekannt, so dass weitere Untersuchungen durchgeführt werden müssen, um diese zu spezifizieren. Dazu sind eine Reihe von Validierungsexperimenten nötig, welche im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht möglich waren. Die Bestimmung der optimalen Korrelationsfunktion in Abhängigkeit von der Beladung bleibt somit Gegenstand nachfolgender Untersuchungen. Für die weiteren Berechnungen wurde $R_{AB} = 0$ verwendet, da dies in den vorliegenden Fällen die Realität besser, aber natürlich noch nicht optimal, abbildet.

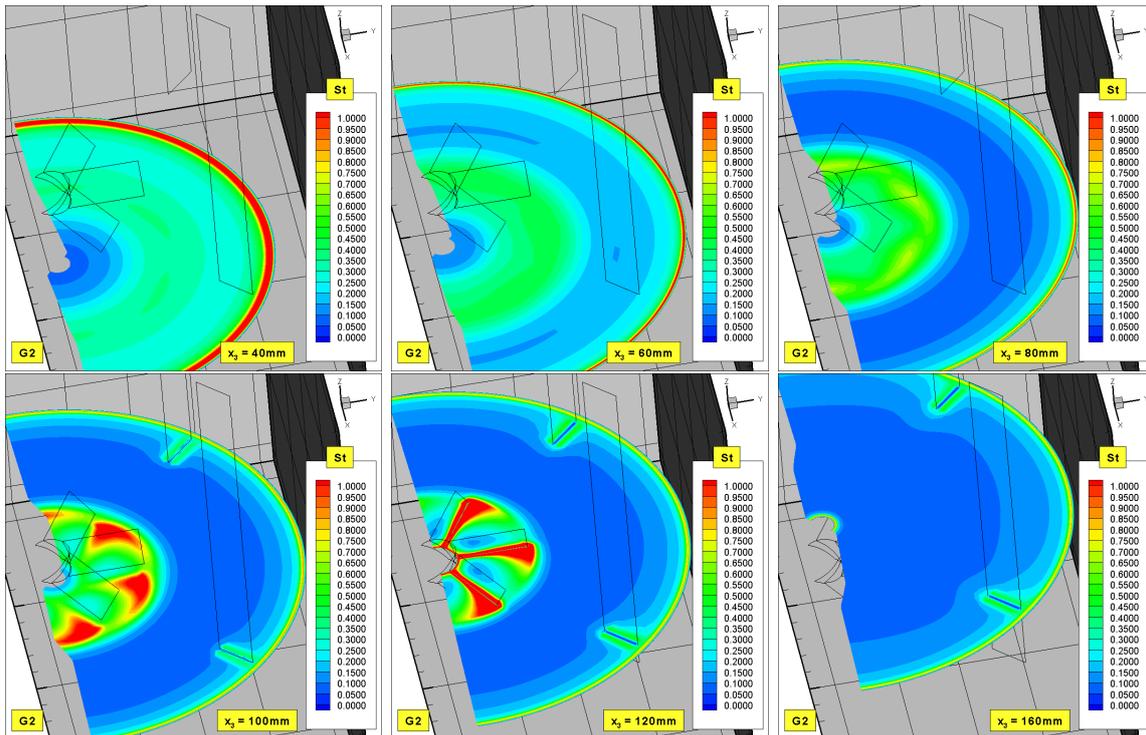


Abbildung 7.41: Räumliche Verteilung der lokalen Stokeszahl in verschiedenen Höhenschichten (G2, $d = 200 \mu\text{m}$)

7.11 Berechnung von Partikelbahnen

Für einen ersten Eindruck der Partikelbewegungen im Rührkessel eignet sich sehr gut die Darstellung einer begrenzten Anzahl von Trajektorien. Beispielhaft ist diese in den Abbildungen 7.42-7.46 für die Berechnung mit $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $d = 200 \mu\text{m}$ und $\varphi_P = 0.02$ unter verschiedenen Perspektiven dargestellt.

Die Darstellung der Trajektorien im gesamten Rührbehälter in einer dreidimensionalen Grafik ist nicht sinnvoll, da dann die Vermischung der Daten des rotierenden und des ortsfesten Koordinatensystems eine verwirrende Darstellung ergibt. Für die dreidimensionalen Darstellungen wurde daher entweder der rotierende oder der ortsfeste Bereich ausgeblendet (Abbildungen 7.42-7.43 bzw. Abbildungen 7.44-7.45). Bei allen Abbildungen sind die Trajektorien mit der lokalen absoluten Partikelgeschwindigkeit (bezogen auf die Rührerumfangsgeschwindigkeit U_{RU}) eingefärbt.

In Abb. 7.42 ist die Teilchenbewegung im stationären Behälterbereich aufgetragen, wobei der ausgesparte Bereich um den Rührer gelb markiert ist. Deutlich werden die Grobstrukturen der Strömung auch durch die Partikelbahnen abgebildet, wobei der Partikelbewegung Dispersionseffekte überlagert sind. Wie zu erwarten war, werden die Teilchen im Ansaug- sowie im Abstrombereich des Rührers beschleunigt, so dass an der Behälterwand hohe Geschwindigkeiten vorliegen. Geringere Geschwin-

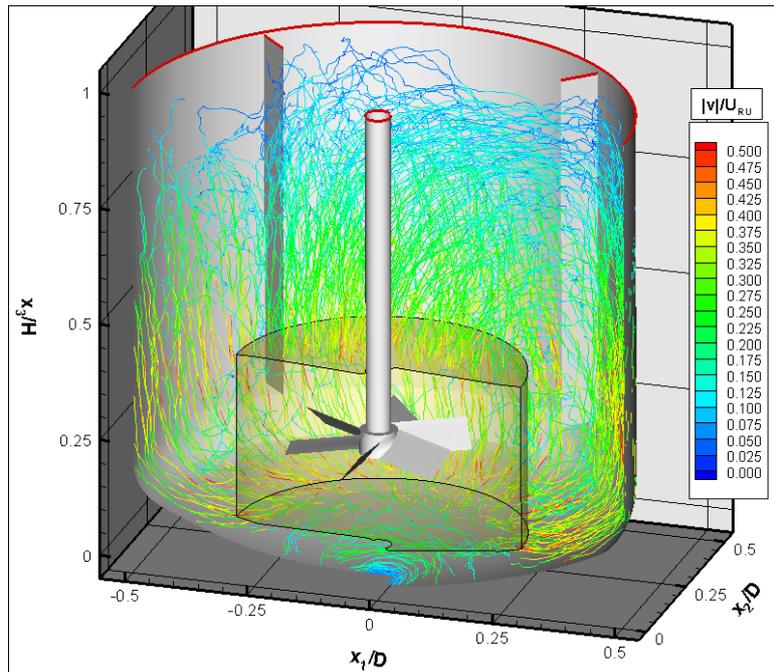


Abbildung 7.42: Trajektorien im ortsfesten Teil des Berechnungsgitters

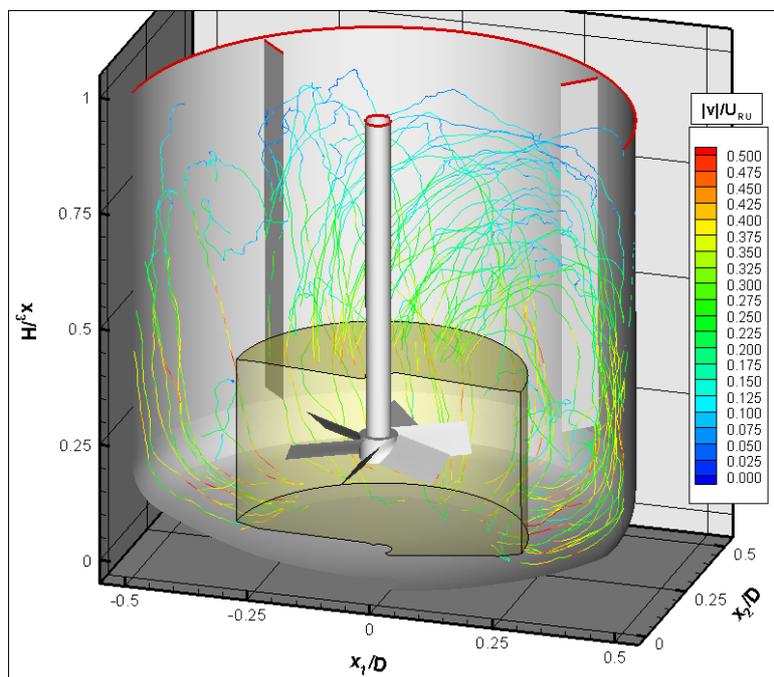


Abbildung 7.43: Reduzierte Anzahl an Trajektorien im ortsfesten Teil des Berechnungsgitters

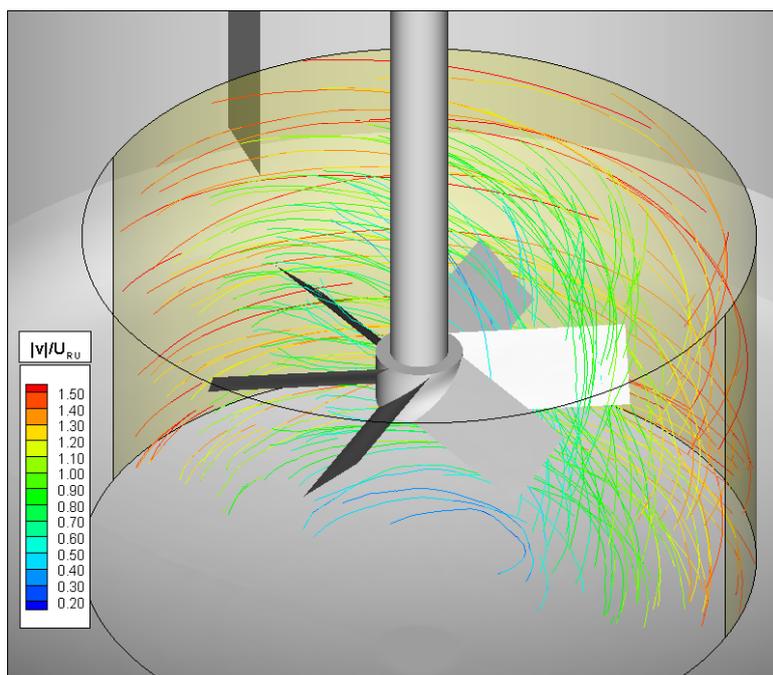


Abbildung 7.44: Trajektorien im rotierenden Teil des Berechnungsgitters

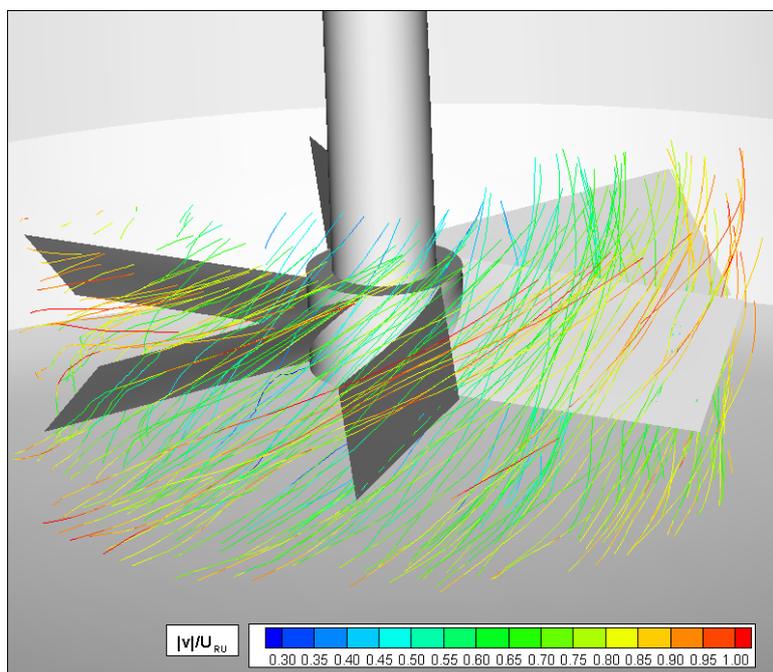


Abbildung 7.45: Trajektorien in der unmittelbaren Nachbarschaft des Rührers (rotierendes Berechnungsgitter)

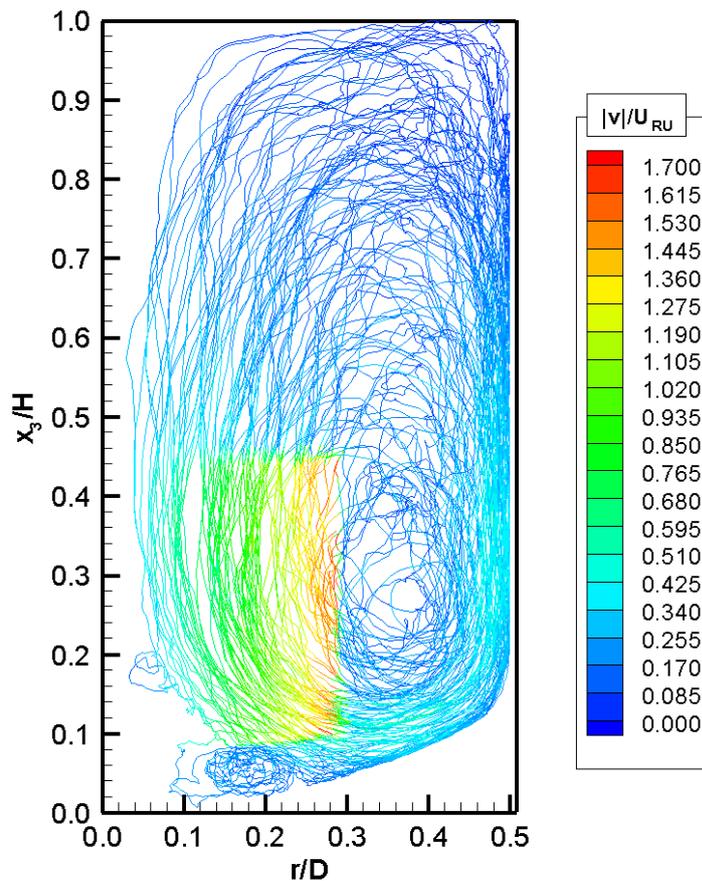


Abbildung 7.46: Gemeinsame Darstellung der Trajektorien im rotierenden sowie im ortsfesten Bereich durch Projektion in die r - x_3 -Ebene; die aufgetragenen Geschwindigkeiten beziehen sich auf das jeweilige Koordinatensystem

digkeiten liegen im oberen Bereich des Behälters sowie am Behälterboden vor. Die im oberen Behälterbereich durch die Stromstörer bedingte Umlenkung der Teilchenbahnen nach innen ist ebenfalls klar zu erkennen. Zur Verdeutlichung der einzelnen Partikelbahnen wurde in Abb. 7.43 deren Anzahl weiter reduziert. Der rotierende Bereich ist entsprechend in Abb. 7.44 dargestellt. Dabei fällt die starke Umlenkung im direkten Rührerbereich auf (s. auch Abb. 7.45), während bereits in geringer radialer Entfernung die Bahnlinien deutlich schwächer vertikal abgelenkt werden.

Eine gemeinsame Darstellung der Trajektorien im rotierenden sowie im ortsfesten Bereich ist durch Projektion in die r - x_3 -Ebene möglich. In Abb. 7.46 ist eine entsprechende Projektion für den vorliegenden Fall dargestellt. Die aufgetragenen Geschwindigkeiten beziehen sich dabei auf das jeweilige Koordinatensystem, so dass sich der rotierende Bereich aufgrund höherer vorliegender Geschwindigkeiten farblich abhebt. Geschwindigkeiten von $|\mathbf{v}|/U_{RU} > 1$ sind möglich, da die tangentielle Ge-

schwindigkeit des rotierenden Gitters einen Wert von bis zu $1.6 \cdot U_{RU}$ annimmt.

Aus dem großen Ringwirbel resultiert das großräumige Makromischen, während das Mesomischen durch die turbulenten Schwankungen der Strömung (sichtbar durch den zackigen Verlauf der Bahnlinien) bestimmt wird. Mikromischen, d.h. das Mischen durch Diffusionseffekte, spielt bei der Bewegung von dispersen Teilchen praktisch keine Rolle.

Bereits bei den Trajektorien ist eine Konzentrierung an den Behälterwänden zu erkennen, während aufgrund von Zentrifugalkräften nur wenige Bahnlinien im Zentrum des zentralen Ringwirbels verlaufen. Ebenso liegen praktisch keine Trajektorien im Wirbelgebiet unterhalb des Rührers vor. In der Realität kommt es aber gerade in diesem Gebiet leicht zu einer Anreicherung an Teilchen (gefolgt von lokalen Absetzeffekten), da für eine Konzentrationserhöhung bereits eine geringe Einfangrate reicht, falls die Teilchen die Rückkehr in die Hauptströmung nicht schaffen. An Hand der Bahnlinien lässt auch nicht auf eine Ausdünnung im oberen Drittel des Behälters schließen, welche in der Realität zu finden ist.

Die Betrachtung von Bahnlinien kann nur einen begrenzten Einblick in die Strömung geben und stößt besonders bei einer Quantifizierung der Konzentration sehr schnell an ihre Grenzen. Dies liegt vor allem daran, dass bei der Bestimmung der Konzentration neben der Anzahl an Bahnlinien auch die lokale Verweilzeit und somit die Teilchengeschwindigkeit von zentraler Bedeutung ist.

7.12 Abschätzung des Fehlers durch die Reduzierung auf die Betrachtung von repräsentativen Teilchen

Da die Realität aufgrund der enormen Anzahl an vorliegenden Teilchen bei der Simulation nicht 1:1 abgebildet werden kann (die Rechenzeiten würden jeden Rahmen sprengen), werden repräsentative Teilchen (sogenannte Parcels) betrachtet, die eine bestimmte Anzahl an realen Teilchen repräsentieren. Dabei wird angenommen, dass sich alle realen Teilchen eines Parcels statistisch gleich verhalten und somit bei der Berechnung nicht einzeln betrachtet werden müssen. Natürlich wird der aus dieser Annahme resultierende Fehler umso größer, je kleiner die Parcelanzahl bzw. der Betrachtungszeitraum gewählt wird. Entsprechend wird der Fehler vernachlässigbar, wenn die Anzahl bzw. der Zeitraum hinreichend groß ist.

Da es sich bei den vorliegenden Untersuchungen um ein geschlossenes System handelt, können die Teilchenbahnen nicht vom Einlass bis zum Auslass verfolgt werden. Vielmehr bedeutet eine Partikelbahn hier die Verfolgung eines Teilchens in einem bestimmten Zeitfenster. Dieses ist willkürlich und wurde bei den vorliegenden Untersuchungen auf 10 s gesetzt. Die ersten 300 Trajektorien haben einen zufälligen

Startpunkt und die Startgeschwindigkeiten werden entsprechend den lokal vorliegenden Fluidgeschwindigkeiten gesetzt. Dann werden die Partikelbahnen entsprechend der Strömung im Zeitfenster von 10 s berechnet. Alle weiteren Parcels starten jeweils am Endpunkt einer vorausgegangenen Trajektorie, wobei auch die letzten Parceleigenschaften übernommen werden. Dieses Vorgehen ist nötig, um die Wirkung des zufälligen Anteils der Startbedingungen auf die Berechnung der Gesamtströmung möglichst klein zu halten. In gewissen Grenzen liefern somit verschiedene Kombinationen von Zeitintervall und Trajektorienanzahl bei konstantem Produkt der beiden Werte identische Ergebnisse. Theoretisch ließe sich also die Berechnung auch mit einem Teilchen und entsprechend großem Zeitfenster durchführen. Für die Ermittlung der Mindestanzahl an zu berechnenden Trajektorien wird sich daher auf die Zeit t_{1P} bezogen, welche theoretisch ein einzelnes Parcel benötigen würde um eine identische Statistik zu erzeugen.

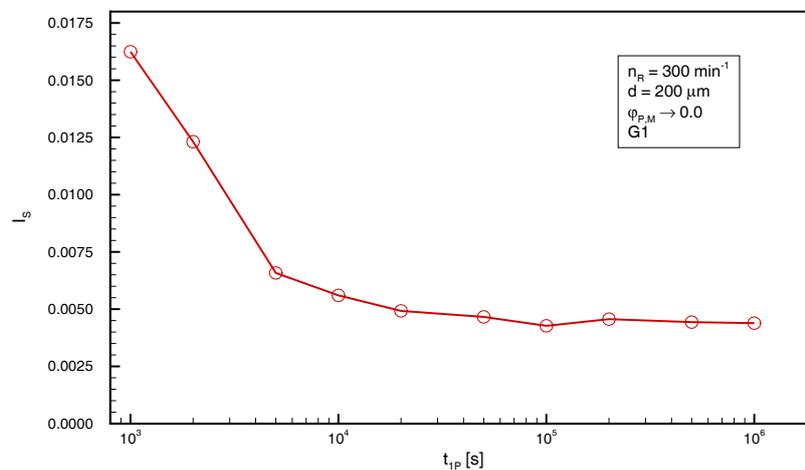


Abbildung 7.47: Intensität der Segregation I_S in Abhängigkeit von der theoretischen Flugzeit eines Teilchens t_{1P}

Zur Bewertung, ob hinreichend viele Trajektorien berechnet wurden, lässt sich z.B. die Intensität der Segregation (s. Abschnitt 5.2.6) als integrales Maß heranziehen. An Hand des als repräsentativ angenommenen Falls mit $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$ und $d = 200 \mu\text{m}$ bei sehr geringer Partikelkonzentration wurde in Abb. 7.47 für Gitter G1 die Anzahl an Trajektorien schrittweise erhöht und die entsprechenden Segregationsintensitäten aufgetragen. Es zeigt sich, dass die Intensität der Segregation zunächst relativ hoch liegt ($I_S \approx 1,6 \cdot 10^{-2}$) und mit zunehmender Anzahl an Trajektorien abnimmt. Ab einer Zeit von $t_{1P} = 5 \cdot 10^4 \text{ s}$ ändert sich die Segregationsintensität praktisch nicht mehr und nimmt einen Wert von $I_S \approx 4,5 \cdot 10^{-3}$ an.

Zur Beurteilung der Partikelverteilung über die Höhe wurde der Rührbehälter in 20 gleich hohe Schichten unterteilt. Am einfachsten lässt sich die Verteilung über die Höhe auswerten, indem man jedes Kontrollvolumen der Höhenschicht zuordnet, in

deren x_3 -Grenzen sich das entsprechende Kontrollvolumenzentrum befindet. Damit ergibt sich für das Berechnungsgitter G1 die in Abb. 7.48 dargestellte Verteilung der durch die einzelnen Höenschichten repräsentierten Volumina.

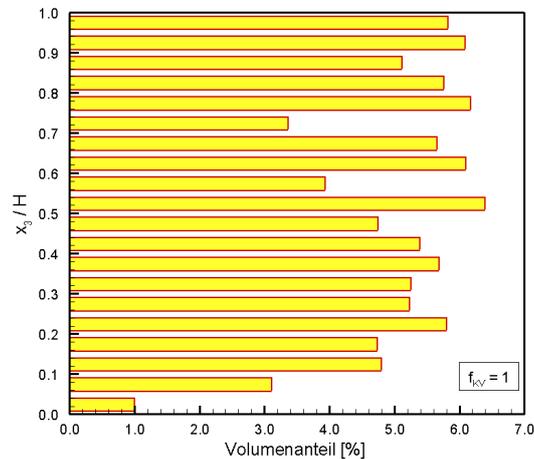


Abbildung 7.48: Verteilung der durch die einzelnen Höenschichten repräsentierten Volumina (G1)

Aufgrund der runden Form des Klöpperbodens wird durch Höenschichten mit kleinen x_3 -Werten weniger Volumen repräsentiert. Aus der ungleichmäßigen Größenverteilung der Kontrollvolumina resultiert eine weitere Abweichung von der idealen Gleichverteilung. Dies ist besonders ausgeprägt im Bereich $x_3/H \approx 0.5 \dots 0.8$ zu erkennen. Ferner kann sich eine Verzerrung ergeben, wenn die Kontrollvolumina einer nahezu horizontalen Indexschicht bei verschiedenen radialen Positionen unterschiedlichen Höenschichten zugeordnet werden (s. Anhang A.2). Der Effekt ist dabei umso schwerwiegender, je geringer die Gitterauflösung gewählt wurde.

Für die Ermittlung einer hinreichend großen Anzahl an Partikeltrajektorien, d.h. die Bestimmung des minimalen Wertes für t_{1P} , ist das beschriebene Vorgehen sicher ausreichend, für die Bewertung der Verteilung über die Höhe allerdings nicht. Die Unzulänglichkeiten sind für eine sinnvolle Analyse zu groß. Eine Reduzierung der Anzahl an Höenschichten würde eine Verbesserung bringen, allerdings ist damit eine Verwaschung der Gradienten verbunden. Besser ist eine Unterteilung der einzelnen Kontrollvolumina in eine hinreichende Anzahl an Subkontrollvolumina, welche dann einzeln den Höenschichten zugeordnet werden. Der Einfluss des Unterteilungsfaktors f_{KV} ⁷¹ auf den mittleren Partikelvolumenanteil $\langle \varphi_P \rangle$ ⁷² und die entsprechende Standardabweichung s_{φ_P} ⁷³ in den verschiedenen Höenschichten ist in Abb. 7.49

⁷¹Der Faktor für die Unterteilung eines Kontrollvolumens in Subkontrollvolumina f_{KV} bezieht sich auf eine Koordinatenrichtung, d.h. es resultieren f_{KV}^3 Subkontrollvolumina.

⁷² $\langle \dots \rangle$ steht hier für die räumliche Mittelung über die jeweilige Höenschicht.

⁷³Aus technischen Gründen erscheint s_{φ_P} in den Abbildungen als $s_{\cdot\varphi_P}$.

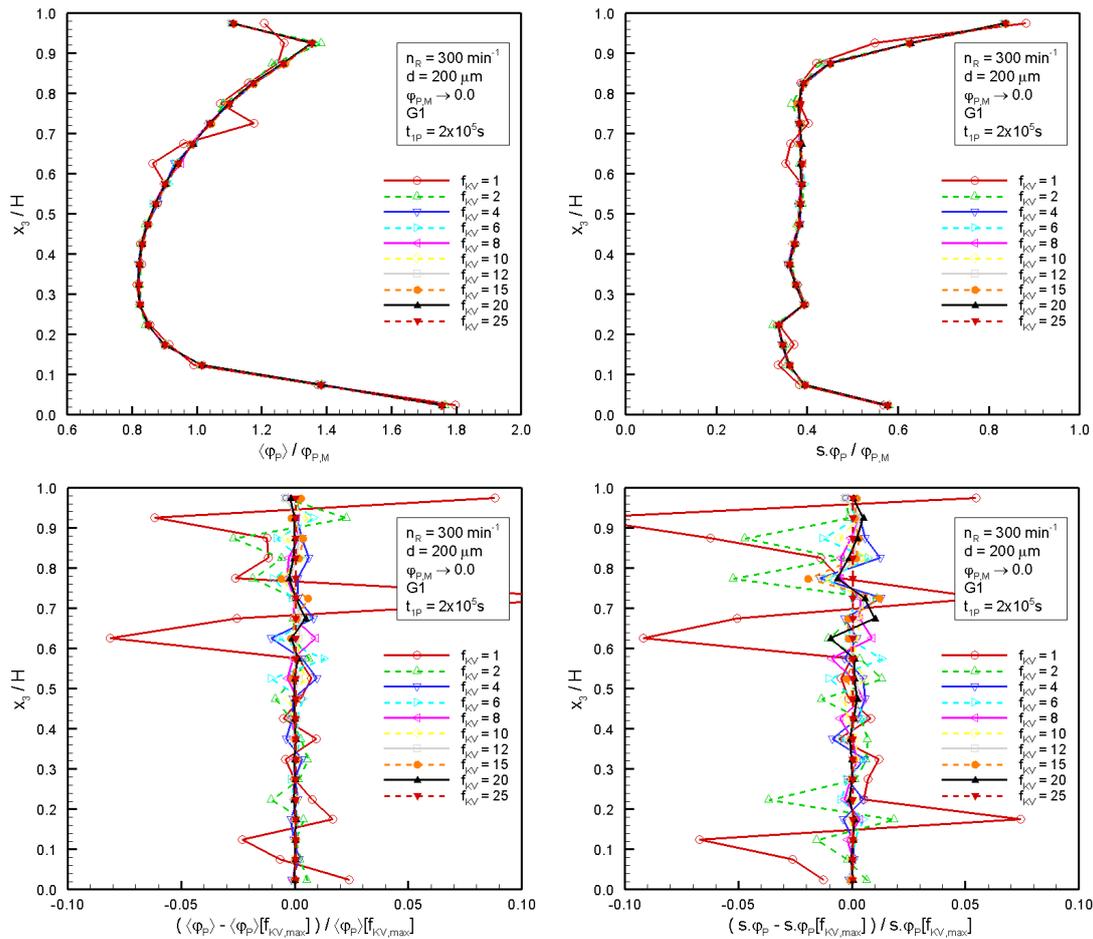


Abbildung 7.49: Mittlerer Partikelvolumenanteil (oben links) und die dazugehörige Standardabweichung (oben rechts) als Funktion von der Höhe und des Unterteilungsfaktors f_{KV} sowie die entsprechenden relativen Änderungen (unten)

(oben) für den Fall $t_{1P} = 2 \cdot 10^5 \text{ s}$ aufgetragen.

Durch die Darstellung der relativen Änderungen⁷⁴ (Abb. 7.49 unten) lässt sich der optimale Wert für f_{KV} leichter ermitteln. Im vorliegenden Fall erhält man ab $f_{KV} = 10$ für $\langle \varphi_P \rangle$ und s_{φ_P} im Wesentlichen nur noch Abweichungen kleiner als 1%. Für alle weiteren Auswertungen wurde daher $f_{KV} = 10$ verwendet. Entsprechend erkennt man im Vergleich zu Abb. 7.48 ($f_{KV} = 1$) bei der aus $f_{KV} = 10$ resultierenden Statistik zur Volumenaufteilung (s. Abb. 7.50 links) eine erhebliche Verbesserung. Die Verwendung von $f_{KV} = 25$ (s. Abb. 7.50 rechts) bringt nur noch einen sehr geringen Zugewinn bei der Gleichverteilung.

⁷⁴Die Betrachtung erfolgt hier relativ zu den Werten aus der Berechnung mit maximalem Unterteilungsfaktor $f_{KV} (= f_{KV,max})$.

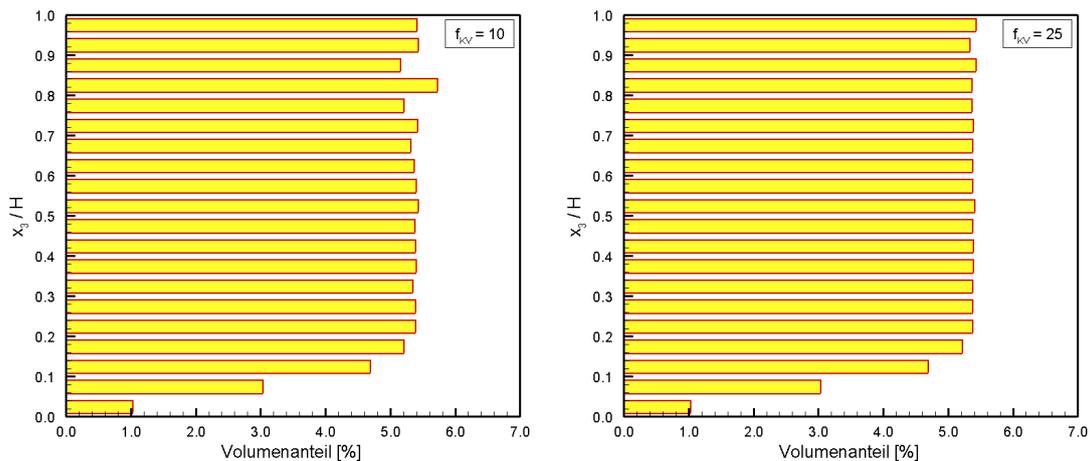


Abbildung 7.50: Verteilung der durch die einzelnen Höhengschichten repräsentierten Volumina bei $f_{KV} = 10$ und $f_{KV} = 25$ (G1)

In Abb. 7.51 (oben links) ist die Verteilung des in den jeweiligen Höhengschichten gemittelten Partikelvolumens über die Höhe aufgetragen, wobei die Trajektorienanzahl variiert. Im Bodenbereich des Rührbehälters ist, wie auch bereits in Abb. 7.49, eine starke Konzentrationsüberhöhung zu verzeichnen, während im mittleren Höhenbereich (besonders im Bereich des Rührers) der Partikelvolumenanteil etwas unter und im oberen Bereich etwas über dem Gesamtmittelwert $\varphi_{P,M}$ liegt. Die Streuung der lokalen Partikelkonzentration innerhalb der Höhengschichten zeigt nur eine geringe Abhängigkeit von x_3 (s. Abb. 7.51 und Abb. 7.49 jeweils rechts). Lediglich in den Bereichen der unteren und oberen Berandung liegen Überhöhungen vor. Im Gegensatz zu den Profilen der Mittelwerte, deren Form sich erst mit hinreichender Anzahl an Partikelbahnen korrekt ausbildet, nehmen die Streuungswerte mit zunehmender Zeit t_{1P} kontinuierlich ab, bis sie ab $t_{1P} \approx 5 \cdot 10^4$ s einem Grenzwert entgegenstreben. Ausschließlich im Bodenbereich liegen weiterhin Schwankungen vor. Noch deutlicher wird dieses Konvergenzverhalten durch die Darstellung der relativen Änderungen⁷⁵ der Schichtmittelwerte und -streuungen (s. Abb. 7.51 unten). In Anhang A.3 sind zusätzlich der Partikelvolumenanteil, die gemittelte Partikelgeschwindigkeit und die mittlere Partikelfluktationsgeschwindigkeit in Schnitten bei $\theta = 90^\circ$ für unterschiedlich viele Trajektorien aufgetragen.

Unter Abwägung von Genauigkeit und Berechnungszeit wurden für alle weiteren Untersuchungen die folgenden Werte als Kompromiss verwendet: $t_{1P} = 3 \cdot 10^4$ s bzw. $2 \cdot 10^4$ s während der Kopplungsiterationen und $t_{1P} = 2 \cdot 10^5$ s für die jeweilige finale Berechnung. Da sich während der Kopplungsphase die Zustände noch stark ändern können spielt ein erhöhter statistischer Fehler durch eine reduzierte Trajektorienanzahl praktisch keine Rolle.

⁷⁵Die Betrachtung erfolgt hier relativ zu der Werten aus der Berechnung mit den meisten Trajektorien, d.h. mit maximaler Zeit t_{1P} ($= t_{1P,max}$).

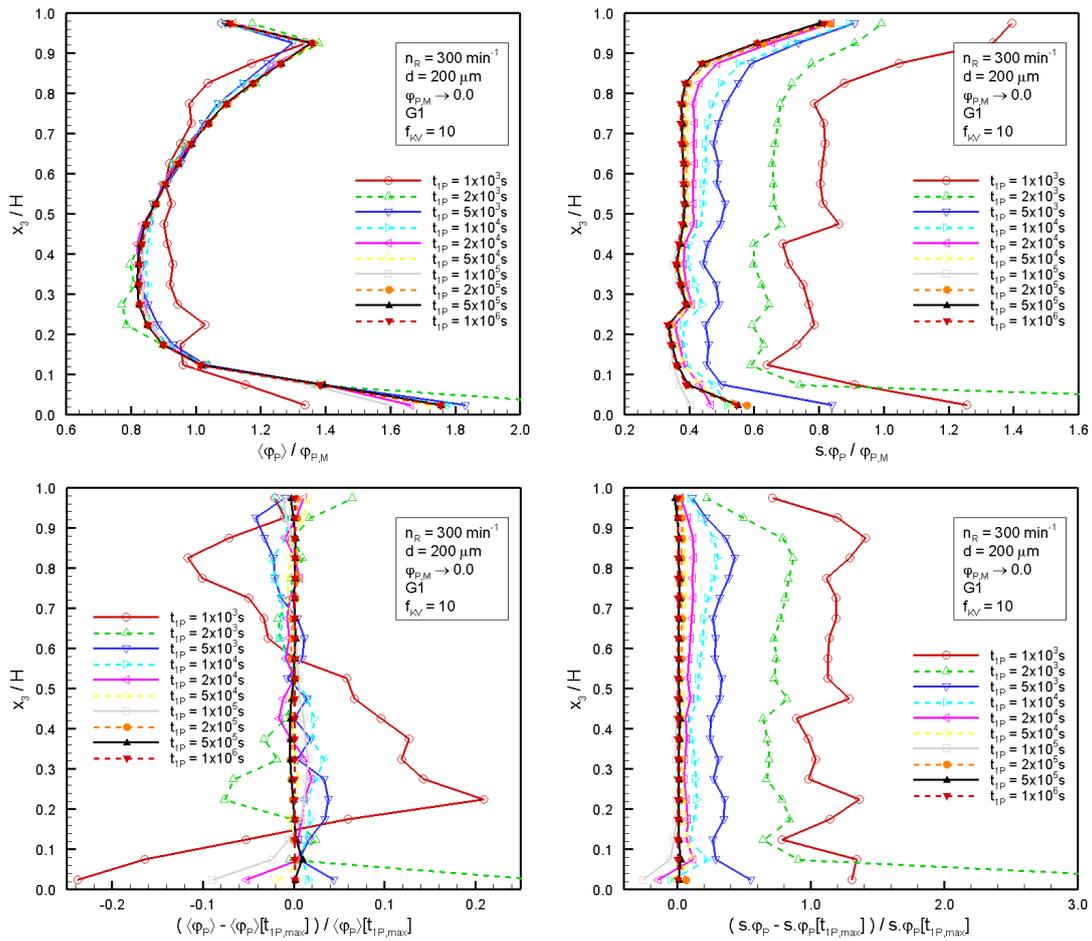


Abbildung 7.51: Mittlerer Partikelvolumenanteil (oben links) und die dazugehörige Standardabweichung (oben rechts) als Funktion von der Höhe und der Trajektorienanzahl sowie die entsprechenden relativen Änderungen (unten)

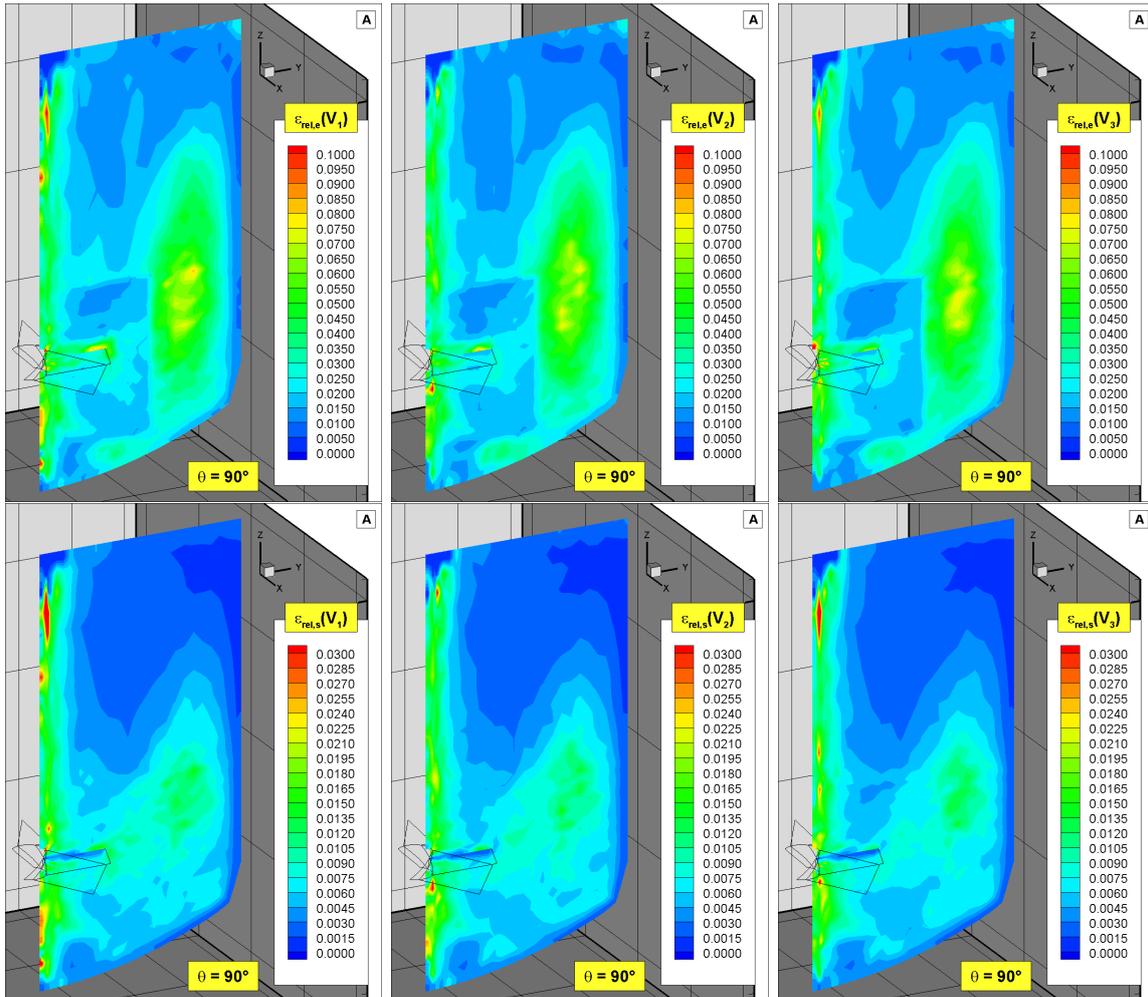
Zur Bewertung der räumlichen Verteilung des statistischen Fehlers für die einzelnen Geschwindigkeitskomponenten der dispersen Phase wurden die Fehlerfelder für die in Tab. 7.5 zusammengestellten Fälle berechnet. Bei allen drei Fällen wurde ein Partikelvolumenanteil von 1% und eine Partikelgröße von $d = 200 \mu\text{m}$ verwendet.

Mit einer statistischen Sicherheit von 90% errechnen sich somit die in den Abbildungen 7.52-7.54 dargestellten relativen Fehler. Dabei wurde als Stichprobengröße sowohl n_s als auch n_e betrachtet. Die realistische Anzahl liegt dazwischen, wobei aufgrund der Kontrollvolumengrößen die Wahrheit sicherlich besser durch n_e abgebildet wird (vgl. Abschnitt 5.2.5). Für eine höhere statistische Sicherheit erhöht sich der relative Fehler entsprechend Tab. 7.6 (welche sich aus Tab. 5.1 ableitet) um den Faktor $f_{\varepsilon_{rel}}$.

Der relative Fehler der i -ten Komponente der mittleren Partikelgeschwindigkeit

| Fall | Berechnungsgitter | t_{1P} |
|------|-------------------|------------------|
| A | G1 | $3 \cdot 10^4$ s |
| B | G1 | $2 \cdot 10^5$ s |
| C | G2 | $2 \cdot 10^5$ s |

Tabelle 7.5: Spezifikationen der drei betrachteten Fälle A, B und C

Abbildung 7.52: Relativer Fehler $\varepsilon_{rel,e}$ und $\varepsilon_{rel,s}$ für die drei Komponenten der Partikelgeschwindigkeit (Fall A)

$\varepsilon_{rel,x}(V_i)$ berechnet sich nach Gl. 5.14, wobei $x = e$ bei der Verwendung von n_e als Stichprobengröße (bzw. $x = s$ bei Verwendung von n_s) gesetzt wird. Der verwendete Mittelwert wird nach Gl. 5.1 berechnet und für die Standardabweichung in Gl. 5.14 wird die mittlere Partikelschwankungsgeschwindigkeit, berechnet nach Gl. 5.3, verwendet, wodurch der relative Fehler wegen der Abweichung von der em-

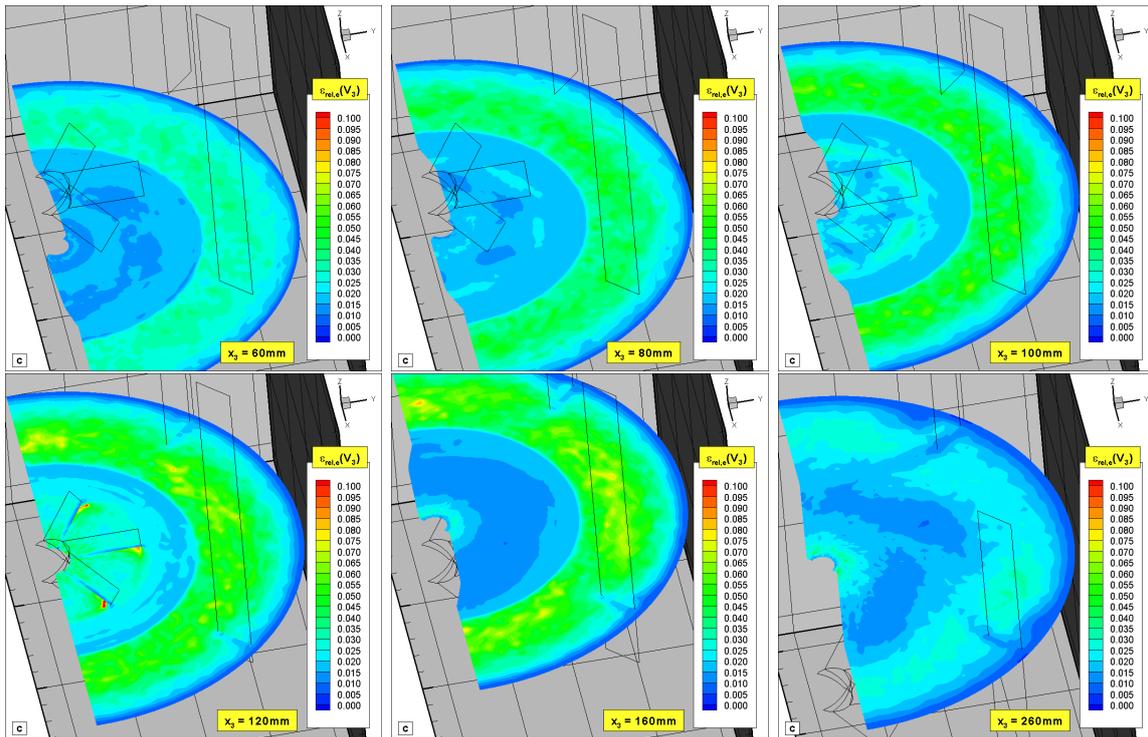


Abbildung 7.53: Relativer Fehler $\varepsilon_{rel,e}$ für die drei Komponenten der Partikelgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Höhe (Fall C)

| P_ε | P_α | $f_{\varepsilon_{rel}}$ |
|-----------------|------------|-------------------------|
| 0.800 | 0.200 | 0.779 |
| 0.900 | 0.100 | 1.000 |
| 0.950 | 0.050 | 1.191 |
| 0.990 | 0.010 | 1.566 |
| 0.999 | 0.001 | 2.001 |

Tabelle 7.6: P_ε - P_α - $f_{\varepsilon_{rel}}$ -Beziehungen für zunehmende statistische Sicherheit.

pirischen Standardabweichung im Extremfall von sehr kleinen Stichprobengrößen unterschätzt wird.

