

Technische Universität München

Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik

Strömungssimulation als Werkzeug zur Bioreaktorcharakterisierung

Stefanie Brüning

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Maschinenwesen der Technischen Universität
München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktor-Ingenieurs

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Andreas Kremling

Prüfer der Dissertation: 1. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Dirk Weuster-Botz

2. Univ.-Prof. Wolfgang Polifke, Ph. D.

Die Dissertation wurde am 28.02.2012 bei der Technischen Universität München

eingereicht und durch die Fakultät für Maschinenwesen am 02.07.2012

angenommen.

Vorwort

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik der Technischen Universität München unter der Leitung von Prof. Dr.-Ing. Dirk Weuster-Botz.

Zu dieser Dissertation haben viele Personen auf unterschiedliche Weise beigetragen, bei denen ich mich an dieser Stelle herzlich bedanken möchte:

Bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Dirk Weuster-Botz für das Vertrauen und die Möglichkeit, an seinem Lehrstuhl promovieren zu dürfen. Seine Ratschläge, Informationen und Diskussionen waren für meine Arbeit sehr hilfreich.

Beim Korreferenten Herrn Prof. Wolfgang Polifke, Ph. D. (Lehrstuhl für Thermodynamik, Technische Universität München) und beim Prüfungsvorsitzenden Herrn Prof. Dr.-Ing. Andreas Kremling (Fachgebiet für Systembiotechnologie, Technische Universität München) für die Übernahme der jeweiligen Aufgabe.

Bei Henning Eickenbusch, Katya Georgieva-Angelova (ANSYS Kundenbetreuung, Otterfing), Ulrich Postl (ANSYS Kundenbetreuung, Darmstadt), Holger Marschall (Center of Smart Interfaces, Technische Universität Darmstadt) und Bastian Schmandt (Institut für Thermofluid-dynamik, Technische Universität Hamburg-Harburg) für die hilfreichen Diskussionen.

Bei allen (ehemaligen) Kollegen am Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik für das sehr gute Arbeitsklima.

Bei meinen Studentinnen Eirini Boulmeti und Heide Stein für die fleißige Mitarbeit.

Bei meiner Mutter, Andreas Joos, Clara Delhomme und Danielle Dennewald für das gründliche Korrekturlesen meiner Arbeit.

Bei Claus Peter Hohmann für sein Verständnis und für die Zeit, die er sich für mich in einer Zeit genommen hat, in der das nicht mehr selbstverständlich ist.

Bei Sabrina Paashaus und Daniela Salmen für ihre Freundschaft und ihren Rückhalt, durch die sie indirekt viel zu dieser Arbeit beigetragen haben.

Bei meiner Familie und meinem Lebensgefährten für ihren Rückhalt und ihre vollste Unterstützung in allen Lebenslagen. Ohne sie wäre diese Arbeit nicht entstanden.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Problemstellung und Zielsetzung	3
3	Theoretische Grundlagen	5
3.1	Aspekte von Strömungen in Rührkesselreaktoren	5
3.1.1	Rheologisches Verhalten von Fluiden	7
3.1.2	Homogenisierung in Rührkesseln	9
3.1.3	Leistungseintrag	12
3.1.4	Sauerstoffeintrag	16
3.2	Mathematische Beschreibung von Strömungen	20
3.2.1	Massenerhaltung	21
3.2.2	Erhaltungsgleichungen für skalare Größen	22
3.2.3	Impulserhaltung	23
3.2.4	Inkompressible Strömungen (Navier-Stokes-Gleichung)	25
3.2.5	Mehrphasige Strömungen	26
3.3	Numerische Simulation von Strömungen	30
3.3.1	Eigenschaften numerischer Verfahren	30
3.3.2	Die Finite-Volumen-Methode	32
3.3.3	Rechengitter	33
3.3.4	Örtliche Diskretisierung	36
3.3.5	Randbedingungen	43
3.3.6	Zeitliche Diskretisierung	44
3.3.7	Direkte numerische Simulation (DNS)	47
3.3.8	Turbulenzmodellierung	48
3.3.9	Modellierung von bewegten Einbauten in Rührkesseln	53
3.3.10	Modellierung mehrphasiger Strömungen	54
3.3.11	Simulation des Stoffübergangs aus der Gas- in die Flüssigphase	55
3.4	Verifizierung und Validierung numerischer Simulationen	56
3.4.1	Rundungsfehler	57
3.4.2	Iterationsfehler	57
3.4.3	Diskretisierungsfehler	59
3.4.4	Bestimmung des Diskretisierungsfehlers mit der Richardson-Extrapolation	60
3.4.5	Modellfehler	62
4	Material und Methoden	63
4.1	Simuliertes paralleles Milliliter-Bioreaktorsystem	63
4.1.1	Gasinduzierender Rührer	64
4.1.2	Paddelrührer	64

4.1.3	H- und S-Rührer	65
4.2	Simulierte Fluide	66
4.3	Verwendete Computerprogramme	67
4.4	Verwendete Hardware	67
4.5	Verwendete Rechengitter	68
4.6	Einstellungen und Modelle der Simulationen	69
4.6.1	Simulation des gasinduzierenden Rührers	70
4.6.2	Simulation des Paddelrührers	72
4.6.3	Simulation von H- und S-Rührer	74
4.7	Abschätzung des Diskretisierungsfehlers nach Richardson	76
5	Iterations- und Diskretisierungsfehler	78
5.1	Simulation des gasinduzierenden Rührers	78
5.1.1	Iterationsfehler und Abbruchkriterium	78
5.1.2	Diskretisierungsfehler	81
5.1.3	Zusammenfassung	86
5.2	Simulation des Paddelrührers	86
5.2.1	Iterationsfehler und Abbruchkriterium	86
5.2.2	Diskretisierungsfehler	90
5.2.3	Zusammenfassung	94
5.3	Simulation des S-Rührers	94
5.3.1	Iterationsfehler und Abbruchkriterium	94
5.3.2	Diskretisierungsfehler	97
5.3.3	Zusammenfassung	104
5.4	Vergleich der drei untersuchten Rührer	104
6	Simulation des Leistungseintrags	107
6.1	Gasinduzierender Rührer	107
6.1.1	Diskussion	110
6.1.2	Zusammenfassung	112
6.2	Paddelrührer	112
6.2.1	Diskussion	115
6.2.2	Zusammenfassung	116
6.3	H-Rührer	116
6.3.1	Diskussion	119
6.3.2	Zusammenfassung	120
6.4	S-Rührer	120
6.4.1	Diskussion	125
6.4.2	Zusammenfassung	126
6.5	Vergleich der betrachteten Rührertypen	127
7	Simulation des eintretenden Gasvolumenstroms des gasinduzierenden Rührers	129
7.1	Strömungsbild	129

7.2	Zweiphasige Simulationen zur Bestimmung des eintretenden Gasvolumenstroms	132
7.3	Zusammenfassung	137
8	Simulation der Phasengrenzfläche des Paddelrührers	138
8.1	Strömungsbild	138
8.2	Bestimmung der spezifischen Phasengrenzfläche	140
8.3	Bestimmung des Massentransportkoeffizienten	144
8.4	Simulation der Phasengrenzfläche und des Stoffübergangskoeffizienten mit einem viskosen Fluid	146
8.5	Zusammenfassung	149
9	Simulation des Homogenisierverhaltens des S-Rührers	151
9.1	Optimierung der Rührergeometrie mithilfe von Strömungssimulation	151
9.2	Ergebnisse der Mischzeitsimulationen	158
9.3	Simulation von Strömung und Mischverhalten mit strukturviskosen Fluiden	164
9.4	Zusammenfassung	168
10	Zusammenfassung	169
11	Ausblick	173
12	Literaturverzeichnis	175
13	Anhang	188
13.1	Symbolverzeichnis	188
13.2	Qualität der verwendeten Netze	195
13.3	Verwendete Einstellungen und Modelle der Simulationen	198
13.3.1	Simulationen des gasinduzierenden Rührers	198
13.3.2	Simulationen des Paddelrührers	201
13.3.3	Simulationen des H- und S-Rührers	203

1 Einleitung

Numerische Strömungsmechanik umfasst die Analyse von Systemen mit Fluidströmungen, Wärme- und Stoffübergang und chemischen Reaktionen mithilfe von rechnergestützten Simulationen. Sie bietet viele Möglichkeiten und wird deshalb mittlerweile für einen weiten Bereich industrieller und wissenschaftlicher Anwendungen genutzt.

Ihre Anfänge liegen in den 1960er Jahren. Seitdem finden sich vor allem in der Luft- und Raumfahrtindustrie Anwender der numerischen Strömungsmechanik (ROACHE, 1998). Ab etwa 1990 wurde die numerische Strömungsmechanik zunehmend auch von anderen Industriezweigen für verschiedenste Anwendungen verwendet. Dazu zählen unter anderem (VERSTEEG und MALASEKERA, 2007):

- Simulationen der Aerodynamik von Flug- und Fahrzeugen – insbesondere von Auftrieb und Strömungswiderstand
- Simulation der Hydrodynamik von Schiffskörpern
- Berechnung von Verbrennungen in Verbrennungsmaschinen oder Gasturbinen
- Simulationen von Luftströmungen für die Wettervorhersage
- Simulation der Strömung des Blutes durch Arterien und Venen
- Berechnung von Meeresströmungen und Simulationen der Belastungen von Anlagen auf hoher See (Bohrinseln oder Windparks)
- Simulation von Durchmischungs- oder Trennvorgängen in der verfahrenstechnischen Industrie

Die relativ späte Verbreitung der numerischen Strömungsmechanik hängt damit zusammen, dass für eine vollständige, mehrdimensionale Simulation einer Strömung zusammen mit verwandten Phänomenen – wie beispielsweise Turbulenz oder Stoff- und Wärmeübergang – in vertretbarer Zeit große Rechenkapazitäten notwendig sind. Letztere sind aber erst seit den 1990er Jahren in ausreichendem Maße und vor allem zu wirtschaftlichen Preisen verfügbar, so dass sich die numerische Strömungsmechanik seither eines gesteigerten Interesses erfreut. Besonders, weil die

Entwicklung der Rechenleistung in den letzten Jahren weiter stark gestiegen ist, lassen sich immer mehr Arten von Strömungen mit immer komplexeren Phänomenen simulieren. Zu diesen komplexen Phänomenen zählt vor allem die Turbulenz, aber auch mehrphasige Strömungen, die zuvor aufgrund der höheren Anzahl zu lösender Gleichungen nicht mit den vorhandenen Rechenkapazitäten in einer akzeptablen Zeit gelöst werden konnten (KRAUME, 2003).

Weitere Beispiele, für die sich numerische Strömungssimulation anbietet, sind Systeme, in denen keine Experimente durchgeführt werden können oder letztere unwirtschaftlich sind, also sehr große Anlagen oder auch Prozesse mit giftigen oder gefährlichen Substanzen. Außerdem gibt es Größen, die sich nicht oder nur unter sehr großem Aufwand messen lassen, die aber für den jeweiligen Prozess eine große Rolle spielen. Dazu zählen in der Verfahrenstechnik und chemischen Industrie zum Beispiel Konzentrationsverteilungen in Reaktoren, die Viskositäten von nicht-newtonschen Fluiden sowie die Größe von Phasengrenzflächen, aber auch die Energiedissipation in den Behältern.

2 Problemstellung und Zielsetzung

Einer der wichtigsten Vorteile der numerischen Strömungssimulation besteht darin, schwer zugängliche Anlagen und Apparate durch Simulationen untersuchen zu können. So lassen sich komplizierte experimentelle Messungen ersetzen. Auch die Auslegung und Optimierung von Apparaten lässt sich durch die Nutzung von numerischer Strömungssimulation günstiger und schneller gestalten. Gerade Parameterstudien sind mit Strömungssimulationen problemlos durchführbar. Ebenso können bei der Maßstabsvergrößerung über dimensionslose Kennzahlen gewisse geometrische Ähnlichkeiten nicht immer eingehalten werden oder die gewählten Kennzahlen den Prozess nicht vollständig abbilden (HENZLER, 2007). Mithilfe der numerischen Strömungssimulation kann dagegen eine Maßstabsübertragung ohne Heuristiken erfolgen.

Am Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik der Technischen Universität München wurde ein paralleles Bioreaktor-System im Millilitermaßstab entwickelt (WEUSTER-BOTZ et al., 2005). Dieses System vereint 48 einzelne, miniaturisierte Bioreaktoren und bietet die Möglichkeit, sie parallel zu betreiben. Auf diese Weise können viele Experimente mit vergleichsweise geringem Aufwand und niedrigen Kosten gleichzeitig ausgeführt werden. Entsprechend lässt sich das parallele Bioreaktor-System zur Bioprozessentwicklung und -optimierung nutzen. Ist der Schritt der Verfahrensentwicklung aber abgeschlossen, muss der Prozess aus dem Millilitermaßstab in den Labor- oder Pilotmaßstab übertragen werden. In seiner Skalierbarkeit liegt hier ein weiterer Vorteil des parallelen Bioreaktorsystems. Es ist in seinem Aufbau an herkömmliche Rührkesselreaktoren angelehnt, und einige für die Maßstabsvergrößerung wichtige Prozessvariablen können experimentell ermittelt werden. Dazu zählen beispielsweise die Sauerstoffsättigung des Mediums, die während des Prozesses gemessen und überwacht werden kann, oder der Leistungseintrag der Rührer in das Medium.

Aber dennoch gibt es Größen, die in dem parallelen Bioreaktor-System messtechnisch nicht zugänglich sind. Dieses Problem wird dadurch verstärkt, dass die Einzelreaktoren von einem magnetisch-induktiven Rührerantrieb und Wärmetauschern für die Temperaturkontrolle umgeben sind und nicht eingesehen werden können. Aus diesem Grund sind die meisten Messverfahren zur Ermittlung weiterer Prozessgrößen, die für die Maßstabsvergrößerung notwendig sind, zu aufwendig bzw. von vornherein ausgeschlossen.

Um das im vorigen Absatz beschriebene Problem zu lösen, wird in dieser Arbeit numerische Strömungssimulation eingesetzt. Mit ihrer Hilfe sollen für die Skalierung von Bioprozessen wichtige Größen, die experimentell nur unter sehr großem Aufwand bestimmt werden können, numerisch ermittelt werden. Dazu zählen die Energiedissipation in den Bioreaktoren oder die Phasengrenzfläche, die während des Prozesses entsteht. Als dritte Größe, die messtechnisch nicht erfassbar ist, kann der Gasvolumenstrom, der durch einen speziell entwickelten „gasinduzierenden“ Rührer während der Kultivierung in den Reaktor eingetragen wird, genannt werden.

Darüber hinaus ist die Entwicklung neuer Bauteile für das Bioreaktor-System mit der Fertigung zahlreicher Prototypen und vielen, aufwendigen Experimenten verbunden. Dies ist langwierig und teuer, weil die Geometrien vieler Prototypen wieder verändert oder verworfen werden müssen. Da während der Entstehungszeit dieser Arbeit neue Rührorgane für das beschriebene Bioreaktor-System entwickelt wurden (z.B. HORTSCH, 2011), wird sich ebenfalls der numerischen Strömungsmechanik bedient, um deren Auslegungsprozess zu beschleunigen und zu vereinfachen.

Zur Erreichung der Zielsetzungen sind die unten beschriebenen Arbeitspakete geplant.

Um belastbare Ergebnisse aus den Simulationen zu erhalten, ist eine gründliche Fehlerbetrachtung unerlässlich (METHA, 1998). Aus diesem Grund ist der Ausgangspunkt der Bearbeitung aller Fragestellungen in dieser Forschungsarbeit

- die Beurteilung der Genauigkeit der Simulationsergebnisse anhand der auftretenden Fehler.

Anschließend werden die Größen rechnerisch ermittelt, die im Bioreaktor-System nicht messtechnisch bestimmt werden können. In diesem Themenfeld gilt es,

- die Energiedissipation im Rührbehälter zu berechnen,
- den in das Medium eintretenden Gasvolumenstrom eines „gasinduzierenden“ Rührers quantitativ zu ermitteln sowie
- die Phasenverteilung und die Größe der Phasengrenzfläche in einem zweiphasigen Prozess zu bestimmen.

Außerdem wird überprüft,

- inwieweit die Auslegung von neuen Komponenten von der numerischen Strömungssimulation profitieren kann.

3 Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen erläutert, die für das Verständnis der Arbeit nötig sind. Dabei wird in Kapitel 3.1 zunächst auf die hydrodynamische Strömung in Rührkesselreaktoren eingegangen, bevor es im nächsten Abschnitt 3.2 um die mathematische Beschreibung dieser Strömungen geht. In den letzten beiden Teilkapiteln 3.3 und 3.4 werden die numerische Simulation von Strömungen in Rührbehältern und deren Fehler erläutert.

3.1 Aspekte von Strömungen in Rührkesselreaktoren

Rührkesselreaktoren sind in der verfahrenstechnischen Industrie allgegenwärtig. Sie werden benutzt, um Chemikalien herzustellen, aber auch in der Biotechnologie zur Kultivierung von Mikroorganismen oder für die Produktion von Nahrungsmitteln, Farbe, Plastik und vielem mehr. Wegen des breiten Anwendungsspektrums müssen sie sehr vielseitig sein. Fluide mit sehr unterschiedlichen Viskositäten und rheologischem Verhalten lassen sich bei verschiedenen Temperaturen und Drücken in Rührbehältern verarbeiten. In den letzten Jahren wurden Rührkesselreaktoren intensiv erforscht, so dass das Wissen über sie stark zugenommen hat. (NIENOW, 2010)

Rührkessel sind meist zylindrisch. Die Strömung im Reaktor wird durch die Drehung eines Rührorgans erzeugt, das auf einer Achse lagert. Durch die Anordnung des Rührers (zentrisch bzw. exzentrisch) oder durch Einbauten (z.B. Messsonden oder Probenahmeverrichtungen) wird die sich ausbildende Strömung beeinflusst. Außerdem sind die Behälter oftmals mit schmalen Prallblechen, die senkrecht zur Wand angebracht sind, ausgestattet – den Stromstörern.

Im Folgenden soll sich auf zylindrische Behälter mit und ohne Bewehrung und eine zentrische Rühreranordnung beschränkt werden, da nur sie für diese Forschungsarbeit von Belang sind.

Die Strömung im Rührkesselreaktor wird über die Rührer-Reynoldszahl Re charakterisiert:

$$Re = \frac{\rho \cdot N \cdot d^2}{\eta} = \frac{N \cdot d^2}{\nu} \quad (3-1)$$

mit N Rührerdrehzahl, s^{-1}
 d Rührerdurchmesser, m
 ρ Dichte, $kg\ m^{-3}$

- η dynamische Viskosität, Pa s
 ν kinematische Viskosität, $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$

Die Reynoldszahl entspricht dem Verhältnis von Trägheits- und Zähigkeitskräften in der Strömung. Reynoldszahlen bis ca. 10 entsprechen einer laminaren Strömung. Danach fängt das Übergangsgebiet an. Hier beginnt für $10 \leq \text{Re} \leq 50$ die Turbulenz im Rührerstrom. Ab $\text{Re} \geq 10^4$ ist der Transitionsvorgang im ganzen Reaktor abgeschlossen und die Strömung ist vollständig turbulent (LIEPE, 1973). Andere Quellen beschreiben den Umschlagpunkt zur Turbulenz schon früher bei $\text{Re} \geq 480$ (MURTHY SHEKHAR und JAYANTI, 2002) bzw. später bei $\text{Re} \geq 2 \cdot 10^4$ (NIENOW, 2010). Dass so viele unterschiedliche Werte für den Umschlagpunkt zur Turbulenz gegeben werden, liegt zum einen daran, ob diese auf den Beginn der Turbulenz oder die Vollendung des Übergangs bezogen werden, und zum anderen hängt der Wert auch von der Geometrie des Rührkessels und dem eingesetzten Rührer ab.

Bei turbulenten Reynoldszahlen in Rührkesseln ohne Strombrecher wird die Strömung von der Rührerdrehung bestimmt und verläuft deshalb hauptsächlich in tangentialer Richtung. Für unbewehrte Reaktoren sind die Geschwindigkeitsanteile in axialer und radialer Richtung klein, weil die Flüssigkeit wie ein Festkörper rotiert (so genannte Festkörperrotation), weshalb die Bewegung innerhalb des Fluids gering ist (HAQUE et al., 2006). Das Fehlen von Stromstörern führt dazu, dass sich eine Trombe in der Mitte der Flüssigkeit ausbildet (NIENOW, 2010) und sich der Behälterinhalt schlecht durchmischt (HALL et al., 2004). Tromben bilden sich nicht für $\text{Re} < 300$ (KRAUME, 2003). Stromstörer wirken diesem Verhalten ebenfalls entgegen. Die Bewehrung verhindert die Festkörperrotation und verstärkt so die Turbulenz und damit die Durchmischung im Reaktor (KRAUME, 2003).