In Abb. 7.52 sind die relativen statistischen Fehler für die einzelnen Komponenten und die unterschiedlichen Stichprobengrößen in Ebenen bei $\theta = 90^\circ$ (d.h. mittig zwischen den Stromstörern) für Fall A aufgetragen. Erwartungsgemäß liegen die relativen Fehler auf Basis von n_s erheblich niedriger als die auf n_e basierenden Werte. Die Unterschiede zwischen den einzelnen Komponenten sind gering. Insgesamt treten die größten relativen Fehler nahe der Rührerwelle, unterhalb des Rührers sowie innerhalb des großen Ringwirbels auf. Weitere Überhöhungen finden sich im Bereich

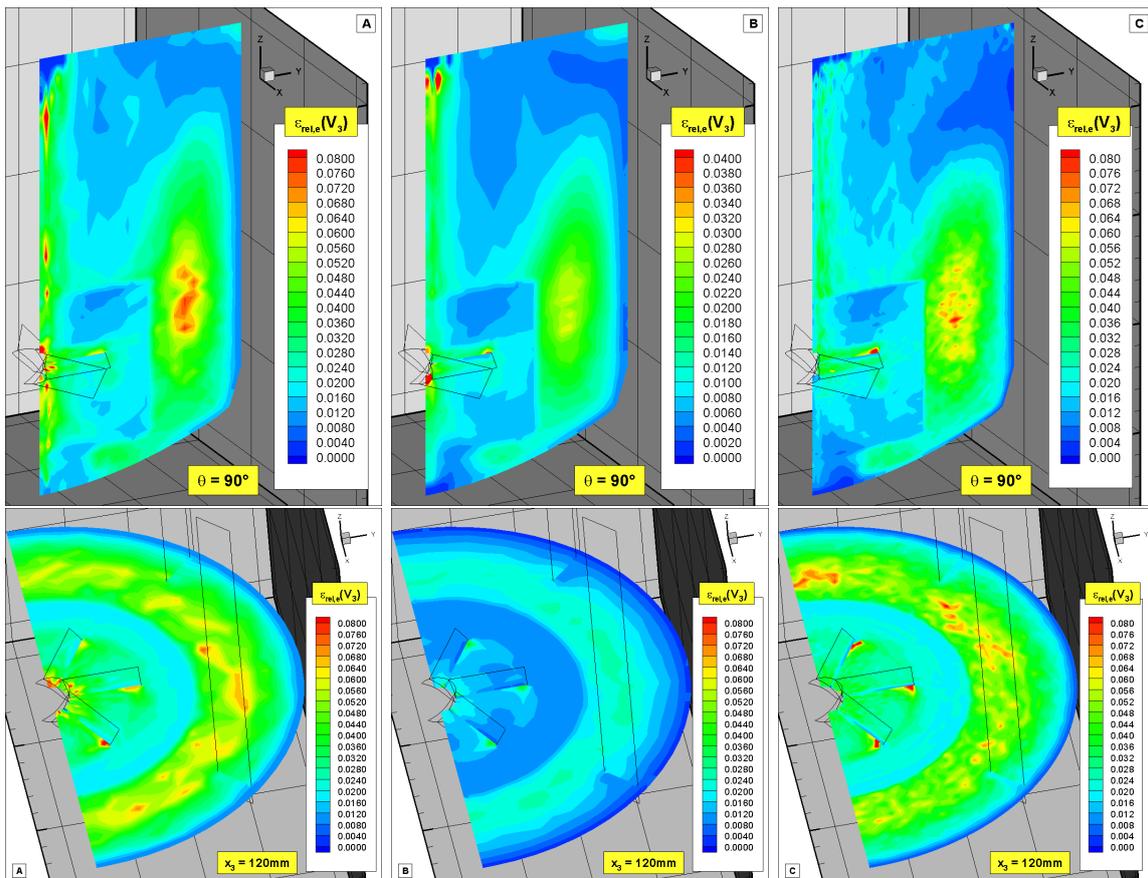


Abbildung 7.54: Relativer Fehler $\epsilon_{rel,e}$ für die vertikale Komponente der Partikelgeschwindigkeit (Fall A-C)

der Rührerblätter. Besonders geringe Werte liegen im oberen Behälterdrittel vor. Bei $\epsilon_{rel,e}$ zeigen sich Effekte durch die Rotation des Gitterbereiches um den Rührer. Aufgrund dieser Drehung resultieren höhere tangentielle Geschwindigkeiten der Teilchen im bewegten Gitter, so dass sich eine größere Anzahl an Teilcheneintritten n_e ergibt. Es berechnen sich damit kleinere Fehler direkt über- und unterhalb des Rührers. Bei $\epsilon_{rel,s}$ zeigt sich dieser Effekt nicht, da sich durch die höhere Geschwindigkeit die Verweilzeit in den entsprechenden Kontrollvolumina reduziert.

Für den weitaus größten Teil des Rührbehälters gilt (Fall A): $\epsilon_{rel,e} < 0.07$ und $\epsilon_{rel,s} < 0.02$. In großen Bereichen liegen die Werte sogar noch deutlich tiefer. Entsprechend gilt für Fall B $\epsilon_{rel,e} < 0.03$ bzw. $\epsilon_{rel,s} < 0.007$ und für Fall C $\epsilon_{rel,e} < 0.07$ bzw. $\epsilon_{rel,s} < 0.02$.

In Abb. 7.53 ist für Fall C die Abhängigkeit des relativen statistischen Fehlers $\epsilon_{rel,e}(V_3)$ von der Höhe dargestellt. Hier werden noch einmal die bereits weiter oben beschriebenen Effekte durch das bewegte Gitter um den Rührer deutlich. Auch die erhöhten Fehler an den Rührerblättern sind klar zu erkennen. Ansonsten ist die Verteilung in Umfangsrichtung unterhalb einer Höhe von etwa 250 mm relativ ho-

mogen. Darüber kommt die Umlenkwirkung der Stromstörer zum Tragen, welche zu einer Art Strahlenbildung führt. Die relativ hohen Konzentrationen darin wiederum erhöhen die Stichprobengrößen und reduzieren damit den statistischen Fehler.

Zusammenfassend ist $\varepsilon_{rel,e}(V_3)$ für die drei betrachteten Fällen in Abb. 7.54 dargestellt. Durch die Erhöhung von t_{1P} (Fall A \rightarrow Fall B) verringern sich die statistischen Fehler erheblich. Eine Erhöhung der Gitterauflösung (Fall B \rightarrow Fall C) führt zu einer Reduzierung der statistischen Güte. In weiten Bereichen sind die statistischen Fehler von Fall A und B vergleichbar.

| Fall | n_e | n_s | $\varepsilon_{rel,e}(V_1)$ | $\varepsilon_{rel,e}(V_2)$ | $\varepsilon_{rel,e}(V_3)$ | $\varepsilon_{rel,s}(V_1)$ | $\varepsilon_{rel,s}(V_2)$ | $\varepsilon_{rel,s}(V_3)$ |
|------|-------|------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|
| A | 500 | $1.5 \cdot 10^5$ | 0.18 | 0.34 | 0.19 | 0.08 | 0.13 | 0.07 |
| B | 5600 | $4.3 \cdot 10^5$ | 0.10 | 0.09 | 0.13 | 0.04 | 0.03 | 0.05 |
| C | 9300 | $1.2 \cdot 10^6$ | 0.34 | 0.26 | 0.15 | 0.12 | 0.05 | 0.05 |

Tabelle 7.7: Maximal auftretende Werte für die relativen Fehler $\varepsilon_{rel,x}(V_i)$ sowie der Stichprobengrößen n_e und n_s für die Fälle A - C

Ergänzend sind in Tab. 7.7 die maximal auftretenden Werte für die relativen Fehler $\varepsilon_{rel,x}(V_i)$ sowie der Stichprobengrößen n_e und n_s zusammengestellt. Durch die Verdopplung der Auflösung (G1 \rightarrow G2) verteilen sich die Partikelbahnen nun bei der Durchströmung einer Fläche auf viermal so viele Kontrollvolumina. Der statistische Fehler steigt somit ebenfalls um etwa einen Faktor von vier. Weniger klar lässt sich der Effekt des turbulenten Queraustausches zwischen den Kontrollvolumina beziffern, welcher bei kleineren Kontrollvolumina zu einer Verbesserung der Statistik führt. Es ist noch zu bemerken, dass die maximalen Fehler die durchschnittlichen Fehler um ein Vielfaches übertreffen können. Dies erklärt sich durch die Berechnung diskreter Teilchenbahnen.

7.13 Berechnung der Newtonzahl

Definitionsgemäß lässt sich die Newtonzahl über den Leistungseintrag P_R oder das Rührerdrehmoment T_R berechnen:

$$Ne = P_R \rho_G^{-1} |n_R|^{-3} d_R^{-5} = 2\pi T_R \rho_G^{-1} n_R^{-2} d_R^{-5} \quad (7.23)$$

Der Leistungseintrag berechnet sich wiederum als Produkt aus der mittleren Energiedissipation und der Masse des Rührguts. Damit lässt sich die Newtonzahl aus der Energiedissipation wie folgt bestimmen:

$$Ne(\varepsilon) = 2 |n_R|^{-3} d_R^{-5} \sum_i \varepsilon_i V_{KV,i} \quad (7.24)$$

wobei die Summation über alle Kontrollvolumina i läuft⁷⁶ und der Faktor 2 aus der Verwendung eines Halbmodells resultiert.

Entsprechend berechnet sich das Rührerdrehmoment mit der am Rührer angreifenden Kraft mal dem Hebelarm, wobei die Kraft aus der Druckdifferenz vor und hinter den Rührerblättern resultiert. Damit resultiert aufgrund der verwendeten Auflösung an den Rührerblättern folgende Beziehung für das Drehmoment:

$$T_R = 2 \left(\sum_i r_i p_i A_i \cos \alpha_{BL} - \sum_j r_j p_j A_j \cos \alpha_{BL} \right) \quad (7.25)$$

Mit der Summation über i werden dabei alle Kontrollvolumina die an der Vorderseite der Rührerblätter angrenzen erfasst und mit der Summation über j diejenigen an der Rückseite (d.h. es sind die Blöcke 12, 14, 16 und 18 involviert). Die Flächen A_i und A_j sind die angrenzenden Seitenflächen der jeweiligen Kontrollvolumina und die Radien r_i und r_j beziehen sich auf die Seitenmitten. Die tangential wirksamen Flächen berechnen sich durch Multiplikation mit $\cos \alpha_{BL}$. Es ist ferner ein Faktor von zwei zu berücksichtigen, da nur die Hälfte des Rührbehälters berechnet wird.

Somit gilt für die Newtonzahl:

$$\text{Ne}(T_R) = 4\pi \rho_G^{-1} n_R^{-2} d_R^{-5} \left| \sum_i r_i p_i A_i - \sum_j r_j p_j A_j \right| \cos \alpha_{BL} \quad (7.26)$$

Die beiden Berechnungsverfahren liefern in der Regel leider keine identischen Werte. Dies ergibt sich zwangsläufig aufgrund unterschiedlicher Berechnungsfehler für die Dissipationsrate und die Druckdifferenzen. Werden die absoluten Fehler hinreichend klein, so konvergieren auch die beiden Berechnungsergebnisse für die Newtonzahl auf einen Wert.

In Abb. 7.55 ist die Abhängigkeit der beiden Newtonzahlen $\text{Ne}(\varepsilon)$ und $\text{Ne}(T_R)$ vom Diskretisierungsverfahren (d.h. vom Gewichtungsfaktor γ_{CDS}) und von der Gitterauflösung (s. Abschnitt 7.7 bzgl. den Einzelheiten der beiden Variationen) dargestellt, wobei eine reine Fluidströmung betrachtet wird.

Bei allen betrachteten Fällen ist die aus der Energiedissipation berechnete Newtonzahl deutlich kleiner als die mit dem Drehmoment bestimmte Kennzahl. Mit zunehmendem Gewichtungsfaktor γ_{CDS} steigt auch die Newtonzahl an. Lediglich $\text{Ne}(\varepsilon)$ bei G1 und $\gamma_{CDS} = 0$ widerspricht diesem Trend, was einen sehr hohen Fehler für diesen Fall vermuten lässt. Mit zunehmender Gitterauflösung steigt die Newtonzahl ebenfalls an, wobei die Änderungsrate von $\text{Ne}(T_R)$ als auch der Unterschied

⁷⁶An den Gleichungen 7.23-7.26 wird die zentrale Bedeutung des Rührerdurchmessers d_R deutlich, da bei der Berechnung der Leistungsaufnahme d_R mit der fünften Potenz eingeht. Um beim Suspendieren im Rührkessel ein Optimum bzgl. Newtonzahl bzw. Leistungsaufnahme zu erreichen empfehlen Liepe & Sperling [178] auf Basis einer Vielzahl von Suspendierversuchen ein Durchmesser Verhältnis von $d_R/D = 0.36$ (s. auch Abschnitt 7.4). Eine Verdichtung dieses umfangreichen experimentellen Wissens erfolgte auch in Form von Regressionsanalysen, so dass eine Vorhersage der Newtonzahl mit Hilfe von Modellgleichungen in Abhängigkeit von Rührertyp, Größenverhältnissen, Bewehrungsgrad usw. möglich wird (s. z.B. Liepe et al. [179]).

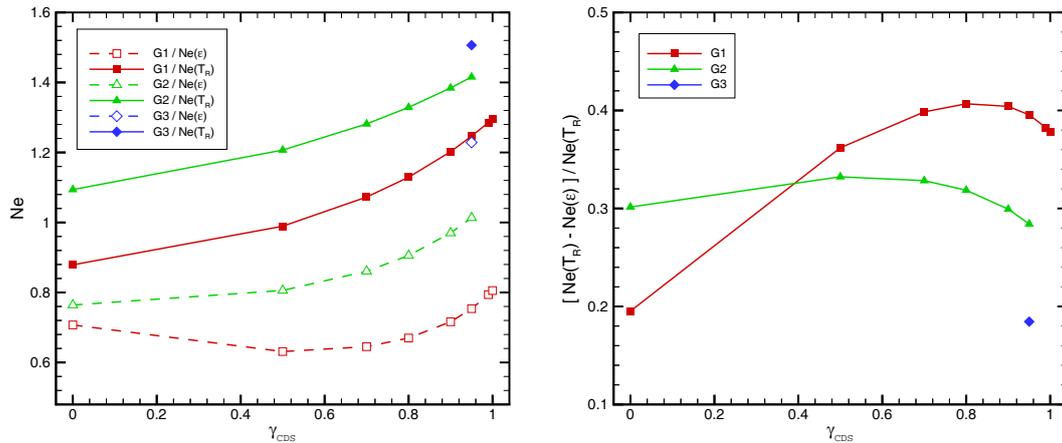


Abbildung 7.55: Newtonzahlen $Ne(T_R)$ und $Ne(\epsilon)$ in Abhängigkeit vom Diskretisierungsverfahren für die Gitter G1 - G3 (links) und die relative Abweichung der Berechnungsverfahren für die Newtonzahl (rechts)

zwischen $Ne(T_R)$ und $Ne(\epsilon)$ (s. Abb. 7.55 rechts) mit zunehmender Auflösung kleiner wird. Insgesamt ist zu bemerken, dass $Ne(T_R)$ bei Variation von γ_{CDS} und der Gitterauflösung deutlich weniger streut als $Ne(\epsilon)$, was durch die große Empfindlichkeit der Berechnung der Dissipationsrate auf beiden Variationen zu erklären ist. Die bereits in Abschnitt 7.7 herausgearbeitete Bedeutung von Diskretisierungsverfahren und Gitterauflösung wird hiermit noch einmal bestätigt. Dieser Zusammenhang ist vor allem dann von zentraler Bedeutung, wenn die primäre Zielgröße der Berechnungen die Newtonzahl darstellt.

In der Literatur findet sich für den betrachteten Berechnungsfall eine Newtonzahl von 1.5 (s. Liepe et al. [179], S. 134), welche sehr gut mit dem berechneten Wert von $Ne(T_R) = 1.506$ (G3, $\gamma_{CDS} = 0.95$) übereinstimmt.

| | | | | | | |
|--|--------------------|------|------|------|------|------|
| Fall | $d[\mu\text{m}] =$ | 100 | 200 | 200 | 200 | 500 |
| | $\varphi_P =$ | 0.01 | 0.01 | 0.02 | 0.03 | 0.01 |
| $Ne(\epsilon)/Ne(\epsilon, \varphi_P = 0)$ | | 1.18 | 1.16 | 1.35 | 1.60 | 1.09 |

Tabelle 7.8: Relative Änderung der Newtonzahl (berechnet aus der Energiedissipation) durch die Anwesenheit von Teilchen ($Ne(\epsilon)/Ne(\epsilon, \varphi_P = 0)$) für verschiedene Teilchengrößen d und Partikelvolumenanteile φ_P

Betrachtet man Zweiphasenströmungen, so ändern sich aufgrund der Anwesenheit von Teilchen und der damit resultierenden Phasenkopplung natürlich auch die Newtonzahlen. In Tab. 7.8 sind die relativen Änderungen (berechnet aus der Energie-

dissipation) $(Ne(\varepsilon)/Ne(\varepsilon, \varphi_P = 0))$ für verschiedene Teilchengrößen d und Partikelvolumenanteile φ_P zusammengefasst. Wie zu erwarten war sind die Effekte durch die Teilchenkonzentration dominant (je größer der Partikelvolumenanteil, desto mehr Energie muss in das System eingebracht werden), während die Teilchengröße nur einen sehr geringen Einfluss zeigt. Dieser kleine Effekt der Teilchengröße dürfte darauf zurückzuführen sein, dass die größeren Teilchen zu einem kleinen Teil nicht suspendiert sind und sich damit die effektiv wirksame Masse etwas verkleinert.

Weitere Ausführungen zur Bestimmung der Newtonzahl, insbesondere in Zusammenhang mit dem Konvergenzverhalten der gekoppelten Zweiphasenströmung, sind in Abschnitt 7.14 zu finden.

7.14 Konvergenzverhalten der Phasenkopplung

Die Bewertung der Konvergenz, d.h. eine Angabe der benötigten Anzahl an Kopplungsiterationen N_{KI} bzw. die Ermittlung der optimalen Anzahl an zusätzlichen inneren Lagrange-Schleifen N_L , d.h. Wiederholungen der Partikelberechnung bevor wieder zum Euler-Teil übergeben wird, gestaltet sich bei komplexen dreidimensionalen Zweiphasenströmungen deutlich schwieriger als bei relativ einfachen Strömungsformen. Es wurden daher im Rahmen dieser Arbeit verschiedene Konvergenzkriterien untersucht und im Folgenden zusammengefasst. Dabei zeigte sich, dass die Wahl eines geeigneten Konvergenzkriteriums stark von der hauptsächlich interessierenden Zielgröße abhängt und nur sinnvoll zu wählen ist, wenn diese a priori feststeht. So zeigt sich z.B. bei der Betrachtung der Newtonzahl ein höherer Bedarf an Kopplungsiterationen als bei einer reinen Betrachtung der Geschwindigkeitskomponenten.

Residuenverlauf

Üblicherweise werden zur Bewertung der Konvergenz von gekoppelten Zweiphasenströmungen die Verläufe der normierten Residuen herangezogen. In relativ einfachen Fällen, wie z.B. bei einer vertikalen Rohrströmung (s. Abschnitt 6.3.2), sind damit auch sinnvolle Bewertungen möglich. Bei der komplexen Strömung in Rührkesseln zeigte sich allerdings, dass die Übergänge nicht hinreichend scharf sind, so dass eine Analyse der Mindestanzahl an Kopplungsiterationen N_{KI} bzw. die Ermittlung der optimalen Anzahl an zusätzlichen inneren Lagrange-Schleifen N_L nur eingeschränkt möglich war.

In Abb. 7.56 sind die Verläufe der normierten Residuen mit zunehmender Anzahl an Kopplungsiterationen N_{KI} beispielhaft für den Fall mit $d = 100 \mu\text{m}$ und $\varphi_P = 0.01$ aufgetragen⁷⁷. Bei einer ausschließlichen Betrachtung der Residuenverläufe würde

⁷⁷Bei den weiteren betrachteten Fällen zeigten sich vergleichbare Verläufe.

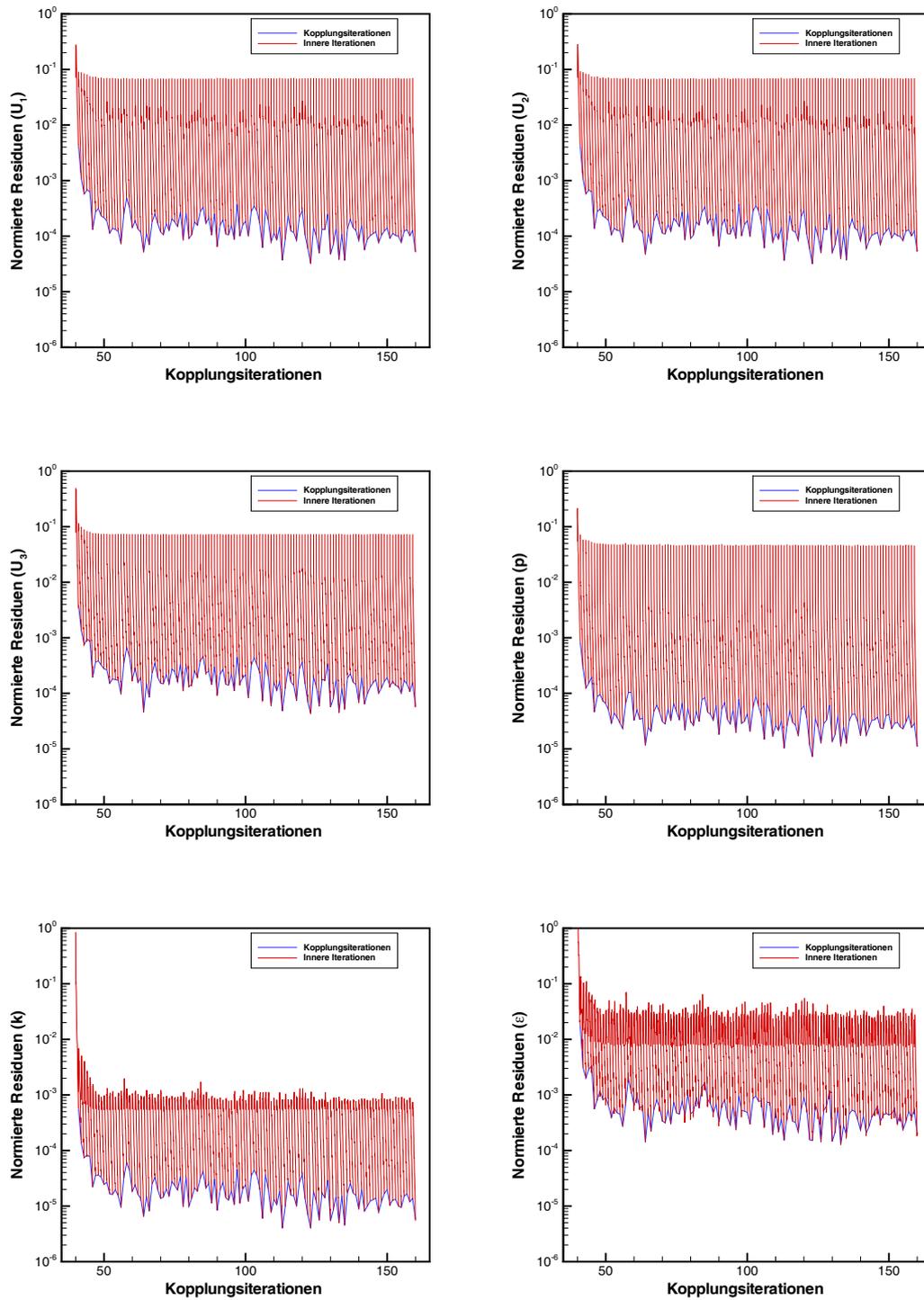


Abbildung 7.56: Konvergenzverhalten (Fluid) - Normierte Residuen bei zunehmender Anzahl an Kopplungsiterationen N_{KI} ($d = 100 \mu\text{m}$, $\varphi_P = 0.01$)

sich also bereits nach relativ wenigen Kopplungsiterationen ein konvergentes Verhalten zeigen. Wie im Folgenden aber noch gezeigt wird, ist dies bei anderen Kriterien nicht der Fall.

Die Auswertung verschiedener Residuenverläufe (Variation von Teilchengröße d und Partikelvolumenanteil φ_P) zeigte qualitativ, dass mit zunehmender Anzahl an inneren Lagrange-Schleifen N_L die Residuenverläufe in der Regel etwas niedriger liegen, d.h. man erhält eine geringfügige Verbesserung. Bei Teilchengrößen von $d = 500 \mu\text{m}$ liegen die Residuenverläufe leicht höher als bei $d = 100 \mu\text{m}$ und $d = 200 \mu\text{m}$. Mit zunehmender Beladung steigen die Residuen um bis zu eine Größenordnung. Durch eine Erhöhung von N_L lässt sich eine gewisse Angleichung unter Reduzierung der Fluktuationen erzielen. Generell sind die Fluktuationen umso geringer, je kleiner die Teilchen sind. Insgesamt sind die Unterschiede eher gering, so dass sich ein Optimum für N_L nur schlecht bestimmen lässt.

Monitorpunkt, -profil oder -fläche

Oft erfolgt die Bewertung der Konvergenz auch anhand der Beobachtung an einem Referenzpunkt, dem sogenannten Monitorpunkt. Dabei werden die absoluten oder relativen Änderungen von Iteration zu Iteration protokolliert. Werden die Unterschiede der verschiedenen Variablen immer kleiner, so liegt Konvergenz vor. Die Verwendung eines Monitorpunktes ist sinnvoll, wenn die Strömung an einem bestimmten Punkt repräsentativ ist und die Änderungen an dieser Stelle beobachtet werden können. Bei komplexen Strömungen ist dies allerdings in der Regel nicht gegeben, so dass alternativ viele Punkte oder Profile (wie z.B. bei der Rohrströmung in Abschnitt 6.3.2 realisiert) betrachtet werden müssen. Im Falle von Rührkesselströmungen sind aber selbst repräsentative Monitorprofile schwer zu definieren, so dass sich die Bewertung der Konvergenz komplex und aufwändig gestaltet.

Weiterhin ist zu beachten, dass kleine lokale Schwankungen um einen Mittelwert, welche das Gesamtergebnis nur vernachlässigbar beeinflussen, das Konvergenzverhalten im Falle von Monitorpunkten oder -profilen empfindlich stören können. Dieser Effekt wird umso relevanter, je stärker die Lokalisierung der Bewertungskriterien erfolgt, d.h. Monitorpunkte sind diesbezüglich am kritischsten zu betrachten.

Eine gewisse Verbesserung bringt die Betrachtung ganzer Schnittflächen, da ein weiter Bereich abgedeckt wird. Die Vielzahl an Informationen lassen sich aber noch schwerer zu einem Bewertungskriterium zusammenfassen. Aus Ermangelung einer Kennzahl (eine Verlaufsdarstellung ist nur noch als Videosequenz möglich), bleibt die Bewertung daher zu einem großen Teil subjektiv und damit schwer fassbar.

Intensität der Segregation

Der zunächst als vielversprechend erachtete Verlauf der Intensität der Segregation I_S mit zunehmender Anzahl an Kopplungsiterationen N_{KI} (analog zu der Betrachtung

der Fehler in Abschnitt 7.12) erwies sich wie auch die Betrachtung der Residuen als nicht hinreichend sensitiv bezüglich der Bewertung einer Konvergenz der Kopplung.

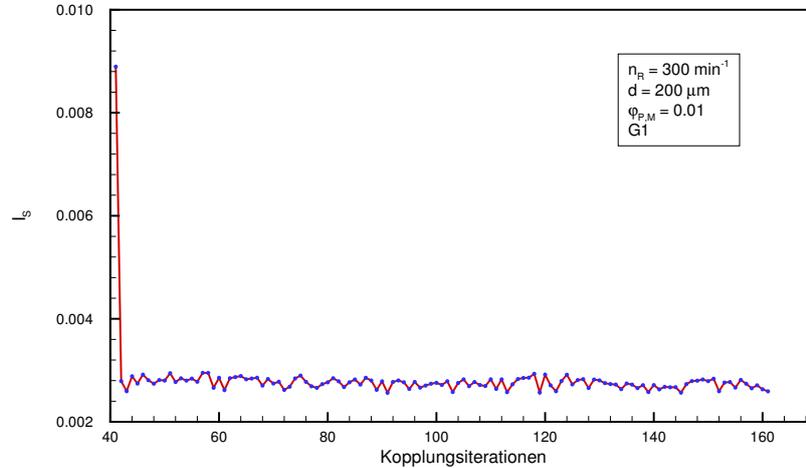


Abbildung 7.57: Konvergenzverhalten - Intensität der Segregation I_S bei zunehmender Anzahl an Kopplungsiterationen N_{KI}

Wie in Abb. 7.57 beispielhaft für den Fall $d = 100 \mu\text{m}$ und $\varphi_P = 0.01$ dargestellt, schwankt I_S bereits nach kurzer Übergangsphase (im Anschluss an die Initialisierung⁷⁸) konstant um einen Mittelwert.

Feststoffverteilung über die Höhe

Die Betrachtung der Feststoffverteilung über die Höhe (Mittelwert und Standardabweichung von φ_P in verschiedenen Höhenschichten) analog zu den Auswertungen in Abschnitt 7.12 zeigte ebenfalls keinen auswertbaren Konvergenzverlauf. Schwankungen machen eine sinnvolle Auswertung schwierig und daher nicht praktikabel.

Zur Verdeutlichung sind in Abb. 7.58 die Konzentrationsverläufe in ausgewählten Höhenschichten exemplarisch für den Fall $d = 200 \mu\text{m}$, $\varphi_P = 0.02$ und $N_L = 4$ ⁷⁹ aufgetragen, wobei dieser Fall als repräsentativ erachtet werden kann, da bei den anderen betrachteten Fällen ähnliche Verläufe vorliegen. Deutlich sind die erwähnten Schwankungen sowohl bei den Mittelwerten als auch bei den Standardabweichung zu erkennen, wobei insbesondere die Schichten in sehr kleinen und sehr großen Höhen auffallen.

⁷⁸Die ersten 40 Kopplungsiterationen wurden ohne Partikel-Partikel-Kollisionen berechnet, so dass diese Iterationen bei der Betrachtung ausgeklammert wurden.

⁷⁹Die Anzahl innerer Lagrange-Schleifen N_L sowie deren Bedeutung für die Berechnungen wird im anschließenden Abschnitt detailliert diskutiert.

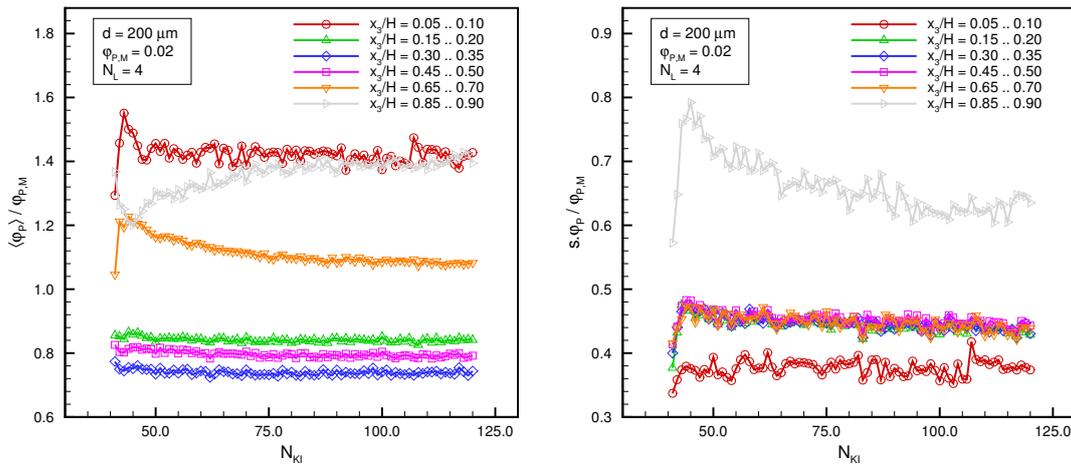


Abbildung 7.58: Mittlerer Partikelvolumenanteil (links) sowie die entsprechende Standardabweichung (rechts) in ausgewählten Höhenschichten als Funktion der Kopplungsiterationen N_{KI} für den Fall $d = 200 \mu\text{m}$, $\varphi_P = 0.02$ und $N_L = 4$ ($G1$, $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $f_{KV} = 10$)

In Abb. 7.59 ist entsprechend eine Variation von N_L dargestellt. Hier zeigt sich wohl der reduzierte Bedarf an Kopplungsiterationen N_{KI} bei zunehmendem Wert von N_L , ein Einfluss auf die Schwankungen (und damit auf die Ermittlung eines geeigneten Konvergenzkriteriums) ergibt sich aber nicht.

Newtonzahl

Zur Bewertung des Konvergenzverhaltens gekoppelter Zweiphasenströmungen in Rührkesseln sowie zur Analyse zusätzlicher innerer Lagrange-Schleifen N_L , hat sich die Newtonzahl als integrale Kennzahl am besten bewährt. Damit war es möglich die Optimierung des Simulationsablauf, z.B. durch Variation von N_L , zu bewerten.

In den vorliegenden Berechnungen wurde für die inneren Lagrange-Schleifen eine Referenzzeit von $t_{1P} = 20000 \text{ s}$ verwendet. Eine Ausnahme stellt allerdings die jeweils letzte Schleife dar, dort wurde ein Wert von $t_{1P} = 30000 \text{ s}$ verwendet. Bei der Berechnung des Fluids wurden 1000 innere Iterationen pro Kopplungsiteration berechnet. In Tab. 7.9 sind für jeweils eine Kopplungsiteration die Summen der betrachteten Zeiten t_{1P} sowie die Anzahl an Euler-Iterationen für verschiedene Werte von N_L zusammengefasst.

Bei der Nutzung eines Prozessors der in Merseburg ($MLU-MVT$) verfügbaren IBM-SP2 ist bei der Gitterauflösung G1 eine Berechnungszeit von nahezu konstant $\approx 10 \text{ min}$ nötig, welche hier als Referenzzeit betrachtet wird. Die Berechnung der Teilchenbahnen benötigt deutlich mehr Zeit.

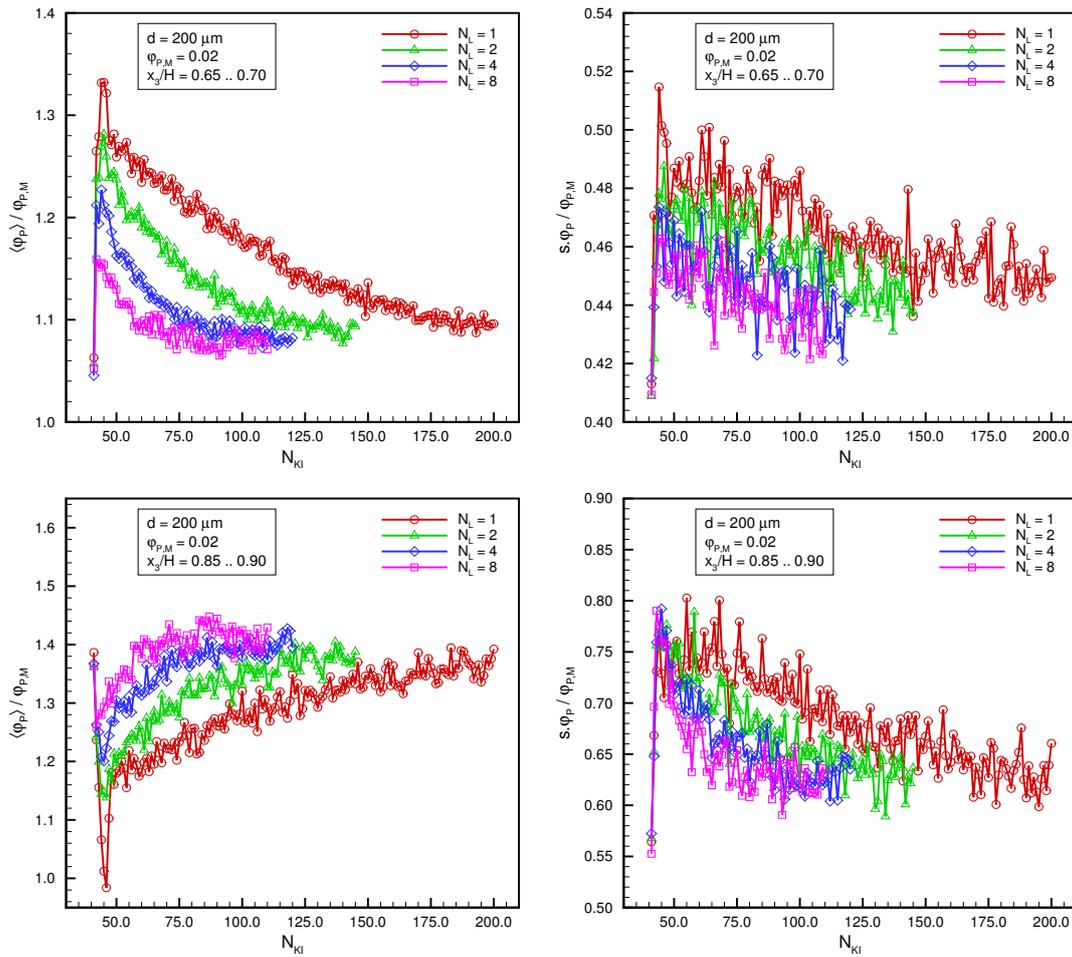


Abbildung 7.59: Hörschichtgemittelter Partikelvolumenanteil (links) sowie die entsprechende Standardabweichung (rechts) in zwei ausgewählten Hörschichten als Funktion von N_{KI} und N_L für den Fall $d = 200 \mu\text{m}$, $\varphi_P = 0.02$

| N_L | 1 | 2 | 4 | 8 |
|-----------------------------|----------------|----------------|----------------|-----------------|
| Lagrange: $\sum t_{1P}$ [s] | $3 \cdot 10^4$ | $5 \cdot 10^4$ | $9 \cdot 10^4$ | $17 \cdot 10^4$ |
| Euler: | $1 \cdot 10^4$ | $1 \cdot 10^4$ | $1 \cdot 10^4$ | $1 \cdot 10^4$ |

Tabelle 7.9: Anzahl an benötigten Iterationen (Euler-Teil) bzw. Teilchenbahnen (Lagrange-Teil) für eine Kopplungsiteration bei verschiedenen Werten von N_L

Die optimale Anzahl an inneren Lagrange-Schleifen N_L hängt vom betrachteten Fall ab. In Tab. 7.10 sind einige Fälle für $N_L = 1$ vergleichend zusammengestellt. Neben der Gesamtberechnungszeit für eine Kopplungsiteration ist auch der jeweilige

| | | | | | | |
|--|--------------------|--------------|--------------|---------------|---------------|--------------|
| Fall | $d[\mu\text{m}] =$ | 100 | 200 | 200 | 200 | 500 |
| | $\varphi_P =$ | 0.01 | 0.01 | 0.02 | 0.03 | 0.01 |
| Berechnungszeit für eine Kopplungsiteration [min] | | ≈ 90 | ≈ 60 | ≈ 110 | ≈ 160 | ≈ 60 |
| Lagrange-Anteil [%] | | 89 | 82 | 91 | 94 | 82 |

Tabelle 7.10: Gesamtberechnungszeit für eine Kopplungsiteration sowie der jeweilige Anteil des Lagrange-Teils für verschiedene Fälle bei $N_L = 1$

Anteil der Lagrange-Berechnungszeit an der Gesamtberechnungszeit eingetragen. Dabei zeigt sich, dass die Berechnungszeit mit zunehmender Konzentration linear ansteigt. Dies erklärt sich primär durch die erhöhte Anzahlkonzentration in den einzelnen Kontrollvolumina und der daraus resultierenden Reduzierung der maximal möglichen Zeitschritte. Analog erhöht sich die Berechnungszeit bei kleineren Teilchen und gleichem Volumenanteil, da auch hier die Anzahlkonzentration steigt.⁸⁰ Der beschriebene Effekt wird bei den größten betrachteten Teilchen überlagert von einer verstärkten Absetzneigung, welche zu vermehrten Wandkollisionen führt und damit den Berechnungsaufwand wieder ansteigen lässt.

| | | | | |
|---------------------------------------|------|------|------|------|
| N_L | 1 | 2 | 4 | 8 |
| Faktor für die Berechnungszeit ... | | | | |
| ... bei einem Lagrange-Anteil von 80% | 1.00 | 1.53 | 2.60 | 4.73 |
| ... bei einem Lagrange-Anteil von 95% | 1.00 | 1.63 | 2.90 | 5.43 |

Tabelle 7.11: Erhöhungsfaktoren für die Berechnungszeiten einer Kopplungsiteration bei Erhöhung von N_L unter Berücksichtigung des Lagrange-Anteils an der Gesamtberechnungszeit

Durch die Erhöhung der Anzahl an inneren Lagrange-Schleifen von $N_L = 1$ auf 2, 4 bzw. 8 erhöhen sich auch die Berechnungszeiten für eine Kopplungsiteration um die in Tab. 7.11 zusammengestellten Faktoren, wobei diese wiederum auch vom Lagrange-Anteil (s. Tab. 7.10) abhängen. Die Verwendung von $N_L > 1$ ist also nur dann effizient, wenn entsprechend weniger Kopplungsiterationen bis zum Erreichen

⁸⁰Wie in Abschnitt 5.2.1 beschrieben, muss der Zeitschritt aufgrund der Modellierungsannahmen von Partikel-Partikel-Kollisionen (s. Abschnitt 4.5) begrenzt werden. Der aus diesem Kriterium maximal zulässige Zeitschritt $\Delta t_{max,PPK}$ berechnet sich mit Hilfe von Gl. 4.64 und es gilt für monodisperse Teilchen unter Berücksichtigung von Gl. 2.1: $\Delta t_{max,PPK} \propto d/\varphi_P$. Dabei wurde angenommen, dass der Betrag der Differenzgeschwindigkeit $|\mathbf{v}_{AB}|$ in erster Näherung unabhängig von der Teilchengröße und dem Volumenanteil ist. Da bereits bei moderaten Konzentrationen die Limitierung des Zeitschritts aufgrund des PPK-Kriteriums erfolgt, führt eine Reduzierung von $\Delta t_{max,PPK}$ direkt zu einer Erhöhung der Berechnungszeit im Lagrange-Teil.

einer konvergenten Lösung benötigt werden.

Betrachtet man den Fall $d = 200 \mu\text{m} / \varphi_P = 0.02$, so ergibt sich ein Endwert für $\text{Ne}(\varepsilon)/\text{Ne}(\varepsilon, \varphi_P = 0)$ von etwa 1.347. Erlaubt man eine Toleranz von $\approx 0.5\%$ des Endwerts, so lassen sich die Iterationszähler für $\text{Ne}(\varepsilon)/\text{Ne}(\varepsilon, \varphi_P = 0) = 1.34$ vergleichen. Die entsprechenden Werte für die Anzahl an benötigten Kopplungsiterationen N_{KI} bis zum Erreichen des Schwellwerts sind in Abb. 7.60 hervorgehoben und in Tab. 7.12 zusammengefasst. Die resultierenden Rechenzeiten bis zum Schwellwert (absolut t_{calc} bzw. relativ $t_{calc,rel} = t_{calc}/t_{calc}(N_L = 1)$) berechnen sich mit Hilfe von Tab. 7.10 sowie Tab. 7.11 und sind ebenfalls in Tab. 7.12 eingetragen.

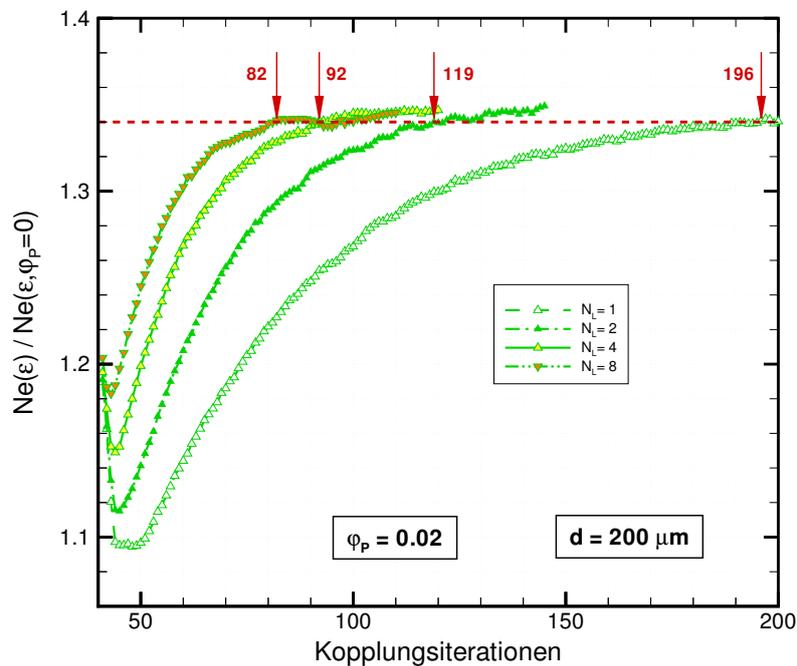


Abbildung 7.60: $\text{Ne}(\varepsilon)/\text{Ne}(\varepsilon, \varphi_P = 0)$ in Abhängigkeit von der Anzahl an Kopplungsiterationen N_{KI} und an inneren Lagrange-Schleifen N_L für den Fall $d = 200 \mu\text{m} / \varphi_P = 0.02$

In Abb. 7.60 wird deutlich, dass mit zunehmender Anzahl an inneren Lagrange-Schleifen N_L der Übergangspunkt zum konvergierten Endwert immer deutlicher wird und sich nahezu ein Knick im Verlauf einstellt. Durch die Erhöhung von N_L wird die Entkopplung zwischen den beiden Phasen aber auch immer stärker, so dass sich bei sehr hohen Werten von N_L ein Schwingen um den Endwert einstellen kann.