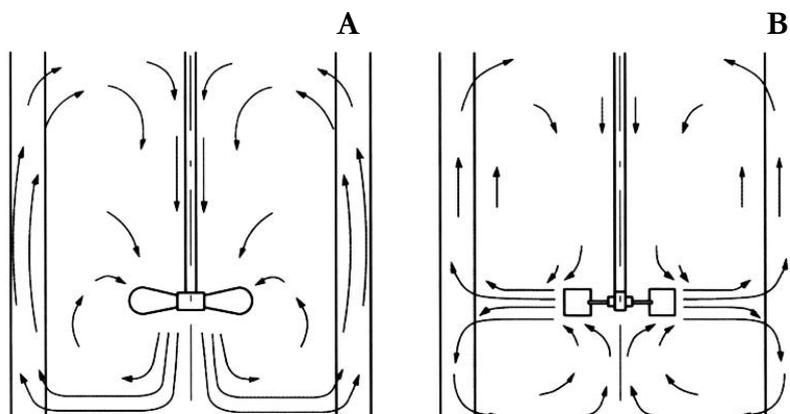


Abbildung 3-1: Strömungsbild mit einem axialen (A) und radialen (B) Rührorgan im bewehrten Rührkessel (ZLOKARNIK, 2005).

Mit Stromstörern wird die Richtung der Strömung durch die Art des Rührers bestimmt. Es wird zwischen radialen und axialen Rührorganen unterschieden. Bei radialen bewegt sich die Hauptströmung vom Rührer in horizontaler Richtung zur Behälterwand und bei axialen ist die Strömung senkrecht nach oben bzw. unten gerichtet (NIENOW, 2010). Das entstehende Strömungsbild ist beispielhaft in Abbildung 3-1 gezeigt: für einen axialen Propellerrührer (A) und einen radialen Sechs-Blatt-Scheibenrührer (B).

Für hochviskose Fluide ändern sich die Anforderungen an den Rührer, da dann laminare Strömungen vorherrschen. Denn kleinere Reynoldszahlen entstehen meist dadurch, dass die Viskosität der Flüssigkeit höher ist. Dann sind eher Rührorgane gefragt, die das Fluid durch den Reaktor „schieben“. Sie nehmen oft mehr Raum im Reaktor ein bzw. durchstreichen bei der Drehung einen größeren Bereich (NIENOW, 2010). Beispiele von Rührertypen für hochviskose Flüssigkeiten sind z.B. Ankerrührer oder Blattrührer (ZLOKARNIK, 2005).

3.1.1 Rheologisches Verhalten von Fluiden

Wird ein Fluid einer Scherbelastung ausgesetzt, reagiert es auf diese mit einer Verformung. Der Widerstand gegen diese Verformung wird als Viskosität bezeichnet. Sie ist für Strömungen eine wichtige Stoffgröße und ist definiert als Proportionalitätsfaktor für den linearen Zusammenhang, der in Gleichung (3-2) dargestellt ist (HERWIG, 2006).

$$\tau = \eta \frac{du}{dy} = \eta \dot{\gamma} \quad (3-2)$$

mit τ Schubspannung, N m^{-2}
 η dynamische Viskosität, Pa s
 u Geschwindigkeit in x-Richtung, m s^{-1}
 y kartesische Koordinate, hier senkrecht zur Bewegungsrichtung, m
 $\dot{\gamma}$ Scherrate, s^{-1}

Gleichung (3-2) wird als newtonsches Reibungsgesetz bezeichnet und beschreibt eine reine Stoffeigenschaft. Alle Fluide, die Gleichung (3-2) folgen, werden als newtonsche Fluide bezeichnet, alle anderen als nicht-newtonsche. Für das newtonsche Fluidverhalten hängt die Viskosität hauptsächlich von der Temperatur ab, so dass für isotherme Strömungen $\eta = \text{const}$ gilt (HERWIG, 2006).

Bei nicht-newtonschen Flüssigkeiten ist die Viskosität abhängig von der Beanspruchung, der das Fluid ausgesetzt wird. Dieses Verhalten ist in Abbildung 3-2 zu sehen. Als strukturviskos bzw.

pseudoplastisch wird eine Flüssigkeit bezeichnet, wenn ihre Viskosität mit steigender Scherbeanspruchung abnimmt (Abbildung 3-2 Strich-Punkt-Linie). Ein Beispiel für diesen Fall sind Polymerlösungen. Bei dilatanten Flüssigkeiten (Abbildung 3-2 gestrichelte Linie) ist das umgekehrte Verhalten zu beobachten, d.h. die Viskosität nimmt mit größer werdender Scherrate ebenfalls zu (z.B. Treibsand oder Stärkelösungen). Außer von der Größe der Scherbeanspruchung kann die Viskosität auch von der Scherzeit abhängen. Dies wird als Thixotropie bzw. Rheopexie bezeichnet (HENZLER, 1988). Auf letzteres und elastisches Verhalten wird hier aber nicht näher eingegangen.

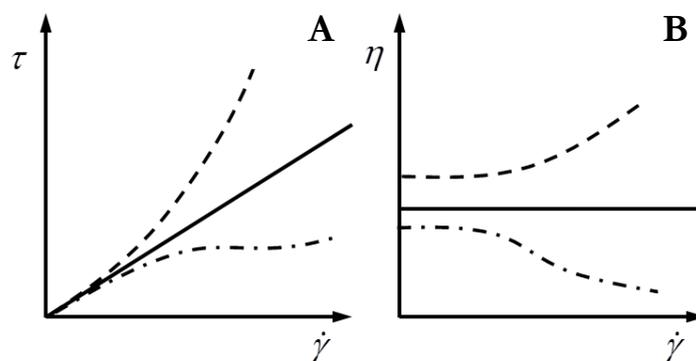


Abbildung 3-2: Fließverhalten newtonscher und nicht-newtonscher Fluide (modifiziert nach HENZLER, 1988). **A:** Abhängigkeit der Schubspannung von der Scherrate. **B:** Abhängigkeit der Viskosität von der Scherrate. Newtonsches Fluid: ———. Dilatantes Fluid: - - - -. Strukturviskoses Fluid: - . . .

Die veränderliche Viskosität nicht-newtonscher Flüssigkeiten kann mit einer Reihe von Gleichungen beschrieben werden (z.B. CHMIEL, 2006; KRAUME, 2003; BOGER und YEOW, 2005). Meist wird wegen seiner Einfachheit der Potenzansatz nach Ostwald und de Waele zur Beschreibung verwendet (Gleichung (3-3)), der auch kurz Potenzgesetz (engl. *power law*) genannt wird (HENZLER, 1988).

$$\eta = K \cdot \dot{\gamma}^{n-1} \quad (3-3)$$

mit K Konsistenzindex, Pa sⁿ
 $\dot{\gamma}$ Scherrate, s⁻¹
 n Fließindex, -

Newtonsche Flüssigkeiten haben einen Fließindex von 1, so dass der Konsistenzindex dann der Viskosität entspricht. Für Fließindizes $n < 1$ wird mit Gleichung (3-3) strukturviskoses Fließverhalten beschrieben und für $n > 1$ dilatantes. Ein Problem, das bei der Benutzung des Ostwald-de Waele-Gesetzes für strukturviskose Stoffe auftreten kann, ist, dass für kleine Scherraten die

Viskosität rasch gegen unendlich läuft, d.h. Gleichung (3-3) ist nicht begrenzt. Deshalb kann es sinnvoll sein, die Scherrate z.B. in numerischen Berechnungen zu limitieren. Dasselbe gilt für hohe Scherraten, wo die Viskosität sehr klein wird (ANSYS INC., 2010e).

3.1.2 Homogenisierung in Rührkesseln

Ein Grund, einen Rührkessel zu verwenden, ist, dass der Reaktorinhalt gleichmäßig vermischt werden soll. Das kann sowohl dazu dienen, aus verschiedenen Fluiden und eventuell Feststoffen eine homogene Mischung herzustellen als auch Konzentrationsgradienten innerhalb einer Flüssigkeit auszugleichen. Was die Strömungsmechanik angeht, ist die Homogenisierung von Flüssigkeiten ein komplizierter Verfahrensschritt, so dass weiterhin Forschung zur Beantwortung offener Fragen nötig ist (ZLOKARNIK, 2005).

Zur Angabe der Leistungsstärke, wie gut eine Mischung in einem Rührkessel mit einem bestimmten Rührer homogenisiert wird, dient oft die Mischzeit Θ . Sie ist definiert als die Zeit, die zum Erreichen eines bestimmten Homogenitätsgrades benötigt wird. Für Flüssigkeiten mit ähnlichen Dichten und Viskositäten hängt die Mischzeit nur von den geometrischen Gegebenheiten (Einbauten, Durchmesser des Rührers und des Reaktors) und der Rührerdrehzahl ab (ZLOKARNIK, 2005). Um diese Abhängigkeit der Mischzeit Θ von der Rührerdrehzahl N zu verringern und sie somit vergleichbarer zu machen, wird die Mischzeitkennzahl Θ_N eingeführt (HIMMLER und SCHIERHOLZ, 2004). Sie entspricht der Anzahl der Umdrehungen, die benötigt wird, um einen gewissen Homogenitätsgrad zu erreichen.

$$\Theta_N = \Theta \cdot N \quad (3-4)$$

mit Θ Mischzeit, s
 N Rührerdrehzahl, s^{-1}

Wird die Mischzeitkennzahl Θ_N über der Reynoldszahl Re aufgetragen, nennt sich dies Mischzeitcharakteristik, und der Strömungszustand lässt sich an ihrem Verlauf ablesen (BUJALSKI et al., 2002). Für bewehrte Rührkesselreaktoren fällt die Mischzeitkennzahl im laminaren Regime und ist für turbulente Strömungen konstant. Fehlen die Stromstörer, ist die Mischzeit im Kerngebiet der Flüssigkeit 3 bis 5-mal höher als im Rest des Reaktors, und die Durchmischung ist generell langsamer als in einem Behälter mit Bewehrung. Die Mischzeitkennzahl ist außerdem sehr stark abhängig von der Reaktor- und Rührergeometrie. Die Abhängigkeit folgt der Gleichung (3-5) (KRAUME, 2003):

$$\Theta_N \propto \left(\frac{d}{D}\right)^{-2} \quad (3-5)$$

mit d Rührerdurchmesser, m
 D Reaktordurchmesser, m

Für kleine Durchmesserhältnisse wird die Mischzeitkennzahl also schnell sehr groß.

Sollen Flüssigkeiten mit einem großen Dichte- und Viskositätsunterschied vermischt werden, kommt zu der oben schon erwähnten Abhängigkeit der Mischzeit von der Geometrie und der Rührerdrehzahl noch eine Abhängigkeit von der Schwerkraft und dem Dichteunterschied (ZLOKARNIK, 2005).