Wertet man die Fälle $d = 100 \mu\text{m} / \varphi_P = 0.01$ bzw. $d = 200 \mu\text{m} / \varphi_P = 0.01$ analog aus (s. auch Abb. 7.61 oben), d.h. auch hier wird der Schwellwert von $\text{Ne}(\varepsilon)/\text{Ne}(\varepsilon, \varphi_P = 0)$ auf $\approx 0.5\%$ des Endwertes gesetzt, so erhält man die in

| $d = 200 \mu\text{m} / \varphi_P = 0.02$ | | | | |
|--|---------------|---------------|---------------|---------------|
| N_L | 1 | 2 | 4 | 8 |
| N_{KI} | 196 | 119 | 92 | 82 |
| t_{calc} [h] | ≈ 359 | ≈ 351 | ≈ 477 | ≈ 791 |
| $t_{calc,rel}$ | 1.00 | 0.98 | 1.33 | 2.20 |

Tabelle 7.12: Anzahl an benötigten Kopplungsiterationen N_{KI} bis zum Erreichen des Schwellwerts sowie die dazugehörigen Rechenzeiten (absolut t_{calc} bzw. relativ $t_{calc,rel} = t_{calc}/t_{calc}(N_L = 1)$) für den Fall $d = 200 \mu\text{m} / \varphi_P = 0.02$

Tab. 7.13 zusammengestellten Rechenzeiten und Kopplungsiterationen.

| | $d = 100 \mu\text{m} / \varphi_P = 0.01$ | | | $d = 200 \mu\text{m} / \varphi_P = 0.01$ | | |
|----------------|--|---------------|---------------|--|---------------|---------------|
| N_L | 1 | 2 | 4 | 1 | 2 | 4 |
| N_{KI} | 141 | 102 | 79 | 101 | 81 | 70 |
| t_{calc} [h] | ≈ 212 | ≈ 243 | ≈ 329 | ≈ 101 | ≈ 126 | ≈ 187 |
| $t_{calc,rel}$ | 1.00 | 1.15 | 1.55 | 1.00 | 1.25 | 1.85 |

Tabelle 7.13: Anzahl an benötigten Kopplungsiterationen N_{KI} bis zum Erreichen des Schwellwerts sowie die dazugehörigen Rechenzeiten (absolut t_{calc} bzw. relativ $t_{calc,rel} = t_{calc}/t_{calc}(N_L = 1)$) für die Fälle $d = 100 \mu\text{m} / \varphi_P = 0.01$ und $d = 200 \mu\text{m} / \varphi_P = 0.01$

Für den Fall $d = 200 \mu\text{m} / \varphi_P = 0.03$ zeigt sich ein ähnliches Verhalten wie bei den bereits beschriebenen Fällen (s. Abb. 7.61 unten). Eine direkte Auswertung in Hinblick auf effektive Rechenzeit ist aber nicht möglich, da die Anzahl an inneren Lagrange-Schleifen N_L erst im Laufe der Berechnungen erhöht wurde. Im Fall $d = 500 \mu\text{m} / \varphi_P = 0.01$ bringt die Erhöhung von N_L praktisch keine Beschleunigung (s. Abb. 7.61 oben), allerdings wird ein Überschwinger, wie er bei der Berechnung mit $N_L = 1$ vorliegt unterdrückt.

Insgesamt betrachtet erscheint der Einsatz von mehreren inneren Lagrange-Schleifen (d.h. $N_L > 1$) bei relativ kleinen Konzentrationen nicht als sinnvoll, da sich die Rechenzeit dadurch nicht verringern lässt. Bei höheren Konzentrationen ist für $N_L = 2$ eine Beschleunigung zu erkennen, während bei zu hohen Werten von N_L die Entkopplung der Phasen wieder überwiegt und sich die Berechnungszeit erhöht. Natürlich ist bei diesen Aussagen zu bedenken, dass die Gitterauflösung einen erheblichen Einfluss zeigen kann und somit eine Verschiebung der optimalen Werte für N_L nicht ausgeschlossen ist.

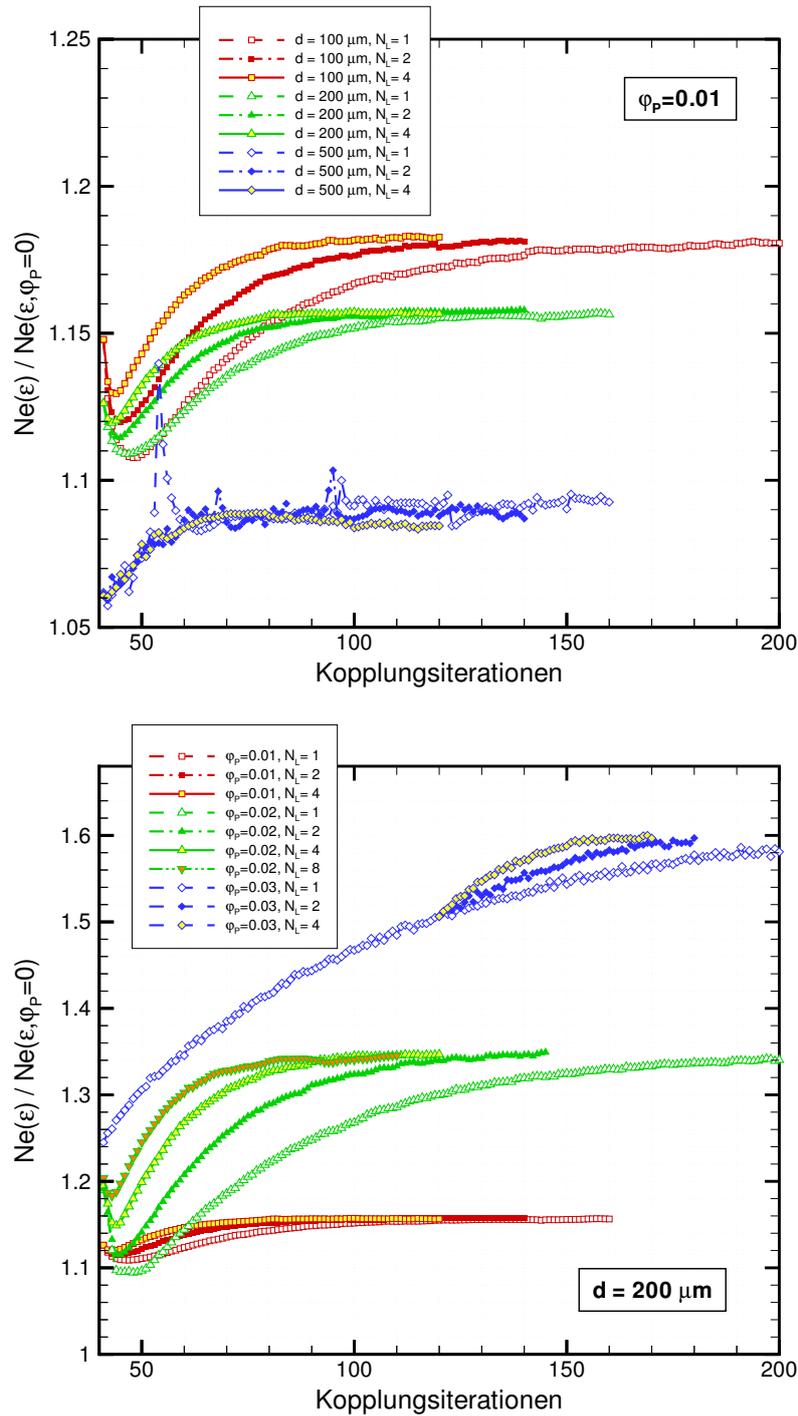


Abbildung 7.61: $Ne(\varepsilon)/Ne(\varepsilon, \varphi_P = 0)$ in Abhängigkeit von der Anzahl an Kopplungsiterationen N_{KI} und an inneren Lagrange-Schleifen N_L bei verschiedenen Teilchengrößen (oben) und Beladungen (unten)

7.15 Gegenüberstellung von Fluid- und Partikelströmung

Hier sollen zunächst die Fluid- und Partikeleigenschaften exemplarisch für den Fall mit $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $d = 200 \mu\text{m}$ und $\varphi_{P,M} = 0.02$ (G1) gegenübergestellt werden, um die Unterschiede zu verdeutlichen. In Abb. 7.62 sind die normierten Geschwindigkeitskomponenten bei $x_3 = 120 \text{ mm}$ vergleichend dargestellt, wobei ergänzend jeweils rechts die Differenzgeschwindigkeit⁸¹ visualisiert ist.

Insgesamt sind die Unterschiede eher gering, da die Teilchen dem Fluid gut folgen können. Deutliche Abweichungen liegen allerdings an der Behälterwand und im Bereich des Rührers vor. An der Wand unterscheidet sich primär die vertikale Komponente, wobei die Teilchen langsamer sind als das Fluid. Teilchen, welche die Rührerzone über die Rührerblattspitzen verlassen, tragen ihren im Rührerstrom gewonnenen Impuls mit in die angrenzenden Bereiche, so dass an diesen Stellen die Teilchen dem Fluid vorausseilen.

Ergänzend zu Abb. 7.62 sind in Abb. 7.63 die Geschwindigkeitsdifferenzen bei $\theta = 90^\circ$ aufgetragen. Hier werden die Unterschiede im Rührerstrom und insbesondere an dessen Rändern deutlich. Auch können Teilchen durch Dispersion mit hohem Impuls aus den Kernbereichen des Abstroms herausgetragen werden und somit dem Fluid vorausseilen. Mit zunehmender Teilchengröße werden die beschriebenen Abweichungen verstärkt.

Der Einfluss der Gitterauflösung wurde für das Fluid in Abschnitt 7.7 bereits ausführlich diskutiert. Natürlich reagiert auch die disperse Phase auf Änderungen der Gitterauflösung, wobei die Aussagen aus Abschnitt 7.7 im Wesentlichen auch auf die Partikelphase zutreffen. Der Vergleich zwischen den gemessenen und berechneten Partikeleigenschaften ($d = 200 \mu\text{m}$, $\varphi_P \rightarrow 0$) in den Abbildungen 7.64-7.67⁸² erfolgt daher analog zum entsprechenden Vergleich bei der fluiden Phase. Da der betrachtete Partikelvolumenanteil sehr klein war, erfolgten die Berechnung ohne Phasenkopplung und ohne Partikel-Partikel-Kollisionen.

Sowohl die Messungen als auch die Rechnungen skalieren etwas schlechter mit der Rührerdrehzahl als das Fluid. Dies resultiert aus der diskreten Natur der dispersen Teilchen, so dass die Auswertung einer begrenzten Anzahl an Teilchen zu einer gewissen Streuung führt. Insgesamt ist die Güte der Übereinstimmung mit der des Fluids vergleichbar.

⁸¹Bei der fluiden Phase werden an Wänden aufgrund der Hafttrandbedingung alle Geschwindigkeitskomponenten zu Null gesetzt, während bei der dispersen Phase an der Wand die Werte des wandnächsten Kontrollvolumens gesetzt werden. Da dies die Physik nicht sauber widerspiegelt, wird bei der Auswertung dieser Bereich ausgeklammert und die Geschwindigkeitsdifferenz zu Null berechnet wird. Lediglich für die tangentielle Komponente an den Rührerblättern war diese Korrektur nicht möglich.

⁸²Ergänzend zu den Abbildungen 7.64-7.67 sind in Abschnitt A.7 auch entsprechende Profile der Partikeleigenschaften für Teilchen mit $d = 500 \mu\text{m}$ zusammengestellt. Im Vergleich zum Fall mit $d = 200 \mu\text{m}$ lassen sich bei den größeren Teilchen nahezu die gleichen Aussagen treffen.

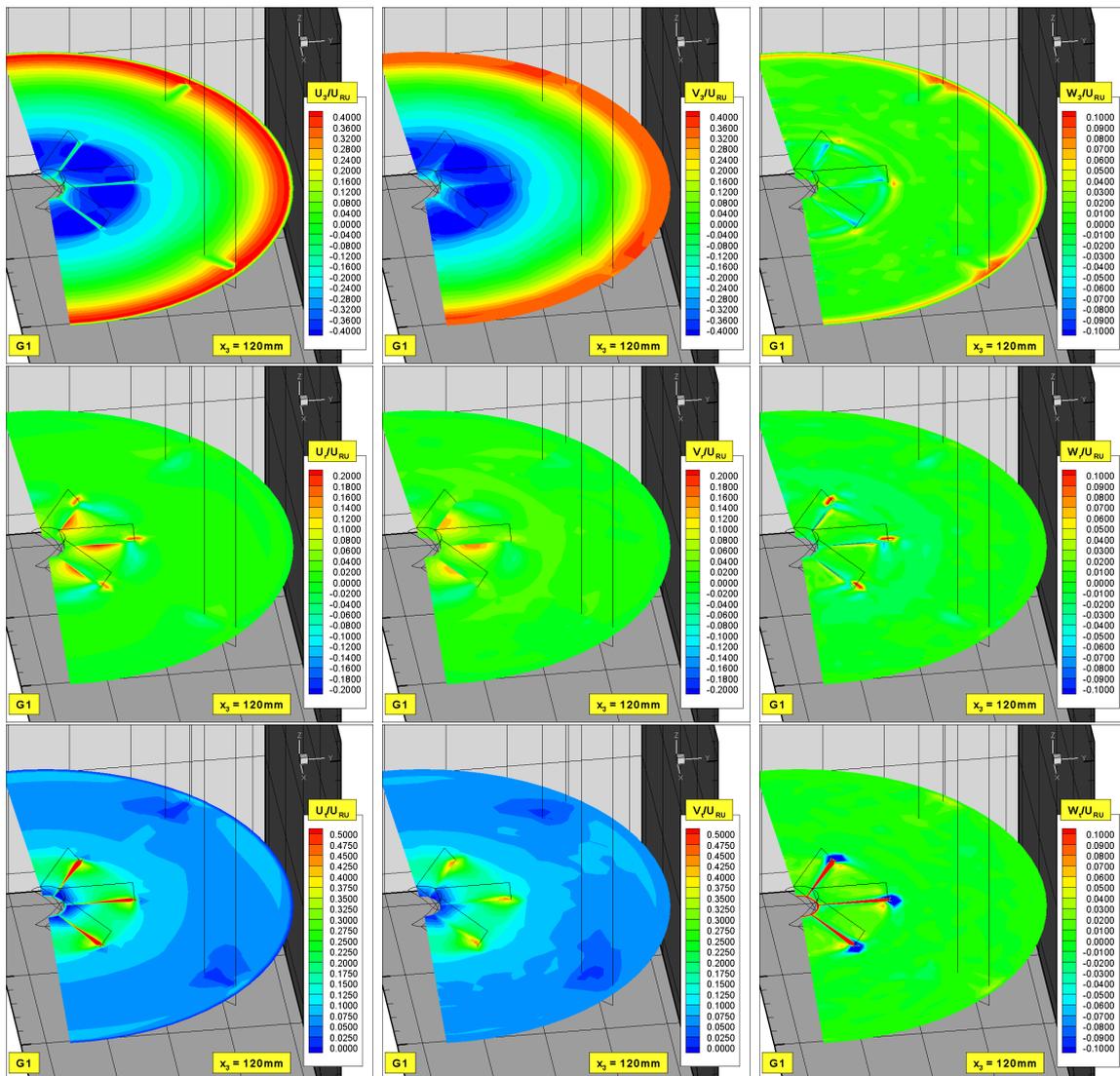


Abbildung 7.62: Räumliche Verteilung der normierten Geschwindigkeitskomponenten bei $x_3 = 120$ mm

Beim Partikelvolumenanteil zeigen sich deutliche Unterschiede zwischen den Berechnungsgittern G1 und G2 unterhalb des Rührers und an der Behälterwand. Hier ist vermutlich die bessere Auflösung der Geschwindigkeitgradienten an der Wand bei G2 verantwortlich, welche z.B. zu höheren vertikalen Geschwindigkeiten führt. Durch höhere Geschwindigkeiten Richtung Boden kommt es verstärkt zu Absetzverhalten und hohen Partikelvolumenanteilen am Behälterboden. Lokale Konzentrationsüberhöhungen aufgrund höherer Gitterauflösung führen also zu der Notwendigkeit der Berücksichtigung der Phasenkopplung sowie von Partikel-Partikel-Kollisionen, um unphysikalische Konzentrationsspitzen abzubauen.

In Abb. 7.68 ist die Feststoffverteilung über die Behälterhöhe, um den Effekt

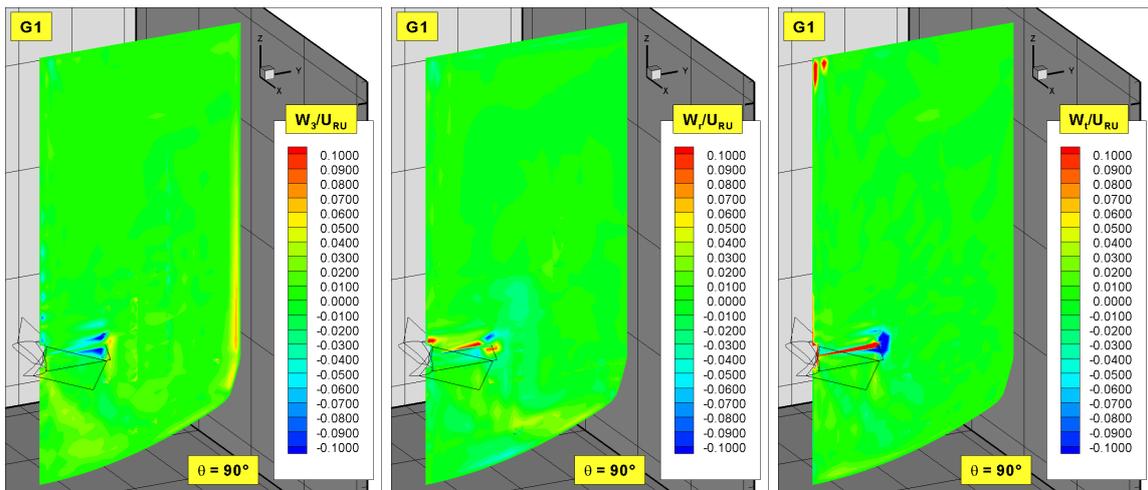


Abbildung 7.63: Räumliche Verteilung der normierten Geschwindigkeitsdifferenzen bei $\theta = 90^\circ$

der Gitterauflösung und der Teilchengröße auf den mittleren Partikelvolumenanteil $\langle \varphi_P \rangle$ und die entsprechende Standardabweichung s_{φ_P} in den verschiedenen Höhenschichten zu bewerten. Das Vorgehen entspricht dabei dem in Abschnitt 7.12. Insgesamt sind bei der höheren Gitterauflösung G2 die Abweichungen vom mittleren Partikelvolumenanteil $\varphi_{P,M}$ ausgeprägter und auch die entsprechenden Streuungen fallen höher aus. Der Effekt der Teilchengröße ist schwächer, wobei die kleineren Teilchen eine etwas bessere Gleichverteilung über die Höhe zeigen. Die größten Unterschiede liegen in Bodennähe vor, sowohl bei $\langle \varphi_P \rangle$ als auch bei s_{φ_P} . Im folgenden Abschnitt wird der Effekt der Teilchengröße noch näher betrachtet.

Bei zunehmender Feststoffkonzentration zeigen sich trotz Unterrelaxierung Schwankungen während der Kopplungsiterationen. Um diese herauszufiltern wurden in Abb. 7.69 die jeweils letzten 10 bzw. 20 Kopplungsiterationen gemittelt ($N_M = 10$ bzw. $N_M = 20$). Dabei bringt die Erhöhung von N_M auf 20 praktisch keine weitere Verbesserung, weder bei $\langle \varphi_P \rangle$ noch bei s_{φ_P} . Daher wird bei allen weiteren Darstellungen der Konzentration über die Höhe $N_M = 10$ verwendet. Erwartungsgemäß hat auch die Variation von N_L keinen Einfluss auf die Verteilung über die Höhe. Ein Effekt der Vorgehensweise kann also nahezu ausgeschlossen werden. Andere Kombinationen von d und $\varphi_{P,M}$ liefern ähnliche Bilder und führen zu analogen Aussagen. Der in Abb. 7.69 dargestellte Fall mit $d = 200 \mu\text{m}$ und $\varphi_{P,M} = 0.02$ ist daher repräsentativ für alle in dieser Arbeit betrachteten Fälle.

Bei entsprechender Auswertung der Fluideigenschaften in Profilen (z.B. in konstanten Höhen) bewirkt eine Mittelung der letzten Kopplungsiterationen praktisch keine Veränderung, da die Schwankungen nur sehr schwach ausgeprägt sind. Fluktuationen wie sie bei φ_P auftreten übertragen sich praktisch nicht auf die Fluideigenschaften, d.h. die Unterrelaxation wirkt hier in hinreichendem Maße.

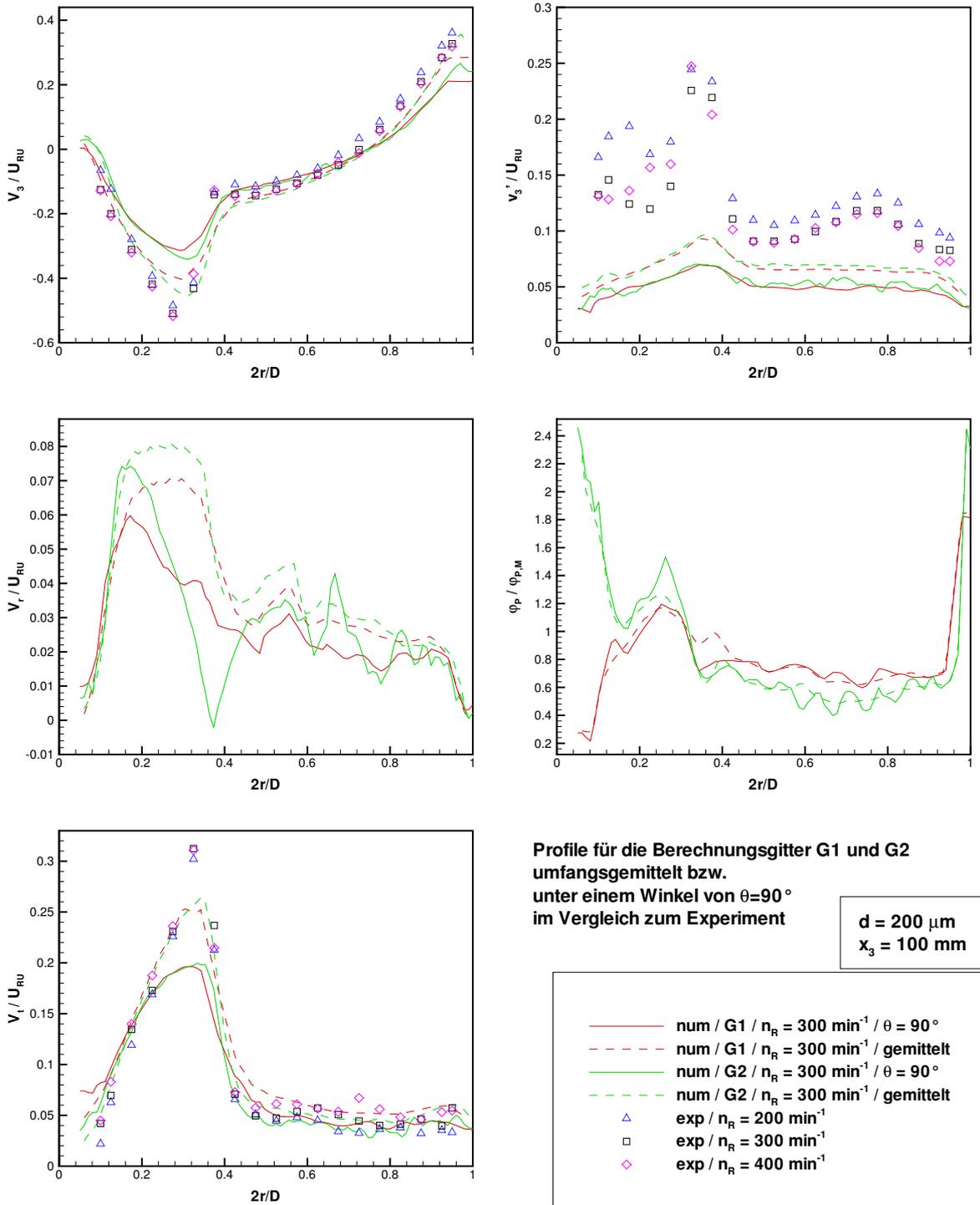


Abbildung 7.64: Partikeleigenschaften auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) bei $x_3 = 100 \text{ mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1 bzw. G2, $d = 200 \mu\text{m}$, $\varphi_P \rightarrow 0$)

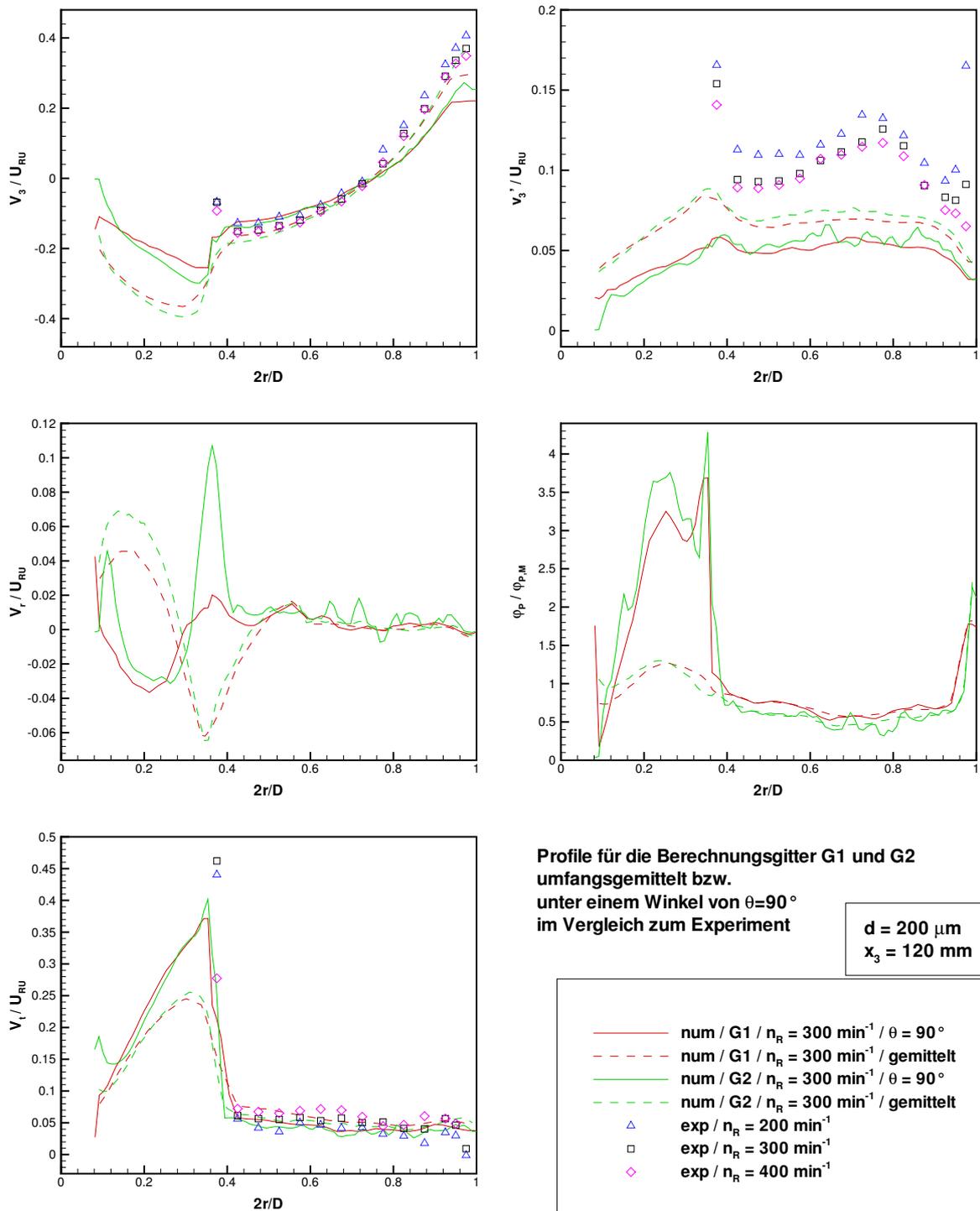


Abbildung 7.65: Partikeleigenschaften auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) bei $x_3 = 120 \text{ mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1 bzw. G2, $d = 200 \mu\text{m}$, $\varphi_P \rightarrow 0$)

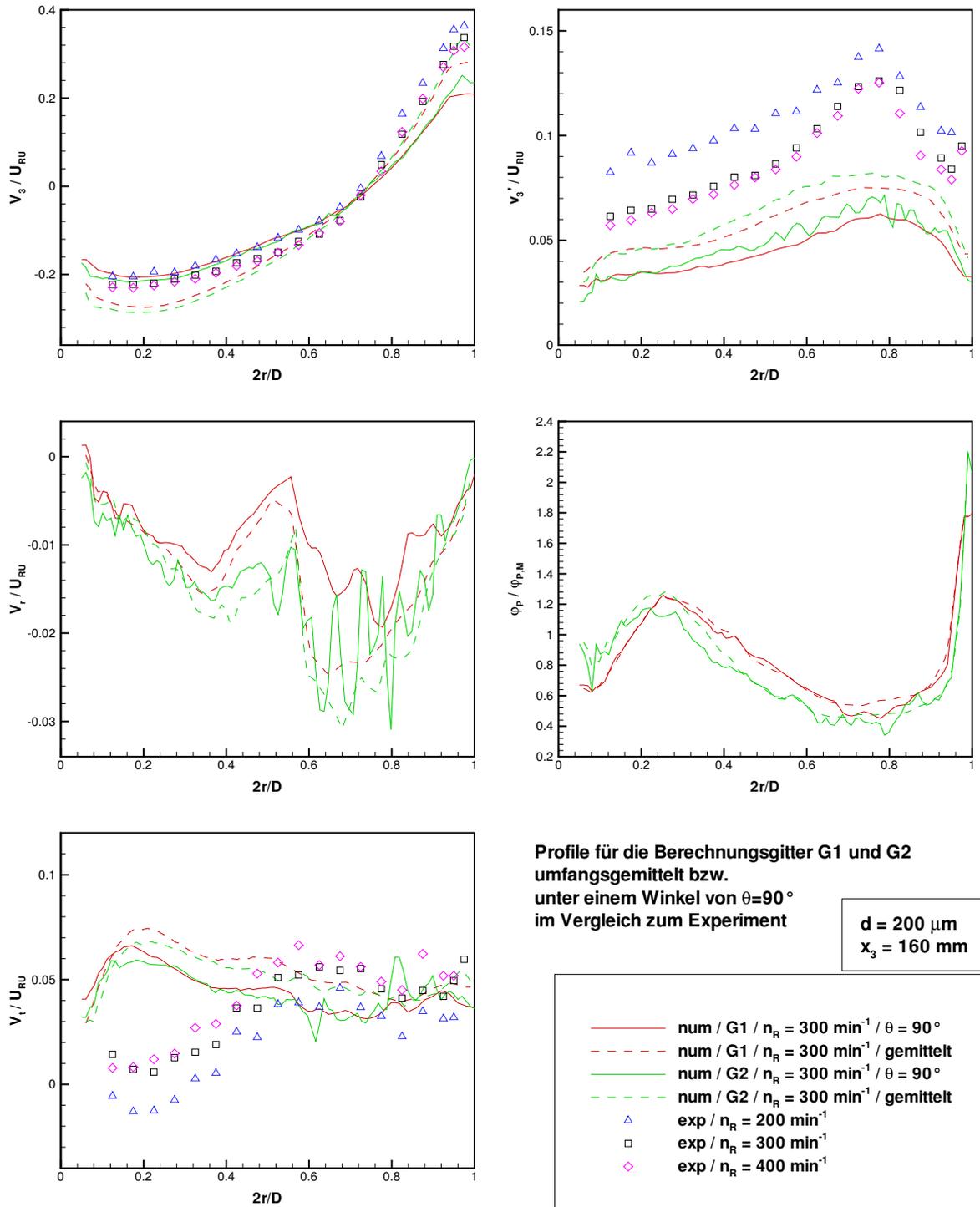


Abbildung 7.66: Partikeleigenschaften auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) bei $x_3 = 160 \text{ mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1 bzw. G2, $d = 200 \mu\text{m}$, $\varphi_P \rightarrow 0$)

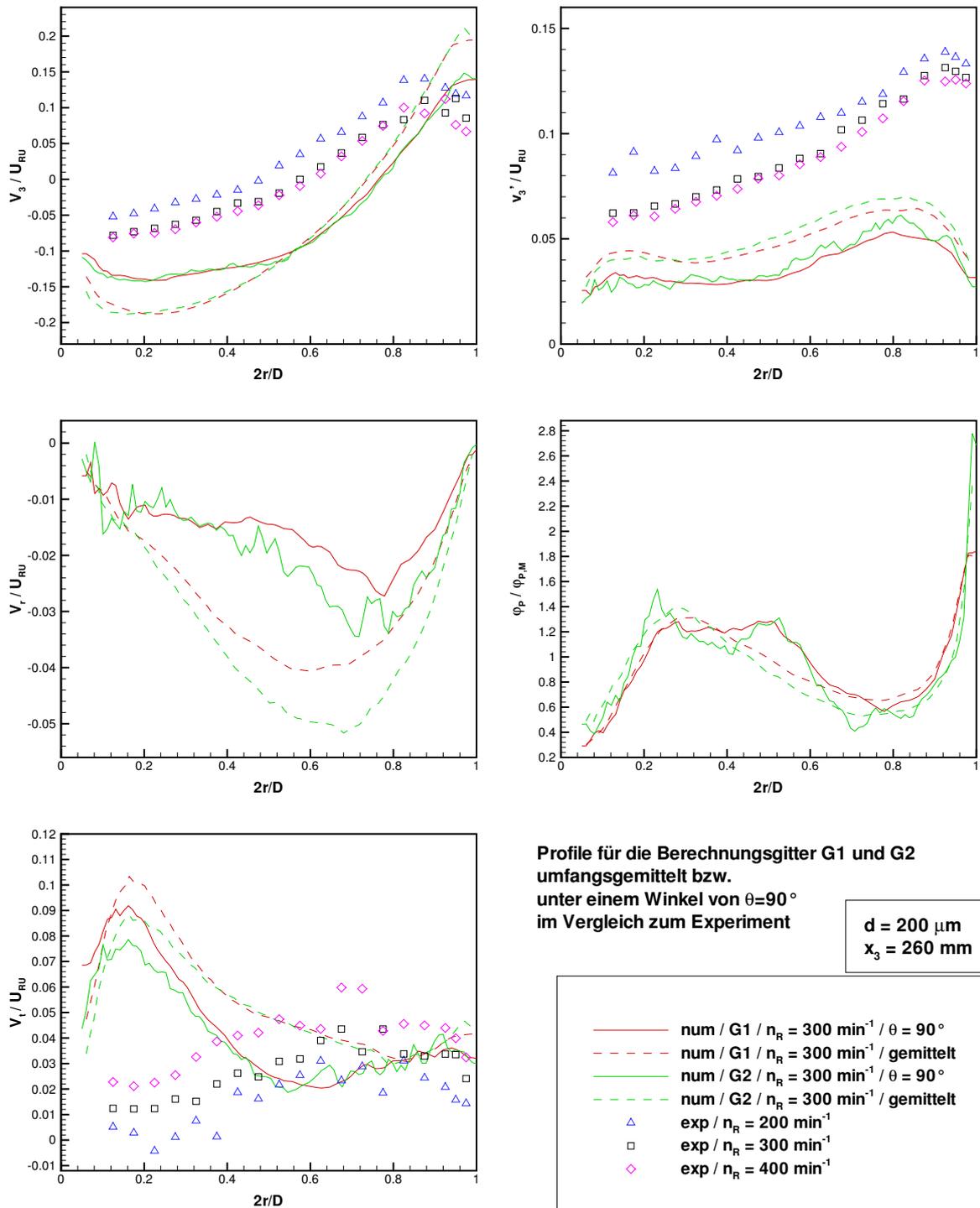


Abbildung 7.67: Partikeleigenschaften auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) bei $x_3 = 260 \text{ mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1 bzw. G2, $d = 200 \mu\text{m}$, $\varphi_P \rightarrow 0$)

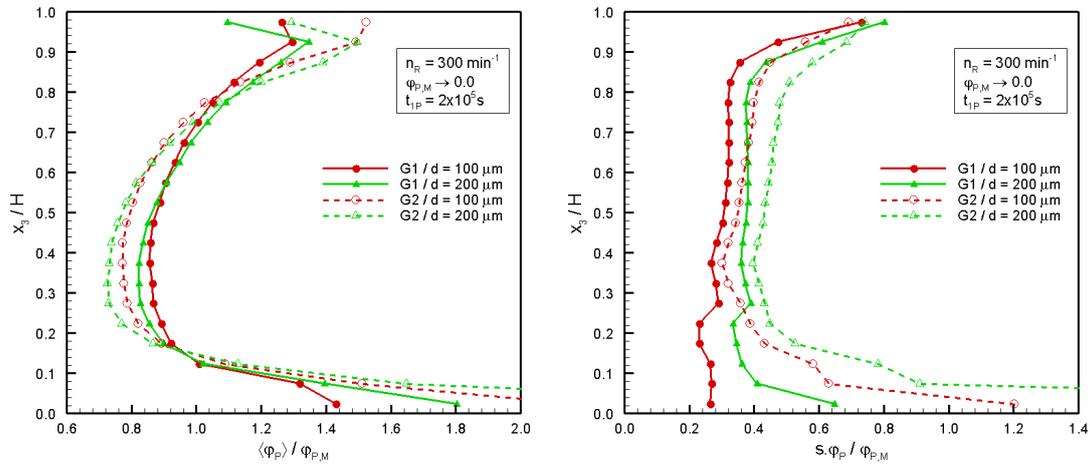


Abbildung 7.68: Mittlerer Partikelvolumenanteil (links) und die dazugehörige Standardabweichung (rechts) als Funktion der Höhe - Effekt der Teilchengröße und der Gitterauflösung bei sehr geringer Konzentration

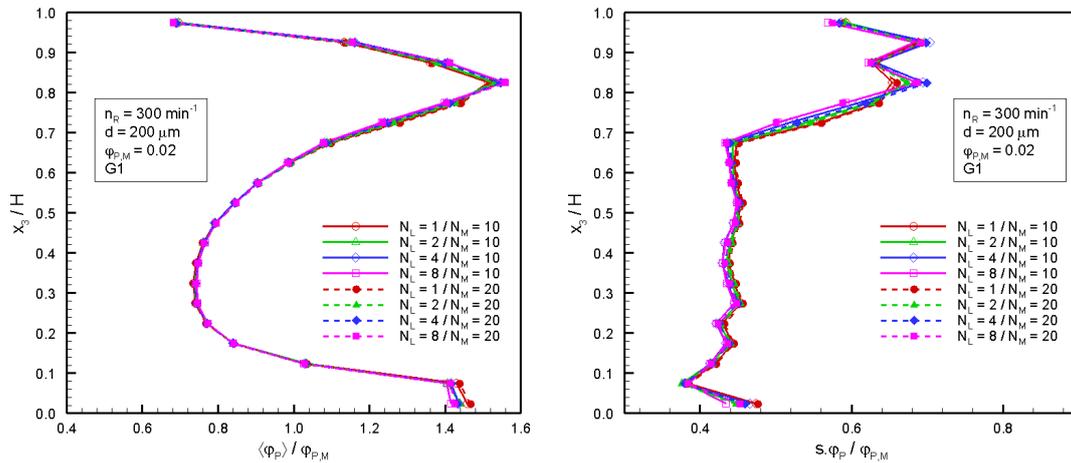


Abbildung 7.69: Mittlerer Partikelvolumenanteil (links) und die dazugehörige Standardabweichung (rechts) als Funktion der Höhe - Bewertung des Effekts von N_L und N_M ($G1$, $d = 200 \mu\text{m}$, $\varphi_{P,M} = 0.02$)

7.16 Parametervariationen und deren Effekt auf die Suspension

Variation der Rührerdrehzahl

Die Variation der Rührerdrehzahl n_R wurde bereits in Abschnitt 7.15 analysiert und bewertet. Abschließend ist zu bemerken, dass eine Vergleichmäßigung der Verteilung (wobei hier primär die Verteilung über die Höhe des Behälters gemeint ist) generell durch eine Erhöhung der Rührerdrehzahl oder eine Reduzierung der Schwarmsinkgeschwindigkeit erreicht werden kann. Letztere lässt sich durch eine Erhöhung der Fluidviskosität oder der Teilchenkonzentration sowie durch eine Reduzierung der Teilchengröße oder der Dichtedifferenz erreichen. Eine Vergrößerung des Rührers ermöglicht bei gleicher Suspendierqualität eine Reduzierung der Drehzahl.

Variation der Teilchengröße

In Abb. 7.70 ist die vertikale Partikelgeschwindigkeit auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) in verschiedenen Höhen unter Variation der Teilchengröße aufgetragen. Um einen Vergleich mit den Experimenten zu ermöglichen wurde eine sehr kleine Konzentration berechnet. Die betrachteten Profile liegen alle relativ eng beieinander, wobei die Geschwindigkeit mit zunehmender Teilchengröße abnimmt, d.h. bei aufwärts gerichteter Strömung werden die Teilchen langsamer und bei abwärts gerichteter Strömung schneller. Ein ähnlich homogenes Bild zeigt sich bei der tangentialen Partikelgeschwindigkeit (s. Abb. 7.71). Auch hier können die größeren Teilchen der Strömung etwas schlechter folgen. Bei entsprechender Auftragung des Partikelvolumenanteils (s. Abb. 7.72) muss man feststellen, dass sich trotz lediglich geringer Unterschiede bei den Geschwindigkeiten die Profile des Partikelvolumenanteils bei einer Variation der Teilchengröße deutlich unterscheiden. Besonders auffällig sind die Unterschiede an der Behälterwand und in der Nähe der Rührerwelle.

Folgerichtig ändert sich auch die vertikale Verteilung der Teilchen bei einer Variation der Teilchengröße d . In Abb. 7.73 sind der mittlere Partikelvolumenanteil sowie die entsprechende Standardabweichung in verschiedenen Höhenschichten dargestellt. Mit zunehmender Teilchengröße werden die Abweichungen von einer homogenen Verteilung immer stärker und auch die Streuungen steigen an. Besonders ausgeprägte Überhöhungen liegen bei $d = 500 \mu\text{m}$ in Bodennähe (hier dürften Absetzeffekte relevant werden) und im oberen Drittel des Behälters vor. Oberhalb der Konzentrationsspitzen fällt $\langle \varphi_P \rangle$ rasch ab und es bildet sich eine Zone mit sehr geringer Teilchenkonzentration. Diese nahezu klare Zone ist umso dicker, je größer die Teilchen sind.

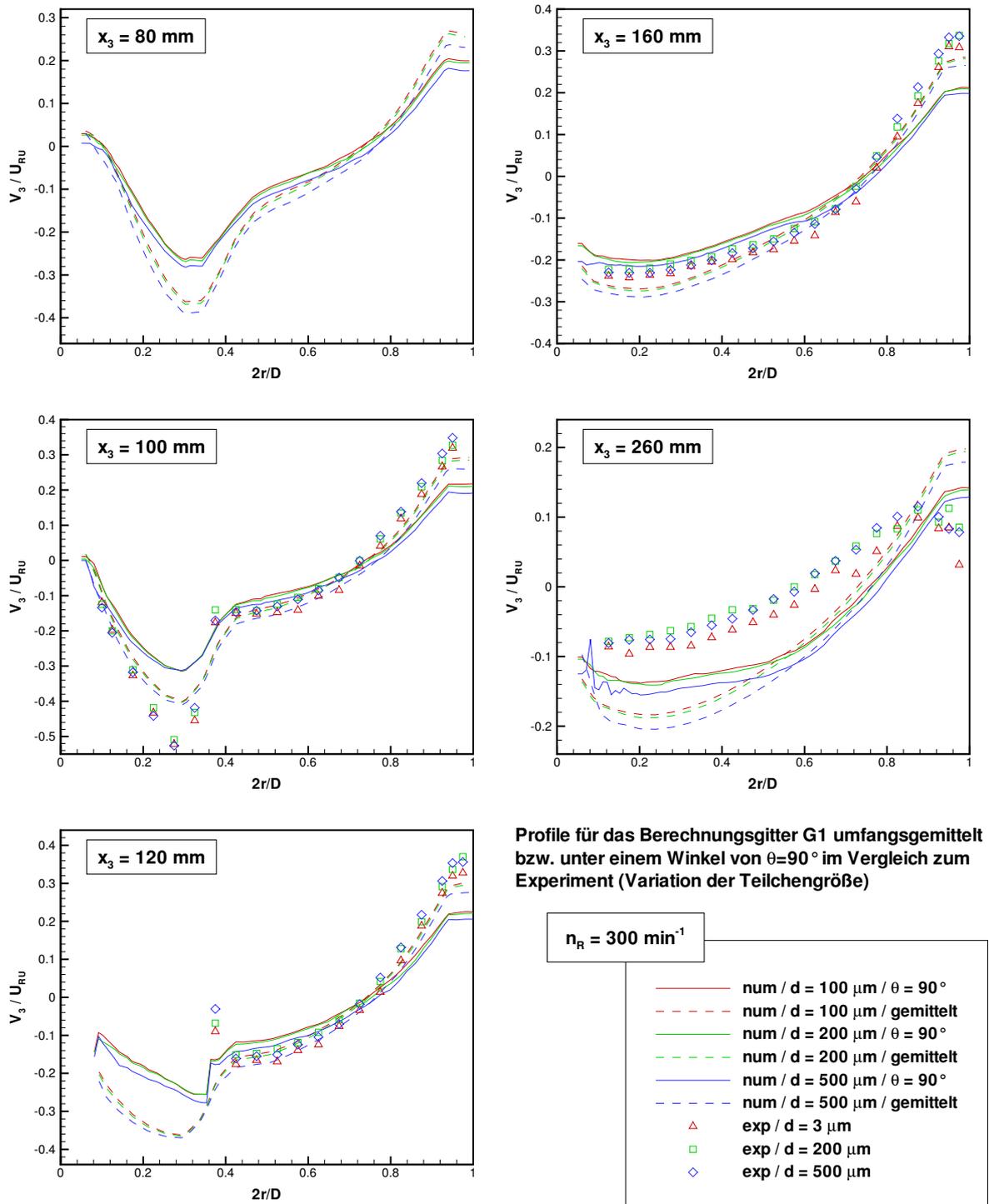


Abbildung 7.70: Vertikale Partikelgeschwindigkeit auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) in verschiedenen Höhen unter Variation der Teilchengröße und Vergleich mit Experimenten (Gitterauflösung G1, $\varphi_P \rightarrow 0$ für alle Fälle)

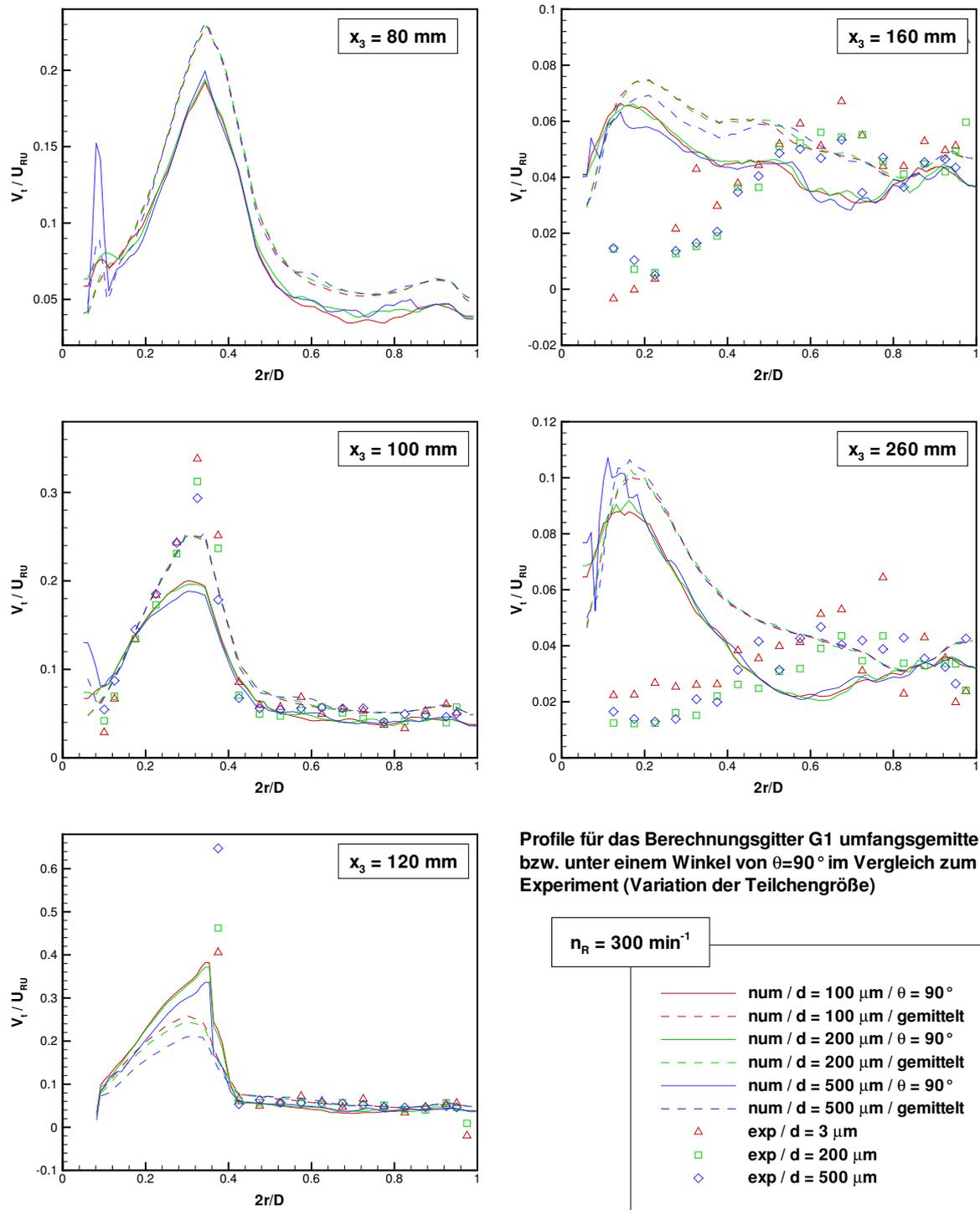


Abbildung 7.71: Tangentiale Partikelgeschwindigkeit auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) in verschiedenen Höhen unter Variation der Teilchengröße und Vergleich mit Experimenten (Gitterauflösung G1, $\varphi_P \rightarrow 0$ für alle Fälle)

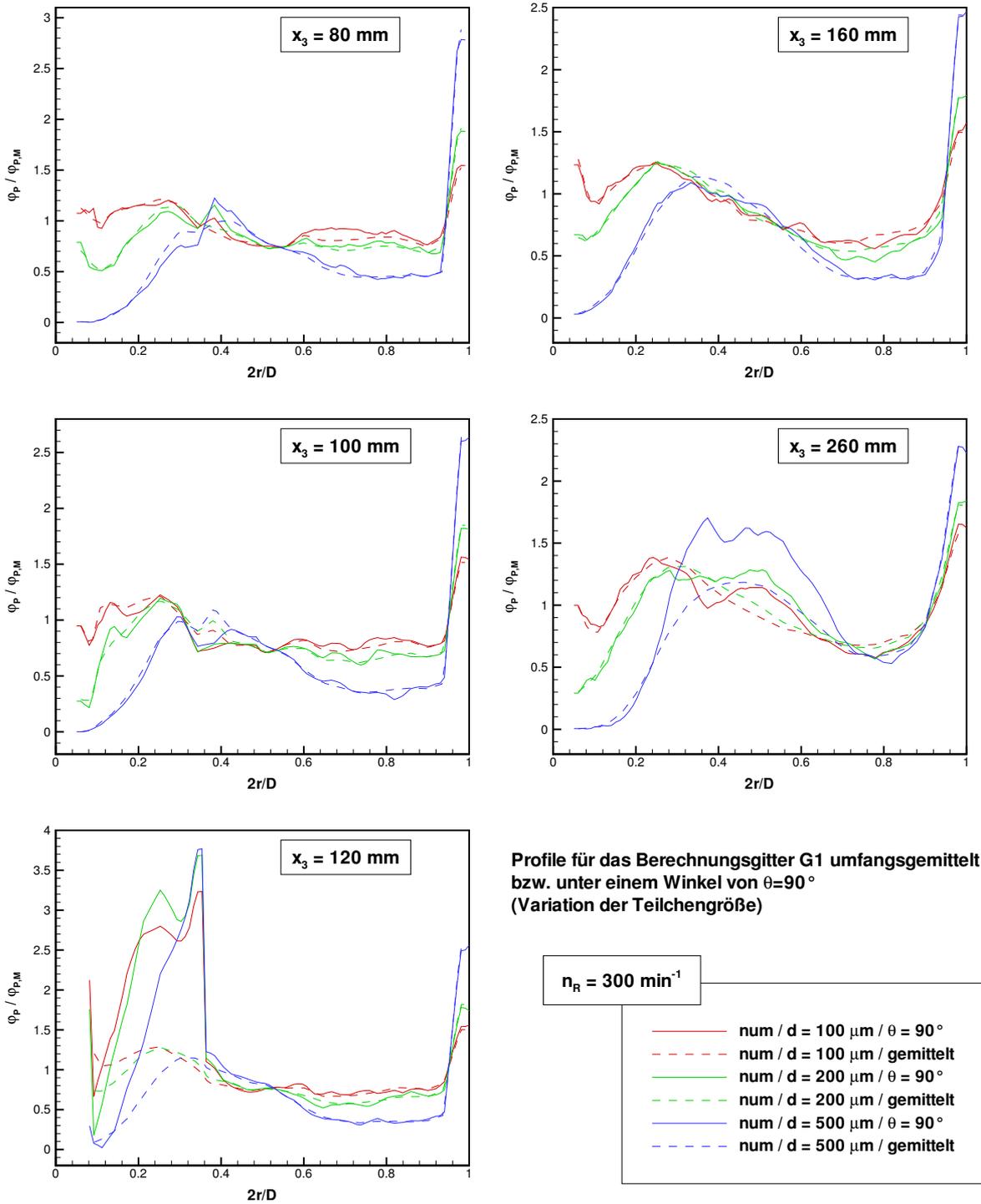


Abbildung 7.72: Partikelvolumenanteil auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) in verschiedenen Höhen unter Variation der Teilchengröße (Gitterauflösung G1, $\varphi_P \rightarrow 0$ für alle Fälle)

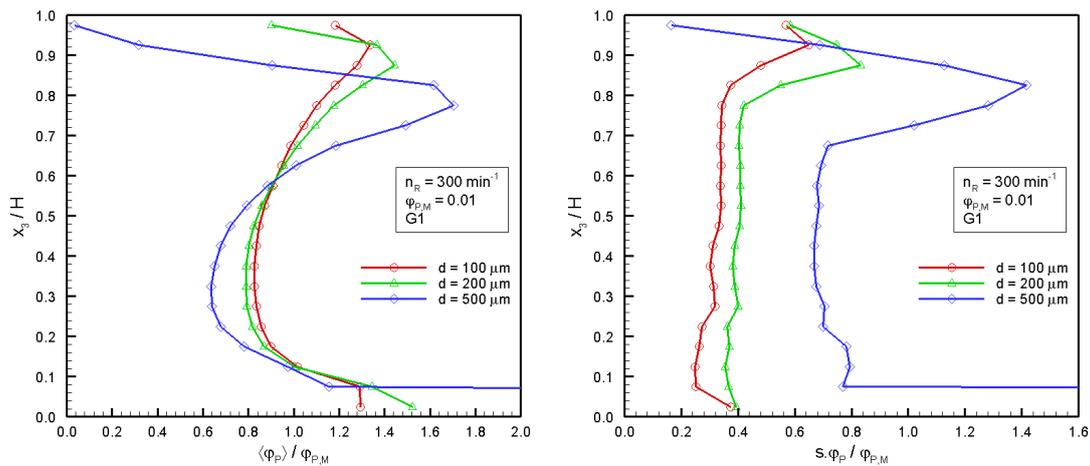


Abbildung 7.73: Mittlerer Partikelvolumenanteil (links) und die dazugehörige Standardabweichung (rechts) als Funktion der Höhe - Effekt der Teilchengröße ($G1$, $\varphi_{P,M} = 0.01$)

Die Wirkung einer Variation der Teilchengröße d auf die Newtonzahl Ne wurde bereits in Abschnitt 7.13 sowie bei der Analyse der Konvergenz der Phasenkopplung in Abschnitt 7.14 diskutiert. Dabei hat sich gezeigt, dass die Ne nur wenig von der Teilchengröße abhängt. Tendenziell nimmt die Ne mit zunehmender Teilchengröße leicht ab. Dies dürfte an der zunehmenden Absetzneigung größerer Teilchen liegen, so dass dadurch effektiv etwas weniger Masse zirkuliert werden muss.

Variation des Partikelvolumenanteils

Der Effekt einer Variation des mittleren Partikelvolumenanteils $\varphi_{P,M}$ auf die vertikale Verteilung von φ_P ist in Abb. 7.74 aufgetragen.

Der Fall $\varphi_P \rightarrow 0$ wurde dabei ohne Phasenkopplung und ohne Partikel-Partikel-Kollisionen berechnet. Da bereits bei $\varphi_{P,M} = 0.01$ die Überhöhung der Konzentration am Behälterboden deutlich zurückgeht (Ausnahme $d = 500 \mu\text{m}$), lässt sich bereits die Bedeutung der Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen auch bei relativ kleinen Konzentration erahnen. Die Konzentrationsüberhöhung im oberen Behälterdrittel nimmt mit steigendem Partikelvolumenanteil zu und die Höhe des Maximums sinkt. Die Streuung in den einzelnen steigt mit zunehmender mittlerer Konzentration.

Die in der vorliegenden Arbeit ermittelten Konzentrationsprofile sind qualitativ vergleichbar mit in der Literatur verfügbaren gemessenen und berechneten Profilen. Auf eine direkte Gegenüberstellung wird hier aber verzichtet, da die verwendeten Geometrien von Behälter und Rührer nicht hinreichend übereinstimmen.

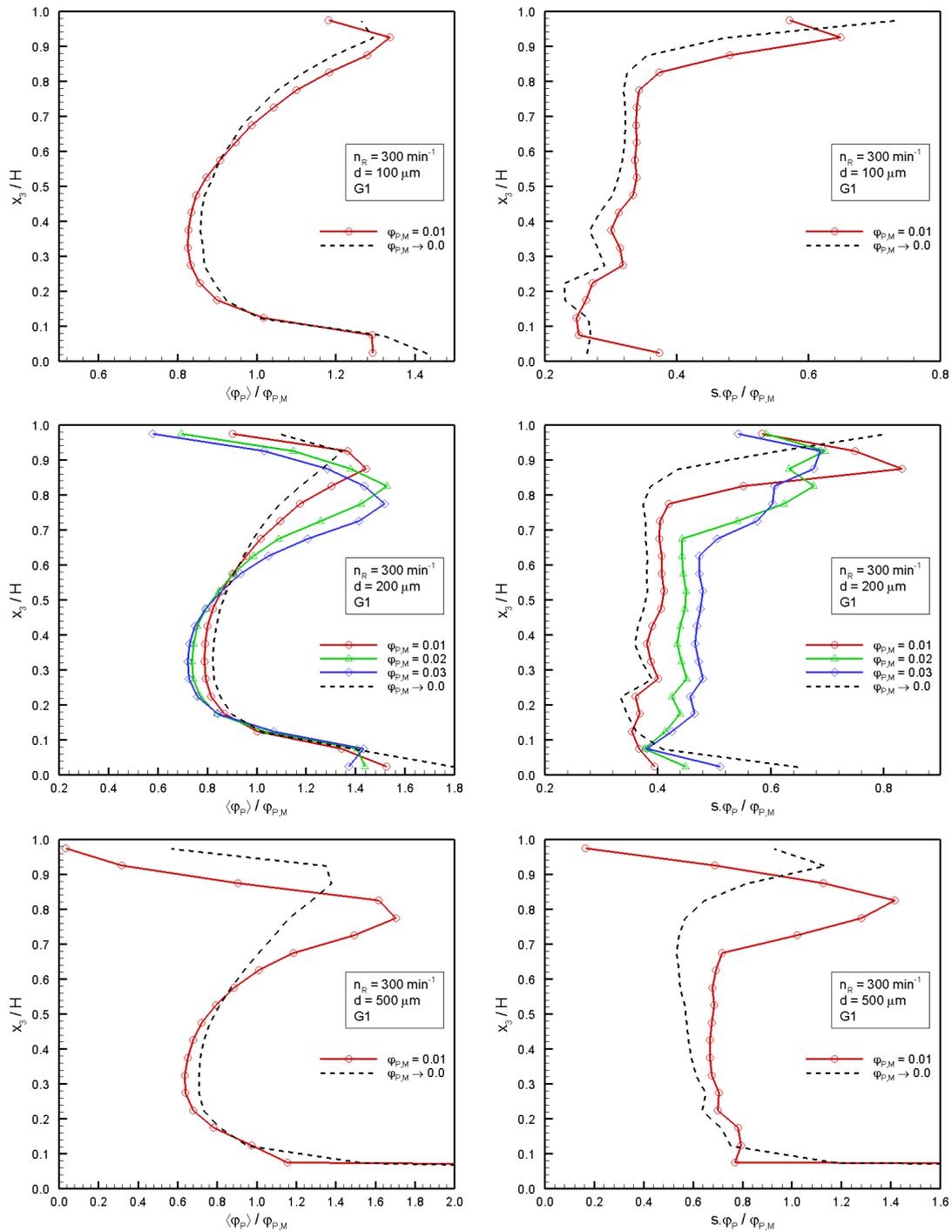


Abbildung 7.74: Mittlerer Partikelvolumenanteil (links) und die dazugehörige Standardabweichung (rechts) als Funktion der Höhe - Effekt des mittleren Partikelvolumenanteils $\varphi_{P,M}$ für die Teilchengrößen $d = 100 \mu\text{m}$ (oben), $d = 200 \mu\text{m}$ (mitte) und $d = 500 \mu\text{m}$ (unten)

Typische Konzentrationsverläufe finden sich z.B. bei Eikenkel [83] oder Herndl [121]. Das Konzentrationsmaximum liegt dabei etwa in halber Höhe des Behälters. Auf Rührerhöhe ist etwa die mittlere Konzentration zu finden. Betrachtet wurden dabei allerdings Partikelvolumenanteile von 5-25%. Messwerte im Bodenbereich des Rührbehälters sind nicht verfügbar. Auch Barresi & Baldi [14] nahmen in Bodennähe keine Messwerte auf, so dass eine Konzentrationsüberhöhung bei ihren Konzentrationsverläufen über die Höhe nur andeutungsweise vorliegt. In den übrigen Bereichen liegt auch hier eine qualitative Übereinstimmung mit den vorliegenden Rechnungen vor. Angst & Kraume [3] ermittelten mit ihren Euler-Euler-Berechnungen allerdings ebenfalls eine starke Konzentrationsüberhöhung am Behälterboden (insbesondere mit zunehmender Teilchengröße). Auch in den restlichen Bereichen decken sich ihre Ergebnisse (unter Berücksichtigung der geometrischen Unterschiede) gut mit den hier gefundenen Teilchenverteilungen. Bei den Berechnungen von Angst & Kraume [3] zeigte sich eine starke Abhängigkeit von der Modellierung der dispersen Phase. Die oft postulierte Gleichverteilung über den Radius konnten auch sie nicht bestätigen.

Die Abhängigkeit der Newtonzahl Ne von einer Variation des mittleren Partikelvolumenanteils $\varphi_{P,M}$ wurde ebenfalls bereits in Abschnitt 7.13 und Abschnitt 7.14 beschrieben. Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die Ne mit zunehmender Teilchenkonzentration erwartungsgemäß steigt, wobei $\varphi_{P,M} = 0.01$ eine Erhöhung um 16%, $\varphi_{P,M} = 0.02$ um 35% und $\varphi_{P,M} = 0.03$ um 60% bewirkt⁸³.

7.17 Bedeutung von Phasenkopplung und Partikel-Partikel-Kollisionen

Zur Visualisierung der Bedeutung einer Berücksichtigung von Partikelquelltermen (mit/ohne PQT , d.h. mit/ohne Zweiwegkopplung) und Partikel-Partikel-Kollisionen (mit/ohne PPK , d.h. mit/ohne Vierwegkopplung) bei den Berechnungen sind in Abb. 7.75 Profile der vertikalen Geschwindigkeiten in verschiedenen Höhen unter einem Winkel von $\theta = 90^\circ$ aufgetragen. Betrachtet wird der Fall mit $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $d = 200 \mu\text{m}$ und $\varphi_{P,M} = 0.02$ ⁸⁴.

Der Fall ohne PQT und ohne PPK ($F1$) entspricht dabei einer Rechnung mit sehr geringer Konzentration und keinerlei Rückkopplung der dispersen Phase auf das

⁸³Allgemein bewirkt eine erhöhte Feststoffbeladung in Zonen mit aufwärts gerichteter Strömung eine Strömungsverlangsamung, während in Zonen mit Abwärtsströmung eine Beschleunigung vorliegt. Für den gesamten Rührbehälter ist im Mittel die beladene Strömung langsamer (Herndl [121]). Dies gilt, solange der Energieeintrag konstant bleibt. Im Falle der Simulationen mit konstanter Rührerdrehzahl resultiert aber eine Erhöhung der Ne (und damit des Energieeintrags) aus einer zunehmenden mittleren Konzentration, so dass Abweichungen von obiger Aussage möglich sind (s. Abschnitt 7.17 Abb. 7.75).

⁸⁴Ergänzend zu Abb. 7.75 sind in Abschnitt A.8 auch entsprechende Profile für die weiteren Fluideigenschaften zusammengestellt.

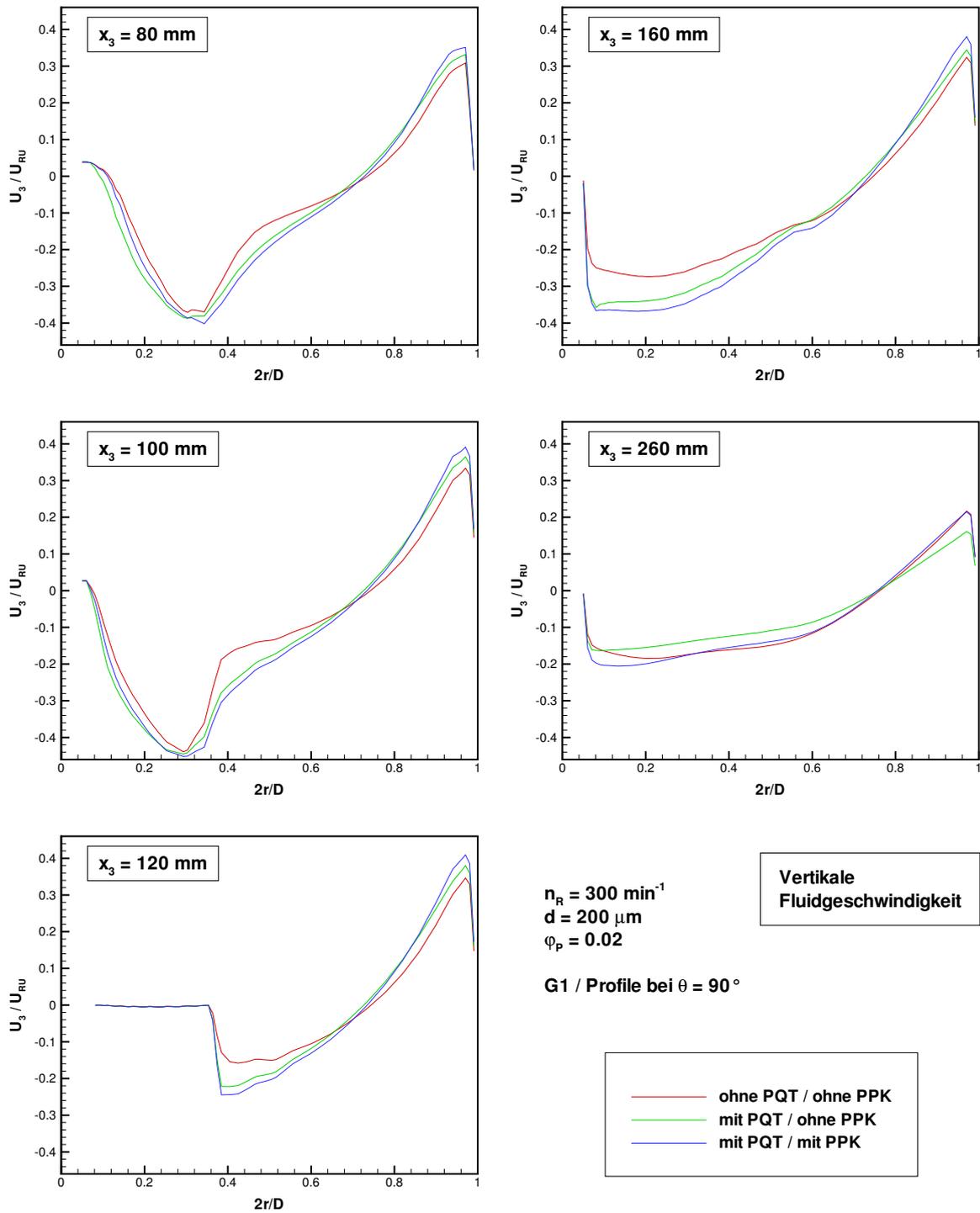


Abbildung 7.75: Vertikale Fluidgeschwindigkeit auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ in verschiedenen Höhen - Effekt der Berücksichtigung von *PQT* und *PPK* ($G1$, $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $d = 200 \mu\text{m}$ und $\varphi_{P,M} = 0.02$)

Fluid (Einwegkopplung). Bei der Berechnung der Kombination mit PQT und ohne PPK ($F2$) wird angenommen, dass Partikel-Partikel-Kollisionen keine Rolle spielen, d.h. eine Zweiwegkopplung zur Beschreibung ausreicht, und entsprechend wird im Fall mit PQT und mit PPK ($F4$) eine Vierwegkopplung berücksichtigt. In der unteren Behälterhälfte wirkt die Phasenkopplung (Änderung durch den Übergang von Fall $F1 \rightarrow F2$) verstärkend auf die vertikale Geschwindigkeit⁸⁵, während sie darüber den Geschwindigkeitsbetrag reduziert. Bei der zusätzlichen Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen (Änderung durch den Übergang von Fall $F2 \rightarrow F4$) wird unterhalb des Rührers U_3 bei $r \approx D/6 \dots D/2$ weiter verstärkt, während bei kleineren Radien eine Dämpfung vorliegt. Diese Änderung lässt sich auch als leichte Verschiebung des Profils in Richtung größerer Radius interpretieren. Oberhalb des Rührers wirken die Partikel-Partikel-Kollisionen zunächst verstärkend und in größeren Höhen schließlich dämpfend auf U_3 .

Der verstärkte Queraustausch an Impuls durch die Präsenz der Teilchen (d.h. Berücksichtigung von PQT und PPK) zeigt sich besonders an den Rändern des Abstromgebiets des Rührers. Das Gebiet hoher vertikaler Geschwindigkeit wird breiter und die Abgrenzung zu Nachbarzonen weniger scharf (s. insbesondere Abb. 7.75 bei $x_3 = 100$ mm und $r \approx D/6 \dots D/3$). Insgesamt lässt sich festhalten, dass der Effekt durch die Berücksichtigung von PQT größer ist als die Wirkung der PPK . Allerdings ist der Anteil der Kollisionen für eine Vernachlässigung des Effekts nicht klein genug, so dass ihre Berücksichtigung auch bereits bei moderaten mittleren Konzentrationen wegen lokaler Konzentrationsüberhöhungen große Bedeutung hat.

Der Effekt einer Berücksichtigung von Partikelquelltermen und Partikel-Partikel-Kollisionen auf die vertikale Feststoffverteilung ist in Abbildung Abb. 7.76 dargestellt. Neben den mittleren Partikelvolumenanteilen sind die entsprechenden Standardabweichungen in verschiedenen Höhenschichten abgebildet. Beim Übergang von $F1 \rightarrow F2$ wird Feststoffverteilung über die Höhe zunächst ungleichmäßiger und die Konzentrationsüberhöhungen am Behälterboden und am oberen Behälterrand werden verstärkt. Die Konzentration im mittleren Bereich nimmt ab. Die maximale Steighöhe der Teilchen wird kleiner, so dass das Konzentrationsmaximum im oberen Behälterdrittel deutlich nach unten wandert und sich darüber eine kleine Zone verringerter Konzentration ausbildet. Die Streuung nimmt zum Teil (insbesondere in Bodennähe und im oberen Behälterdrittel) erheblich zu. Lediglich am oberen Rand des Behälters kommt es zu einer Verringerung. Berücksichtigt man nun zusätzlich Partikel-Partikel-Kollisionen (Übergang von $F2 \rightarrow F4$), so wird die vertikale Verteilung wieder homogener. Besonders auffällig ist die Auflösung der extrem hohen unphysikalischen Konzentrationsüberhöhung am Behälterboden. Durch die Kollisionen werden die Teilchen also gerade in Bereichen mit relativ hoher Konzentration erheblich besser dispergiert und die Berechnungsergebnisse rücken näher an die realen

⁸⁵Insbesondere an den Behälterwänden berechnet sich im vorliegenden Fall beim Übergang von $F1 \rightarrow F4$ eine merkliche Erhöhung der axialen Geschwindigkeit. Dies lässt sich vermutlich primär durch den erhöhten Energieeintrag erklären (s. Abschnitt 7.16). Vergleichbare Geschwindigkeitserhöhungen wurden auch von Kohnen [156] sowohl bei Experimenten als auch bei entsprechenden Euler-Euler-Berechnungen beobachtet.

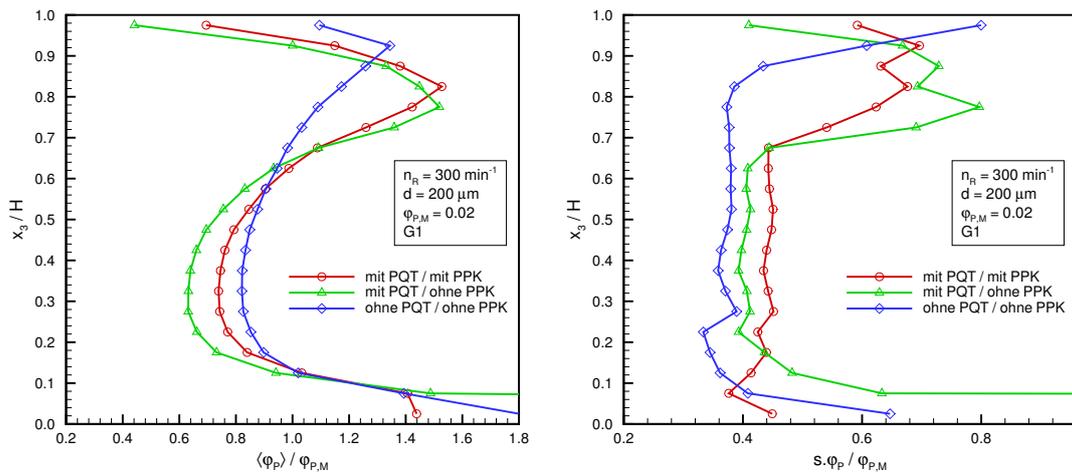


Abbildung 7.76: Mittlerer Partikelvolumenanteil (links) und die dazugehörige Standardabweichung (rechts) als Funktion der Höhe - Effekt der Berücksichtigung von *PQT* und *PPK* ($G1$, $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $d = 200 \mu\text{m}$ und $\varphi_{P,M} = 0.02$)

Verhältnisse heran. Das Konzentrationsmaximum im oberen Behälterdrittel wandert geringfügig noch oben der Partikelvolumenanteil im mittleren Bereich steigt deutlich an. In Bodennähe nimmt die Streuung dramatisch ab, was auf die deutlich verbesserte Homogenität aufgrund der dispergierenden Wirkung der Partikel-Partikel-Kollisionen zurückzuführen ist. Im mittleren Höhenbereich nimmt die Streuung leicht zu, während sie im oberen Höhendrittel tendenziell abnimmt.

Ergänzend zu Abb. 7.76 sind in Abb. 7.77 die Änderungen der Feststoffverteilung für $F1 \rightarrow F2$ in radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ in verschiedenen Höhen aufgetragen. Entsprechend wird der Fall $F2 \rightarrow F4$ in Abb. 7.78 betrachtet. Diese Abbildungen verdeutlichen, dass die einzelnen Effekte stark dreidimensional wirksam sind und sich nicht ohne erhebliche Verluste auf einfachere Betrachtungen reduzieren lassen.

Insgesamt lässt sich festhalten, dass Partikel-Partikel-Kollisionen zu einer Verbesserung der Gleichverteilung der dispersen Phase beitragen, wobei der Effekt in entscheidendem Maße bei lokalen (oft unrealistischen) Konzentrationsüberhöhungen wirksam ist. Eine Vernachlässigung von Partikel-Partikel-Kollisionen, welche von einer Vielzahl von Autoren bei kleinen bis moderaten Konzentrationen als gerechtfertigt erachtet wird, führt daher zu deutlichen Fehlern⁸⁶. Die Notwendigkeit der

⁸⁶Derksen [69] kam bei seinen Berechnungen der Partikeldispersionen im Rührwerk zu dem gleichen Ergebnis bzgl. der Bedeutung von Partikel-Partikel-Kollisionen. Dabei simulierte er die Strömung mit *LES*, wobei das Programm auf dem Lattice-Boltzmann-Verfahren basiert (s. Derksen & Van den Akker [70]), und die disperse Phase mit einem Lagrangeschen Ansatz. Dabei betrachtete er ein System aus Wasser und Glaskügelchen ($d = 300 \mu\text{m}$ bzw. $468 \mu\text{m}$ und $\varphi_P = 0.0095$ bzw. 0.036) in einem Laborrührbehälter (0.01 m^3) mit ebenem Boden, 4 Stromstörern und einem Sechsstab-Scheibenrührer. Die Rührer-Reynoldszahl lag bei seinen

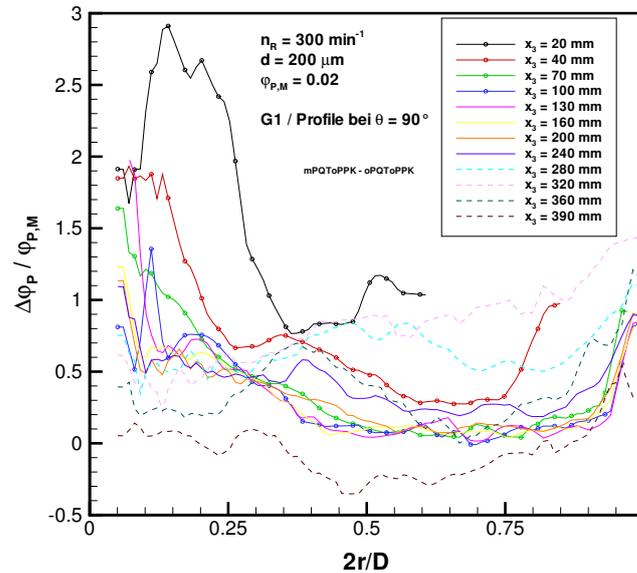


Abbildung 7.77: Änderung des lokalen Partikelvolumenanteils auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ in verschiedenen Höhen - Übergang von $F1 \rightarrow F2$ ($G1$, $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $d = 200 \mu\text{m}$ und $\varphi_{P,M} = 0.02$)

Berücksichtigung einer Zweizegekopplung steht bereits ab relativ kleinen Gesamtkonzentrationen außer Frage.

Untersuchungen bei $Re = 1.0 \cdot 10^5$ bzw. $1.5 \cdot 10^5$, d.h. nach Zwietering [361] bzw. Baldi et al. [12] etwas über dem gerade suspendierten Bereich. Wie bei der vorliegenden Arbeit fand auch Derksen hohe Partikelkonzentrationen am Boden und an der Behälterwand. Unrealistische Überhöhungen ließen sich nur durch die Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen vermeiden.

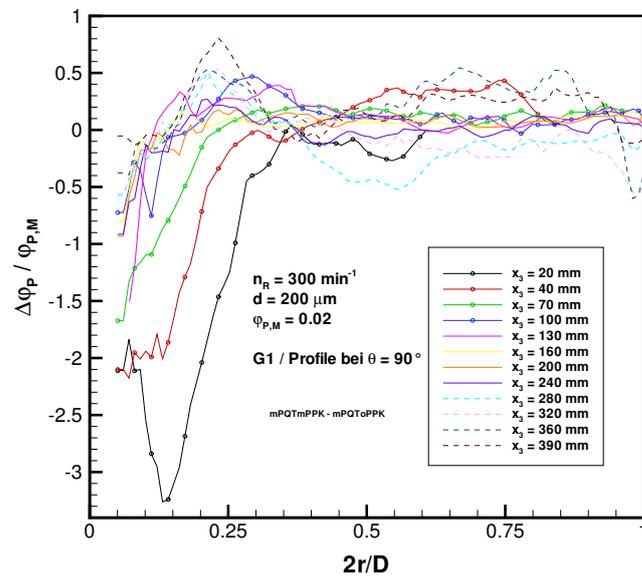


Abbildung 7.78: Änderung des lokalen Partikelvolumenanteils auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ in verschiedenen Höhen - Übergang von $F2 \rightarrow F4$ (G1, $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $d = 200 \mu\text{m}$ und $\varphi_{P,M} = 0.02$)

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 Lagrange-sches 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. Hexaedern 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 gut 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.

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 begasten 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.

A Anhang

A.1 Vergleich verschiedener Beziehungen für den Widerstandsbeiwert

Für die Abhängigkeit des Widerstandsbeiwertes c_D von der Partikel-Reynoldszahl Re_P ¹ wurden in der Literatur bereits viele verschiedene Approximationsgleichungen vorgeschlagen. An dieser Stelle sollen einige ausgewählte Beziehungen miteinander verglichen werden.

Die von Morsi & Alexander [208] vorgeschlagene Beziehung approximiert den experimentell ermittelten Kurvenverlauf (c_D als Funktion von Re_P) mit Hilfe einer einfachen Formel (s. Gl. A.1) und durch eine Vielzahl von Unterteilungen des Re_P -Bereiches.

$$c_D = k_0 + k_1 \text{Re}_P^{-1} + k_2 \text{Re}_P^{-2} \quad \forall \text{Re}_P \leq 5 \cdot 10^4 \quad (\text{A.1})$$

Für die Koeffizienten k_1 , k_2 und k_3 gelten in den einzelnen Re_P -Bereichen die in Tab. A.1 zusammengefassten Werte.

| Re_P -Bereich | k_0 | k_1 | k_2 |
|--|--------|-----------------------|----------------------|
| $0 < \text{Re}_P \leq 0.1$ | 0.0 | 24.0 | 0.0 |
| $0.1 < \text{Re}_P \leq 1$ | 3.69 | 22.73 | 0.0903 |
| $1 < \text{Re}_P \leq 10$ | 1.222 | 29.1667 | -3.8889 |
| $10 < \text{Re}_P \leq 10^2$ | 0.6167 | 46.5 | $-1.1667 \cdot 10^2$ |
| $10^2 < \text{Re}_P \leq 10^3$ | 0.3644 | 96.33 | $-2.7780 \cdot 10^3$ |
| $10^3 < \text{Re}_P \leq 5 \cdot 10^3$ | 0.357 | $1.48620 \cdot 10^2$ | $-4.7500 \cdot 10^4$ |
| $5 \cdot 10^3 < \text{Re}_P \leq 10^4$ | 0.46 | $-4.90546 \cdot 10^2$ | $5.7870 \cdot 10^5$ |
| $10^4 < \text{Re}_P \leq 5 \cdot 10^4$ | 0.5191 | $-1.66250 \cdot 10^3$ | $5.4167 \cdot 10^6$ |

Tabelle A.1: Zahlenwerte der Koeffizienten für die c_D -Approximationsgleichung von Morsi & Alexander

Durch die starke Unterteilung des Re_P -Bereichs erhält man eine sehr genaue Approximation für den Widerstandsbeiwert c_D . Der Fehler liegt im gesamten Gültigkeitsbereich unter 2%, so dass sich die Beziehung als Referenz annehmen lässt, an der sich andere Funktionen messen müssen. Da bei der Implementierung der Funktion nach Morsi & Alexander viele *IF*-Abfragen erforderlich sind, ist der Rechenaufwand

¹Die zugrunde liegende Standardwiderstandskurve einer Kugel gilt streng genommen nur für ein glattes, sphärisches, rotationsfreies Teilchen mit konstanter Relativgeschwindigkeit in einem unendlich ausgedehnten Fluid ohne jegliche Störungen. (Eine chronologische Liste mit den wichtigsten Beiträgen zur Spezifikation der Kurve findet sich z.B bei Torbin & Gauvin [324].) Die experimentellen Arbeiten von Tsuji et al. [326] zur Magnuskraft einer rotierenden Kugel zeigten allerdings, dass die Partikelrotation (wenigstens bei kleinen Re_P) keinen signifikanten Einfluss auf c_D hat und damit ggf. vernachlässigbar ist.

im Vergleich zu Funktionen mit geringerer Anzahl an Bereichsunterteilungen relativ hoch. Es ist also sinnvoll kostengünstigere Funktionen zu verwenden, sofern deren Genauigkeit hinreichend groß ist.

Die von Schiller & Naumann [284] bereits 1933 vorgeschlagene Funktion (Gl. A.2) kommt mit einer Unterteilung des Re_P -Bereichs aus und hat in der Literatur eine Art Standard-Status.

$$c_D = 24 \text{Re}_P^{-1} \left(1 + 0.15 \text{Re}_P^{0.687} \right) \quad \forall \text{Re}_P < 800 \quad (\text{A.2})$$

Die Genauigkeit liegt im Bereich von $\pm 5\%$. Für Werte der Partikel-Reynoldszahl im Bereich $800 \geq \text{Re}_P < 3.5 \cdot 10^5$ wird der Widerstandsbeiwert zu $c_D = 0.445$ gesetzt, wobei die Genauigkeit in diesem Bereich bei $\pm 13\%$ liegt.

Von Clift & Gauvin [46] wurde 1970 die Beziehung von Schiller & Naumann erweitert, um mit einer Formel (Gl. A.3) eine Gültigkeit bis zur kritischen Reynoldszahl $3.5 \cdot 10^5$ zu erreichen. Die Abweichungen liegen dabei in einem Bereich von $\pm 6\%$.

$$c_D = 24 \text{Re}_P^{-1} \left(1 + 0.15 \text{Re}_P^{0.687} + \frac{0.0175 \text{Re}_P}{1 + 4.25 \cdot 10^4 \text{Re}_P^{-1.16}} \right) \quad \forall \text{Re}_P < 3.5 \cdot 10^5 \quad (\text{A.3})$$

Die 1961 von Putnam [247] vorgeschlagene Beziehung (Gl. A.4) ist der von Schiller & Naumann sehr ähnlich. Auch hier liegen zwei Bereiche vor und ab einer Partikel-Reynoldszahl von 1000 wird ein konstanter Wert von 0.44 für den Widerstandsbeiwert angenommen. Die Genauigkeit liegt somit ähnlich zu der von Gl. A.2.

$$c_D = 24 \text{Re}_P^{-1} \left(1 + \frac{1}{6} \text{Re}_P^{2/3} \right) \quad \forall \text{Re}_P < 1000 \quad (\text{A.4})$$

In Abb. A.1 sind die aufgeführten Funktionen vergleichend aufgetragen. Dabei ist neben Geraden für den Stokeschen Bereich ($c_D = 24 \text{Re}_P^{-1}$) auch der konstante Wert von $c_D = 0.445$ im Newtonschen Bereich eingetragen. Die relativen Abweichungen der einzelnen Funktionen von der Beziehung nach Morsi & Alexander (= genaueste betrachtete Korrelation) sind in Abb. A.2 zusammengefasst. Aufgrund der (geringen) Abweichungen dieser Beziehung von den Messungen erhält man nicht exakt die gleichen prozentualen Abweichungen wie beim direkten Vergleich mit den Messwerten, welche bei den Funktionsdefinitionen angegeben wurden.

Besonders im Bereich relativ kleiner Reynoldszahlen liegen nur geringe Unterschiede bei den berechneten Widerstandsbeiwerten vor. Es lässt sich somit festhalten, dass für die meisten Anwendungen die Genauigkeit der relativ einfachen Beziehungen (wie Gl. A.2 und Gl. A.4) bereits völlig ausreicht und der Einsatz von numerisch aufwendigeren Approximationsgleichungen nicht nötig ist.

Weitere Korrelationen (auch für speziellere Anwendungen wie z.B. der Partikelbewegung bei Verbrennungsuntersuchungen) und deren Bewertungen wurden bereits von verschiedenen Autoren zusammengestellt. Als Beispiele seien hier die Bücher von Clift et al. [47] und Crowe et al. [55] aufgeführt.

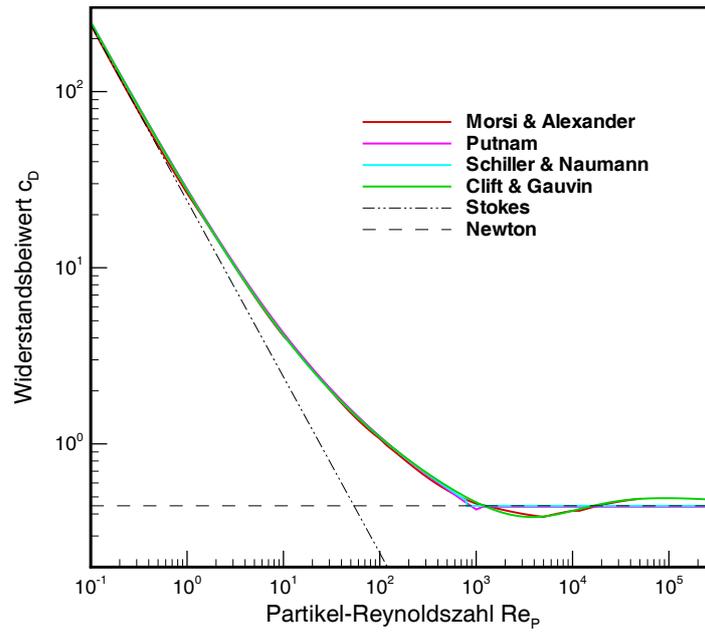


Abbildung A.1: Verschiedene Korrelationen zwischen Partikel-Reynoldszahl Re_p und Widerstandsbeiwertes c_D

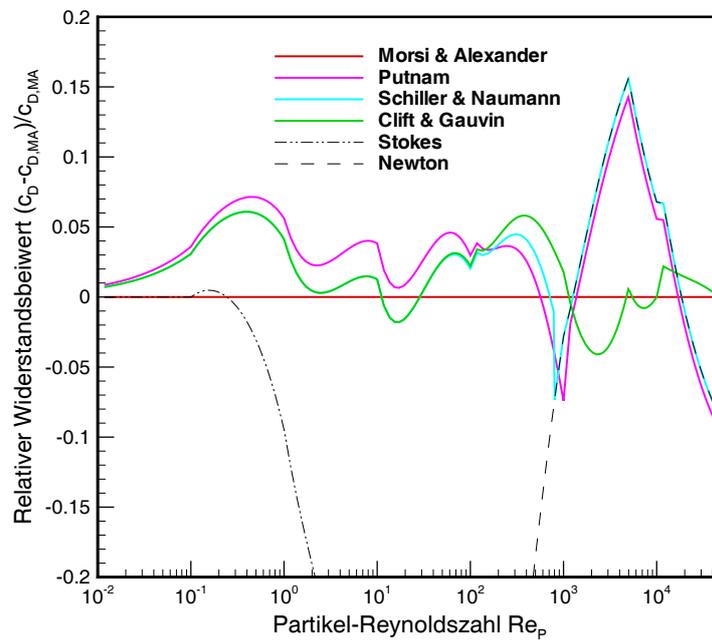


Abbildung A.2: Relative Abweichung des Widerstandsbeiwertes verschiedener Korrelationen vom Beiwert berechnet nach Morsi & Alexander ($c_{D,MA}$)

A.2 Unterteilung des Behälters in Höhenschichten - Fehler bei der Analyse des Partikelvolumenanteils als Funktion der Höhe bei zu starker Vereinfachung

Zur Beurteilung der Partikelverteilung über die Höhe wurde der Rührbehälter in 20 gleich hohe Schichten unterteilt und im einfachsten Fall die Kontrollvolumen entsprechend der Lage ihrer Kontrollvolumenzentren komplett zugeordnet. Die daraus resultierende Problematik wurde in Abschnitt 7.12 bereits angeschnitten. Insbesondere bei relativ groben Berechnungsgittern ist diese Vorgehensweise kritisch, da die Unterteilung zu unscharf wird, was sich als ungleichmäßige Verteilung der repräsentierten Volumina in den einzelnen Höhenschichten (s. Abb. 7.48) bemerkbar macht.