Zur Evaluation der Mischzeit werden eine lokale und eine globale Mischgüte definiert. Die lokale lautet (HENNIG et al., 2007)

$$M_{lok}(t) = \frac{c(t)}{\bar{c}} \quad (3-6)$$

mit M_{lok} lokale Mischgüte, -
 $c(t)$ zeitliche Konzentrationsverteilung, g L⁻¹
 \bar{c} mittlere Endkonzentration bei vollständiger Durchmischung, g L⁻¹

und die globale (HENNIG et al., 2007)

$$M_{glob}(t) = 1 - \sqrt{\frac{1}{V_L} \iiint_{V_L} \left(\frac{c(t)}{\bar{c}} - 1\right)^2 dV} \quad (3-7)$$

mit M_{glob} globale Mischgüte, -
 V_L Flüssigkeitsvolumen, m³.

Mithilfe der Gleichungen (3-6) und (3-7) kann der Verlauf der Homogenisierung über der Zeit betrachtet werden und somit die Zeit bestimmt werden, die nötig ist, um einen gewissen Homogenitätsgrad zu erreichen. Die globale Mischgüte (Gleichung (3-7)) gibt die Abweichung des Systems vom Zustand idealer Durchmischung ($M_{glob} = 1$) an. Sie liefert aber keine örtlichen Schwankungen im Reaktor. Dafür muss die lokale Mischgüte (Gleichung (3-6)) herangezogen werden.

Die Durchmischung nicht-newtonscher Fluide läuft deutlich langsamer ab als die von newtonschen Flüssigkeiten. Das liegt daran, dass durch die sehr unterschiedlichen Scherraten im Reaktor auch sehr verschiedene Viskositäten herrschen. Besonders im Wandbereich des Reaktors ist die Scherbeanspruchung gering, und deshalb sind dort die Viskositäten für strukturviskose Flüssigkeiten sehr hoch. Dieses Gebiet ist aber entscheidend für die Dauer der Homogenisierung. Außerdem ist es für nicht-newtonsche Fluide bedenklich, eine Mischzeitcharakteristik der Form

$\Theta_N = f(\text{Re})$ aufzustellen, da es schwer ist, eine aussagekräftige mittlere Viskosität für die Reynoldszahl zu finden (ZLOKARNIK, 2005). Es gibt zwar Ansätze zur Ermittlung einer scheinbaren Viskosität über eine effektive Scherrate, aber ihre Anwendung ist teils umstritten.

Das einfachste Konzept, das zu einer effektiven Scherrate führt, ist das Drehzahlkonzept nach METZNER und OTTO (1957). Dabei wird zur Bestimmung einer mittleren Scherrate z.B. für das Ostwald-de Waele-Gesetz in Gleichung (3-3) ein einfacher proportionaler Zusammenhang verwendet.

$$\left(\frac{du}{dy}\right)_{\text{eff}} = k_{MO} \cdot N \quad (3-8)$$

mit u Geschwindigkeit in x-Richtung, m s^{-1}
 y kartesische Koordinate, hier senkrecht zur Bewegungsrichtung, m
 k_{MO} Metzner-Otto Konstante, -
 N Rührerdrehzahl, s^{-1}

Es wurden unterschiedliche Werte für die Metzner-Otto Konstante in Gleichung (3-8) vorgeschlagen. Sie liegen z.B. bei 10 bzw. 12,8 (CALDERBANK und MOO-YOUNG, 1959), 11,5 (METZNER et al., 1961) oder 64,3 (KELLY und GIGAS, 2003). Dass die Werte so unterschiedlich sind, ist nicht verwunderlich, da die Konstante stark von der Geometrie des Reaktors abhängt.

SÁNCHEZ PÉREZ et al. (2006) führten eine veränderte Abhängigkeit von der Rührerdrehzahl für turbulente Strömungen ein.

$$\left(\frac{du}{dy}\right)_{\text{eff}} = k_{MO} \cdot N^{1,5} \quad (3-9)$$

CALDERBANK und MOO-YOUNG (1961) veränderten die Formel so, dass sie auch vom Fließindex n abhängt.

$$\left(\frac{du}{dy}\right)_{\text{eff}} = k_{MO} \cdot N \cdot \left(\frac{4n}{3n+1}\right)^{n/(1-n)} \quad (3-10)$$

BOWEN (1986) verwendete eine zusätzliche Abhängigkeit von geometrischen Parametern.

$$\left(\frac{du}{dy}\right)_{\text{eff}} = k_{MO} \cdot N \cdot \left(\frac{d}{D}\right)^{0,3} \cdot \frac{d}{b} \quad (3-11)$$

mit d Rührerdurchmesser, m
 D Reaktordurchmesser, m

b Höhe des Rührerblatts, m

HENZLER und KAULING (1985) lösten sich von der Grundlage des Drehzahlkonzeptes und entwickelten das Leistungskonzept. Dabei hängt die effektive Scherrate nicht mehr von der Drehzahl ab, sondern vom volumetrischen Leistungseintrag P/V in das Fluid.

$$\left(\frac{d\mu}{dy}\right)_{\text{eff}} = k_{HK}^{2/1+n} \cdot \left(\frac{P/V}{K}\right)^{1/1+n} \quad (3-12)$$

mit k_{HK} Konstante des Leistungskonzeptes, -
 P Leistungseintrag, W
 V Volumen, m³
 K Konsistenzindex, Pa sⁿ
 n Fließindex, -

Für Formel (3-12) wird der Leistungseintrag P benötigt. Auf seine Bestimmung wird im folgenden Kapitel 3.1.3 eingegangen.

3.1.3 Leistungseintrag

Durch die Rührerdrehung wird Energie in die Flüssigkeit im Rührkessel eingetragen. Je nach Anwendung ist es erwünscht, dass viel Energie in der Flüssigkeit verteilt wird, z.B. bei der Dispersion von Gasen in der Flüssigkeit oder der Vermischung von zwei Flüssigkeiten. Es kann aber auch das Gegenteil der Fall sein, dass zu viel eingetragene Leistung dem ablaufenden Prozess schadet, beispielsweise bei der Kristallisation oder der Kultivierung von Zellkulturen oder Pilzen.

BIEDERMANN und HENZLER (1994) haben herausgefunden, dass besonders der auf das Flüssigkeitsvolumen bezogene Leistungseintrag P/V einen großen Einfluss auf die Partikelbeanspruchung im Reaktor hat. Die Leistung P wird durch den Rührer von außen in Form von Wirbeln, also Turbulenz, in die Flüssigkeit eingebracht. Danach wird die Energie durch die turbulente Schwankungsbewegung in einer Kaskade an immer kleiner werdende Wirbel abgegeben, bis sie schließlich in Form von Wärme an die Umgebung dissipiert wird. Dieser Vorgang ist beispielhaft in Abbildung 3-3 dargestellt. Da durch die Turbulenz ständig Energie an die Umgebung abgegeben wird, muss also zu ihrer Aufrechterhaltung dem System also wieder neue Energie zugeführt werden (HERWIG, 2006).

KOLMOGOROV (1958) beschrieb diesen Vorgang als Überlagerung von Turbulenzwirbeln unterschiedlicher Größe und gab als Länge der kleinsten Wirbel die Kolmogorov-Länge l_K , auch Mikromaßstab der Turbulenz genannt, an. Der Mikromaßstab der Turbulenz ist verantwortlich für

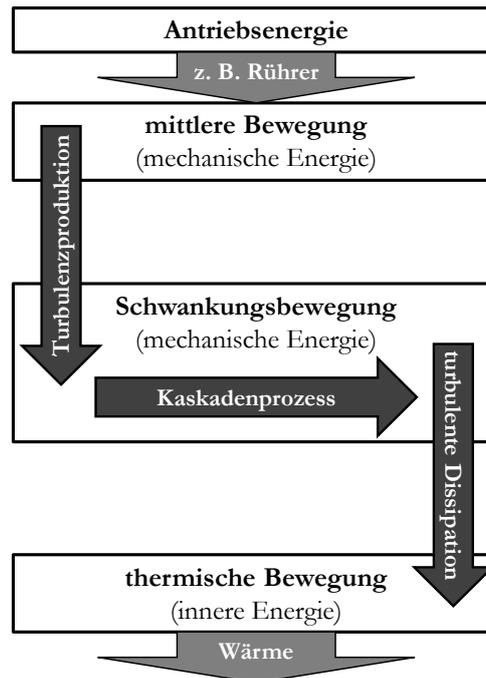


Abbildung 3-3: Weg der Energie einer stationären turbulenten Strömung von der bereitgestellten mechanischen Energie bis zur Erwärmung der Umgebung (modifiziert nach HERWIG, 2006).

die Scherbeanspruchung von Mikroorganismen oder das Dispergieren von zwei Fluiden (ZLOKARNIK, 1999). Die turbulenten Wirbel üben auf im Reaktor befindliche Partikel besonders dann eine große Belastung aus, wenn letztere etwa die gleiche Größe haben wie die Wirbel (BIEDERMANN und HENZLER, 1994).

$$l_K = \sqrt[4]{\frac{\nu^3}{\varepsilon}} \quad (3-13)$$

mit ν kinematische Viskosität, $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
 ε Energiedissipation, W kg^{-1}

Neben dem Mikromaßstab existiert auch ein Makromaßstab der Turbulenz Λ . Er entspricht in etwa dem Rührerdurchmesser d und ist beispielsweise für das Homogenisieren von Flüssigkeiten von Bedeutung (ZLOKARNIK, 1999).

Da die Energiedissipation eine lokale Größe ist, die im Reaktor stark schwankt, lässt sie sich nur durch aufwendige Experimente oder numerische Simulationen örtlich aufgelöst bestimmen. Eine mittlere Energiedissipation im Reaktor $\bar{\varepsilon}$ kann aber über den mechanischen Leistungseintrag ermittelt werden (HENZLER und BIEDERMANN, 1996).

$$\bar{\varepsilon} = \frac{P}{V \cdot \rho} \quad (3-14)$$

mit P Leistungseintrag, W
 V Volumen, m³
 ρ Dichte der Flüssigkeit, kg m⁻³

Der Leistungseintrag P ist für einen Rührbehälter leicht über das Drehmoment des Rührers zu bestimmen, also durch die Integration der Kräfte, die auf den Rührer wirken (SÁNCHEZ PÉREZ et al., 2006).

$$P = 2\pi \cdot N \cdot M \quad (3-15)$$

mit N Rührerdrehzahl, s⁻¹
 M Drehmoment des Rührers, N m

Eine andere Möglichkeit besteht darin, die Kräfte, die die Flüssigkeit auf die Behälterwand und die ruhenden Einbauten ausübt, über deren Fläche zu integrieren (BIRTIGH et al., 2000). Außerdem kann bei einer turbulenten Strömung der Leistungseintrag auch durch Integration der turbulenten Energiedissipation im Fluid erhalten werden (KUMARESAN et al., 2005).

$$P = \iiint_{V_F} \rho \cdot \varepsilon \, dV \quad (3-16)$$

mit ρ Dichte der Flüssigkeit, kg m⁻³
 ε turbulente Energiedissipation, W kg⁻¹
 V_F Fluidvolumen, m³

Die einfachste Methode – und deshalb auch die, die für diese Arbeit gewählt wurde – zur Bestimmung des Leistungseintrags in die Flüssigkeit ist Gleichung (3-15). Die Integration der turbulenten Energiedissipation zur Berechnung des Leistungseintrags birgt den Nachteil, dass die turbulente Energiedissipation sehr genau ermittelt werden muss, um sinnvolle Leistungseinträge zu erhalten.