Die beschriebene Ungleichverteilung bei stark vereinfachter Zuordnung der Kontrollvolumina ($f_{KV} = 1$) resultiert zwangsläufig, da die Auflösung des Berechnungsgitters G1 für eine derartige Analyse nicht hinreichend groß ist. Verdeutlichen lässt sich dieser Zusammenhang durch die Darstellung der Kontrollvolumenzentren in Kombination mit den einzelnen Höhenschichten (s. Abb. A.3). Dadurch wird schnell klar, dass bestimmte Bereiche bei einer Zuordnung mit $f_{KV} = 1$ über-², unter-³ und zum Teil gar nicht⁴ repräsentiert werden.

Durch die Verwendung von Subkontrollvolumina, wie in Abschnitt 7.12 beschrieben, lässt sich die Schärfe aber hinreichend erhöhen.

²Überrepräsentation z.B. des Bereichs $x_3 = 0.24 \dots 0.26$ m und $r > 0.1$ m in der entsprechenden Höhenschicht.

³Unterrepräsentation z.B. des Bereichs $x_3 = 0.14 \dots 0.16$ m und $r < 0.1$ m in der entsprechenden Höhenschicht.

⁴Keine Repräsentation z.B. des Bereichs $x_3 = 0.28 \dots 0.3$ m und $r > 0.1$ m in der entsprechenden Höhenschicht.

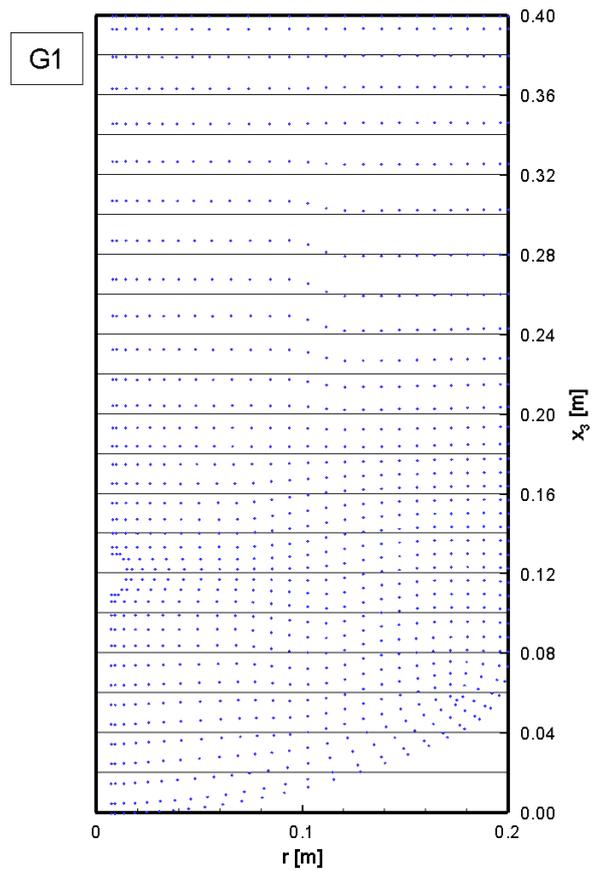


Abbildung A.3: Verteilung der Kontrollvolumenzentren (inkl. Randkontrollvolumen) beim Berechnungsgitters G1 und 20 Höhenschichten

A.3 Mittlere Partikeleigenschaften in vertikalen Schnittebenen bei einer Variation der Anzahl an Partikeltrajektorien

Ergänzend zu der verdichtenden Betrachtung von vertikalen Profilen über Höhenschichten in Abschnitt 7.12 sind hier vertikale Schnitte bei $\theta = 90^\circ$ aufgetragen. Neben dem Partikelvolumenanteil ist auch die mittlere Partikelgeschwindigkeit und die mittlere Partikelfluktuationsgeschwindigkeit aufgetragen (s. Abbildungen A.4-A.6), wobei jeweils nur in den einzelnen Kontrollvolumina gemittelt wurde.

Die Rührerdrehzahl betrug dabei $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$ und die Teilchen hatten eine Größe von $d = 200 \mu\text{m}$. Es wurde eine sehr geringe Partikelkonzentration betrachtet und die Berechnung erfolgte auf dem Berechnungsgitter G1⁵. In den Abbildungen A.4-A.6 wurde die Anzahl an Trajektorien von links oben ($t_{1P} = 2 \cdot 10^3 \text{ s}$) nach rechts unten ($t_{1P} = 1 \cdot 10^6 \text{ s}$) erhöht. Jede Trajektorie wurde 10 s lang verfolgt, so dass entsprechend $t_{1P}/10 \text{ s}$ Trajektorien (die Anzahl ist auch als Notiz in jedem Bild vermerkt) berechnet wurden.

Bei allen drei betrachteten Variablen zeigt sich, dass erst ab $t_{1P} = 2 \cdot 10^5 \text{ s}$ (wie auch bei den Untersuchungen in Abschnitt 7.12) keine weitere Veränderung des Strömungsfeldes mehr erfolgt und eine noch größere Anzahl an Trajektorien keine entscheidende Verbesserung mehr bewirkt.

⁵Für die Diskretisierung der konvektiven Flüsse wurde ein wichtungsfaktor von $\gamma_{CDS} = 0.95$ verwendet (s. Abschnitt 7.7).

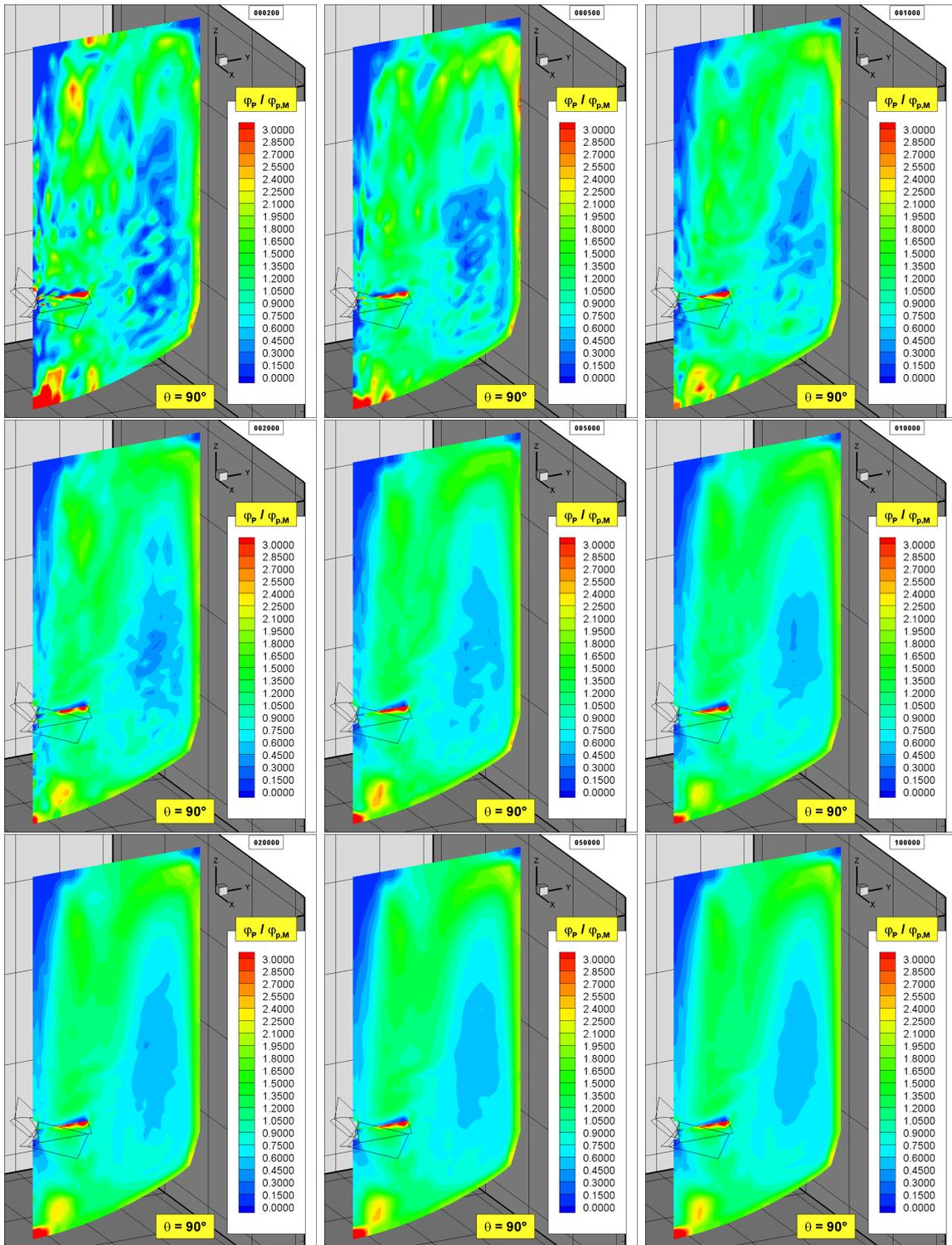


Abbildung A.4: Vergleich des Partikelvolumenanteils bei unterschiedlicher Anzahl von Trajektorien

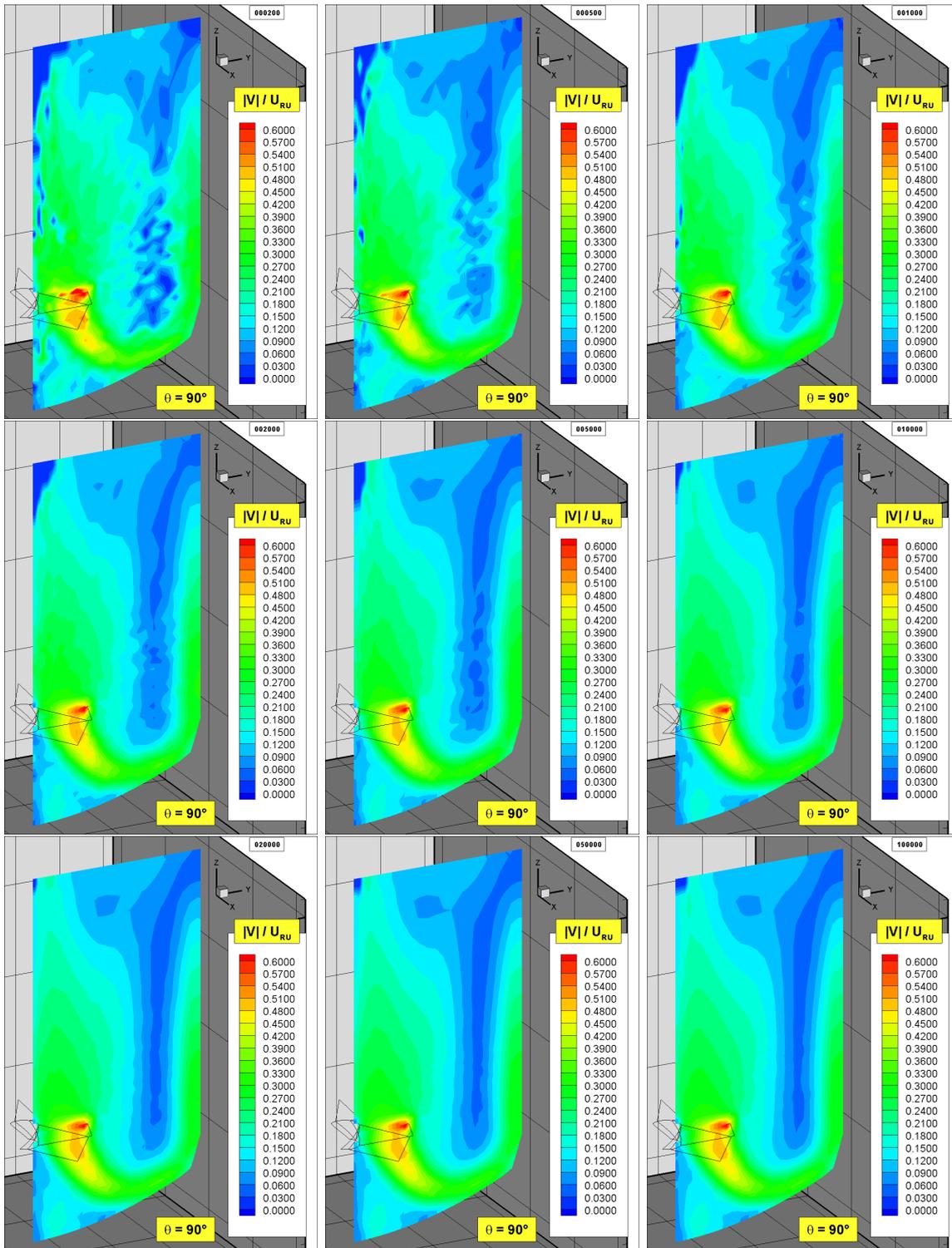


Abbildung A.5: Vergleich der absoluten Geschwindigkeit bei unterschiedlicher Anzahl von Trajektorien

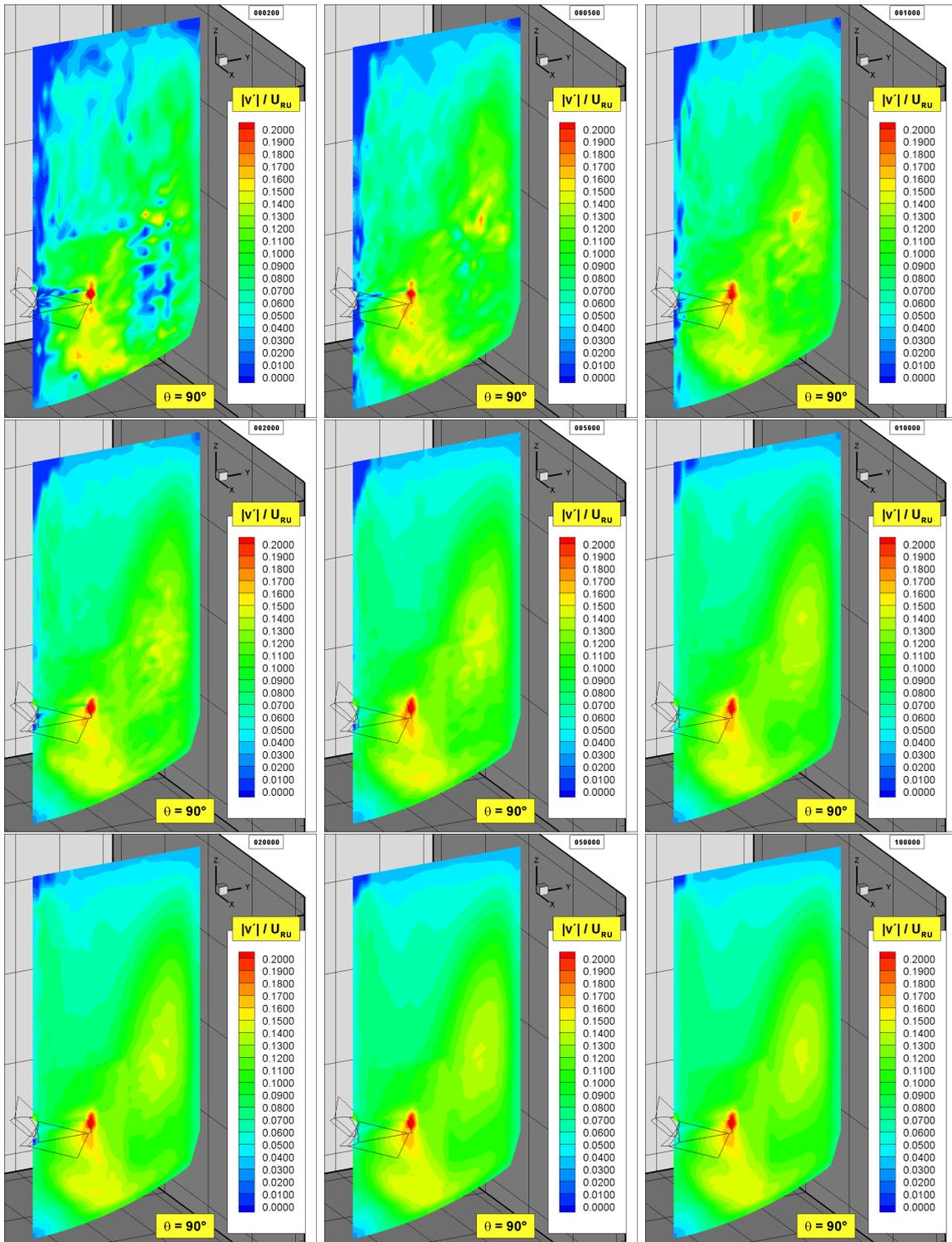


Abbildung A.6: Vergleich der absoluten Fluktuationsgeschwindigkeit bei unterschiedlicher Anzahl von Trajektorien

A.4 Bedeutung der einzelnen Geschwindigkeitskomponenten

Zur Visualisierung der Bedeutung der einzelnen Geschwindigkeitskomponenten des Fluids in den verschiedenen Bereichen des Rührkessels (betrachteter Fall: G2, $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$) sind die Komponenten in Abb. A.7 entsprechend normiert aufgetragen. Ein Wert von 0 bedeutet hierbei, dass die Richtungskomponente nicht vorkommt und ein Wert von 1 entsprechend, dass keine andere Richtungskomponente existiert.

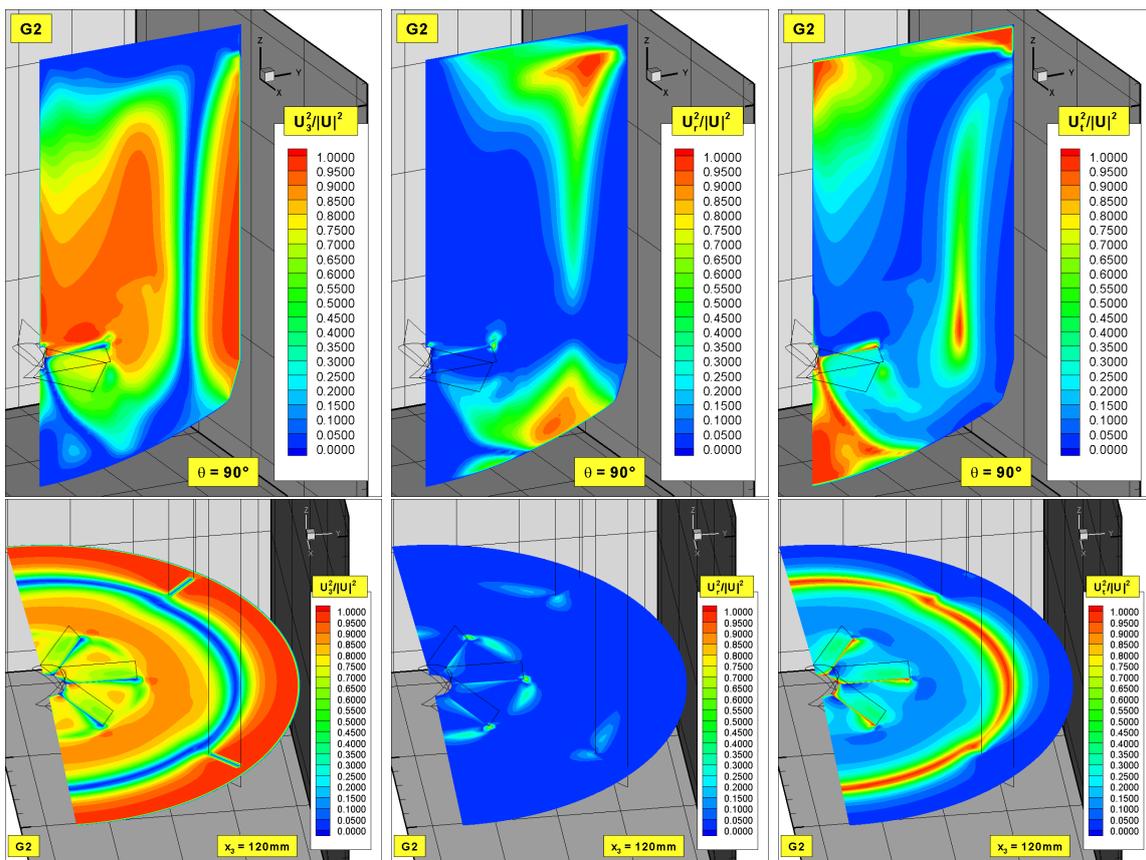


Abbildung A.7: Räumliche Verteilung der normierten Geschwindigkeitskomponenten bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 120 \text{ mm}$

U_3 ist die dominante Komponente an der Behälterwand und oberhalb des Rührers. Am Behälterboden und im oberen Bereich des Behälters spielt U_r eine zentrale Rolle. U_t dagegen hat große Bedeutung im Zirkulationsgebiet unterhalb des Rührers. Durch die Drehung des Rührers sind in dessen Abstromgebiet alle Komponenten relevant. In der Rührerebene bei $x_3 = 120 \text{ mm}$ tritt die vertikale Komponente sehr stark in Erscheinung, während die radiale Komponente nur an den Blattspitzen eine gewisse Rolle spielt. Die tangentiale Komponente hat natürlich innerhalb des Rührers relativ große Bedeutung.

A.5 Fluideigenschaften in vertikalen und horizontalen Schnittebenen bei einer Variation der Auflösung des Berechnungsgitters

Zum Vergleich der dreidimensionalen Strömung im Rührkessel für die betrachteten Berechnungsgitter G1, G2 und G3 (G1: $3.1 \cdot 10^4$ Zellen, G2: $2.5 \cdot 10^5$ Zellen und G3: $2.0 \cdot 10^6$ Zellen, s. Abschnitt 7.4) ⁶ sind im Folgenden (Abbildungen A.8-A.11) die verschiedenen mittleren Fluideigenschaften (axiale, radiale, tangentiale und absolute Geschwindigkeit, turbulente kinetische Energie sowie Dissipationsrate) in vertikalen und horizontalen Schnittebenen (bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 120$ mm) als Konturdarstellungen aufgetragen. Die Rührerdrehzahl betrug dabei $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$ und die Normierung der Fluideigenschaften erfolgte entsprechend Tab. 7.4.

⁶Für die Diskretisierung der konvektiven Flüsse wurde ein Wichtungsfaktor von $\gamma_{CDS} = 0.95$ verwendet (s. Abschnitt 7.7).

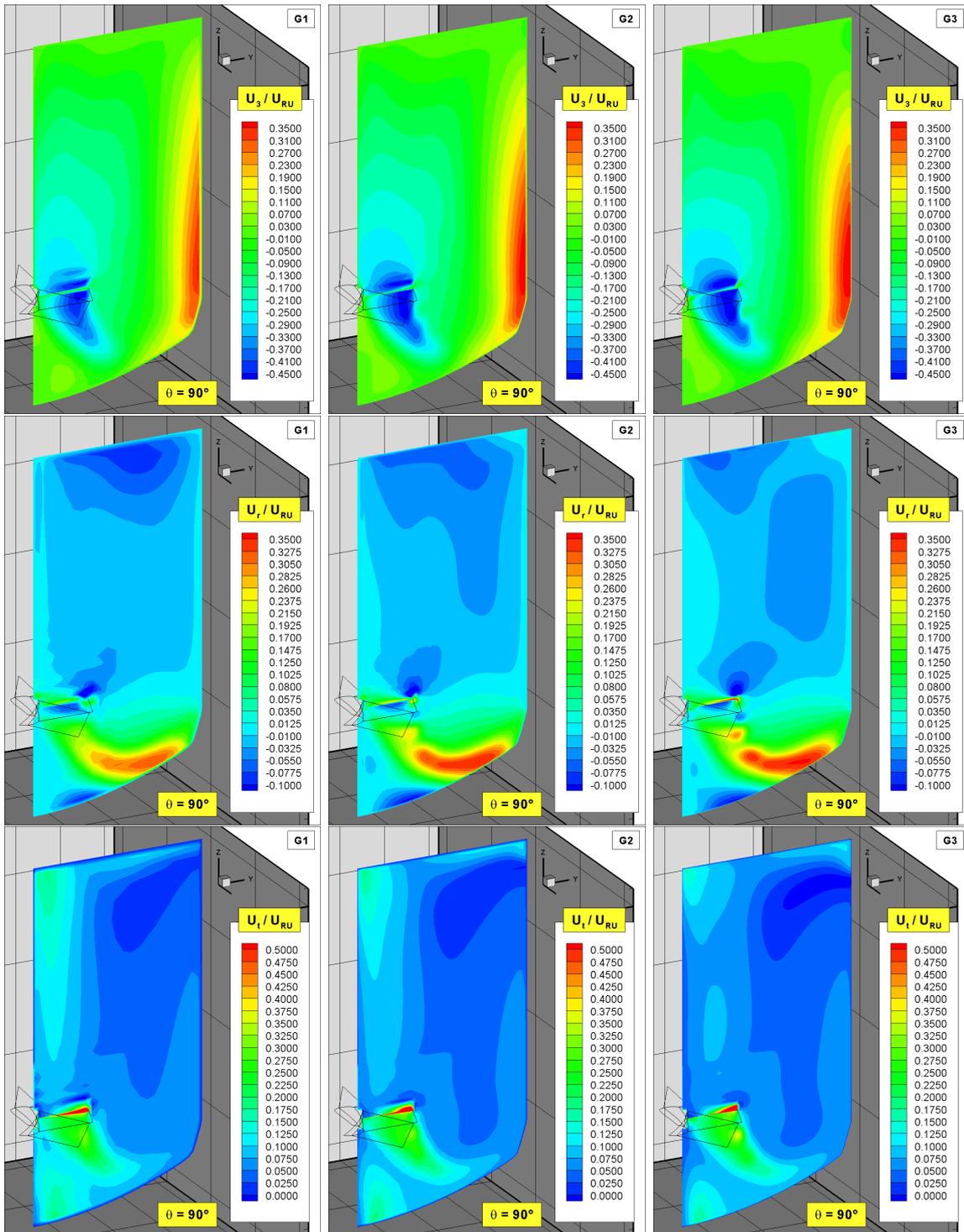


Abbildung A.8: Räumliche Verteilung der normierten Geschwindigkeitskomponenten bei $\theta = 90^\circ$ für die drei betrachteten Berechnungsgitter G1 (links), G2 (mitte) und G3 (rechts)

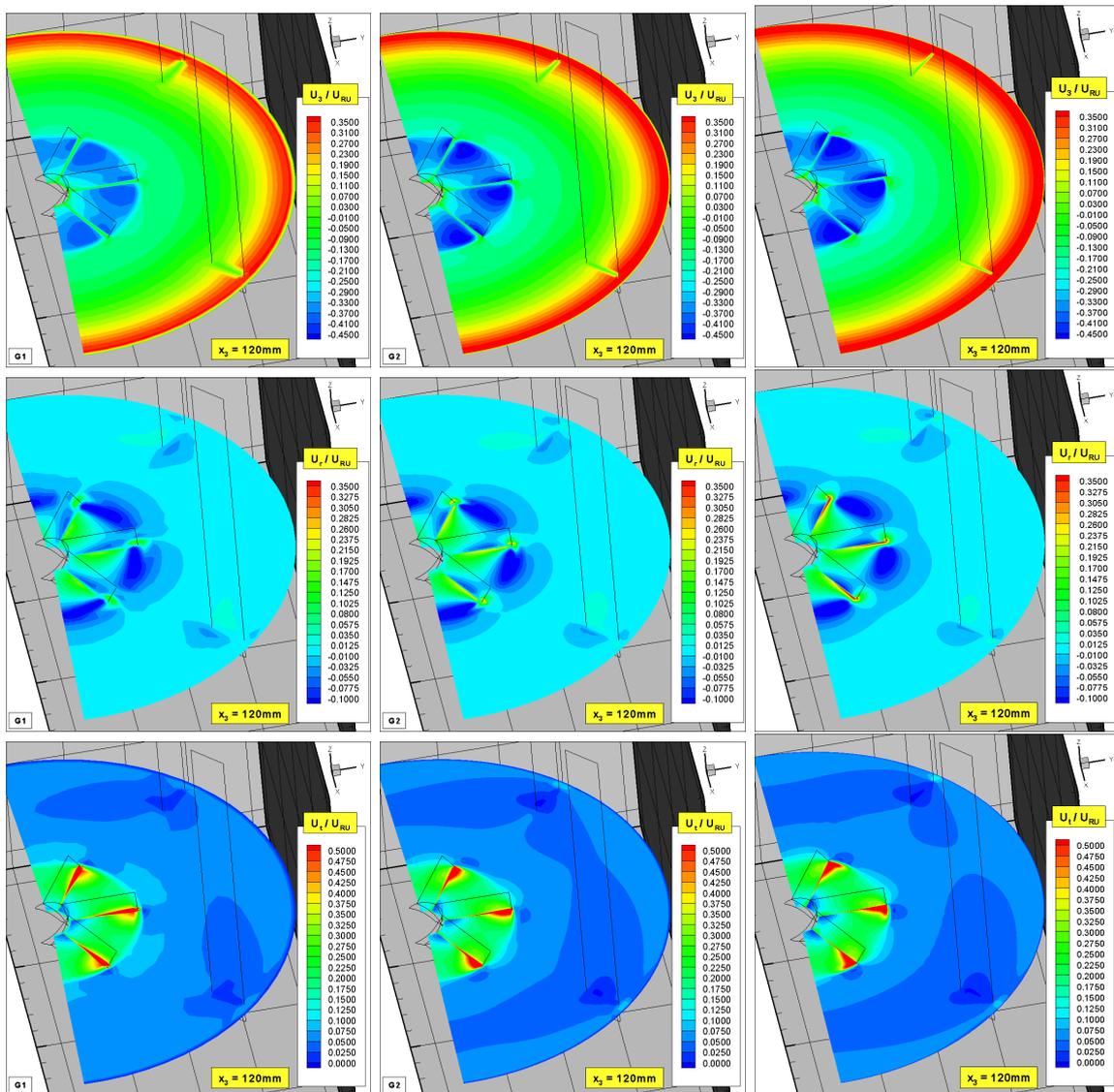


Abbildung A.9: Räumliche Verteilung der normierten Geschwindigkeitskomponenten bei $x_3 = 120 \text{ mm}$ für die drei betrachteten Berechnungsgitter G1 (links), G2 (mitte) und G3 (rechts)

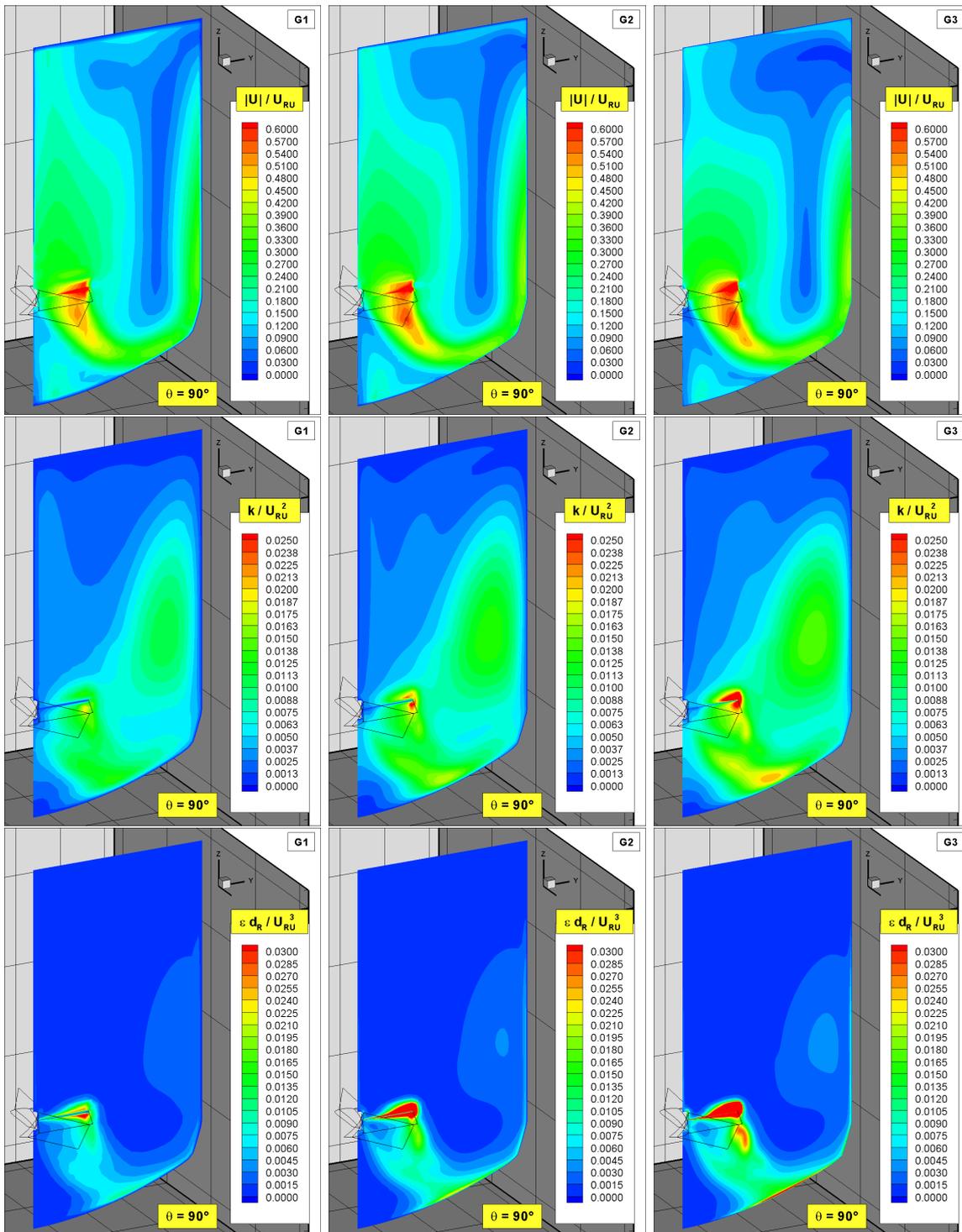


Abbildung A.10: Räumliche Verteilung der absoluten Geschwindigkeit, der turbulenten kinetischen Energie sowie der Dissipationsrate (jeweils normiert) bei $\theta = 90^\circ$ für die drei betrachteten Berechnungsgitter G1 (links), G2 (mitte) und G3 (rechts)

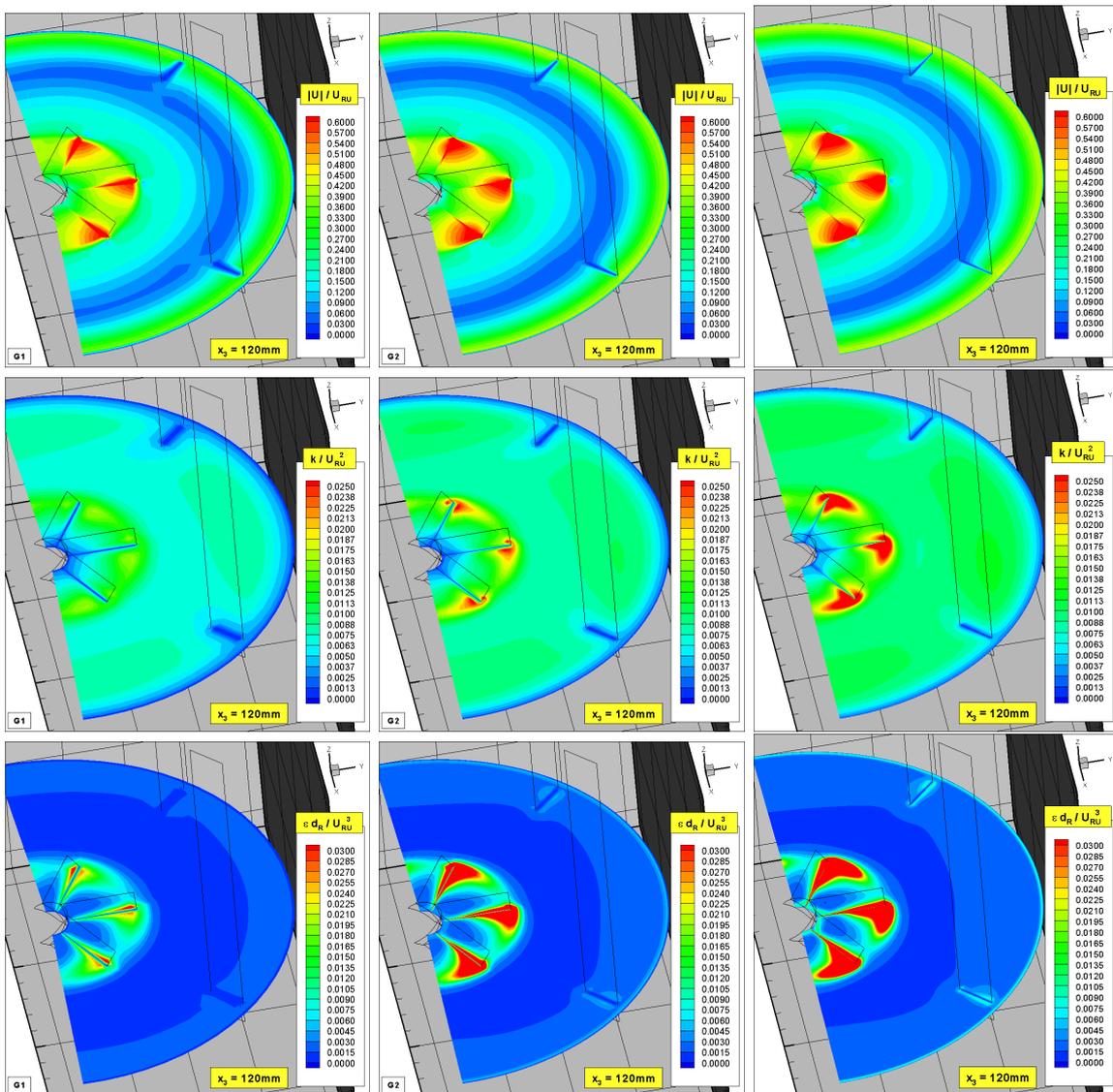


Abbildung A.11: Räumliche Verteilung der absoluten Geschwindigkeit, der turbulenten kinetischen Energie sowie der Dissipationsrate (jeweils normiert) bei $x_3 = 120 \text{ mm}$ für die drei betrachteten Berechnungsgitter G1 (links), G2 (mitte) und G3 (rechts)

A.6 Fluideigenschaften in ausgewählten radialen Profilen bei einer Variation der Rührerdrehzahl und Vergleich mit experimentellen Daten

Ergänzend zu den Abbildungen 7.36-7.39 in Abschnitt 7.9 sind im Folgenden die entsprechenden Profile für $x_3 = 60$ mm, $x_3 = 80$ mm, $x_3 = 160$ mm und $x_3 = 260$ mm zusammengestellt. In den Abbildungen A.12-A.15 sind die Fluideigenschaften absolut und in den Abbildungen A.16-A.19 relativ (entsprechend Tab. 7.4) aufgetragen.

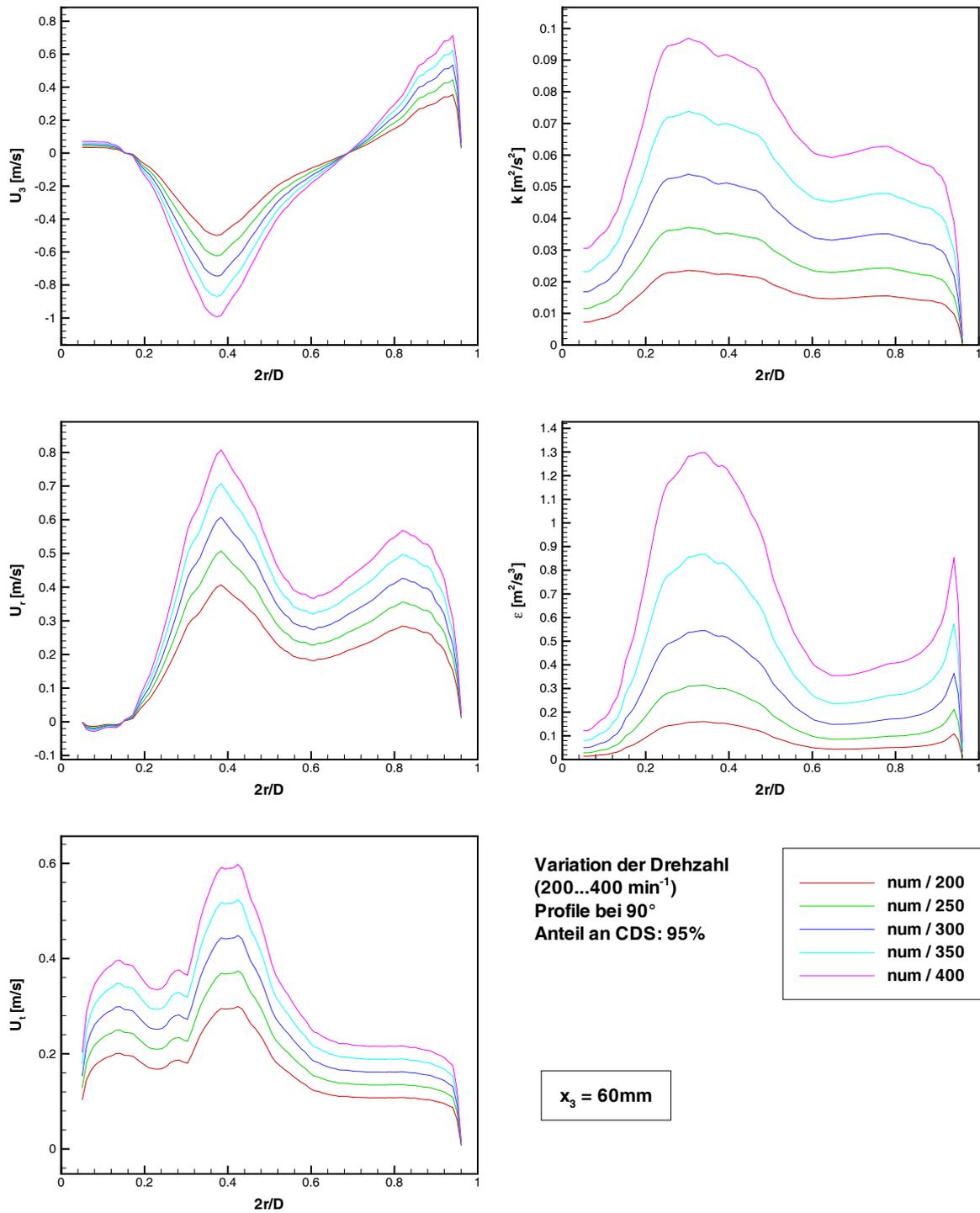


Abbildung A.12: Berechnete und gemessene Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 60\text{mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1, $\gamma_{CDS} = 0.95$)

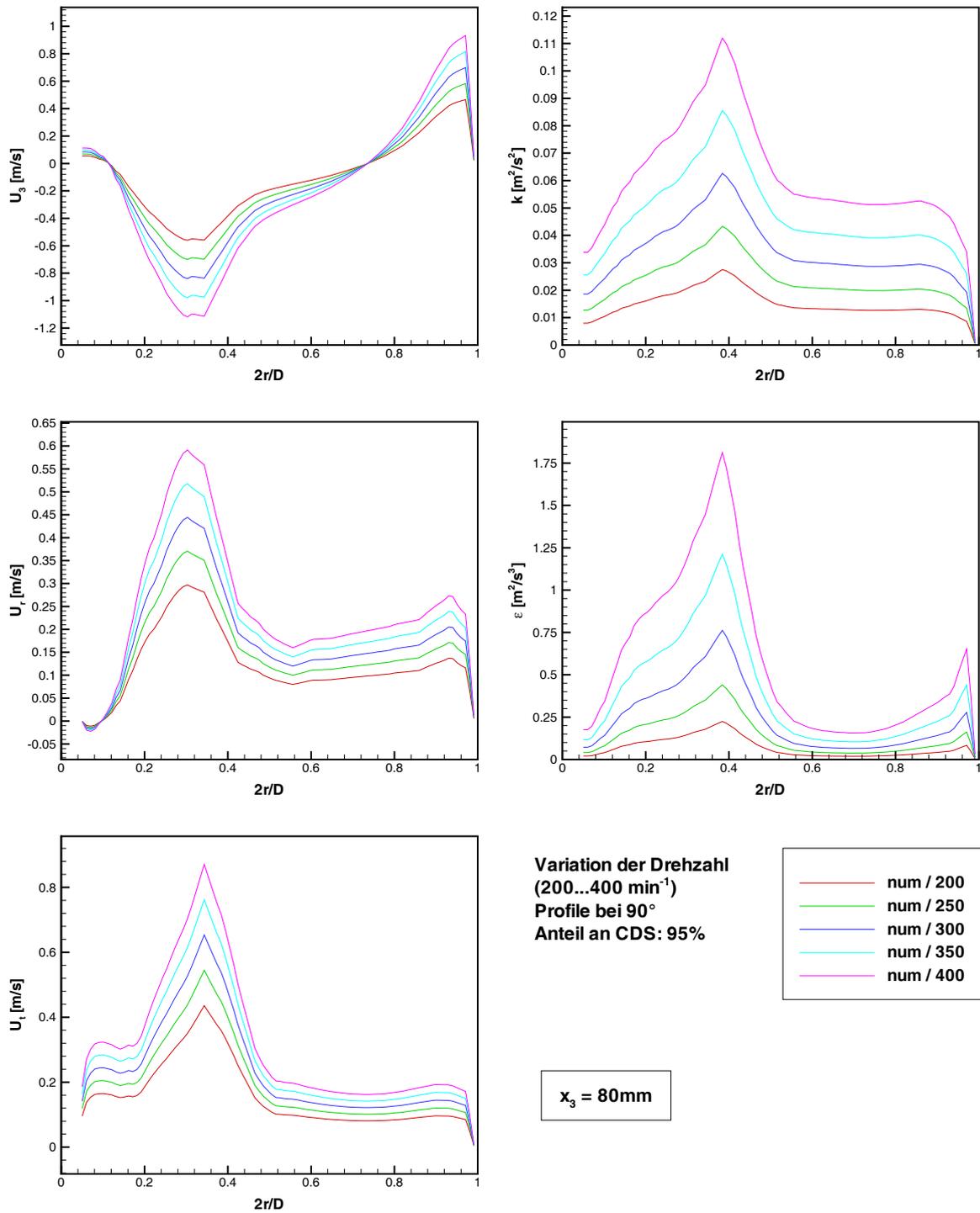


Abbildung A.13: Berechnete und gemessene Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 80\text{mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1, $\gamma_{CDS} = 0.95$)

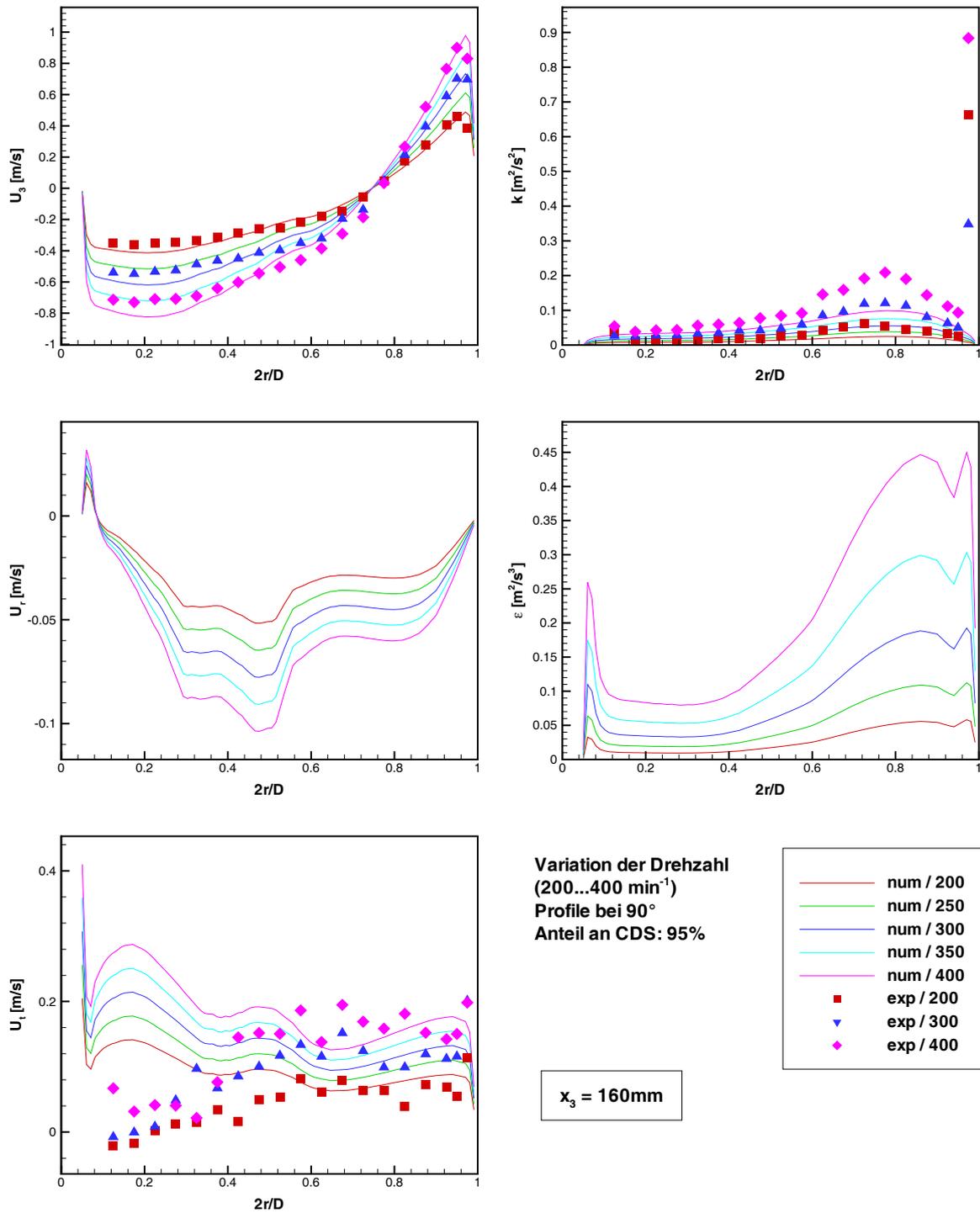


Abbildung A.14: Berechnete und gemessene Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 160\text{mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1, $\gamma_{CDS} = 0.95$)

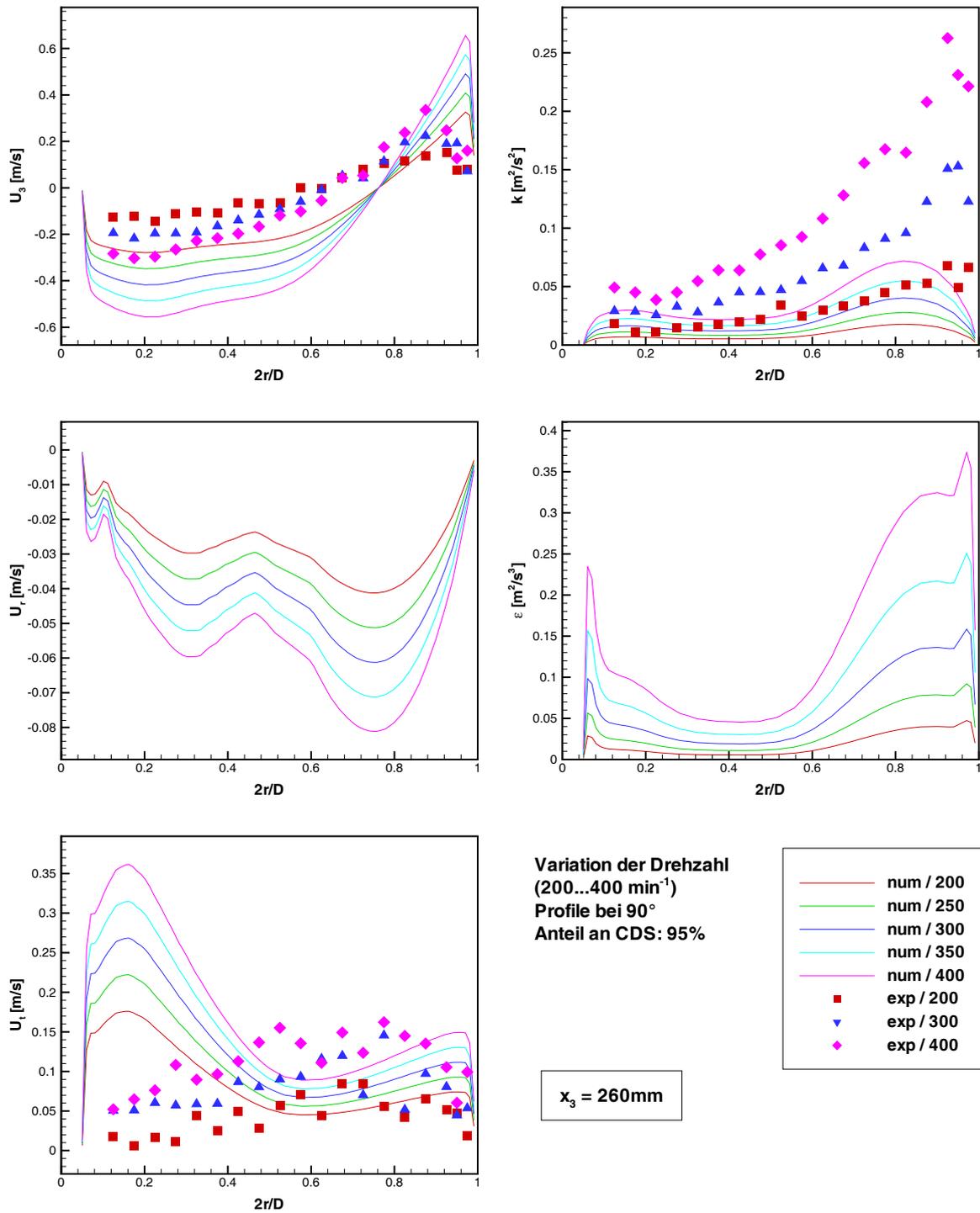


Abbildung A.15: Berechnete und gemessene Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 260mm$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1, $\gamma_{CDS} = 0.95$)

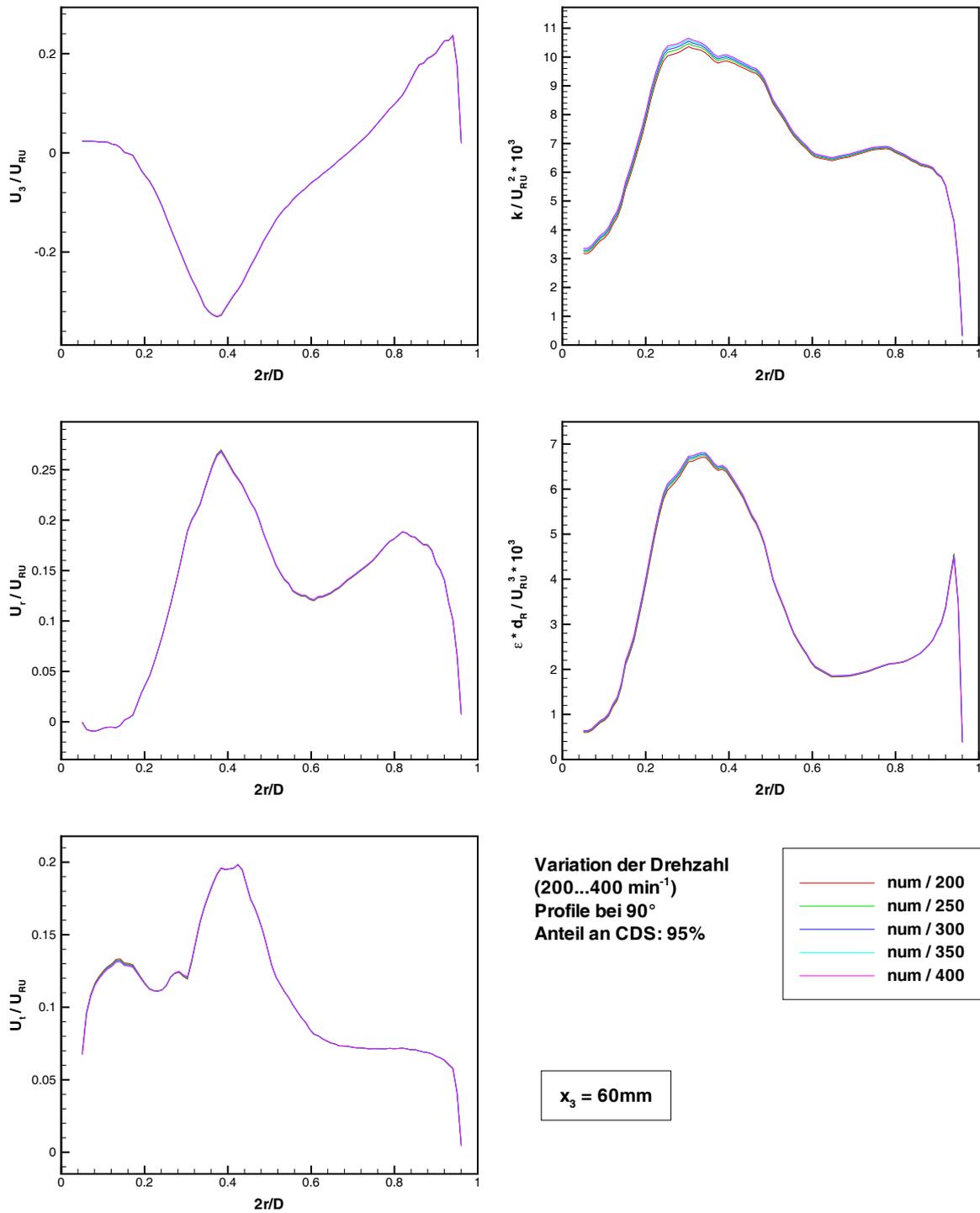


Abbildung A.16: Berechnete und gemessene relative Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 60\text{mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R ($G1$, $\gamma_{CDS} = 0.95$)

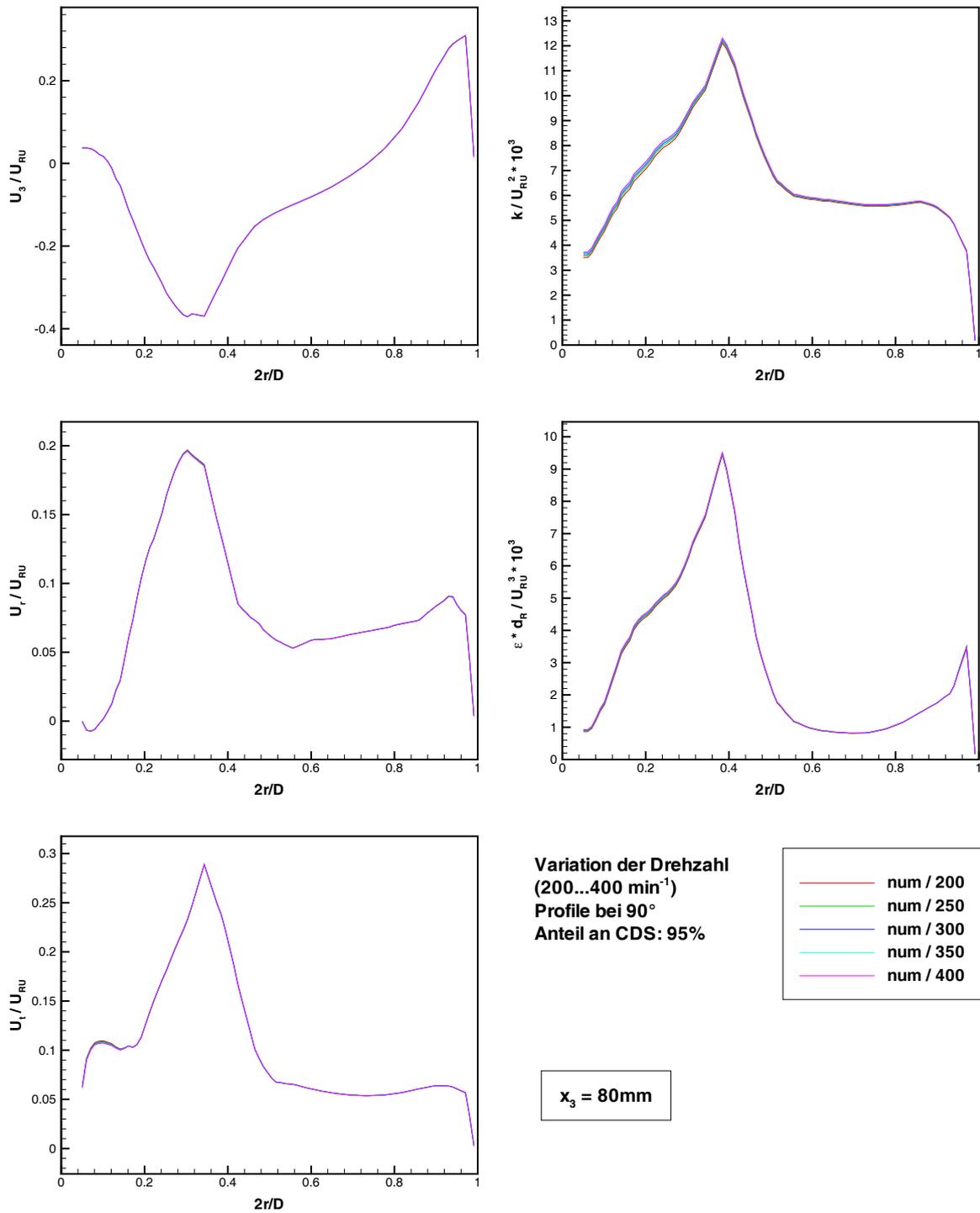


Abbildung A.17: Berechnete und gemessene relative Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 80\text{mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1, $\gamma_{CDS} = 0.95$)

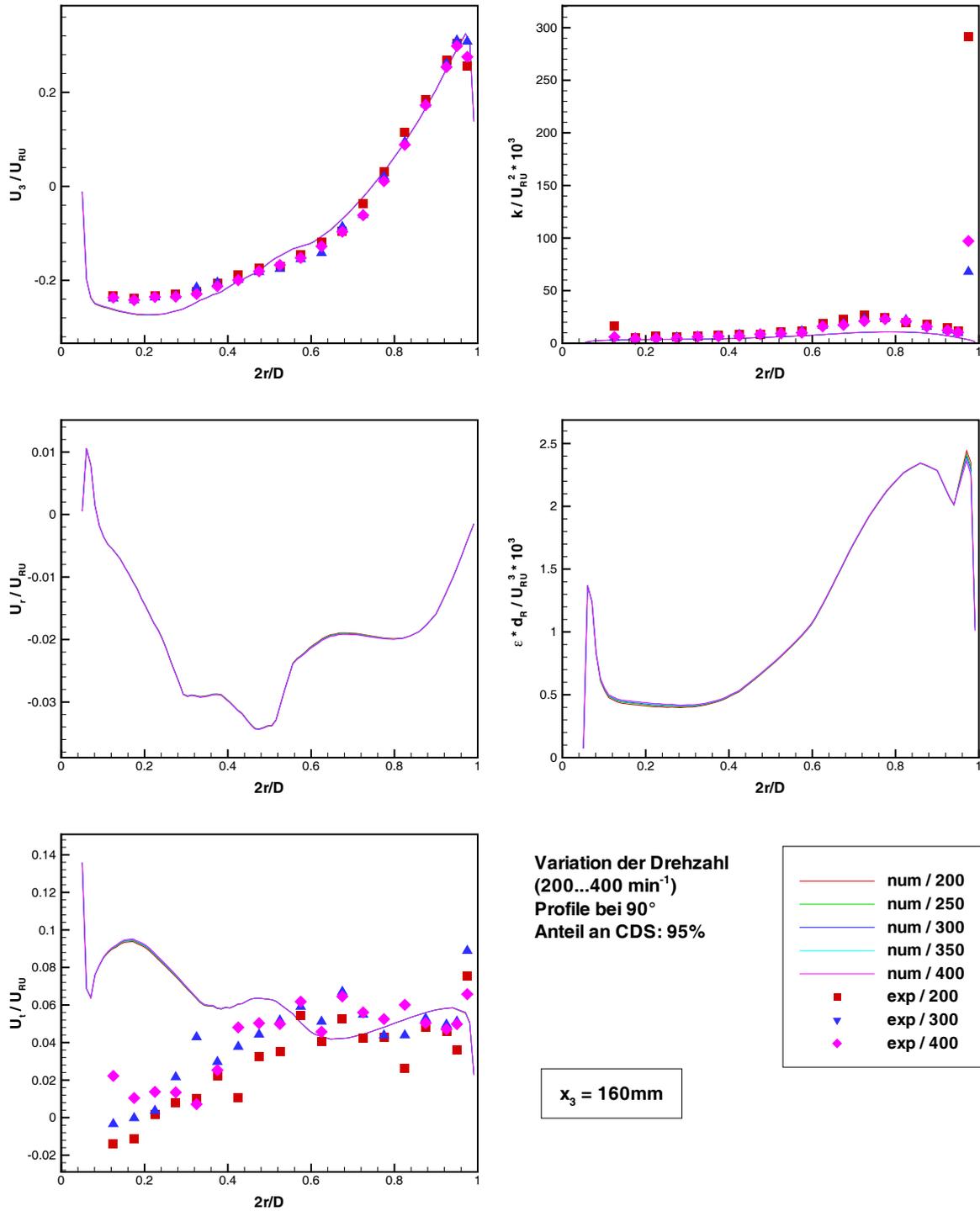


Abbildung A.18: Berechnete und gemessene relative Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 160\text{mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1, $\gamma_{CDS} = 0.95$)

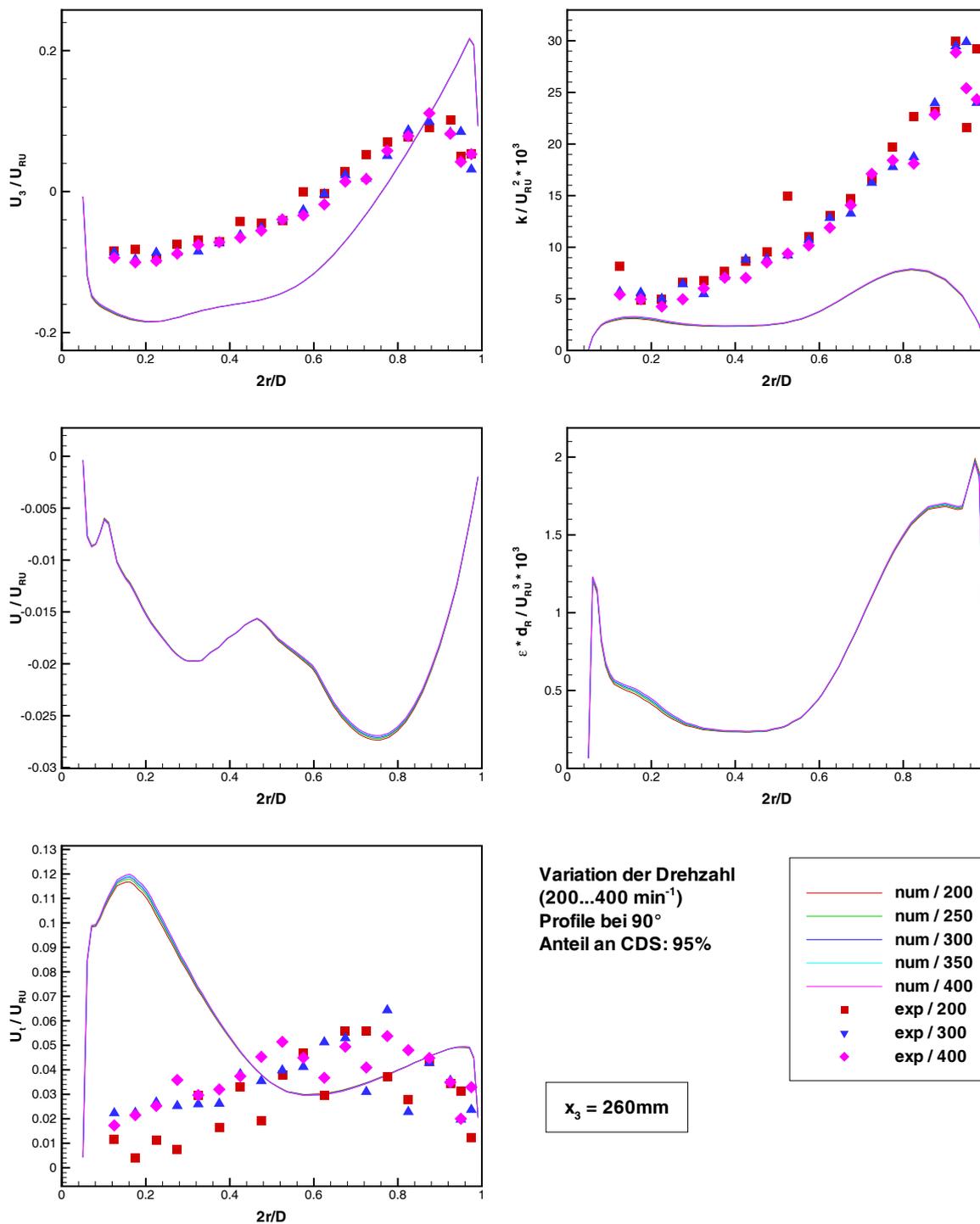


Abbildung A.19: Berechnete und gemessene relative Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 260\text{mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R ($G1$, $\gamma_{CDS} = 0.95$)

A.7 Partikeleigenschaften: Vergleich von Berechnung und Messung in ausgewählten radialen Profilen

Ergänzend zu den Abbildungen 7.64-7.67 in Abschnitt 7.15 sind im Folgenden entsprechende Profile der Partikeleigenschaften für Teilchen mit $d = 500 \mu\text{m}$ zusammengestellt. Betrachtet werden die Höhen $x_3 = 100 \text{ mm}$, $x_3 = 120 \text{ mm}$, $x_3 = 160 \text{ mm}$ und $x_3 = 260 \text{ mm}$.

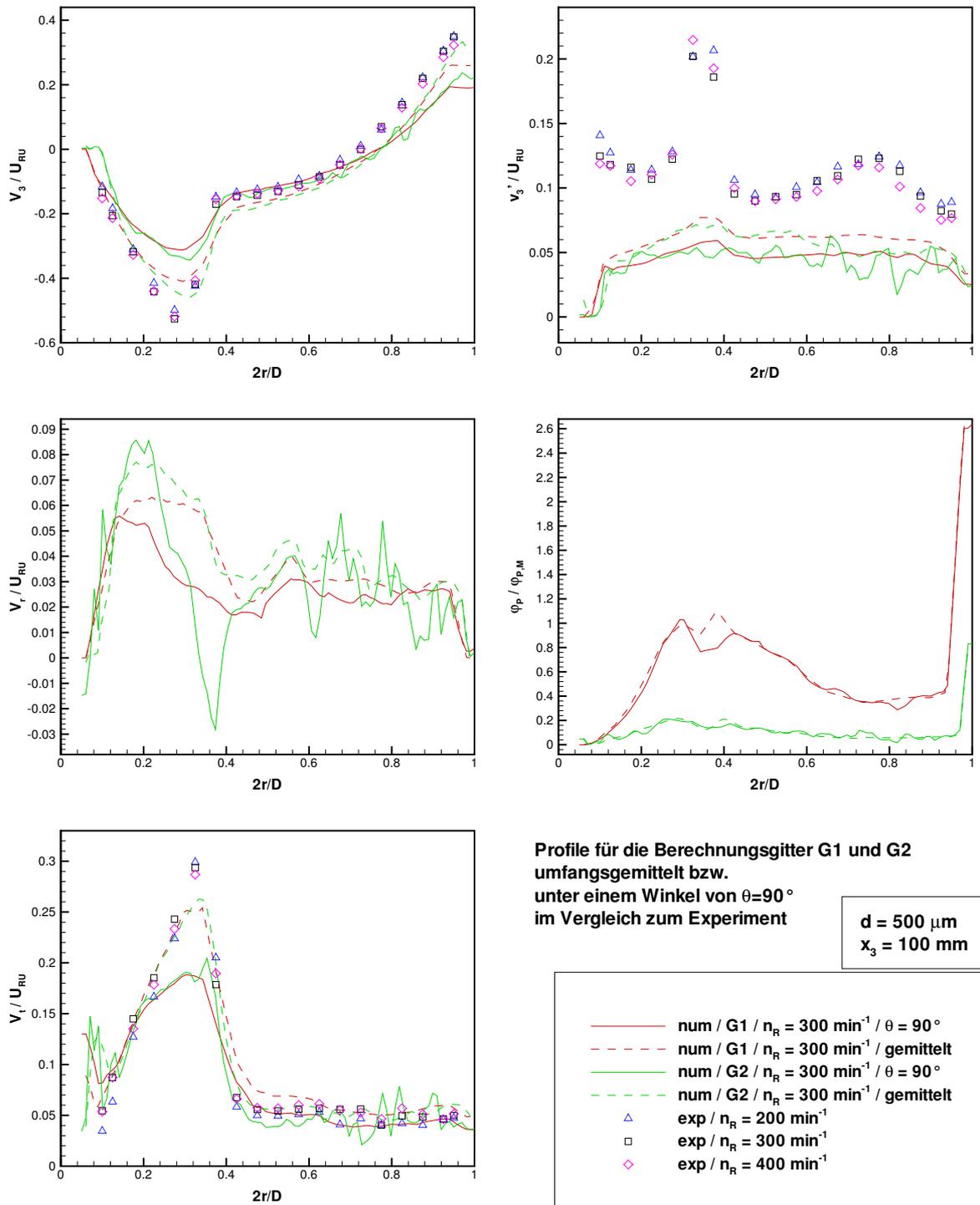


Abbildung A.20: Partikeleigenschaften auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) bei $x_3 = 100 \text{ mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1 bzw. G2, $d = 500 \mu\text{m}$, $\varphi_P \rightarrow 0$)

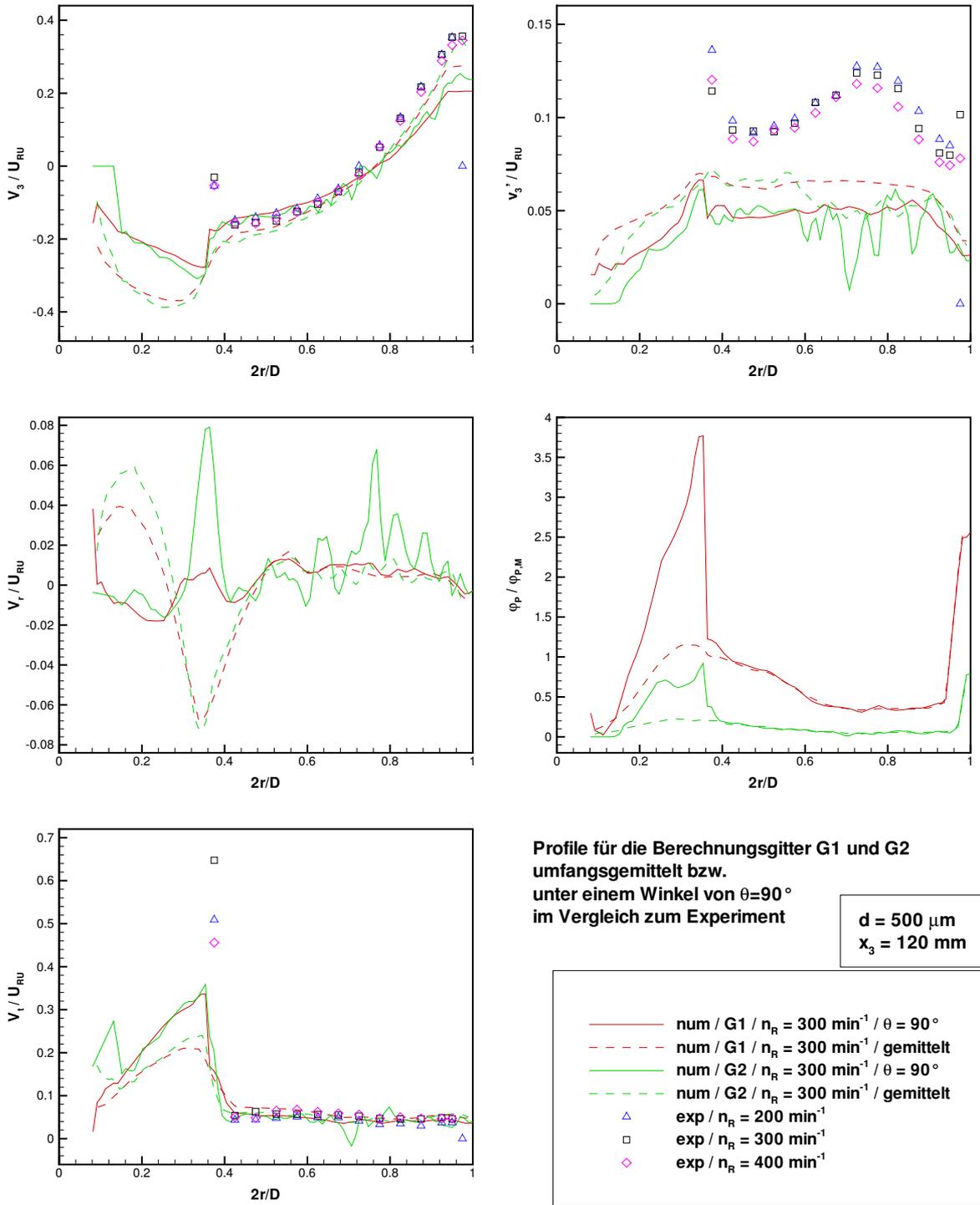


Abbildung A.21: Partikeleigenschaften auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) bei $x_3 = 120 \text{ mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1 bzw. G2, $d = 500 \mu\text{m}$, $\varphi_P \rightarrow 0$)

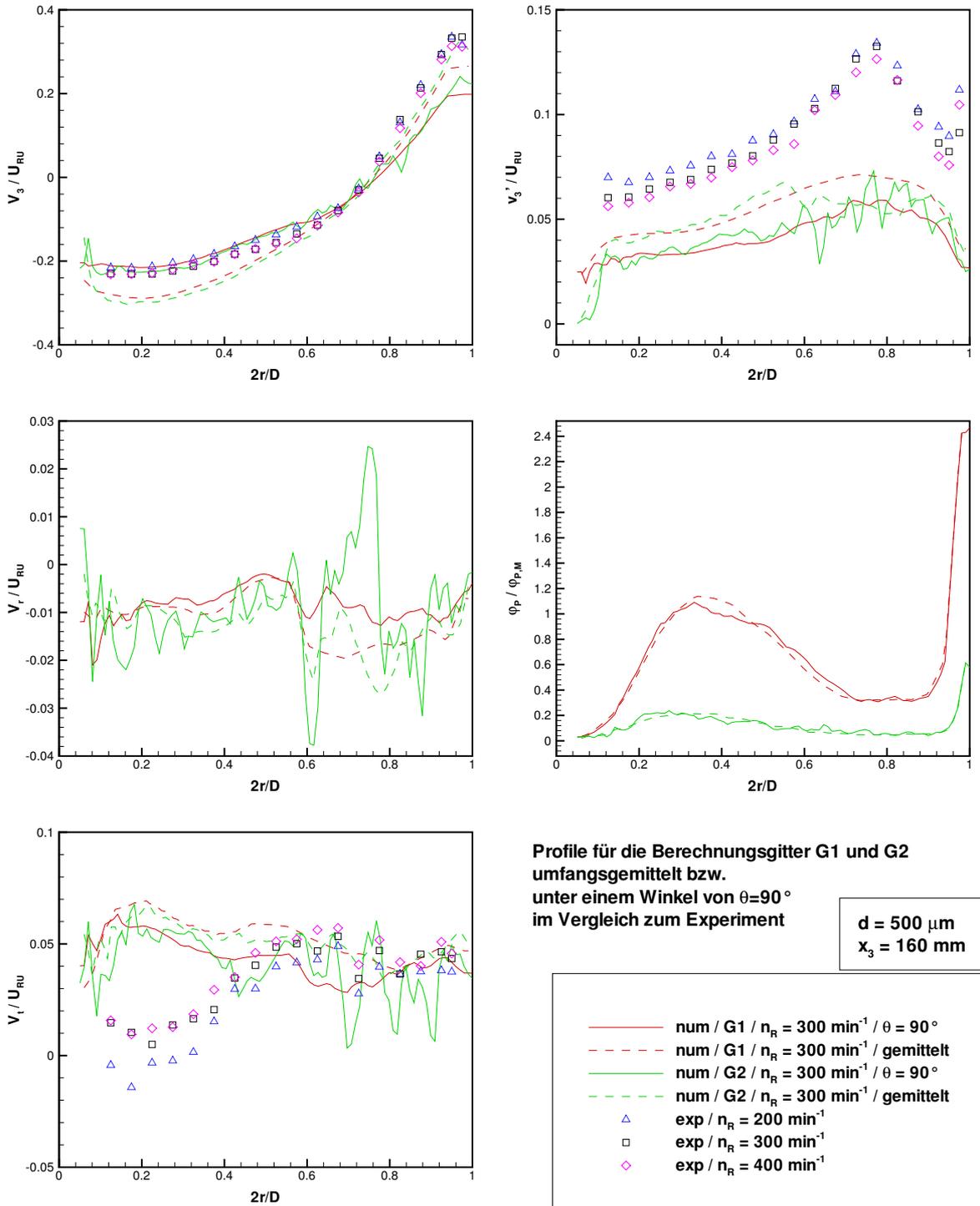


Abbildung A.22: Partikeleigenschaften auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) bei $x_3 = 160 \text{ mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1 bzw. G2, $d = 500 \mu\text{m}$, $\varphi_P \rightarrow 0$)

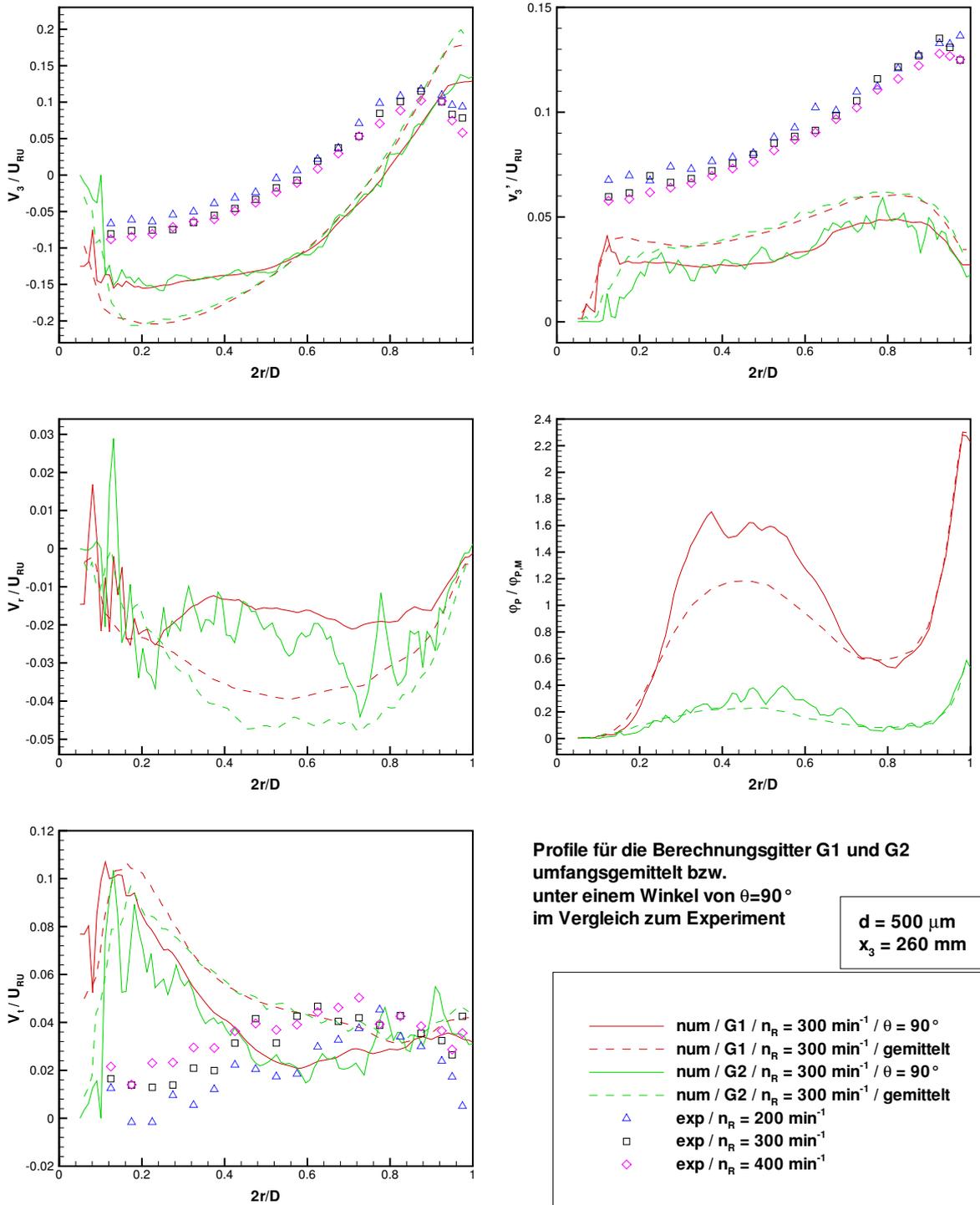


Abbildung A.23: Partikeleigenschaften auf radialen Profilen (für $\theta = 90^\circ$ & umfangsgemittelt) bei $x_3 = 260 \text{ mm}$ unter Variation der Rührerdrehzahl n_R (G1 bzw. G2, $d = 500 \mu\text{m}$, $\varphi_P \rightarrow 0$)

A.8 Fluideigenschaften in ausgewählten radialen Profilen mit bzw. ohne Berücksichtigung von Partikelquelltermen und Partikel-Partikel-Kollisionen

Ergänzend zu Abb. 7.75 in Abschnitt 7.17 sind im Folgenden Profile für die verschiedenen Fluideigenschaften in den Höhen $x_3 = 60$ mm, $x_3 = 80$ mm, $x_3 = 100$ mm, $x_3 = 120$ mm, $x_3 = 160$ mm und $x_3 = 260$ mm zusammengestellt.

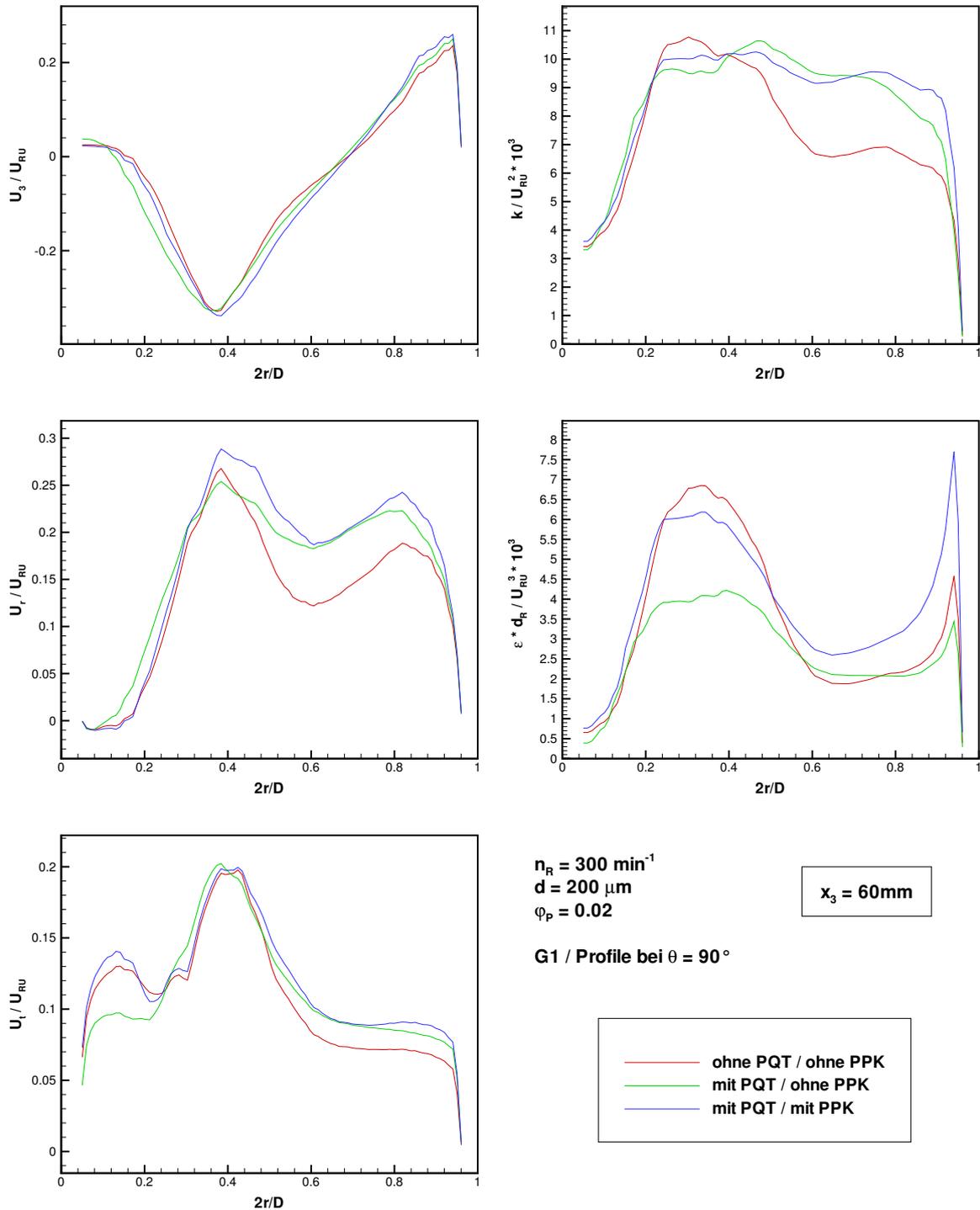


Abbildung A.24: Berechnete Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 60\text{mm}$ mit/ohne Partikelquelltermen (*PQT*) bzw. mit/ohne Partikel-Partikel-Kollisionen (*PPK*); ($G1$, $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $d = 200 \mu\text{m}$, $\varphi_{P,M} = 0.02$)

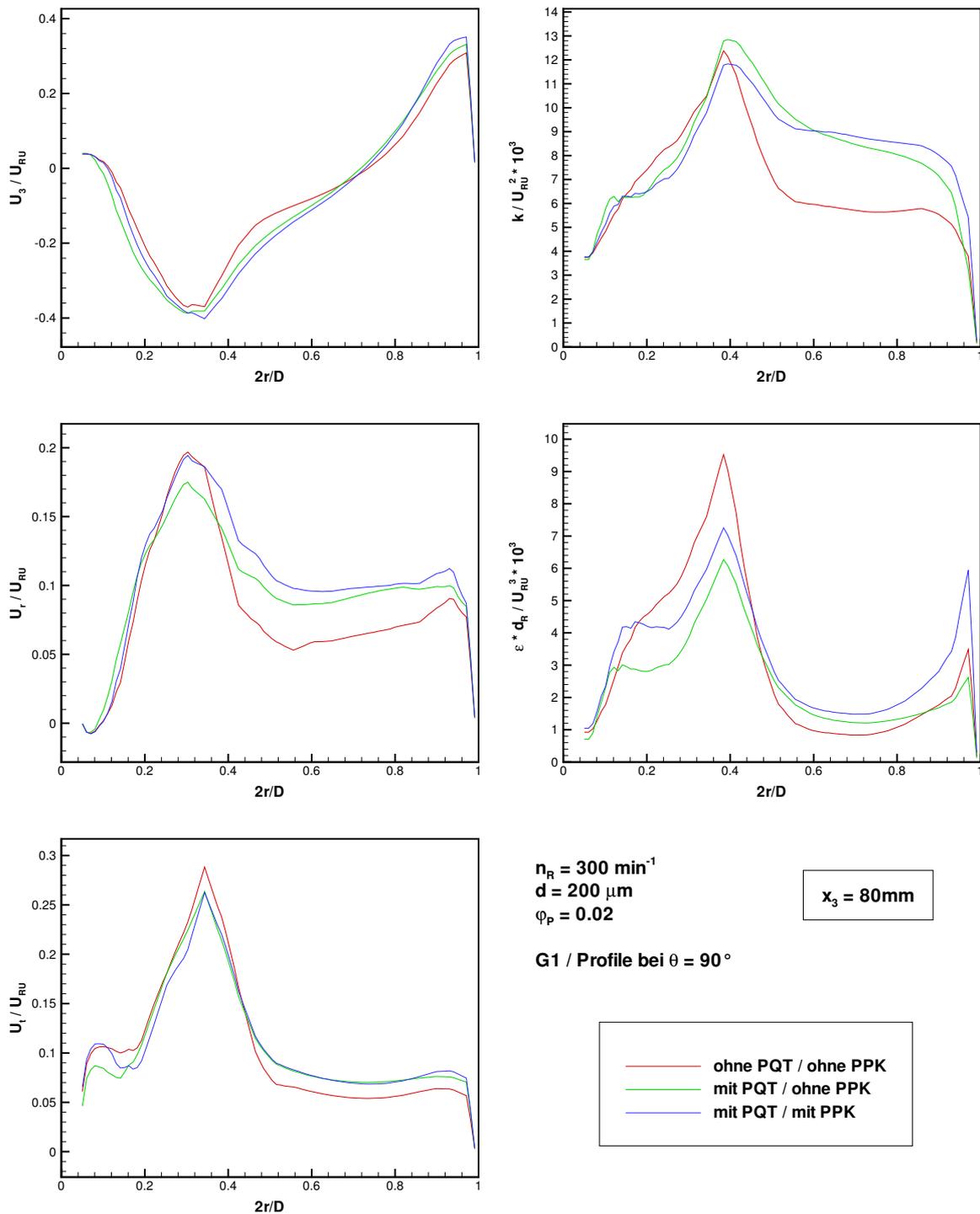


Abbildung A.25: Berechnete Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 80 \text{ mm}$ mit/ohne Partikelquelltermen (*PQT*) bzw. mit/ohne Partikel-Partikel-Kollisionen (*PPK*); (*G1*, $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $d = 200 \text{ }\mu\text{m}$, $\varphi_{P,M} = 0.02$)