Ist der Leistungseintrag in die Flüssigkeit bekannt, kann die Newton-Zahl Ne (engl. auch *power number*) bestimmt werden (ZLOKARNIK, 2005). Sie beschreibt das Verhältnis von Widerstands- zu Trägheitskraft.

$$Ne = \frac{P}{\rho \cdot N^3 \cdot d^5} \quad (3-17)$$

mit P Leistungseintrag, W
 ρ Dichte der Flüssigkeit, kg m⁻³
 N Rührerdrehzahl, s⁻¹

d Rührerdurchmesser, m

Wird die Newton-Zahl über der Reynoldszahl aufgetragen, ergibt sich eine Leistungscharakteristik (siehe auch Abbildung 3-4). In ihr lassen sich die verschiedenen Strömungsbereiche am Verlauf der Newton-Zahl ablesen (ZLOKARNIK, 2005). Im laminaren Bereich fällt die Newton-Zahl mit steigender Reynoldszahl und es gilt

$$Ne \cdot Re = \text{const.} \quad (3-18)$$

In turbulenten Strömungen ist die Newton-Zahl von der Viskosität und damit auch von der Reynoldszahl unabhängig, d.h.

$$Ne = \text{const.} \quad (3-19)$$

Ein deutlich erkennbarer Übergangsbereich tritt bei der Leistungscharakteristik nur in unbewehrten Behältern auf. In diesem Falle ergibt sich:

$$Ne \cdot Re^{1/3} = \text{const.} \quad (3-20)$$

In Abbildung 3-4 lässt sich außerdem erkennen, dass der Leistungseintrag für Rührkesselreaktoren ohne Stromstörer niedriger liegt als für Behälter mit Bewehrung.

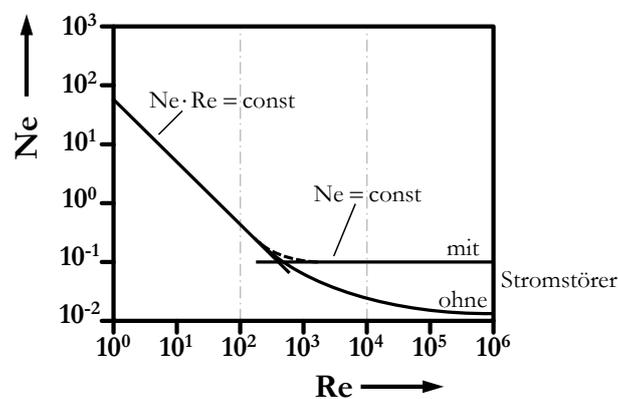


Abbildung 3-4: Beispielhafte Leistungscharakteristik $Ne = f(Re)$ für Rührer (modifiziert nach HIMMLER und SCHIERHOLZ, 2004). Im Diagramm angedeutet sind die jeweiligen Abhängigkeiten in den verschiedenen Strömungsregimes und die Unterschiede zwischen bewehrten und unbewehrten Reaktoren.

Für nicht newtonsche Fluide ergibt sich bei der Leistungscharakteristik dasselbe Problem, das schon in Abschnitt 3.1.2 für die Mischzeitcharakteristik beschrieben wurde. Es lässt sich mit einer der Gleichungen (3-8) bis (3-12) zwar eine Viskosität für die Aufstellung einer Leistungscha-

rakteristik ermitteln, aber das Problem liegt darin, ob diese scheinbare Viskosität den Zustand über den gesamten Rührkessel treffend wiedergibt. Die numerische Strömungssimulation bietet hier den Vorteil, dass nicht eine repräsentative Viskosität für den ganzen Rührkessel verwendet werden muss, weil die Simulation in der Lage ist, die Scherraten und damit auch die Viskositäten örtlich aufgelöst zu bestimmen.

3.1.4 Sauerstoffeintrag

Einer der wichtigsten Vorgänge in Rührkesselreaktoren in der Bioverfahrenstechnik ist der Stoffübergang von Sauerstoff aus der Gas- in die Flüssigphase. Wegen der geringen Löslichkeit von Sauerstoff in wässrigen Lösungen kann ein ausreichender Sauerstoffeintrag in die Flüssigphase oft nur durch den zusätzlichen Leistungseintrag des Rührens erreicht werden.

Es gibt drei Modellvorstellungen zum Stofftransport von der Gas- in die Flüssigphase, die weit verbreitet sind: die Zweifilmtheorie, das Penetrationsmodell und die Theorie der Oberflächenenerneuerung (CHMIEL, 2011).

Beim Penetrationsmodell findet der Stoffübergang zwischen laminar bewegten Phasen durch instationäre Diffusion in eine räumlich unbegrenzte Phase statt. Die Zeit, die für den Kontakt zwischen Volumenelementen beider Phasen zur Verfügung steht, ist konstant und hängt von der Relativbewegung zwischen den Phasen ab (HIGBIE, 1935).

Bei der Theorie der Oberflächenenerneuerung wird davon ausgegangen, dass sich die Volumenelemente an der Phasengrenze ständig durch die Turbulenz erneuern. Die Zeit, die beide Phasen in Kontakt stehen, hängt hier nicht nur von der Relativgeschwindigkeit sondern auch von der Bewegung, die auf die turbulente Schwankungsbewegung zurückgeht, ab. Sie ist im Gegensatz zum Penetrationsmodell nicht mehr konstant (DANCKWERTS, 1951).

Für die Zweifilmtheorie wird angenommen, dass auf jeder Seite der Grenzfläche ein Flüssigkeitsfilm existiert, durch den der Stofftransport diffusiv erfolgt. Der Kernbereich (engl. *bulk*) jeder Phase ist turbulent, so dass dort Konzentrationsgradienten vernachlässigt werden können. Außerdem befindet sich die übergehende Komponente an der Phasengrenze sofort im Gleichgewicht mit der jeweiligen Phase (LEWIS und WHITMAN, 1924).

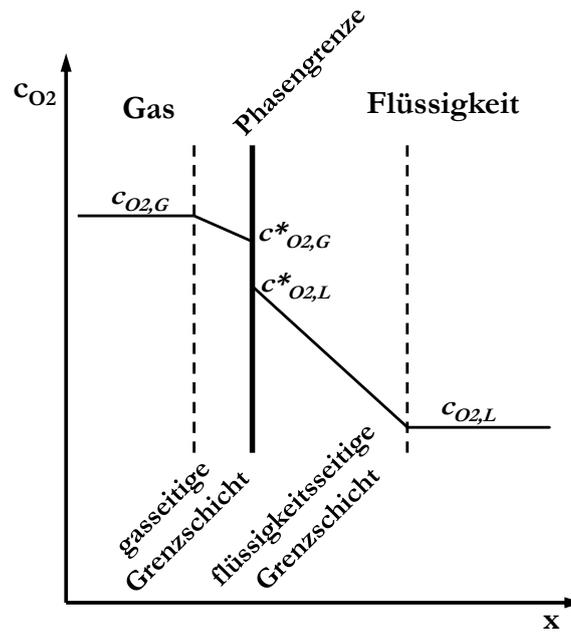


Abbildung 3-5: Schematische Darstellung des Verlaufs der Sauerstoffkonzentration vom Kern einer Gasblase bis in den Kern der Flüssigphase nach dem Zweifilmmodell (modifiziert nach CHMIEL, 2011).

Diese drei Modelle enthalten alle Annahmen, die die hydrodynamische Realität nur unzureichend wiedergeben. Trotzdem werden sie häufig verwendet, um den Stoffübergang zu beschreiben. Nachfolgend wird die Gleichung für den Stofftransport an einer Gasblase umgeben von Flüssigkeit hergeleitet. Dafür werden die Annahmen des Zweifilmmodells verwendet.

Der Weg des Stofftransports aus der Gas- in die Flüssigphase ist in Abbildung 3-5 dargestellt. Das treibende Gefälle für den Transport ist die Konzentrationsdifferenz zwischen beiden Phasen ($c_{O_2,G} - c_{O_2,L}$).

Die Unstetigkeit an der Phasengrenze lässt sich durch das Henry-Gesetz (3-21) eliminieren (AHRENDTS, 2000).

$$H = \frac{c_{O_2,G}}{c_{O_2,L}^*} \quad (3-21)$$

mit H Henry-Konstante, -

$c_{O_2,G}$ Sauerstoffkonzentration in der Gasphase, g L^{-1}

$c_{O_2,L}^*$ flüssigkeitsseitige Gleichgewichtskonzentration von O_2 an der Phasengrenze, g L^{-1}

Die Stoffübergangskoeffizienten k der beiden Phasen lassen sich durch die jeweiligen Diffusionskoeffizienten D_{O_2} und die Dicke der laminaren Grenzschicht δ beschreiben (ZLOKARNIK, 2005).

$$k_k = \frac{D_{O_2,k}}{\delta_k} \quad (3-22)$$

Da der Diffusionskoeffizient in Gasen typischerweise um vier bis fünf Größenordnungen höher ist als in Flüssigkeiten ($D_{O_2,G} \gg D_{O_2,L}$) und die Dicke der Grenzschicht in Gasen δ_G kleiner als in der Flüssigkeit ($\delta_G \ll \delta_L$), gilt auch $k_G \gg k_L$. Damit ist der gaseitige Stofftransportwiderstand $1/k_G$ sehr viel kleiner als der flüssigkeitsseitige ($1/k_G \ll 1/k_L$) und kann vernachlässigt werden.

Bleibt der Konzentrationsgradient entlang der ganzen laminaren Grenzschicht der Flüssigkeit konstant, ergibt sich damit für den Massenstrom über die Phasengrenze (ZLOKARNIK, 2005)

$$\dot{m}_{O_2} = k_{L,O_2} \cdot A \cdot \left(\frac{c_{O_2,G}}{H} - c_{O_2,L} \right) \quad (3-23)$$

mit \dot{m}_{O_2} Sauerstoffmassenstrom aus der Gas- in die Flüssigphase, kg s^{-1}

k_{L,O_2} flüssigkeitsseitiger Sauerstoffübergangskoeffizient, m s^{-1}

A Austauschfläche, m^2

H Henry-Konstante, -

$c_{O_2,G}$ Sauerstoffkonzentration in der Gasphase, g L^{-1}

$c_{O_2,L}$ Sauerstoffkonzentration in der Flüssigphase, g L^{-1} .