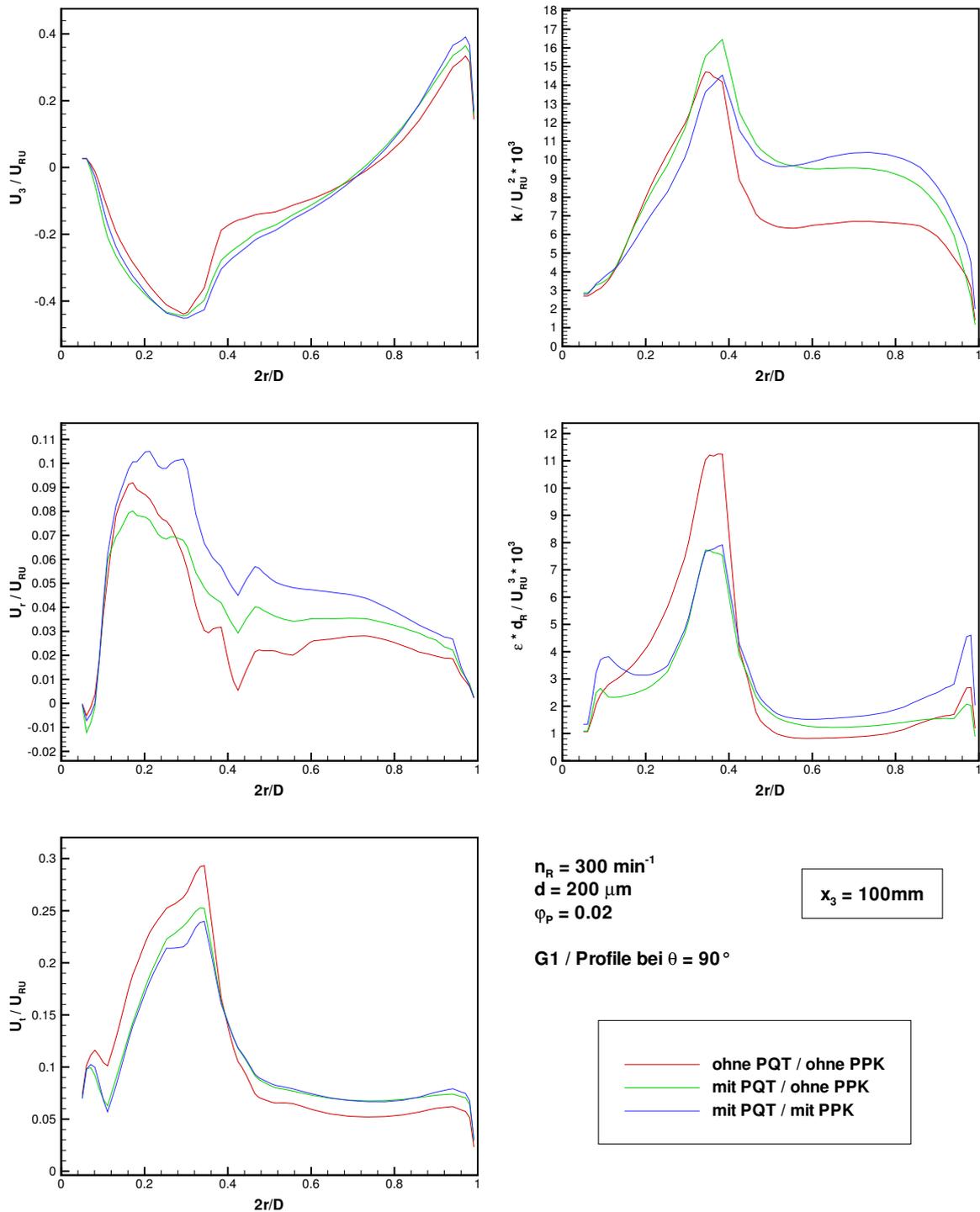


Abbildung A.26: Berechnete Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 100 \text{ mm}$ mit/ohne Partikelquelltermen (PQT) bzw. mit/ohne Partikel-Partikel-Kollisionen (PPK); (G1, $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $d = 200 \text{ } \mu\text{m}$, $\varphi_{P,M} = 0.02$)

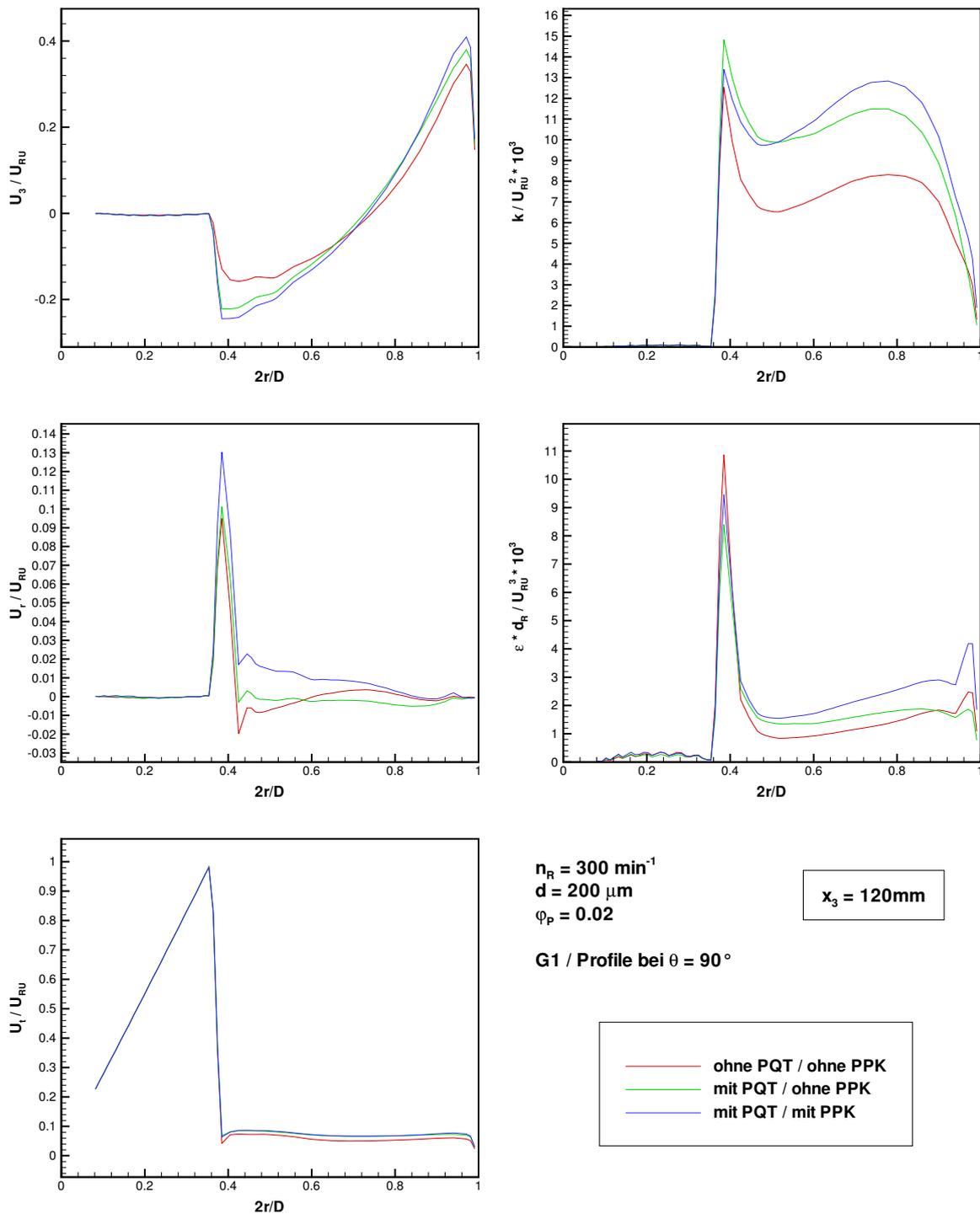


Abbildung A.27: Berechnete Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 120 \text{ mm}$ mit/ohne Partikelquelltermen (PQT) bzw. mit/ohne Partikel-Partikel-Kollisionen (PPK); (G1, $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $d = 200 \text{ } \mu\text{m}$, $\varphi_{P,M} = 0.02$)

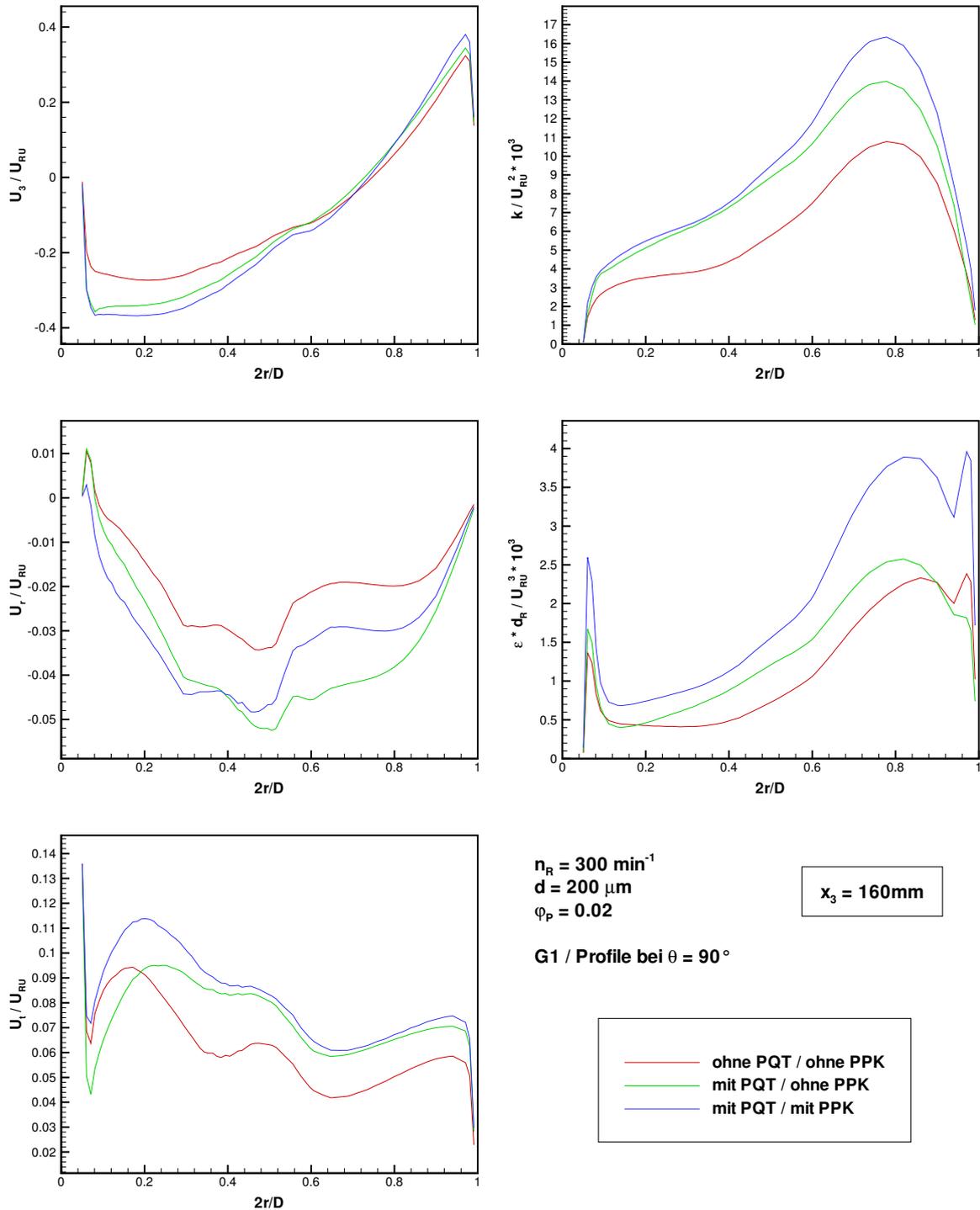


Abbildung A.28: Berechnete Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 160 \text{ mm}$ mit/ohne Partikelquelltermen (PQT) bzw. mit/ohne Partikel-Partikel-Kollisionen (PPK); (G1, $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $d = 200 \text{ }\mu\text{m}$, $\varphi_{P,M} = 0.02$)

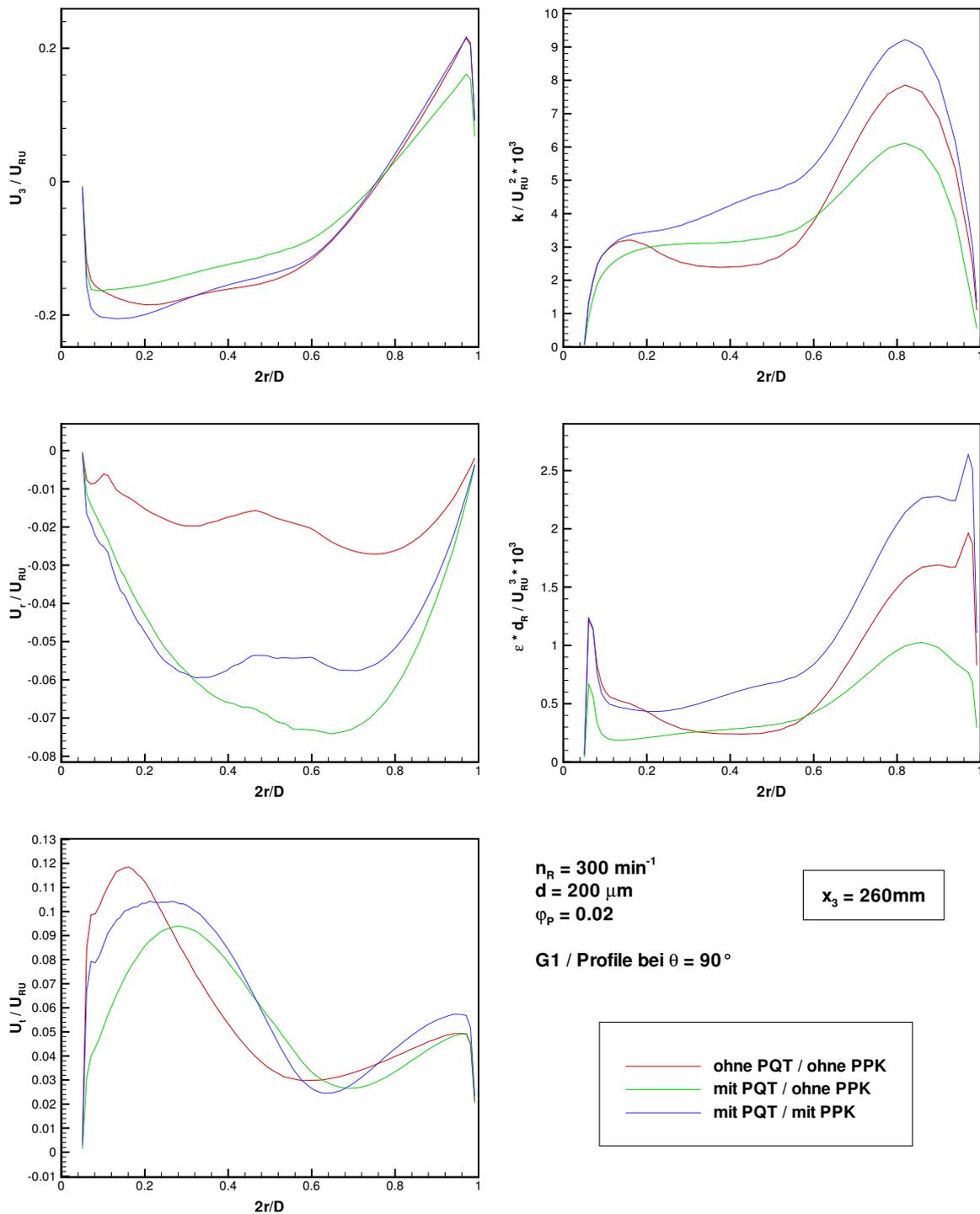


Abbildung A.29: Berechnete Fluideigenschaften auf radialen Profilen bei $\theta = 90^\circ$ und $x_3 = 260 \text{ mm}$ mit/ohne Partikelquelltermen (PQT) bzw. mit/ohne Partikel-Partikel-Kollisionen (PPK); (G1, $n_R = 300 \text{ min}^{-1}$, $d = 200 \text{ } \mu\text{m}$, $\varphi_{P,M} = 0.02$)

Literaturverzeichnis

- [1] ABID, M. ; XUEREB, C. ; BERTRAND, J.: Modeling of the 3D hydrodynamics of 2-blade-impellers in stirred tanks filled with a highly viscous fluid. In: *Can. J. Chem. Eng.* 72 (1994), S. 184–193
- [2] ANDREWS, M. J. ; O'ROURKE, P. J.: The multiphase particle-in-cell (MP-PIC) method for dense particulate flows. In: *Int. J. Multiphase Flow* 22 (1996), S. 379–402
- [3] ANGST, R. ; KRAUME, M.: CFD-Berechnungen der Fest/flüssig-Strömung in Rührbehältern: Einflüsse von Gitter und Modell. In: *GVC Fachausschuss-sitzung CFD*. Berlin, D, 2003
- [4] ARMENANTE, P. M. ; CHOU, C. C. ; HEMRAJANI, R. R.: Comparison of experimental and numerical fluid velocity distribution profiles in an unbaffled mixing vessel provided with a pitched-blade turbine. In: *ICHEME Symp. Series* 136 (1994), S. 349–356
- [5] AYAZI SHAMLOU, P. ; KOUTSAKOS, E.: Solids suspensions and distribution in liquids under turbulent agitation. In: *Chem. Eng. Sci.* 44 (1989), S. 529–542
- [6] BAKKER, A.: *Hydrodynamics of stirred gas-liquid dispersions*, Delft University of Technology, NL, Diss., 1992
- [7] BAKKER, A. ; FASANO, J. B.: Time dependent, turbulent mixing and chemical reaction in stirred tanks. In: *AIChE Symp. Series* 90 (1994), Nr. 299, S. 71–77
- [8] BAKKER, A. ; FASANO, J. B. ; MYERS, K. J.: Effects of flow pattern on the solids distribution in a stirred tank. In: *ICHEME Symp. Series* 136 (1994), S. 1–8
- [9] BAKKER, A. ; LAROCHE, R. D. ; WANG, M. H. ; CALABRESE, R. V.: Sliding Mesh Simulation of Laminar Flow in Stirred Tanks. In: *Trans. IChemE Part A* 75 (1997), S. 42–44
- [10] BAKKER, A. ; MYERS, K. J. ; WARD, R. W. ; LEE, C. K.: The Laminar and Turbulent Flow Pattern of a Pitched Blade Turbine. In: *Trans. IChemE Part A* 74 (1996), S. 485–491

- [11] BAKKER, R.: *Micromixing in Chemical Reactors*, Delft University of Technology, NL, Diss., 1996
- [12] BALDI, G. ; CONTI, R. ; ALARIA, E.: Complete suspension of particles in mechanically agitated vessels. In: *Chem. Eng. Sci.* 33 (1978), S. 21–25
- [13] BANKS, W. H. H.: The laminar boundary layer on a rotating sphere. In: *Acta Mech.* 24 (1976), S. 273–287
- [14] BARRESI, A. ; BALDI, G.: Solid dispersion in an agitated vessel. In: *Chem. Eng. Sci.* 42 (1987), S. 2949–2956
- [15] BARRUE, H. ; XUEREBO, C. ; PITIOT, P. ; FALK, L. ; BERTRAND, J.: Comparison of Experimental and Computational Particle Trajectories in a Stirred Vessel. In: *Chem. Eng. Technol.* 22 (1999), S. 511–521
- [16] BARTELS, C. ; BREUER, M. ; WECHSLER, K. ; DURST, F.: Computational fluid dynamics applications on parallel-vector computers: computations of stirred vessel flows. In: *Computers & Fluids* 31 (2002), S. 69–97
- [17] BASSET, A. B.: On the motion of a sphere in a viscous liquid. In: *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* A179 (1888), S. 43–63
- [18] BASSET, A. B.: *A Treatise on Hydrodynamics, Vol. 2.* London : Deighton Bell, 1888
- [19] BEITZ, W. (Hrsg.) ; GROTE, K.-H. (Hrsg.): *Dubbel — Taschenbuch für den Maschinenbau.* 19. Auflage. Berlin : Springer-Verlag, 1997
- [20] BERLEMONT, A. ; ACHIM, P.: Influence of the isotropization of particle motion due to collisions on the fluid turbulence anisotropy in a turbulent pipe flow. In: *Proc. 4th Int. Conf. on Multiphase Flow – ICMF’01 – 354.* New Orleans (La.), USA, 2001
- [21] BERLEMONT, A. ; CHANG, Z. ; GOUESBET, G.: Particle Lagrangian Tracking with Hydrodynamic interactions and collisions. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 60 (1998), S. 1–18
- [22] BERLEMONT, A. ; CHANG, Z. ; GOUESBET, G.: Simulation of particle collisions in a two phase pipe flow by using multiple particles Lagrangian tracking. In: *Proc. 3rd Int. Conf. on Multiphase Flow – ICMF’98.* Lyon, F, 1998
- [23] BERLEMONT, A. ; DESJONQUÈRES, P. ; GOUESBET, G.: Particle Lagrangian simulation in turbulent flows. In: *Int. J. Multiphase Flow* 16 (1990), S. 19–34
- [24] BIRD, R. B. ; STEWART, W. E. ; LIGHTFOOT, E. N.: *Transport Phenomena.* New York : J. Wiley & Sons, 1960
- [25] BOHNET, M. ; NIESMAK, G.: Distribution of solids in stirred suspensions. In: *Ger. Chem. Eng.* 3 (1980), S. 57–65

- [26] BOLOUR-FROUSHAN, A. H.: *Prediction of single-phase turbulent flow in agitated mixing vessels*, University of London, GB, Ph.D. Thesis, 1986
- [27] BOURNE, J. R. ; SHARMA, R. N.: Homogeneous particle suspension in propeller-agitated flat bottomed tanks. In: *Chem. Engng. J.* 8 (1974), S. 243–250
- [28] BOUSSINESQ, M. J.: Sur la résistance qu'oppose un liquide indéfini en repos, sans pesanteur, au mouvement varié d'une sphère solide qu'il mouille sur toute sa surface, quand les vitesses restent bien continues et assez faibles pour que leurs carrés et produits soient négligeables. In: *C. R. Acad. Sci. Paris* 100 (1885), S. 935–937
- [29] BOUSSINESQ, M. J.: *Theorie Analytique de la Chaleur, Vol. 2*. Paris : L'École Polytechnique, 1903
- [30] BRADSHAW, P. (Hrsg.): *Turbulence - Springer Topics in Applied Physics*. Bd. 12. New York : Springer-Verlag, 1978
- [31] BRAUER, H.: *Grundlagen der Einphasen- und Mehrphasenströmungen*. Aarau : Verlag Sauerländer, 1971
- [32] BRAUER, H. ; THIELE, H.: Bewegung von Partikelschwärmen. In: *Chem.-Ing.-Tech.* 45 (1973), S. 909–912
- [33] BRODKEY, R. S.: *Turbulence in Mixing Operations*. New York : Academic Press, 1975
- [34] BRONSTEIN, I. N. ; SEMENDJAJEW, K. A.: *Taschenbuch der Mathematik*. 23. Auflage. Thun : Verlag Harri Deutsch, 1987
- [35] BRUCATO, A. ; CIOFALO, M. ; GRISAFI, F. ; MICALÈ, G.: Complete numerical simulation of flow fields in baffled stirred vessels: The inner-outer approach. In: *ICHEME Symp. Series* 136 (1994), S. 155–162
- [36] BRUCATO, A. ; CIOFALO, M. ; GRISAFI, F. ; MICALÈ, G.: Numerical prediction of flow fields in baffled stirred vessels: A comparison of alternative modelling approaches. In: *Chem. Eng. Sci.* 53 (1998), S. 3653–3684
- [37] BRUCATO, A. ; CIOFALO, M. ; GRISAFI, F. ; RIZZUTI, L.: Computer simulation of turbulent fluid flow in baffled and unbaffled tanks stirred by radial impellers. In: *Proc. Int. Conf. Computer Applications to Batch Processes*. Cengio, I, 1990, S. 69–86
- [38] BUNDESINSTITUT FÜR RISIKOBEWERTUNG (BfR). *Chemikalieninformationssystem zu verbraucherrelevanten Stoffen (CIVS)*. <http://www.bgvv.de>
- [39] CALABRESE, R. V. ; MIDDLEMAN, S.: The dispersion of discrete particles in a turbulent fluid field. In: *AIChE J.* 25 (1979), S. 1025–1035

- [40] CHANG, E. J. ; MAXEY, M. R.: Accelerated motion of rigid spheres in unsteady flow at low to moderate Reynolds numbers. Part I: Oscillatory motion. In: *J. Fluid Mech.* 277 (1994), S. 347–379
- [41] CHANG, E. J. ; MAXEY, M. R.: Accelerated motion of rigid spheres in unsteady flow at low to moderate Reynolds numbers. Part I: Accelerated motion. In: *J. Fluid Mech.* 303 (1995), S. 133–153
- [42] CHEN, M. ; KONTOMARIS, K. ; MCCLAUGHLIN, J. B.: Direct Numerical Simulation of Droplet Collisions in a Turbulent Channel Flow. Part I: collision algorithm. In: *Int. J. Multiphase Flow* 24 (1998), S. 1079–1103
- [43] CHEN, M. ; KONTOMARIS, K. ; MCCLAUGHLIN, J. B.: Direct Numerical Simulation of Droplet Collisions in a Turbulent Channel Flow. Part II: collision rates. In: *Int. J. Multiphase Flow* 24 (1998), S. 1105–1138
- [44] CHEN, X. Q. ; PEREIRA, J. C. F.: Efficient computation of particle dispersion in turbulent flows with a stochastic-probabilistic model. In: *Int. J. Heat Mass Transfer* 40 (1997), S. 1727–1741
- [45] CHUNG, J. N. ; TROUTT, T. R.: Simulation of particle dispersion in an axisymmetric jet. In: *J. Fluid Mech.* 186 (1988), S. 199–222
- [46] CLIFT, R. C. ; GAUVIN, W. H.: The motion of particles in turbulent gas streams. In: *Proc. Chemeca '70*, 1970, S. 14–28
- [47] CLIFT, R. C. ; GRACE, J. R. ; WEBER, M. E.: *Bubbles, Drops and Particles*. New York : Academic Press, 1978
- [48] CONDON, E. U. ; ODISHAW, H.: *Handbook of Physics*. New York : McGraw-Hill, 1958
- [49] COSTES, J. ; COUDERC, J. P.: Study by laser doppler anemometry of the turbulent flow induced by a rushton turbine in a stirred tank – Influence of the size of the units I: Mean flow and turbulence. In: *Chem. Eng. Sci.* 43 (1988), S. 2751–2764
- [50] COSTES, J. ; COUDERC, J. P.: Study by laser doppler anemometry of the turbulent flow induced by a rushton turbine in a stirred tank–Influence of the size of the units II: Spectral analysis and scales of turbulence. In: *Chem. Eng. Sci.* 43(10) (1988), S. 2765–2772
- [51] CROWE, C. T.: On the relative importance of particle-particle collisions in gas-particle flows. In: *Proc. Conf. on Gas Borne Particles — Paper C78/81*, 1981, S. 135–137
- [52] CROWE, C. T.: REVIEW — Numerical Models for dilute Gas-Particle Flows. In: *Trans. ASME - J. Fluids Engng.* 104 (1982), S. 297–303

- [53] CROWE, C. T.: The State-Of-The-Art in the Development of numerical Models for Dispersed Phase Flows. In: *Proc. Int. Conf. on Multiphase Flow*. Tsukuba, Japan, 1991, S. 49–60
- [54] CROWE, C. T. ; SHARMA, M. P. ; STOCK, D. E.: The particle-source-in-cell (PSI-cell) method for gas-droplet flows. In: *Trans. ASME - J. Fluids Engng.* 99 (1977), S. 325–332
- [55] CROWE, C. T. ; SOMMERFELD, M. ; TSUJI, Y.: *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. Boca Raton : CRC Press, 1998
- [56] CSANADY, G. T.: Turbulent Diffusion of Heavy Particles in the Atmosphere. In: *J. Atmospheric Sci.* 20 (1963), S. 201–208
- [57] CUTTER, L. A.: Flow and turbulence in a stirred tank. In: *AIChE J.* 12 (1966), S. 35–45
- [58] DANCKWERTS, P. V.: The definition and measurement of some characteristics of mixtures. In: *Appl. Sci. Res.* 3 (1953), S. 279–296
- [59] DANDY, D. S. ; DWYER, H. A.: A sphere in shear flow at finite Reynolds Number: effect of shear on particle lift, drag, and heat transfer. In: *J. Fluid Mech.* 216 (1990), S. 381–410
- [60] DASKOPOULOS, P. ; HARRIS, C. K.: Three dimensional CFD simulations of turbulent flow in baffled stirred tanks: An assessment of the current position. In: *IChemE Symp. Series* 140 (1996), S. 1–13
- [61] DECKER, S.: *Numerische Berechnungen und experimentelle Untersuchungen der Partikeldispersion in turbulenten Scherströmungen*, Lehrstuhl für Strömungsmechanik, Universität Erlangen-Nürnberg, D, Diplomarbeit, 1993
- [62] DECKER, S. ; SOMMERFELD, M.: Calculation of Particle Suspension in Agitated Vessels with the Euler-Lagrange Approach. In: *IChemE Symp. Series* 140 (1996), S. 71–82
- [63] DECKER, S. ; SOMMERFELD, M.: Numerische Berechnung der Konzentrationsverteilung in zweiphasigen Rührwerkströmungen mit dem Euler-Lagrange-Verfahren. In: *Chem. Techn.* 51 (1999), S. 245–248
- [64] DECKER, S. ; SOMMERFELD, M.: Numerical calculations of two-phase flows in agitated vessels using the Euler/Lagrange approach. In: *Proc. ASME FEDSM'00 - 11154*. Boston (Mass.), USA, 2000
- [65] DEEN, N.: *An Experimental and Computational Study of Fluid Dynamics in Gas-Liquid Chemical Reactors*, Aalborg University, Esbjerg, DK, Ph.D. Thesis, 2001

- [66] DEEN, N. G. ; SOLBERG, T. ; HJERTAGER, H.: Flow generated by an aerated Rushton impeller: Two-phase PIV experiments and numerical simulations. In: *Can. J. Chem. Eng.* 80 (2002), S. 638–652
- [67] DEMIRDŽIĆ, I. ; PERIĆ, M.: Finite volume method for prediction of fluid flow in arbitrarily shaped domains with moving boundaries. In: *Int. J. Num. Methods Fluids* 10 (1990), S. 771–790
- [68] DENNIS, S. C. R. ; SINGH, S. N. ; INGHAM, D. B.: The steady flow due to a rotating sphere at low and moderate Reynolds number. In: *J. Fluid Mech.* 101 (1980), S. 257–279
- [69] DERKSEN, J. J.: Simulation of solid particle dispersion in agitated tanks. In: *Proc. 11th European Conf. on Mixing*. Bamberg, D, 2003, S. 121–128
- [70] DERKSEN, J. J. ; VAN DEN AKKER, H. E. A.: Large Eddy Simulations on the Flow Driven by a Rushton Turbine. In: *AIChE J.* 45 (1999), S. 209–221
- [71] DESJONQUÈRES, P.: *Modélisation Lagrangienne du comportement de particules discrètes en écoulement turbulent*, Université de Rouen, F, Thèse de 3^{ème} cycle, 1987
- [72] DI FELICE, R.: The voidage function for fluid-particle interaction systems. In: *Int. J. Multiphase Flow* 20 (1994), S. 153–159
- [73] DOMELEVO, K. ; SAINSAULIEU, L.: A numerical method for the computation of the dispersion of a cloud of particles by a turbulent gas flow field. In: *J. Computat. Physics* 133 (1997), S. 256 – 278
- [74] DONG, L. ; JOHANSEN, S. T. ; ENGH, T. A.: Flow induced by an impeller in an unbaffled tank – Part I: Experimental. In: *Chem. Eng. Sci.* 49 (1994), S. 549–560
- [75] DONG, L. ; JOHANSEN, S. T. ; ENGH, T. A.: Flow induced by an impeller in an unbaffled tank – Part II: Numerical modelling. In: *Chem. Eng. Sci.* 49 (1994), S. 3511–3518
- [76] DRYDEN, H. L.: A Review of the Statistical Theory of Turbulence. In: *Quart. Appl. Math.* 1 (1943), S. 7–42
- [77] DURBIN, P. A.: A random flight model of inhomogeneous turbulent dispersion. In: *Phys. Fluids* 23 (1980), S. 2151–2153
- [78] DURST, F. ; MELLING, A. ; WHITELAW, J. H.: *Theorie und Praxis der Laser-Doppler Anemometrie*. Karlsruhe : G. Braun, 1987
- [79] DURST, F. ; MILOJEVIĆ, D. ; SCHÖNUNG, B.: Eulerian and Lagrangian predictions of particulate two-phase flows – A numerical study. In: *Appl. Math. Modelling* 8 (1984), S. 101–115

- [80] EATON, J. K. ; FESSLER, J. R.: Preferential concentration of particles by turbulence. In: *Int. J. Multiphase Flow* 20 (1994), S. 169–209
- [81] EGGELS, J. G. M.: Direct and Large-Eddy Simulations of Turbulent Fluid Flow Using the Lattice-Boltzmann Scheme. In: *Int. J. Heat Fluid Flow* 16 (1996), S. 307–323
- [82] EILERS, H.: Die Viskosität von Emulsionen hochviskoser Stoffe als Funktion der Konzentration. In: *Kolloid-Zeitschrift* 97 (1941), S. 3313–321
- [83] EINENKEL, W. D.: *Beschreibung der fluiddynamischen Vorgänge beim Suspensieren im Rührwerk*, TU München, D, Diss., 1979
- [84] ELGHOBASHI, S.: On predicting particle-laden turbulent flows. In: *Appl. Sci. Res.* 52 (1994), S. 309–329
- [85] ELGHOBASHI, S. ; ABOU-ARAB, T. W.: A two-equation turbulence model for two-phase flows. In: *Phys. Fluids* 26 (1983), S. 931–938
- [86] ELGHOBASHI, S. ; ABOU-ARAB, T. W. ; RIZK, M. ; MOSTAFA, A.: Prediction of the Particle-Laden Jet with a Two-Equation Turbulence Model. In: *Int. J. Multiphase Flow* 10 (1984), S. 697–710
- [87] ELGHOBASHI, S. ; TRUESDELL, G. C.: On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles – Part I: Turbulence Modification. In: *Phys. Fluids A* 5 (1993), S. 1790–1801
- [88] ERGUN, S.: Fluid flow through packed columns. In: *Chem. Eng. Progress* 48 (1952), S. 89–94
- [89] ERTEM-MÜLLER, S.: *Numerical efficiency of implicit and explicit methods with multigrid for Large Eddy Simulations in complex geometries*, TU Darmstadt, D, Diss., 2003
- [90] ERTEM-MÜLLER, S. ; SCHÄFER, M.: DNS and LES of the turbulent flow in a Rushton turbine. In: *GVC Fachausschusssitzung CFD*. Berlin, D, 2003
- [91] FERZIGER, J. H.: Large Eddy Simulation. In: HUSSAINI, M. Y. (Hrsg.) ; GATSKI, T. (Hrsg.): *Simulation and Modeling of Turbulent Flows*. Cambridge, New York : Cambridge University Press, 1995
- [92] FERZIGER, J. H. ; PERIĆ, M.: *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Berlin : Springer-Verlag, 2002
- [93] FOKEMA, M. D. ; KRESTA, S. M. ; WOOD, P. E.: Importance of Using the Correct Impeller Boundary Conditions for CFD Simulations of Stirred Tanks. In: *Can. J. Chem. Eng.* 72 (1994), S. 177–183

- [94] FORTES, A. F. ; JOSEPH, D. D. ; LUNDGREN, T. S.: Nonlinear mechanics of fluidization of beds of spherical particles. In: *J. Fluid Mech.* 177 (1987), S. 467–483
- [95] FRANK, T.: *Numerische Berechnung der feststoffbeladenen Gasströmung im horizontalen Kanal unter Berücksichtigung von Wandrauigkeiten*, Bergakademie Freiberg, D, Diss., 1992
- [96] FRANK, T.: *Parallele Algorithmen für die numerische Simulation dreidimensionaler, disperser Mehrphasenströmungen und deren Anwendung in der Verfahrenstechnik*. Aachen : Shaker-Verlag, 2002. – Habilitationsschrift, TU Chemnitz, D
- [97] FRANK, T. ; SCHADE, K. P. ; PETRAK, D.: Numerical simulation and experimental investigation of a gas-solid two-phase flow in a horizontal channel. In: *Int. J. Multiphase Flow* 19 (1993), S. 187–198
- [98] FRENKIEL, F. N.: On the Kinematics of Turbulence. In: *J. Aero. Sci.* (1948), S. 57–64
- [99] FRIBERG, P. C.: *Three-dimensional modelling and simulations of gas-liquid flow processes in bioreactors*, Norwegian University of Science and Technology, Porsgrunn, N, Diss., 1998
- [100] FROHN, A.: *Einführung in die kinetische Gastheorie*. Wiesbaden : Aula-Verlag, 1988
- [101] FULLER, D. D.: Coefficients of friction. In: GRAY, D. E. (Hrsg.): *American Institute of Physics Handbook*. 3rd Edition. New York : McGraw-Hill, 1972
- [102] GEISLER, R.: *Fluiddynamik und Leistungseintrag in turbulent gerührten Suspensionen*, TU München, D, Diss., 1991
- [103] GIDASPOW, D.: *Multiphase Flow and Fluidization - Continuum and Kinetic Theory Description*. Boston : Academic Press, 1994
- [104] GODFREY, J. C. ; ZHU, Z. M.: Measurement of particle-liquid profiles in agitated tanks. In: *AIChE Symp. Series* 90 (1994), Nr. 299, S. 181–185
- [105] GORE, R. A. ; CROWE, C. T.: Effect of particle size on modulating turbulent intensity. In: *Int. J. Multiphase Flow* 15 (1989), S. 279–285
- [106] GOSMAN, A. D. ; LEKAKOU, C. ; POLITIS, S. ; ISSA, R. I. ; LOONEY, M. K.: Multidimensional Modeling of Turbulent Two-Phase Flows in Stirred Vessels. In: *AIChE J.* 38 (1992), S. 1946–1956
- [107] GRANT, G. ; TABAKOFF, W.: Erosion prediction in turbomachinery resulting from environmental solid particles. In: *J. Aircraft* 12 (1975), S. 471–478

- [108] GÜNDEL, A. A. ; WEBER, M. E.: Flow phenomena in stirred tanks – Part I: The impeller stream. In: *AIChE J.* 21 (1975), S. 931–949
- [109] HACKBUSCH, W.: *Multigrid Methods and Applications*. Berlin : Springer-Verlag, 1985
- [110] HALL, C. D.: The Simulation of Particle Motion in the Atmosphere by a Numerical Random-Walk Model. In: *Quart. J. R. Met. Soc.* 101 (1975), S. 235–244
- [111] HANJALIĆ, K. ; LAUNDER, B. E. ; SCHIESTEL, R.: *Multiple-Time-Scale Concepts in Turbulent Transport Modeling*. Von Kármán Institute for Fluid Mechanics, Rhode Saint Genèse, B, 1980 (Lecture Series No. 1980-3)
- [112] HAPPEL, J. ; BRENNER, H.: *Low Reynolds Number Hydrodynamics*. Leiden : Noordhoff Intl. Pub., 1973
- [113] HAPPEL, J. ; PFEFFER, R.: The motion of two spheres following each other in a viscous fluid. In: *AIChE J.* 6 (1960), S. 129–133
- [114] HARNBY, N. ; EDWARDS, M. F. ; NIENOW, A. W.: *Mixing in the Process Industries*. London : Butterworths, 1985
- [115] HARVEY, A. D. ; LEE, C. K. ; ROGERS, S. E.: Steady-State Modeling and Experimental Measurement of a Baffled Pitched-Blade Impeller Stirred Tank. In: *AIChE J.* 41 (1995), S. 2177–2186
- [116] HARVEY, A. D. ; ROGERS, S. E.: Steady and Unsteady Computation of Impeller-Stirred Reactors. In: *AIChE J.* 42 (1996), S. 2701–2712
- [117] HARVEY, A. D. ; WOOD, S. P. ; LANG, D. E.: Experimental and Computational Study of Multiple Impeller Flows. In: *Chem. Eng. Sci.* 52 (1997), S. 1479–1492
- [118] HARVEY, P. S. ; GREAVES, M.: Turbulent flow in an agitated vessel – Part I: A predictive model. In: *Trans. IChemE Part A* 60 (1982), S. 195–200
- [119] HARVEY, P. S. ; GREAVES, M.: Turbulent flow in an agitated vessel – Part II: Numerical solution and model predictions. In: *Trans. IChemE Part A* 60 (1982), S. 201–210
- [120] HENTRICH, P. (Hrsg.): *EKATO - Handbuch der Rührtechnik*. Schopfheim : Ekato Rühr- und Mischtechnik GmbH, 2000
- [121] HERNDL, G.: Suspendieren. In: *Fortschr. Verfahrenstechn.* 20 (1982), S. 137–162
- [122] HETSRONI, G.: *Handbook of Multiphase Systems*. Washington : Hemisphere Publishing Corporation, 1982

- [123] HETSRONI, G.: Particles-Turbulence Interaction. In: *Int. J. Multiphase Flow* 15 (1989), S. 735–746
- [124] HINZE, J. O.: *Turbulence*. New York : McGraw Hill, 1975
- [125] HIRAOKA, S. ; YAMADA, I. ; ARAGAKI, T. ; NISHIKI, H. ; SATO, A. ; TAKAGI, T.: Numerical analysis of three dimensional velocity profile of highly viscous Newtonian fluid in an agitated vessels with paddle impeller. In: *J. Chem. Eng. Japan* 21 (1988), S. 79–86
- [126] HJELMFELT, A. T. ; MOCKROS, L. F.: Motion of discrete particles in a turbulent fluid. In: *Appl. Sci. Res.* 16 (1966), S. 149–161
- [127] HOCKEY, R. M.: *Turbulence Newtonian and Non-Newtonian Flows in a Stirred Reactor*, University of London, GB, Ph.D. Thesis, 1990
- [128] HÖFKEN, M.: *Moderne experimentelle Methoden für die Untersuchung von Strömungen in Rührbehältern und für Rührwerkoptimierungen*, Universität Erlangen-Nürnberg, D, Diss., 1994
- [129] HOWARTH, L.: Note on the Boundary Layer on a Rotating Sphere. In: *Phil. Mag.* 42 (1951), S. 1308–1315
- [130] HUBER, N.: *Zur Phasenverteilung von Gas-Feststoff-Strömungen in Rohren*, Universität Erlangen-Nürnberg, D, Diss., 1997
- [131] HUBER, N. ; SOMMERFELD, M.: Numerical calculation of dilute-phase pneumatic conveying in complex pipe systems. In: *Proc. ASME FEDSM'97 - 3694*. Vancouver (B.C.), CAN, 1997
- [132] HUBER, N. ; SOMMERFELD, M.: Modelling and numerical calculation of dilute-phase pneumatic conveying in pipe systems. In: *Powder Technology* 99 (1998), S. 90–101
- [133] HUTCHINGS, B. J. ; WEETMAN, R. J. ; PATEL, B. R.: Computation of flow fields in mixing tanks with experimental verification. In: *Proc. ASME Annual Meeting '89 - TN-481*. San Francisco (CA), USA, 1989
- [134] IGNATJEW, M.: *Hydrodynamische Modellierung von Suspendierprozessen in Rührmaschinen*, Universität Paderborn, D, Diss., 1994
- [135] INVENT COMPUTING GMBH: *Benutzerhandbuch zu FASTEST*. Erlangen, 2000
- [136] ISSA, R. I.: Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. In: *J. Computat. Physics* 62 (1985), S. 40–65
- [137] ISSA, R. I.: Numerical modelling of flows in stirred mixing vessels. In: SOMMERFELD, M. (Hrsg.): *Proc. 7th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*. Erlangen, D, 1994

- [138] ISSA, R. I.: Numerical modelling of two-phase flow in mixing vessels. In: PAPAIOU, K. D. (Hrsg.): *Computational Fluid Dynamics, ECCOMAS 98, Vol. 2*. John Wiley & Sons, 1998, S. 622–629
- [139] ISSA, R. I. ; GOSMAN, A. D.: The computation of three-dimensional turbulent two-phase flows in mixer vessels. In: *Proc. 2nd Int. Conf. Num. Methods Lam. and Turb. Flows*. Venice, I, 1981
- [140] JAWORSKI, Z. ; ZAKRZEWSKA, B.: Modelling of the turbulent wall jet generated by a pitched blade turbine impeller - The effect of turbulence model. In: *Trans. IChemE Part A* 80 (2002), S. 846–854
- [141] JENNE, M. ; REUSS, M.: A critical assessment on the use of $k-\varepsilon$ turbulence models for simulation of the turbulent liquid flow induced by a Rushton-turbine in baffled stirred-tank reactors. In: *Chem. Eng. Sci.* 54 (1999), S. 3921–3941
- [142] JISCHA, M. F.: *Konvektiver Impuls-, Wärme- und Stoffaustausch*. Braunschweig : Vieweg Verlag, 1982
- [143] JONES, W. ; LAUNDER, B. E.: The Prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence. In: *Int. J. Heat Mass Transfer* 15 (1972), S. 301–314
- [144] KAMINOYAMA, M. ; SAITO, R. ; KAMIWANO, M.: Numerical analysis of three-dimensional flow of a pseudoplastic liquid in a stirred vessel with a turbine impeller. In: *Int. Chem. Engineering* 30 (1990), S. 720–728
- [145] KAMINOYAMA, M. ; SAITO, R. ; KAMIWANO, M.: Numerical analysis of mixing processing for high-viscosity pseudoplastic liquids in mixers with various plate-type impellers. In: *Int. Chem. Engineering* 33 (1993), S. 506–515
- [146] KASKAS, A. A.: *Schwarmgeschwindigkeit in Mehrkornsuspensionen am Beispiel der Sedimentation*, TU Berlin, D, Diss., 1970
- [147] KHOSLA, P. K. ; RUBIN, S. G.: A Diagonally-Dominant Second-Order Accurate Implicit Scheme. In: *Computers & Fluids* 2 (1974), S. 207–209
- [148] KIM, J. ; ELGHOBASCHI, S. ; SIRIGNANO, W. A.: Three dimensional flow over two spheres placed side by side. In: *J. Fluid Mech.* 246 (1993), S. 465–488
- [149] KIM, J. ; ELGHOBASCHI, S. ; SIRIGNANO, W. A.: On the equation for spherical-particle motion: effect of Reynolds and acceleration numbers. In: *J. Fluid Mech.* 367 (1998), S. 221–253
- [150] KIM, J. ; MANNING, F. S.: Turbulence energy and intensity spectra in a baffled, stirred vessel. In: *AIChE J.* 10 (1964), S. 747–751
- [151] KIPKE, K.: Anwendung strömungstechnischer Interferenzwirkung auf die Entwicklung des Interferenzstromrührers Intermig. In: *Verfahrenstechn.* 11 (1977), S. 518–524