Gleichung (3-23) lässt sich in dieser Form für Prozesse verwenden, in denen der Sauerstoff nur über die Flüssigkeitsoberfläche eingetragen wird. Handelt es sich um volumenbegaste Verfahren, wird der Massenstrom meist auf das Flüssigkeitsvolumen V_L bezogen (ZLOKARNIK, 2005)

$$\frac{\dot{m}_{O_2}}{V_L} = k_L a \cdot \left(\frac{c_{O_2,G}}{H} - c_{O_2,L} \right) \quad (3-24)$$

mit $k_L a$ volumenbezogener Sauerstoffübergangskoeffizient, s^{-1}

und mit der spezifischen Austauschfläche a

$$a = \frac{A}{V_L}. \quad (3-25)$$

Da sich a alleine in Systemen mit einem Gas und einer Flüssigkeit experimentell nur sehr schlecht bestimmen lässt, weil der Blasendurchmesser nicht konstant ist, wird in Messungen meist das Produkt $k_L a$ ermittelt. Für Rührkesselreaktoren mit 6-Blatt-Scheibenrührern wurden beispielsweise $k_L a$ von $0,05 \text{ s}^{-1}$ bis $0,3 \text{ s}^{-1}$ bestimmt (VAN'T RIET, 1979; MIDDLETON, 1985). Dennoch finden sich in der Literatur auch Werte für k_L , wenn auch sehr viel seltener. Diese werden dann

über experimentell bestimmte $k_L a$ und a berechnet. ALVES et al. (2004) ermittelten so für Wasser und wässrige Salzlösungen k_L von bis zu $3,2 \cdot 10^{-4} \text{ m s}^{-1}$.

Um auf die aufwendigen Experimente verzichten zu können, wurden schon früh Korrelationen für $k_L a$ und k_L entwickelt. COOPER et al. (1944) fanden für niedrigviskose Medien

$$k_L a = C_1 \cdot \left(\frac{P}{V} \right)^{\alpha_1} \cdot (v_G)^{\beta_1} \quad (3-26)$$

mit P Leistungseintrag, W
 V Volumen, m^3
 v_G Gasleerrohrgeschwindigkeit, m s^{-1} .

C_1 , α_1 und β_1 sind Parameter, um das Modell anzupassen. VAN'T RIET (1979) gibt folgende Werte an: $C_1 = 2,6 \cdot 10^{-2} \text{ W}^{-\alpha_1} \text{ m}^{3+\alpha_1} \text{ m}^{-\beta_1} \text{ s}^{\beta_1}$, $\alpha_1 = 0,4$ und $\beta_1 = 0,5$, mit denen dann ein relativer Fehler von $\pm 20 - 40 \%$ vorliegt. MOUCHA et al. (2003) führten Experimente mit drei verschiedenen Rührertypen und etwa 20 Kombinationen aus diesen Rührorganen durch und erhielten $\alpha_1 = 1,19$, $\beta_1 = 0,549$ und $C_1 = 1,081 \cdot 10^{-3} \text{ W}^{-\alpha_1} \text{ m}^{3+\alpha_1} \text{ m}^{-\beta_1} \text{ s}^{\beta_1}$ mit einer Standardabweichung von $\pm 30 \%$.

Für die Beschreibung nicht-newtonscher Fluide wird Gleichung (3-26) erweitert, beispielsweise durch Anhängen eines weiteren Glieds mit der scheinbaren Viskosität η_{sp} (RYU und HUMPHREY, 1972).

$$k_L a = C_1 \cdot \left(\frac{P}{V} \right)^{\alpha_1} \cdot (v_G)^{\beta_1} \cdot (\eta_{sp})^{\gamma_1} \quad (3-27)$$

Die Parameter C_1 , α_1 , β_1 und γ_1 gibt BADINO et al. (2001) mit $\alpha_1 = 0,53$, $\beta_1 = 0,43$ bzw. $\gamma_1 = -0,12$ und $C_1 = 5,53 \cdot 10^{-3} \text{ W}^{-\alpha_1} \text{ m}^{3+\alpha_1} \text{ m}^{-\beta_1} \text{ s}^{\beta_1} (\text{Pa s})^{-\gamma_1}$ an.

Für die Bestimmung des k_L wird oft eine Korrelation verwendet, die auf HIGBIE (1935) zurückgeht und von LAMONT und SCOTT (1970) weiterentwickelt wurde.

$$k_L \propto \sqrt{\frac{D_L}{\nu}} \cdot (\varepsilon \nu)^{0,25} \quad (3-28)$$

mit D_L Diffusionskoeffizient in der Flüssigkeit, $\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$
 ε Energiedissipation, W kg^{-1}
 ν kinematische Viskosität, $\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$

Für nicht-newtonsche Fluide (unter Verwendung des Ostwald-de Waele-Gesetzes (3-3)) lässt sich Gleichung (3-28) anpassen zu (GARCIA-OCHOA und GOMEZ, 2004)

$$k_L = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{D_L} \cdot \left(\frac{\varepsilon \cdot \rho}{K} \right)^{1/2(1+n)} \quad (3-29)$$

mit ρ Dichte der Flüssigkeit, kg m^{-3}
 K Konsistenzindex, Pa s^n
 n Fließindex, -.

Ein Überblick über weitere Modelle zur Beschreibung des $k_L a$ findet sich z.B. in KAWASE und MOO-YOUNG (1988).

3.2 Mathematische Beschreibung von Strömungen

Unter der mathematischen Beschreibung von Strömungen wird in der Regel die mathematische Formulierung der Erhaltungsprinzipien für Masse, Impuls und Energie verstanden, also die Grundgleichungen der Strömungsmechanik. Sie werden hergeleitet, indem eine vorgegebene Kontrollmasse (KM) bilanziert wird. Dafür werden ausschließlich intensive Variablen verwendet, da sie von der eigentlichen Menge der betrachteten Materie unabhängig sind. Für eine beliebige intensive Erhaltungseigenschaft ϕ ist die zugehörige extensive Eigenschaft Φ folgendermaßen definiert:

$$\Phi = \iiint_{V_{KM}} \rho \phi \, dV \quad (3-30)$$

mit ρ Dichte der Flüssigkeit, kg m^{-3}
 V_{KM} Volumen, das die bilanzierte Kontrollmasse einnimmt, m^3 .

Statt über eine Kontrollmasse kann auch über einen vorgegebenen Raum, das so genannte Kontrollvolumen (KV), bilanziert werden. Dies ist für sich bewegende Fluide einfacher. In diesem Fall wird aus Gleichung (3-30) die Kontrollvolumengleichung (3-31) erhalten. Sie heißt auch Reynoldstransporttheorem (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

$$\frac{d}{dt} \iiint_{V_{KM}} \rho \phi \, dV = \frac{d}{dt} \iiint_{V_{KV}} \rho \phi \, dV + \iint_{A_{KV}} \rho \phi (\mathbf{v} - \mathbf{v}_{KV}) \cdot \mathbf{n} \, dA \quad (3-31)$$

mit t Zeit, s
 V_{KV} Volumen des Kontrollvolumens, m^3
 A_{KV} Oberfläche des Kontrollvolumens, m^2
 \mathbf{n} Einheitsvektor senkrecht zu A_{KV} , -
 \mathbf{v} Vektor der Fluidgeschwindigkeit, m s^{-1}
 \mathbf{v}_{KV} Vektor der Geschwindigkeit, mit der sich A_{KV} bewegt, m s^{-1}

Für $\mathbf{v}_{KV} = \mathbf{v}$, wenn sich also das Kontrollvolumen so schnell wie das Fluid bewegt, wird der zweite Term auf der rechten Seite von Gleichung (3-31) zu null und das Kontrollvolumen wieder zur Kontrollmasse. Da sich in den hier betrachteten Fällen das Kontrollvolumen nicht bewegt, ist $\mathbf{v}_{KV} = 0$. Dieser letzte Term auf der rechten Seite wird auch als konvektiver Term bezeichnet. Gleichung (3-31) sagt aus, dass die Änderungsrate der Menge einer extensiven Eigenschaft Φ gleich der Änderungsrate der Menge dieser Eigenschaft im Kontrollvolumen plus ihrem Nettofluss durch die KV-Oberfläche, hervorgerufen durch die Fluidbewegung, ist (BIRD et al., 2002).

Aus Gleichung (3-31) lassen sich alle Erhaltungsgleichungen ableiten, indem für ϕ eine passende Größe eingesetzt wird. Dies wird in den folgenden Abschnitten vorgestellt.

3.2.1 Massenerhaltung

Die Bilanzierung eines Kontrollvolumens für die Herleitung der Gleichung für die Massenerhaltung ist in Abbildung 3-6 gezeigt.

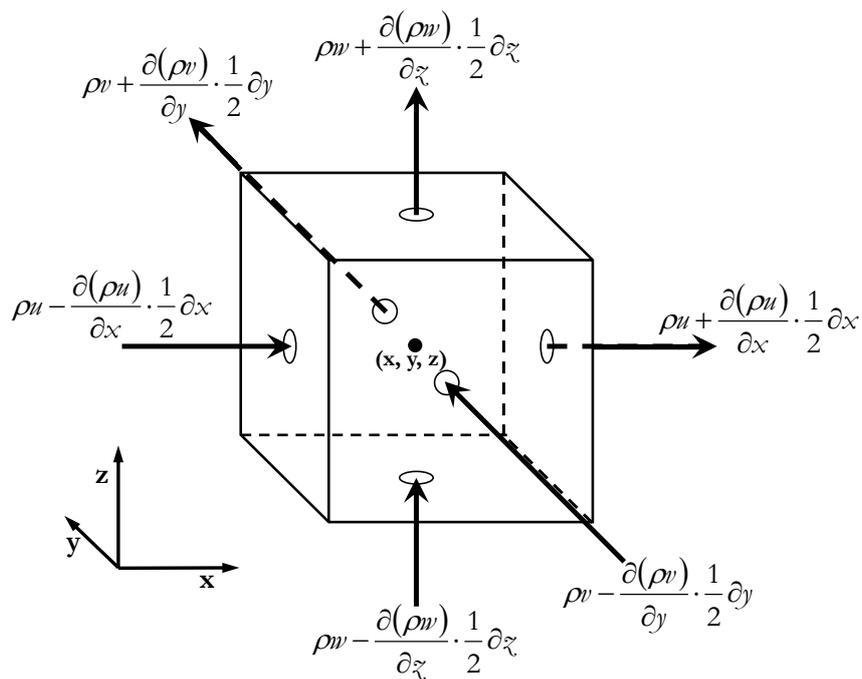


Abbildung 3-6: Bilanzierung der Massenflüsse in ein und aus einem Kontrollvolumen (modifiziert nach VERSTEEG und MALALASEKERA, 2007).

Wenn alle Flüsse über die Kontrollvolumengrenzen addiert werden, folgt daraus unmittelbar Gleichung (3-32) für ein kartesisches Koordinatensystem bzw. in Tensorschreibweise.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3-32)$$

mit ρ Dichte der Flüssigkeit, kg m^{-3}
 t Zeit, s
 u Geschwindigkeit in x -Richtung, m s^{-1}
 v Geschwindigkeit in y -Richtung, m s^{-1}
 w Geschwindigkeit in z -Richtung, m s^{-1}

Eine andere Form der Herleitung der Integralform der Erhaltungsgleichung für die Masse – auch als Kontinuitätsgleichung bekannt – ist, $\phi = 1$ in die Kontrollvolumengleichung (3-31) einzusetzen.

Das heißt, die zu erhaltende Größe ist ρ , die Masse pro Volumeneinheit. Wird dann noch in der Kontrollvolumengleichung mithilfe des Gaußschen Integralsatzes (RUGE und WERMUTH, 2000) das Oberflächen- in ein Volumenintegral umgewandelt, ergibt sich die Differentialform der Kontinuitätsgleichung (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (3-33)$$

mit \mathbf{v} vektorielle Fluidgeschwindigkeit, m s^{-1}

Diese Form ist für alle Koordinatensysteme gültig, wenn der Ausdruck für die Divergenz entsprechend substituiert wird, für kartesische Koordinaten ist dies in Gleichung (3-32) gezeigt.

3.2.2 Erhaltungsgleichungen für skalare Größen

Die Integralform der Gleichung für die Erhaltung einer skalaren Größe ϕ , wie z.B. einer Konzentration c oder der Temperatur T , ergibt sich aus der Kontrollvolumengleichung (3-31) mit $\phi = \phi$, wenn zusätzlich der Einfluss von Diffusion und von Quelltermen berücksichtigt wird.

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{V_{KV}} \rho \phi \, dV + \iint_{A_{KV}} \rho \phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dA = \iint_{A_{KV}} \Gamma \nabla \phi \cdot \mathbf{n} \, dA + \iiint_{V_{KV}} q_\phi \, dV \quad (3-34)$$

Der erste Term auf der rechten Seite der obigen Gleichung beschreibt den diffusiven Transport des Skalars mit Γ als Diffusionskoeffizienten. q_ϕ steht für Quellen und Senken von ϕ .

Die Differentialform von Gleichung (3-34) in Vektorschreibweise lautet

$$\frac{\partial(\rho \phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + q_\phi \quad (3-35)$$

und in Tensornotation wird die generische Erhaltungsgleichung zu (FERZIGER und PERIĆ, 2008)

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + q_\phi. \quad (3-36)$$

3.2.3 Impulserhaltung

Die Impulserhaltungsgleichung entsteht, wenn in die Kontrollvolumengleichung (3-31) für $\phi = \mathbf{v}$ eingesetzt wird. Das heißt, erhalten wird hier der Impuls pro Masseinheit.

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{V_{KV}} \rho \mathbf{v} \, dV + \iint_{A_{KV}} \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dA = \sum \mathbf{f} \quad (3-37)$$

Die rechte Seite von Gleichung (3-37) beschreibt die Kräfte, die auf das Fluid im Kontrollvolumen wirken. Diese setzen sich zusammen aus Oberflächen- und Volumen- bzw. Körperkräften. Zu den Oberflächenkräften zählen z.B. der Druck, Normal- und Scherspannungen und die Oberflächenspannung und zu den Körperkräften beispielsweise die Schwerkraft oder Zentrifugalkräfte.

Die Oberflächenkräfte müssen durch Größen beschrieben werden, für die Erhaltungsgleichungen gelöst werden (wie Dichte oder Geschwindigkeit), da sonst das Gleichungssystem nicht geschlossen ist und nicht gelöst werden kann. Für newtonsche Fluide ist das mit der Verwendung des newtonschen Reibungsgesetzes aus Gleichung (3-2) möglich. Nicht-newtonsche Fluide können mit der hier vorgestellten Form der Impulserhaltungsgleichung nur dann gelöst werden, wenn angenommen wird, dass die Viskosität nur eine Funktion der Scherrate ist, also eigentlich der Geschwindigkeit und ggf. noch der Temperatur. Dann kann zur Beschreibung der Viskosität eine Gleichung wie das Ostwald-de Waele-Gesetz (Gleichung (3-3)) verwendet werden, und die Impulsgleichungen sind lösbar. Für alle anderen nicht-newtonschen Fluide müssen zur Beschreibung des Zusammenhangs zwischen Geschwindigkeit und Spannungstensor zusätzliche Differentialgleichungen gelöst werden, was das System sehr viel komplizierter macht (FERZIGER und PERIĆ, 2008). In der vorliegenden Arbeit wird zur Beschreibung der Viskosität nicht-newtonischer Flüssigkeiten das Ostwald-de Waele-Gesetz (Gleichung (3-3)) verwendet und damit kann auch die herkömmliche, oben vorgestellte Impulsgleichung benutzt werden. Auf die Beschreibung der anderen Fälle wird hier verzichtet. Genauere Informationen finden sich z.B. in LODGE (1964) oder MUJUMDAR und MASHELKAR (1982).

Als Oberflächenkräfte werden der Druck und die Normal- und Scherspannungen berücksichtigt und bei den Körperkräften nur die Gravitation. Damit wird aus Gleichung (3-37)

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{V_{KV}} \rho \mathbf{v} \, dV + \iint_{A_{KV}} \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dA = \iint_{A_{KV}} \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} \, dA + \iiint_{V_{KV}} \rho \mathbf{g} \, dV \quad (3-38)$$

mit \mathbf{g} Vektor der Erdbeschleunigung, m s^{-2}

und mit dem Spannungstensor \mathbf{T} , der auf dem newtonschen Reibungsgesetz (3-2) beruht,

$$\mathbf{T} = - \left(p + \frac{2}{3} \eta \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \mathbf{I} + \eta \left[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right] \quad (3-39)$$

mit p Druck, Pa

\mathbf{I} Einheitstensor, - .

Der viskose Teil des Spannungstensors ist symmetrisch, d.h. $\tau_{ij} = \tau_{ji}$, und enthält in der Diagonale die Normalspannungen und in den anderen Elementen die Scherspannungen (PASCHEDAG, 2004).

In der koordinatenfreien Vektorform wird Gleichung (3-38) zu

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{g} \quad (3-40)$$

bzw. in Tensorschreibweise zu (FERZIGER und PERIĆ, 2008)

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i \quad (3-41)$$

mit dem viskosen Teil des Spannungstensors τ_{ij}

$$\tau_{ij} = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \eta \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \delta_{ij}. \quad (3-42)$$

Hier ist δ_{ij} das Kronecker-Symbol, für das gilt $\delta_{ij} = 1$, wenn $i = j$, und sonst $\delta_{ij} = 0$.

In der Form von Gleichung (3-41) ist die Erhaltungsgleichung für den Impuls für alle Strömungszustände gültig. Da in laminaren und turbulenten Strömungen dieselben Kräfte wirken, nur in anderem Verhältnis, können mit ihr auch turbulente Strömungen beschrieben werden (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

3.2.4 Inkompressible Strömungen (Navier-Stokes-Gleichung)

Die Erhaltungsgleichungen für Masse und Impuls sind nichtlinear, gekoppelt und schwer lösbar. Nur für wenige Fälle (meist vollentwickelte Strömungen in einfachen Geometrien) ist es möglich, sie analytisch zu lösen. Für alle anderen Anwendungen werden numerische Verfahren zur Lösung der Gleichungen benutzt. Da auch dann der Rechenaufwand erheblich sein kann, werden viele Vereinfachungen verwendet. Das führt zwar Fehler ein, aber diese werden aufgrund der Einsparungen von Rechenzeit und Kosten in Kauf genommen (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

Eine Vereinfachung, die hier getroffen wird, ist, dass die Strömung als inkompressibel angenommen wird, d.h. $\rho = \text{const.}$ Dabei können die Fluide an sich durchaus kompressibel sein, solange die Kompressibilität für den betrachteten Fall keinen Einfluss auf die Strömung hat. Da es sich hier um Fluide (hauptsächlich Flüssigkeiten) bei atmosphärischen Drücken und moderaten Geschwindigkeiten (bis maximal $4,5 \text{ m s}^{-1}$) handelt, ist dies gerechtfertigt. Außerdem wird die Strömung als isotherm angenommen, was dazu führt, dass auch die Viskosität sich nicht ändert ($\eta = \text{const.}$). Mit diesen beiden Annahmen werden die allgemeinen Gleichungen für die Masse- und Impulserhaltung (3-32) und (3-41) zu einer vereinfachten Massenerhaltungsgleichung (3-43) und der so genannten Navier-Stokes-Gleichung (3-44) (BOGER und YEOW, 2005):

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3-43)$$

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \eta \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right) - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i \quad (3-44)$$

mit g_i Komponente der vektoriellen Erdbeschleunigung in x_i -Richtung, m s^{-2}

An dieser Stelle soll noch einmal ausdrücklich darauf hingewiesen werden, dass die Navier-Stokes-Gleichung so nur für newtonsches Fluidverhalten gilt, da sie auf dem newtonschen Reibungsgesetz (3-2) beruht. Für nicht-newtonsche Fluide kann die Gleichung (3-44) nur verwendet werden, wenn sich die Viskosität durch Größen beschreiben lässt, für die Erhaltungsgleichungen gelöst werden (vgl. Abschnitt 3.2.3). Wird also beispielsweise das Ostwald-de Waele-Gesetz (Gleichung (3-3)) für die Beschreibung der Viskosität genutzt, ist die Navier-Stokes-Gleichung anwendbar.

3.2.5 Mehrphasige Strömungen

Mehrphasige Systeme enthalten mindestens zwei nicht ineinander mischbare Fluide oder mindestens ein Fluid und einen Feststoff. In der vorliegenden Arbeit werden nur Mehrphasensysteme bestehend aus einem Gas und einer Flüssigkeit betrachtet. Deshalb beschränkt sich die Beschreibung hier auf diese Fälle.

Zwischen den Phasen bilden sich zweidimensionale Phasengrenzflächen aus, an denen sich die Stoffwerte sprunghaft ändern. Mehrphasensysteme lassen sich systematisieren nach der Verteilung der Phasen und der Lage der Phasengrenzflächen, also danach ob die Phasen kontinuierlich (zusammenhängend) oder dispergiert (geteilt) vorliegen und wie die Größenverteilung der dispersten Phase ist. Dies ist in Abbildung 3-7 B zu sehen. Die Klassifizierung nach der Lage der Phasengrenze zeigt Abbildung 3-7 A.