- [152] KIPKE, K.: Auslegung von Industrie-Rührwerken. In: *Chem.-Ing.-Tech.* 57 (1985), S. 813–823
- [153] KITRON, A. ; ELPERIN, T. ; TAMIR, A.: Monte Carlo analysis of wall erosion and direct contact heat transfer by impinging two-phase jets. In: *J. Thermophysics and Heat Transfer* 3 (1989), S. 112–122
- [154] KITRON, A. ; ELPERIN, T. ; TAMIR, A.: Monte Carlo simulation of gas-solids suspension flows in impinging stream reactors. In: *Int. J. Multiphase Flow* 16 (1990), S. 1–17
- [155] KNEULE, F.: *Rühren - Praxis der Verfahrenstechnik, Band 1.* Frankfurt : DECHEMA, 1986
- [156] KOHNEN, C.: *Experimentelle und numerische Untersuchungen der Fluidströmung gerührter Suspensionen,* TU Braunschweig, D, Diss., 2000
- [157] KOHNEN, G.: *Über den Einfluß der Phasenwechselwirkungen bei turbulenten Zweiphasenströmungen und deren numerische Erfassung in der Euler-Lagrange Betrachtungsweise,* Universität Halle-Wittenberg, D, Diss., 1997
- [158] KOHNEN, G. ; RÜGER, M. ; SOMMERFELD, M.: Convergence behaviour for numerical calculations by the Euler/Lagrange method for strongly coupled phases. In: *Numerical Methods in Multiphase Flows* — ASME FED Vol. 185, 1994, S. 191–202
- [159] KOLAR, V. ; FILIP, P. ; CUREV, A. G.: The Swirling Radial Jet. In: *Appl. Sci. Res.* 39 (1982), S. 329–335
- [160] KOLMOGOROV, A. N.: Die lokale Struktur der Turbulenz in einer inkompressiblen zähen Flüssigkeit bei sehr großen Reynoldszahlen. In: KOLMOGOROV, A. N. (Hrsg.) ; LIMBERG, H. (Hrsg.) ; GOERING, H. (Hrsg.): *Sammelband zur statistischen Theorie der Turbulenz.* Berlin : Akademie-Verlag, 1958
- [161] KRAUME, M. ; ZEHNER, P.: Konzept zur Maßstabsübertragung beim Suspensieren im Rührbehälter. In: *Chem.-Ing.-Tech.* 67 (1995), S. 280–288
- [162] KRESTA, S. M.: *Characterization, Measurement and Prediction of the Turbulent Flow in Stirred Tanks,* McMaster University, Hamilton (Ontario), CAN, Ph.D. Thesis, 1993
- [163] KRESTA, S. M. ; WOOD, P. E.: Prediction of the three-dimensional turbulent flow in stirred tanks. In: *AIChE J.* 37 (1991), S. 448–460
- [164] KRESTA, S. M. ; WOOD, P. E.: The flow field produced by a pitched blade turbine: Characterization of the turbulence and estimation of the dissipation rate. In: *Chem. Eng. Sci.* 48 (1993), S. 1761–1774
- [165] LAMB, H.: *Hydrodynamics.* New York : Dover, 1945

- [166] LANE, G. L. ; SCHWARZ, M. P. ; EVANS, G. M.: Predicting gas-liquid flow in a mechanically stirred tank. In: *Appl. Math. Modelling* 26 (2002), S. 223–235
- [167] LAUFHÜTTE, H. D.: *Turbulenzparameter in gerührten Fluiden*, TU München, D, Diss., 1986
- [168] LAUNDER, B. E. ; SHARMA, B. I.: Application of the Energy Dissipation Model of Turbulence to Calculation of Flow Near a Spinning Disc. In: *Letters on Heat and Mass Transfer* 15 (1974), S. 301–314
- [169] LAUNDER, B. E. ; SPALDING, D. B.: The Numerical Computation of Turbulent Flows. In: *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 3 (1974), S. 269–289
- [170] LEE, K. C. ; NG, K. ; YIANNESKIS, M. ; LANGE, M. ; SANATIAN, R.: Sliding mesh predictions of the flows around Rushton impellers. In: *ICChemE Symp. Series* 140 (1996), S. 47–58
- [171] LEE, K. C. ; YIANNESKIS, M.: The Extent of Periodicity of the Flow in Vessels Stirred by Rushton Impellers. In: *AIChE Symp. Series* 90 (1994), Nr. 299, S. 5–18
- [172] LEE, K. C. ; YIANNESKIS, M.: Turbulence Properties of the Impeller Stream of a Rushton Turbine. In: *AIChE J.* 44 (1998), S. 13–24
- [173] LEE, S. L. ; DURST, F.: On the motion of particles in turbulent duct flows. In: *Int. J. Multiphase Flow* 8 (1982), S. 125–146
- [174] LEGG, B. J.: Turbulent dispersion from an elevated line source – Markov chain simulations of concentration and flux profiles. In: *Quart. J. R. Met. Soc.* 109 (1983), S. 645–660
- [175] LEGG, B. J. ; RAUPACH, M. R.: Markov-chain simulation of particle dispersion in inhomogeneous flows – The mean drift velocity induced by a gradient in Eulerian velocity variance. In: *Bound.-Layer Met.* 24 (1982), S. 3–13
- [176] LIANG, L. ; MICHAELIDES, E. E.: The magnitude of basset forces in unsteady multiphase flow computations. In: *Trans. ASME - J. Fluids Engng.* 114 (1992), S. 417–419
- [177] LIEPE, F. ; MEUSEL, W. ; MÖCKEL, H. O. ; PLATZER, B. ; WEISSGÄRBER, H.: *Verfahrenstechnische Berechnungsmethoden Teil 4 - Stoffvereinigen in fluiden Phasen*. Weinheim : VCH-Verlagsgesellschaft, 1988
- [178] LIEPE, F. ; SPERLING, R. *priv. Mitteilung*. 1995
- [179] LIEPE, F. ; SPERLING, R. ; JEMBERE, S.: *Rührwerke, Theoretische Grundlagen, Auslegung und Bewertung*. Köthen : Eigenverlag FH Anhalt, 1998
- [180] LOHR, B.: *Untersuchung turbulenter Strömungsfelder in einem Rührreaktor technischer Größe*, TU München, D, Diss., 1975

- [181] LOONEY, M. K. ; GOSMAN, A. D. ; ISSA, R. I. ; POLITIS, S.: Modelling of the turbulent flow of solid-liquid suspensions in stirred vessels. In: *5th Int. Conf. Math. Modelling*. Berkeley (CA), USA, 1985
- [182] LOTH, E.: Numerical approaches for motion of dispersed particles, droplets and bubbles. In: *Prog. Energy Combust. Sci.* 26 (2000), S. 161–223
- [183] LUMLEY, J. L.: Two-phase and non-Newtonian flows. In: BRADSHAW, P. (Hrsg.): *Turbulence - Springer Topics in Applied Physics* Bd. 12. New York : Springer-Verlag, 1978, S. 289–324
- [184] LUN, C. K. K. ; BENT, A. A.: Numerical simulation of inelastic frictional spheres in simple shear flow. In: *J. Fluid Mech.* 258 (1994), S. 335–353
- [185] LUN, C. K. K. ; LIU, H. S.: Numerical simulation of dilute turbulent gas-solid flows in horizontal channels. In: *Int. J. Multiphase Flow* 23 (1997), S. 575–605
- [186] LUN, C. K. K. ; SAVAGE, S. B. ; JEFFREY, D. J. ; CHEPURNIY, N.: Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield. In: *J. Fluid Mech.* 140 (1984), S. 223–256
- [187] LUO, J. Y. ; GOSMAN, A. D. ; ISSA, R. I.: Prediction of impeller induced flows in mixing vessels using multiple frames of reference. In: *IChemE Symp. Series* 136 (1994), S. 549–556
- [188] LUO, J. Y. ; GOSMAN, A. D. ; ISSA, R. I. ; MIDDLETON, J. C. ; FITZGERALD, M. K.: Full flow field computation of mixing in baffled stirred vessels. In: *Trans. IChemE Part A* 71 (1993), S. 342–344
- [189] MACINNES, J. M. ; BRACCO, F. V.: Stochastic particle dispersion modelling and the tracer-particle limit. In: *Phys. Fluids A* 4 (1992), S. 2809–2824
- [190] MAEDA, M. ; HISHIDA, K. ; FURUTANI, T.: Optical measurements of local gas and particle velocity in an upward flowing dilute gas-solids suspension. In: *Proc. Polyphase Flow and Transport Technology (Century 2-ETC)*. San Francisco, USA, 1980, S. 211–216
- [191] MAGNAUDET, J. J. M.: The forces acting on bubbles and rigid particles. In: *Proc. ASME FEDSM'97 - 3522*. Vancouver (B.C.), CAN, 1997
- [192] MAHMOUDI, S. M. S.: *Velocity and Mixing Characteristics of Stirred Vessels with two Impellers*, King's College, London, GB, Ph.D. Thesis, 1993
- [193] MATSUMOTO, S. ; SAITO, S.: Monte Carlo Simulation of horizontal pneumatic conveying based on the rough wall model. In: *J. Chem. Eng. Japan* 3 (1970), S. 223–230

- [194] MATSUMOTO, S. ; SAITO, S.: On the mechanism of suspension of particle in horizontal pneumatic conveying: Monte Carlo Simulation based on the irregular bouncing model. In: *J. Chem. Eng. Japan* 3 (1970), S. 83–92
- [195] MAXEY, M. R. ; RILEY, J. J.: Equation of motion for a small rigid sphere in a non-uniform flow. In: *Phys. Fluids* 26 (1983), S. 883–889
- [196] MCLAUGHLIN, J. B.: Inertial migration of a small sphere in linear shear flows. In: *J. Fluid Mech.* 224 (1991), S. 261–274
- [197] MEI, R.: An approximate expression for the shear lift force on a spherical particle at finite Reynolds number. In: *Int. J. Multiphase Flow* 18 (1992), S. 145–147
- [198] MEI, R. ; ADRIAN, R. J.: Flow past a sphere with an oscillation in the free-stream velocity and unsteady drag at finite Reynolds number. In: *J. Fluid Mech.* 237 (1992), S. 323–341
- [199] MEI, R. ; LAWRENCE, C. J. ; ADRIAN, R. J.: Unsteady drag on a sphere at finite Reynolds number with small fluctuations in the free-stream velocity. In: *J. Fluid Mech.* 233 (1991), S. 613–631
- [200] MICALÈ, G. ; MONTANTE, G. ; GRISAFI, F. ; BRUCATO, A. ; GODFREY, J.: CFD simulation of particle distribution in stirred vessels. In: *Chem. Eng. Res. Des.* 78 (2000), S. 435–444
- [201] MIDDLETON, J. C. ; PIERCE, F. ; LYNCH, P. M.: Computations of flow fields and complex reaction yield in turbulent stirred reactors, and comparison with experimental data. In: *ICHEME Symp. Series* 87 (1984), S. 239–247
- [202] MIDDLETON, J. C. ; PIERCE, F. ; LYNCH, P. M.: Computations of flow fields and complex reaction yield in turbulent stirred reactors, and comparison with experimental data. In: *Chem. Eng. Res. Des.* 64 (1986), S. 18–22
- [203] MILOJEVIĆ, D.: Lagrangian Stochastic-Deterministic (LSD) Predictions of Particle Dispersion in Turbulence. In: *Part. Part. Syst. Charact.* 7 (1990), S. 181–190
- [204] MONTANTE, G. ; LEE, K. C. ; BRUCATO, A. ; YIANNESKIS, M.: Numerical simulations of the dependency of flow pattern on impeller clearance in stirred vessels. In: *Chem. Eng. Sci.* 56 (2001), S. 3751–3770
- [205] MONTANTE, G. ; MAGELLI, F.: CDF simulations of solid particles distribution in a vessel agitated with a pitched blade turbine and validation with experimental data. In: SOMMERFELD, M. (Hrsg.): *Proc. 10th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*. Merseburg, D, 2002, S. 265–274
- [206] MONTANTE, G. ; MICALÈ, G. ; BRUCATO, A. ; MAGELLI, F.: CFD simulation of particle distribution in a multiple-impeller high-aspect-ratio stirred vessel. In: *Proc. 10th European Conf. on Mixing*. Delft, NL, 2000, S. 125–132

- [207] MONTANTE, G. ; MICALE, G. ; MAGELLI, F. ; BRUCATO, A.: Experiments and CFD predictions of solid particle distribution in a vessel agitated with four pitched blade turbines. In: *Chem. Eng. Res. Des.* 79 (2001), S. 1005–1010
- [208] MORSI, S. A. ; ALEXANDER, A. J.: An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems. In: *J. Fluid Mech.* 55 (1972), S. 193–208
- [209] MORUD, K. E. ; HJERTAGER, B. H.: LDA measurements and CFD modelling of gas-liquid flow in a stirred vessel. In: *Chem. Eng. Sci.* 51 (1996), S. 233–249
- [210] MUJUMDAR, A. S. ; HUANG, B. ; WOLF, D. ; WEBER, M. E. ; DOUGLAS, W. J. M.: Turbulence parameters in a stirred tank. In: *Can. J. Chem. Eng.* 48 (1970), S. 475–483
- [211] MURTHY, J. Y. ; MATHUR, S. R. ; CHOUDHURY, D.: CFD simulation of flows in stirred tank reactors using a sliding mesh technique. In: *ICHEME Symp. Series* 136 (1994), S. 341–348
- [212] MUSIL, L. ; VLK, J.: Suspending solid particles in an agitated conical-bottom tank. In: *Chem. Eng. Sci.* 33 (1978), S. 1123–1131
- [213] NAGATA, S.: *Mixing: Principles and Applications*. New York : J. Wiley & Sons, 1975
- [214] NASSAR, A. F. ; ZIVKOVIC, G. ; GENENGER, B. ; DURST, F.: PDA measurements and numerical simulation of turbulent two-phase flow in stirred vessels. In: SOMMERFELD, M. (Hrsg.): *Bubbly Flows: Analysis, Modelling and Calculation*. Berlin : Springer-Verlag, 2004, S. 337–352
- [215] NEESSE, T. ; SCHUBERT, H. ; LIEPE, F. ; MÖCKEL, H. O.: Turbulenzmessungen in der Mehrphasenströmung fest-flüssig eines Rührapparates. In: *Chem. Techn.* 29 (1977), S. 544–548
- [216] NG, K. ; FENTIMAN, N. J. ; LEE, K. C. ; YIANNESKIS, M.: Assessment of sliding mesh CFD predictions and LDA measurements of the flow in a tank stirred by a Rushton impeller. In: *Trans. IChemE Part A* 76 (1998), S. 737–747
- [217] NIESMAK, G.: *Feststoffverteilung und Leistungsbedarf gerührter Suspensionen*, TU Braunschweig, D, Diss., 1982
- [218] NOURI, J. M.: *Single and two phase flows in ducts and stirred reactors*, University of London, GB, Ph.D. Thesis, 1988
- [219] NOURI, J. M. ; WHITELAW, J. H.: Effect of size and confinement on the flow characteristics in stirred reactors. In: *Proc. 5th Int. Symp. on App. Laser Tech. Fluid Mech.* - 23.2. Lisbon, PT, 1990
- [220] NOURI, J. M. ; WHITELAW, J. H.: Flow characteristics of stirred reactors with Newtonian and Non-Newtonian fluids. In: *AIChE J.* 36 (1990), S. 627–629

- [221] NOURI, J. M. ; WHITELAW, J. H.: Particle velocity characteristics of dilute to moderately dense suspension flows in stirred reactors. In: *Int. J. Multiphase Flow* 18 (1992), S. 21–33
- [222] NOURI, J. M. ; WHITELAW, J. H. ; YIANNESKIS, M.: Particle motion and turbulence in dense two-phase flows. In: *Int. J. Multiphase Flow* 13 (1987), S. 729–739
- [223] ODAR, F.: Verification of the proposed equation for calculating of the forces on a sphere accelerating in a viscous fluid. In: *J. Fluid Mech.* 25 (1966), S. 591–592
- [224] ODAR, F. ; HAMILTON, W. S.: Forces on a Sphere Accelerating in a Viscous Fluid. In: *J. Fluid Mech.* 18 (1964), S. 302–314
- [225] OESTERLÉ, B. ; BUI DINH, T.: Experiments on the lift of a spinning sphere in a range of intermediate Reynolds numbers. In: *Exp. Fluids* 25 (1998), S. 16–22
- [226] OESTERLÉ, B. ; BUI DINH, T. ; VIAL, J.: Measurements of lift and torque on a rotating sphere at intermediate Reynolds numbers. In: *Mech. Res. Commun.* 18 (1991), S. 145–150
- [227] OESTERLÉ, B. ; PETITJEAN, A.: Simulation of particle-to-particle interactions in gas-solid flows. In: *Int. J. Multiphase Flow* 19 (1993), S. 199–211
- [228] OLDSHUE, J. Y.: *Fluid Mixing Technology*. New York : McGraw Hill, 1983
- [229] ORMANCEY, A. ; MARTINON, J.: Prediction of Particle Dispersion in Turbulent Flows. In: *Phys. Chem. Hydrodynamics* 5 (1984), S. 229–244
- [230] O’ROURKE, P. J.: *Collective drop effects on vaporizing liquid sprays*, Princeton University (N.J.), USA, Ph.D. Thesis, 1981
- [231] OSEEN, C. W.: Über die Stokessche Formel und über eine verwandte Aufgabe in der Hydrodynamik. In: *Arkiv för matematik, astr. och fysik* Bd. 6 (1910)
- [232] OSEEN, C. W.: Über den Gültigkeitsbereich der Stokessche Widerstandsformel. In: *Arkiv för matematik, astr. och fysik* Bd. 9 (1913)
- [233] OSEEN, C. W.: *Hydrodynamik*. Leipzig : Akademische Verlagsgesellschaft, 1927
- [234] OSEEN, C. W.: Neuere Methoden und Ergebnisse in der Hydrodynamic. In: *Arkiv för matematik, astr. och fysik* Bd. 23 (1927)
- [235] PATANKAR, S. V.: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1980

- [236] PATANKAR, S. V. ; SPALDING, D. B.: A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. In: *Int. J. Heat Mass Transfer* 15 (1972), S. 1787–1806
- [237] PERIĆ, M.: *A Finite Volume Method for the Prediction of Three-Dimensional Fluid Flow in Complex Ducts*, Imperial College, University of London, GB, Ph.D. Thesis, 1985
- [238] PERICLEOUS, K. A. ; PATEL, M. K.: The modelling of tangential and axial agitators in chemical reactors. In: *Phys. Chem. Hydrodynamics* 8 (1987), S. 105–123
- [239] PERICLEOUS, K. A. ; PATEL, M. K.: The source-sink approach in the modelling of stirred reactors. In: *Phys. Chem. Hydrodynamics* 9 (1987), S. 279–297
- [240] PERNG, C. Y. ; MURTHY, J. Y.: A moving deforming mesh technique for simulation of flow in mixing tanks. In: *AIChE Symp. Series* 89 (1993), Nr. 293, S. 37–41
- [241] PERNG, C. Y. ; MURTHY, J. Y.: A sliding-mesh technique for simulation of flow in mixing tanks. In: *Proc. ASME Winter Annual Meeting - 93-WA/HT-33*. New Orleans (La.), USA, 1993
- [242] PLACEK, J. ; TAVLARIDES, L. L.: Turbulent flow in stirred tanks – Part I: Turbulent flow in the turbine impeller region. In: *AIChE J.* 31 (1985), S. 1113–1120
- [243] PLACEK, J. ; TAVLARIDES, L. L. ; SMITH, G. W. ; FOŘT, I.: Turbulent flow in stirred tanks – Part II: A two-scale model of turbulence. In: *AIChE J.* 32 (1986), S. 1771–1786
- [244] POIRIER, M. R. ; POWELL, M. R. ; GLADKI, H. ; RODWELL, P. O.: Suspending Zeolite Particles in Tanks. In: *Proc. ASME/JSME FEDSM'99*. San Francisco (CA), USA, 1999
- [245] POLITIS, S.: *Prediction of two-phase solid-liquid turbulent flow in stirred vessels*, University of London, GB, Ph.D. Thesis, 1989
- [246] PRESS, W. H. ; FLANNERY, B. P. ; TEUKOLSKY, S. A. ; VETTERLING, W. T.: *Numerical recipes: The art of scientific computing*. Cambridge, New York : Cambridge University Press, 1986
- [247] PUTNAM, A.: Integrable form of droplet drag coefficient. In: *Am. Rocket Soc. J.* 31 (1961), S. 1467–1468
- [248] RAMACHANDRAN, R. S. ; WANG, T. Y. ; KLEINSTREUER, C. ; CHINAG, H.: Laminar Flow Past Three Closely Spaced Monodispersed Spheres or Nonevaporating Drops. In: *AIAA J.* 29 (1991), S. 43–51

- [249] RANADE, V. V. ; BOURNE, J. R.: Reactive mixing in agitated tanks. In: *Chem. Eng. Commun.* 99 (1991), S. 33–53
- [250] RANADE, V. V. ; BOURNE, J. R. ; JOSHI, J. B.: Fluid mechanics and blending in agitated tanks. In: *Chem. Eng. Sci.* 46 (1991), S. 1883–1893
- [251] RANADE, V. V. ; DESHPANDE, V. R.: Gas-liquid flow in stirred vessels: Trailing vortices and gas accumulation behind impeller blades. In: *Chem. Eng. Sci.* 54 (1999), S. 2305–2315
- [252] RANADE, V. V. ; DOMMETI, S. M. S.: Computational Snapshot of Flow Generated by Axial Impellers in Baffled Stirred Vessels. In: *Trans. IChemE Part A* 74 (1996), S. 476–484
- [253] RANADE, V. V. ; JOSHI, J. B.: Flow generated by pitched blade turbines – Part I: Measurements using laser Doppler anemometer. In: *Chem. Eng. Commun.* 81 (1989), S. 197–224
- [254] RANADE, V. V. ; JOSHI, J. B.: Flow generated by a disc turbine – Part I: Experimental. In: *Trans. IChemE Part A* 68 (1990), S. 19–33
- [255] RANADE, V. V. ; JOSHI, J. B.: Flow generated by a disc turbine – Part II: Mathematical modelling and comparison with experimental data. In: *Trans. IChemE Part A* 68 (1990), S. 34–50
- [256] RANADE, V. V. ; JOSHI, J. B. ; MARATHE, A. G.: Flow generated by pitched blade turbines – Part II: Simulation using $k-\varepsilon$ model. In: *Chem. Eng. Commun.* 81 (1989), S. 225–248
- [257] RANADE, V. V. ; PERRARD, M. ; SAUZE, N. L. ; XUEREBO, C. ; BERTRAND, J.: PIV measurements and CFD simulations with snapshot approach. In: *Trans. IChemE Part A* 79 (2001), S. 3–12
- [258] RANADE, V. V. ; VAN DEN AKKER, H. E. A.: A computational snapshot of gas-liquid flow in baffled stirred reactors. In: *Chem. Eng. Sci.* 49 (1994), S. 5175–5192
- [259] RAO, M. A. ; BRODKEY, R. S.: Continuous flow stirred tank turbulence parameters in the impeller stream. In: *Chem. Eng. Sci.* 27 (1972), S. 137–156
- [260] REEKS, M. W.: On the dispersion of small particles suspended in an isotropic turbulent fluid. In: *J. Fluid Mech.* 83 (1977), S. 529–546
- [261] REEKS, M. W. ; MCKEE, S.: The dispersive effects of Basset history forces on particle motion in a turbulent flow. In: *Phys. Fluids* 27 (1984), S. 1573–1582
- [262] REVSTEDT, J. ; FUCHS, L. ; TRÄGÄRDT, C.: Large eddy simulations of the turbulent flow in a stirred reactor. In: *Chem. Eng. Sci.* 54 (1998), S. 4041–4053

- [263] REYNOLDS, O.: On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids. In: *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* A186 (1895), S. 123–164
- [264] RHIE, C. M. ; CHOW, W. L.: A numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. In: *AIAA J.* 21 (1983), S. 1525–1532
- [265] RICHARDSON, J. F. ; ZAKI, W. N.: Sedimentation and Fluidization: Part I. In: *Trans. IChemE Part A* 32 (1954), S. 35–53
- [266] RILEY, J. J.: *Computer Simulation of Turbulent Dispersion*, The Johns Hopkins University, Baltimore (Md.), USA, Ph.D. Thesis, 1971
- [267] RIVERO, M. ; FABRE, J. Magnaudet J.: Quelques résultats nouveaux concernant les forces exercées sur une inclusion sphérique par un écoulement accéléré. In: *C. R. Acad. Sci. Paris Série II* 312 (1991), S. 1499–1506
- [268] RIZK, M. A. ; ELGHOBASHI, S. E.: A two-equation turbulence model for dispersed dilute confined two-phase flows. In: *Int. J. Multiphase Flow* 15 (1989), S. 119–133
- [269] ROSENFELD, M. ; KWAK, D.: Time-Dependent Solutions of Viscous Incompressible Flows in Moving Coordinates. In: *Int. J. Num. Methods Fluids* 13 (1991), S. 1311–1328
- [270] ROTHER, H.: *Inbetriebnahme eines LDA-Rührversuchsstandes und Messungen von Geschwindigkeiten*, Fachbereich Ingenieurwissenschaften, Universität Halle-Wittenberg, D, Diplomarbeit, 2000
- [271] ROTTA, J. C.: *Turbulente Strömungen*. Stuttgart : Teubner Verlag, 1972
- [272] RUBINOW, S. I. ; KELLER, J. B.: The transverse force on a spinning sphere moving in a viscous fluid. In: *J. Fluid Mech.* 11 (1961), S. 447–459
- [273] RUTHERFORD, K. ; LEE, K. C. ; MAHMOUDI, S. M. S. ; YIANNESKIS, M.: Hydrodynamic characteristics of dual rushton impeller stirred vessels. In: *AIChE J.* 42 (1996), S. 332–346
- [274] RUTHERFORD, K. ; MAHMOUDI, S. M. S. ; LEE, K. C. ; YIANNESKIS, M.: The influence of rushton impeller blade and disk thickness on the mixing characteristics of stirred vessels. In: *Trans. IChemE Part A* 74 (1996), S. 369–378
- [275] SAFFMAN, P. G.: The lift on a small sphere in a slow shear flow. In: *J. Fluid Mech.* 22 (1965), S. 385–400
- [276] SAFFMAN, P. G.: Corrigendum to "The lift on a small sphere in a slow shear flow". In: *J. Fluid Mech.* 31 (1968), S. 624

- [277] SAWATZKI, O.: *Über den Einfluß der Rotation und der Wandstöße auf die Flugbahnen kugeligter Teilchen im Luftstrom*, Universität Karlsruhe, D, Diss., 1961
- [278] SAWATZKI, O.: Strömungsfeld um eine rotierende Kugel. In: *Acta Mech.* 9 (1970), S. 159–214
- [279] SAWFORD, B. L.: Lagrangian statistical simulation of concentration mean and fluctuation fields. In: *J. Climate and Appl. Meteorology* 24 (1985), S. 1152–1166
- [280] SCHÄFER, J.: *Rohrfluß granularer Materie: Theorie und Simulation*, Universität Duisburg, D, Diss., 1996
- [281] SCHÄFER, M.: *Charakterisierung, Auslegung und Verbesserung des Makro- und Mikromischens in gerührten Behältern*, Universität Erlangen-Nürnberg, D, Diss., 2001
- [282] SCHÄFER, M. ; PERIĆ, M. *Numerische Strömungsmechanik*. Vorlesungsskript, Lehrstuhl für Strömungsmechanik, Universität Erlangen-Nürnberg, D. 1997
- [283] SCHÄFER, M. ; YIANNESKIS, M. ; WÄCHTER, P. ; DURST, F.: Trailing Vortices around a 45° Pitched-Blade Impeller. In: *AIChE J.* 44 (1998), S. 1233–1245
- [284] SCHILLER, L. ; NAUMANN, A.: Über die grundlegenden Berechnungen bei der Schwerkraftaufbereitung. In: *Ver. Deut. Ing.* 77 (1933), S. 318–320
- [285] SCHUBERT, H. ; HEIDENREICH, E. ; LIEPE, F. ; NEESSE, T.: *Mechanische Verfahrenstechnik 1*. Leipzig : VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, 1977
- [286] SHAW, J. A.: Succeed at solids suspension. In: *Chem. Eng. Progress* 88 (1992), S. 34–41
- [287] SHUEN, J. S. ; SOLOMON, A. S. P. ; ZHANG, Q.-F. ; FAETH, G. M.: *A Theoretical and Experimental Study of Turbulent Particle-Laden Jets*. Contractor Report 168293: NASA, 1983
- [288] SIJERČIĆ, M.: *Matematičko modeliranje kompleksnih turbulentnih transportnih procesa*. Beograd : Jugoslovensko društvo termičara / Institut za nuklearne nauke (Vinča), 1998
- [289] SMOLUCHOWSKI, M.: On the mutual action of spheres which move in a viscous liquid. In: *Bull. Acad. Sci. Cracovie A1* (1911), S. 28–39
- [290] SNYDER, W. H. ; LUMLEY, J. L.: Some measurements of particle velocity autocorrelation functions in a turbulent flow. In: *J. Fluid Mech.* 48 (1971), S. 41–71

- [291] SOMMERFELD, M.: Numerical simulation of the particle dispersion in turbulent flows including particle lift forces and different particle/wall collision models. In: *Numerical Methods for Multiphase Flows* — ASME FED Vol. 91, 1990, S. 11–18
- [292] SOMMERFELD, M.: Modelling of particle-wall collisions in confined gas-particle flows. In: *Int. J. Multiphase Flow* 18 (1992), S. 905–926
- [293] SOMMERFELD, M.: The importance of inter-particle collisions in horizontal gas-solid channel flows. In: *Gas-Particle Flows* — ASME FED Vol. 228, 1995, S. 335–345
- [294] SOMMERFELD, M.: *Modellierung und numerische Berechnung von partikel-beladenen turbulenten Strömungen mit Hilfe des Euler/Lagrange-Verfahrens*, Universität Erlangen-Nürnberg, D, Habil., 1996
- [295] SOMMERFELD, M.: A stochastic approach to model inter-particle collisions in the frame of the Euler/Lagrange approach. In: *ERCOfTAC Bulletin* 36 (1998), S. 34–37
- [296] SOMMERFELD, M.: Inter-particle collisions in turbulent flows: A stochastic Lagrangian model. In: *Proc. 1st Int. Symp. on Turbulence and Shear Flow Phenomena*. Santa Barbara (CA), USA, 1999, S. 265–270
- [297] SOMMERFELD, M.: *Theoretical and experimental modelling of particulate flow: Overview and fundamentals*. Von Kármán Institute for Fluid Mechanics, Rhode Saint Genèse, B, 2000 (Lecture Series No. 2000-6)
- [298] SOMMERFELD, M.: Analyse der Wandkollision von nicht-sphärischen Feststoffpartikeln. In: *Chem.-Ing.-Tech.* 73 (2001), S. 1573–1578
- [299] SOMMERFELD, M.: Validation of a stochastic Lagrangian modelling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence. In: *Int. J. Multiphase Flow* 27 (2001), S. 1829–1858
- [300] SOMMERFELD, M.: Bewegung fester Partikel in Gasen und Flüssigkeiten. In: *VDI-Wärmeatlas*. 9. Auflage. Berlin : Springer-Verlag, 2002. – Kap. Lca
- [301] SOMMERFELD, M.: Analysis of collision effects for turbulent gas-particle flows in a horizontal channel: Part I. Particle transport. In: *Int. J. Multiphase Flow* 29 (2003), S. 675–699
- [302] SOMMERFELD, M. ; DECKER, S.: State of the Art and Future Trends in CFD Simulation of Stirred Vessel Hydrodynamics. In: *Chem. Eng. Technol.* 27 (2004), S. 215–224
- [303] SOMMERFELD, M. ; HUBER, N.: Experimental analysis and modelling of partile-wall collisions. In: *Int. J. Multiphase Flow* 25 (1999), S. 1457–1489

- [304] SOMMERFELD, M. ; KOHNEN, G. ; RÜGER, M.: Some open questions and inconsistencies of Lagrangian particle dispersion models. In: *Proc. 9th Symp. on Turbulent Shear Flows - 15-1*. Kyoto, Japan, 1993
- [305] SOMMERFELD, M. ; KUSSIN, J.: Analysis of collision effects for turbulent gas-particle flows in a horizontal channel: Part II. Integral properties and validation. In: *Int. J. Multiphase Flow* 29 (2003), S. 701–718
- [306] SOMMERFELD, M. ; ZIVKOVIC, G.: Recent advances in the numerical simulation of pneumatic conveying through pipe systems. In: HIRSCH, C. (Hrsg.): *Computational Methods in Applied Sciences*, 1992. – First European Computational Fluid Dynamics Conf., Brussels, B, S. 201–212
- [307] SQUIRES, K. D. ; EATON, J. K.: On the modelling of particle-laden turbulent flows. In: SOMMERFELD, M. (Hrsg.): *Proc. 6th workshop on Two-phase flow predictions, Erlangen*, 1992, S. 220–229
- [308] STAUDINGER, G. ; MOSER, F.: 100 proz. Suspension von Feststoffen im Rührgefäß. In: *Chem.-Ing.-Tech.* 48 (1976), S. 1071
- [309] STOKES, G. G.: On the effect of internal friction of fluids on the motion of pendulums. In: *Trans. Camb. Phil. Soc.* 9 (1851), S. 8–106
- [310] STONE, H. L.: Iterative Solution of Implicit Approximations of Multi-Dimensional Partial Differential Equations. In: *SIAM J. Num. Anal.* 5 (1968), S. 530–558
- [311] STOOT, C. M. ; CALABRESE, R. V.: Mean Velocity Field Relative to a Rushton Turbine Blade. In: *AIChE J.* 41 (1995), S. 1–11
- [312] STORM, R.: *Wahrscheinlichkeitsrechnung, mathematische Statistik und statistische Qualitätskontrolle*. Leipzig : VEB Fachbuchverlag, 1986
- [313] STURESSON, C. ; RASMUSON, A.: Complete suspension of solid particles in stirred vessels. In: *ICHEME Symp. Series* 136 (1994), S. 357–364
- [314] SVENKA, P.: *Das Strömungsfeld in einem Rührbehälter technischer Größe für verfahrenstechnische Vorgänge und chemische Reaktionen*, TU München, D, Diss., 1981
- [315] TABOR, G. ; GOSMAN, A. G. ; ISSA, R. I.: Numerical simulation of the flow in a mixing vessel. In: *ICHEME Symp. Series* 140 (1996), S. 25–34
- [316] TAKEDA, H. ; NARASAKI, K. ; KITAJIMA, H. ; SUDO, S. ; ONOFUSA, M. ; IGUCHI, S.: Numerical simulation of mixing flows in agitated vessels with impellers and baffles. In: *Computers & Fluids* 22 (1993), S. 223–228
- [317] TANAKA, T. ; KIRIBAYASHI, K. ; TSUJI, Y.: Monte-Carlo simulation of gas-solid flow in vertical pipe or channel. In: *Proc. Int. Conf. on Multiphase Flow '91*. Tsukuba, Japan, 1991, S. 439–442

- [318] TANAKA, T. ; TSUJI, Y.: Numerical simulation of gas-solid two-phase flow in a vertical pipe: On the effect of inter-particle collision. In: *Gas-Solid Flows* — ASME FED Vol. 121, 1991, S. 123–128
- [319] TATTERSON, G. B. ; BRODKEY, R. ; CALABRESE, R. V.: Move Mixing Technology into the 21st Century. In: *Chem. Eng. Progress* 6 (1991), S. 45–48
- [320] TAYLOR, G. I.: Diffusion by continuous movements. In: *Proc. Lond. Math. Soc.* 20 (1921), S. 196–211
- [321] TCHEN, C. M.: *Mean and correlation problems connected with the motion of small particles suspended in a turbulent fluid*, University Delft, NL, Diss., 1947
- [322] TENNEKES, H. ; LUMLEY, J. L.: *A First Course in Turbulence*. Cambridge (MA) : MIT Press, 1976
- [323] THOMAE, H.: Das turbulente Strömungsfeld in einem Rührkessel. In: *Chem.-Ing.-Tech.* 42 (1970), S. 317–322
- [324] TOROBIN, L. B. ; GAUVIN, W. H.: Fundamental aspects of solid-gas flow. In: *Can. J. Chem. Eng.* 37 (1959), S. 129–176
- [325] TSUJI, Y. ; MORIKAWA, Y.: LDV measurements of an air-solid two-phase flow in a horizontal pipe. In: *J. Fluid Mech.* 120 (1982), S. 385–409
- [326] TSUJI, Y. ; MORIKAWA, Y. ; MIZUNO, O.: Experimental measurement of the Magnus force on a rotating sphere at low Reynolds Numbers. In: *Trans. ASME - J. Fluids Engng.* 107 (1985), S. 484–488
- [327] TSUJI, Y. ; MORIKAWA, Y. ; SHIOMI, H.: LDV measurements of an air-solid two-phase flow in a vertical pipe. In: *J. Fluid Mech.* 139 (1984), S. 417–434
- [328] TSUJI, Y. ; MORIKAWA, Y. ; TANAKA, T. ; NAKATSUKASA, N. ; NAKATANI, M.: Numerical simulation of gas-solid two-phase flow in a two-dimensional horizontal channel. In: *Int. J. Multiphase Flow* 13 (1987), S. 671–684
- [329] TSUJI, Y. ; MORIKAWA, Y. ; TERESHIMA, K.: Fluid-dynamic interaction between two spheres. In: *Int. J. Multiphase Flow* 8 (1982), S. 71–82
- [330] TSUJI, Y. ; OSHIMA, T. ; MORIKAWA, Y.: Numerical Simulation of Pneumatic Conveying in a Horizontal Pipe. In: *KONA* 3 (1985), S. 38–51
- [331] TSUJI, Y. ; SHEN, N. Y. ; MORIKAWA, Y.: Numerical simulation of gas-solid flows – Part I: Particle-to-wall collision. In: *Technology Reports of the Osaka University* 39 (1975), S. 233–241
- [332] TSUJI, Y. ; SHEN, N. Y. ; MORIKAWA, Y.: Lagrangian simulation of dilute gas-solid flows in a horizontal pipe. In: *Adv. Powder Technol.* 2 (1991), S. 63–81

- [333] UHL, V. W. ; GRAY, J. B.: *Mixing - Theory and Practice*. New York : Academic Press, 1966
- [334] VAN'T RIET, K. ; BRUIJN, W. ; SMITH, J. M.: Real and Pseudo-Turbulence in the Discharge Stream From a Rushton Turbine. In: *Chem. Eng. Sci.* 31 (1976), S. 407–412
- [335] VAN'T RIET, K. ; SMITH, J. M.: The Trailing Vortex System Produced by Rushton Turbine Agitators. In: *Chem. Eng. Sci.* 30 (1975), S. 1093–1105
- [336] VANYO, J. P.: *Rotating fluids in engineering and science*. Stoneham : Butterworth-Heinemann, 1993
- [337] VON KÁRMÁN, T. ; HOWARTH, L.: On the statistical theory of isotropic turbulence. In: *Proc. Roy. Soc. London A*164 (1938), S. 192–215
- [338] VON SMOLUCHOWSKI, M.: Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloidaler Lösungen. In: *Z. Phys. Chem.* 92 (1917), S. 129–168
- [339] WÄCHTER, P.: *Entwicklung von Rührelementen für ein- und mehrphasige Rühraufgaben*, Universität Erlangen-Nürnberg, D, Diss., 1999
- [340] WALKLATE, P. J.: A random-walk model for dispersion of heavy particles in turbulent air flow. In: *Bound.-Layer Met.* 39 (1987), S. 175–190
- [341] WANG, M. C. ; UHLENBECK, G. E.: On the theory of Brownian motion. In: *Rev. Mod. Phys.* 17 (1945), S. 323–341
- [342] WASSEN, E.: *Entwicklung paralleler Algorithmen zur numerischen Simulation von Gas-Partikel-Strömungen unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen*, TU Chemnitz, D, Diss., 1998
- [343] WECHSLER, K. ; BREUER, M. ; DURST, F.: Steady and Unsteady Computations of Turbulent Flows Induced by a 4/45° Pitched-Blade Impeller. In: *Trans. ASME - J. Fluids Engng.* 121 (1999), S. 318–329
- [344] WEDLER, G.: *Lehrbuch der Physikalischen Chemie*. Weinheim : VCH-Verlagsgesellschaft, 1987
- [345] WELLS, M. R. ; STOCK, D. E.: The effects of crossing trajectories on the dispersion of particles in a turbulent flow. In: *J. Fluid Mech.* 136 (1983), S. 31–62
- [346] WEN, C. Y. ; YU, Y. H.: A generalized method for predicting the minimum fluidization velocity. In: *AIChE J.* 12 (1966), S. 610–612
- [347] WU, H. ; PATTERSON, G. K.: Laser-Doppler Measurements of Turbulent-Flow Parameters in a Stirred Mixer. In: *Chem. Eng. Sci.* 44 (1989), S. 2207–2221

- [348] XU, Y. ; MCGRATH, G.: CFD Predictions of Stirred Tank Flows. In: *Trans. IChemE Part A* 74 (1996), S. 471–475
- [349] YEOH, S. L. ; PAPADAKIS, G. ; LEE, K. C. ; YIANNESKIS, M.: Large Eddy Simulation of Turbulent Flow in a Rushton Impeller Stirred Reactor with Sliding-Deforming Mesh Methodology. In: *Chem. Eng. Technol.* 27 (2004), S. 257–263
- [350] YIANNESKIS, M. ; POPIOLEK, Z. ; WHITELAW, J. H.: An Experimental Study of the Steady and Unsteady Flow Characteristics of Stirred Reactors. In: *J. Fluid Mech.* 175 (1987), S. 537–555
- [351] YIANNESKIS, M. ; WHITELAW, J. H.: On the Structure of the Trailing Vortices Around Rushton Turbine Blades. In: *Trans. IChemE Part A* 71 (1993), S. 543–550
- [352] YONEMURA, S. ; TANAKA, T. ; TSUJI, Y.: Cluster formation in gas-solid flow predicted by the DSMC method. In: *Gas-Solid Flows — ASME FED Vol. 166*, 1993, S. 303–309
- [353] YOON, H. S. ; SHARP, K. V. ; HILL, D. F. ; ADRIAN, R. J. ; BALACHANDAR, S. ; HA, M. Y. ; KAR, K.: Integrated experimental and computational approach to simulation of flow in a stirred tank. In: *Chem. Eng. Sci.* 56 (2001), S. 6635–6649
- [354] YUDINE, M. I.: Physical considerations on heavy particle diffusion. In: *Adv. Geophys.* 6 (1959), S. 185–191
- [355] ZHOU, G. ; KRESTA, S. M.: Correlation of Mean Drop Size and Minimum Drop Size with the Turbulence Energy Dissipation and the Flow in an Agitated Tank. In: *Chem. Eng. Sci.* 53 (1998), S. 2063–2079
- [356] ZHOU, Q. ; LESCHZINER, M. A.: A Lagrangian particle dispersion model based on a time-correlated stochastic approach. In: *Gas-Solid Flows — ASME FED Vol. 121*, 1991, S. 255–260
- [357] ZHOU, Q. ; LESCHZINER, M. A.: A time-correlated stochastic model for particle dispersion in anisotropic turbulence. In: *Proc. 8th Turbulent Shear Flow Symp. - 10-3*. Munich, D, 1991, S. 255–260
- [358] ZISSELMAR, R.: *Experimentelle Untersuchungen zum Turbulenzverhalten der Suspensionsrohrströmung*, Universität Erlangen-Nürnberg, D, Diss., 1978
- [359] ZISSELMAR, R. ; MOLERUS, O.: Investigations of solid-liquid pipe flow with regard to turbulent modifications. In: *Chem. Engng. J.* 18 (1979), S. 233–239
- [360] ZLOKARNIK, M.: *Rührtechnik*. Berlin : Springer-Verlag, 1999
- [361] ZWIETERING, T. N.: Suspending of solid particles in liquid by agitators. In: *Chem. Eng. Sci.* 8 (1958), S. 244–253

Lebenslauf

Name: Stefan Decker
Geburtstag: 2. April 1968
Geburtsort: Wilhermsdorf
Familienstand: verheiratet, ein Kind

Schulbildung:

9/1974-7/1978 Grundschule Wilhermsdorf
9/1978-6/1987 Friedrich-Alexander-Gymnasium Neustadt a. d. Aisch

Hochschulstudium:

11/1987-8/1993 Studium des Chemieingenieurwesens mit der Fachrichtung Technische Chemie an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

Berufliche Tätigkeit:

10/1993-10/1994 Wissenschaftlicher Angestellter am Lehrstuhl für Strömungsmechanik der Universität Erlangen-Nürnberg
11/1994-12/1999 Wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Umweltschutztechnik der Universität Halle-Wittenberg
1/2000-10/2000 Ingenieur bei der Invent Computing GmbH in Uttenreuth
11/2000-12/2001 Wissenschaftlicher Angestellter am Lehrstuhl für Strömungsmechanik der Universität Erlangen-Nürnberg
seit 1/2002 Ingenieur bei der Robert Bosch GmbH in Bamberg

Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass ich, Stefan Decker, die vorliegende Dissertation entsprechend den in der Promotionsordnung des Bereiches Ingenieurwissenschaften der Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg festgelegten Regeln, ohne Mitwirkung Fremder und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form als Dissertation eingereicht und ist als Ganzes noch nicht veröffentlicht.

Gundelsheim, im Juli 2005

Stefan Decker