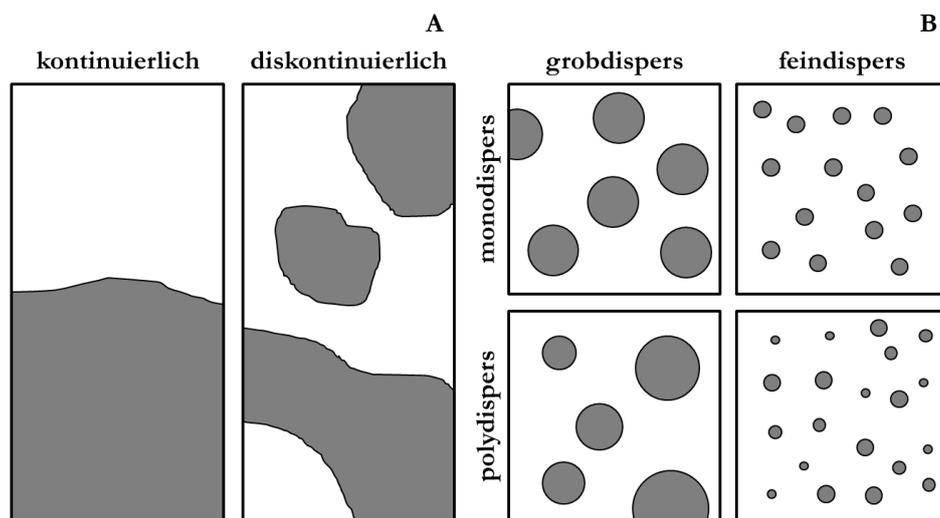


Abbildung 3-7: Systematische Einteilung von Mehrphasengemischen nach der geometrischen Verteilung der Einzelphasen (modifiziert nach PASCHEDAG, 2004).

Es ist ein gängiges Vorgehen, disperse Systeme mathematisch nicht durch den Ort und die Eigenschaften einzelner Blasen oder Tropfen zu charakterisieren, sondern durch statistisch gemittelte Größen. Deshalb können aus allen kontinuierlich formulierten Gleichungen keine lokalen bzw. zeitlichen Informationen für beliebig kleine Volumina bzw. Zeitintervalle abgeleitet werden, sondern nur gemittelte Werte (PASCHEDAG, 2004).

Um disperse Systeme mathematisch zu beschreiben, werden häufig zwei verschiedene Möglichkeiten angewandt: das Euler-Lagrange-Verfahren und die Euler-Euler-Methode. Beim Euler-Lagrange-Modell werden nur für die kontinuierliche Phase Erhaltungsgleichungen gelöst. Die disperse Phase wird mit Partikeln dargestellt, deren Bewegung durch das kontinuierliche Fluid

verfolgt wird. Der Vorteil dieser Methode liegt darin, dass nur für ein Fluid Bilanzgleichungen gelöst werden müssen. Andererseits ist das Euler-Lagrange-Verfahren nur bis zu Dispersphasenanteilen von etwa 5 % anwendbar. Beim Euler-Euler-Ansatz werden beide Phasen kontinuierlich betrachtet und für beide werden angepasste Bilanzgleichungen gelöst. Der höhere Rechenaufwand für mindestens zwei Sätze Erhaltungsgleichungen wird dadurch aufgewogen, dass es möglich ist, auch Dispersphasenanteile bis ca. 20 % darzustellen (ANSYS INC., 2010e). Die Entscheidung, welches Modell benutzt werden soll, hängt hauptsächlich davon ab, wie groß der Dispersphasenanteil ist, und wie die Phasen verteilt sind (vgl. Abbildung 3-7). Für disperse Systeme (Abbildung 3-7 B) kann je nach Dispersphasenanteil auch das Euler-Lagrange-Modell verwendet werden, während für kontinuierliche Systeme (Abbildung 3-7 A) das Euler-Euler-Verfahren verwendet werden muss.

Im Folgenden wird nur die Euler-Euler-Methode näher erläutert, da sie in der vorliegenden Arbeit verwendet wird. Für weiterführende Literatur zum Euler-Lagrange-Verfahren sei der Leser auf SOMMERFELD (1996) oder PASCHEDAG (2004) verwiesen. Außerdem wird auf die Beschreibung von Systemen mit Phasenumwandlung verzichtet, da sie in dieser Forschungsarbeit ebenfalls nicht zur Anwendung kommen. Genauere Informationen dazu lassen sich z.B. in PASCHEDAG (2004) finden.

Eine wichtige Größe bei der Beschreibung von mehrphasigen Systemen ist der Phasenanteil α_k , also das Verhältnis vom Volumen der jeweiligen Phase V_k zum Gesamtvolumen V .

$$\alpha_k = \frac{V_k}{V} \quad (3-45)$$

Wegen der Volumenerhaltung muss die Summe aller Phasenanteile eins ergeben.

$$\sum_k \alpha_k = 1 \quad (3-46)$$

Bei der Euler-Euler-Herangehensweise werden die Phasen als sich durchdringende Kontinua betrachtet. Das bedeutet, dass in jedem Kontrollvolumen alle betrachteten Phasen im Prinzip vorhanden sind und einen Phasenanteil entsprechend des Volumens erhalten, das sie einnehmen (ANSYS INC., 2010e).

Mithilfe des Phasenanteils lassen sich aus den allgemeinen Variablen für das gesamte System die Größen für die jeweilige Phase – genau wie für das Volumen in Gleichung (3-45) – ableiten, z.B. für die Dichte in Gleichung (3-47) (ANSYS INC., 2010f).

$$\rho_{eff,k} = \alpha_k \cdot \rho_k \quad (3-47)$$

Hier ist es wichtig, zwischen dem Stoffwert „Dichte der Phase k “ ρ_k und der Erhaltungsgröße „Masse der Phase k pro Volumeneinheit“ $\rho_{eff,k}$ zu unterscheiden. In einphasigen Systemen gibt es zwischen den beiden Werten keinen Unterschied.

Die Kontinuitätsgleichung für die Phase k in einem mehrphasigen System lautet (PASCHEDAG, 2004)

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k) = 0 \quad (3-48)$$

und die Impulsbilanz (PASCHEDAG, 2004)

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) = \nabla (\alpha_k \boldsymbol{\tau}_{ij,k}) - \alpha_k \nabla p + \alpha_k \rho_k \mathbf{g} + \mathbf{f}_{PWV} \quad (3-49)$$

mit \mathbf{f}_{PWV} Phasenwechselwirkungskräfte, N m^{-3} .

Die Phasenwechselwirkungskräfte gehen in die Gleichung der kontinuierlichen und dispersen Phase mit umgekehrtem Vorzeichen ein. Sie beschreiben den Impulsaustausch zwischen den Phasen. Generell wird zwischen Widerstandskräften (engl. *drag forces*) und Blasenkräften (engl. *non-drag forces*) unterschieden.

Die wichtigste Kraft bei den Phasenwechselwirkungen ist die Widerstandskraft \mathbf{F}_D . Sie muss immer dann berücksichtigt werden, wenn es eine Relativbewegung zwischen den Phasen gibt (PASCHEDAG, 2004).

$$\mathbf{F}_D = \frac{3}{4} C_D \frac{\rho_f}{d_d} (\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_d) |\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_d| \quad (3-50)$$

mit C_D Widerstandsbeiwert, -

ρ_f Dichte der kontinuierlichen Phase, kg m^{-3}

d_d Durchmesser der Blasen bzw. Partikeln der dispersen Phase, m

\mathbf{v}_f Geschwindigkeit der kontinuierlichen Phase, m s^{-1}

\mathbf{v}_d Geschwindigkeit der dispersen Phase, m s^{-1}

Der Widerstandsbeiwert C_D kann mithilfe von empirischen Korrelationen bestimmt werden, die oft auf der Partikel-Reynoldszahl beruhen. Eine Übersicht findet sich beispielsweise in CLIFT et al. (1978) oder ISHII und ZUBER (1979).

Weiterhin lassen sich als Wechselwirkungskräfte noch die laterale Auftriebskraft (engl. *lift force*), die turbulente Dispersionskraft (engl. *turbulent dispersion force*) und die virtuelle Massenkraft (engl. *virtual mass force*) erwähnen.

Die laterale Auftriebskraft wird erzeugt, wenn die kontinuierliche Phase eine Blase nicht gleichmäßig anströmt, so dass auf deren Oberfläche ein Druckgradient entsteht. An der Seite, an der die Blase schneller angeströmt wird, bildet sich ein Unterdruck, und sie bewegt sich in diese Richtung.

Die turbulente Dispersionskraft beschreibt den Effekt, der entsteht, wenn Blasen der turbulenten Schwankungsbewegung der kontinuierlichen Phase ausgesetzt sind.

Die virtuelle Massenkraft schließlich berücksichtigt, dass eine sich bewegende Blase immer einen gewissen Teil des umgebenden Fluids mitreißt.

Eine weiterführende Beschreibung der Phasenwechselwirkungskräfte findet sich z.B. in PASCHEDAG (2004) oder MARSCHALL et al. (2011a).

Da die Phasenwechselwirkungen für jede Phase explizit beschrieben werden, muss die Dispersionsphase im Euler-Euler-Modell monodispers sein. Sollen Größenverteilungen einer ansonsten gleichen Phase berücksichtigt werden, muss für jede Partikelgröße eine eigene Phase definiert werden (PASCHEDAG, 2004). Weil zur realistischen Beschreibung einer Größenverteilung etwa 20 bis 100 Größenklassen nötig wären und für jede Klasse ein eigener Differentialgleichungssatz gelöst werden muss, wird der Rechenaufwand schnell groß. Abhilfe kann in einem solchen Fall das Größenklassen-Modell (engl. *Multiple-Size-Group*- oder MUSIG-Modell) von LO (1996) schaffen. Es arbeitet mit zehn bis zwanzig Größenklassen und algebraischen Beziehungen für die Geschwindigkeiten der einzelnen Klassen. So muss für die disperse Phase die Impulsbilanz nur einmal gelöst werden.

Kontinuierliche und diskontinuierliche Mehrphasensysteme lassen sich nicht mit Mittelungsansätzen wie dem Euler-Euler-Verfahren darstellen. Bei diesen Systemen wird nicht mehr zwischen kontinuierlicher und disperser Phase unterschieden, sondern beide Phasen werden als gleichberechtigt betrachtet. Das Innere jeder Phase kann wie ein einphasiges System mit den Gleichungen aus den Abschnitten 3.2.1 bis 3.2.4 beschrieben werden. An der Phasengrenze sind besondere Rand- bzw. Übergangsbedingungen für die jeweilige Phase nötig (PASCHEDAG, 2004).

Es wird zwischen ortsfesten und beweglichen Phasengrenzen unterschieden. Die Bilanzen für die Randbedingungen an der Phasengrenze werden bei beweglichen Phasengrenzen zunächst für ein

mitbewegtes Koordinatensystem aufgestellt und dann auf das ortsfeste transformiert. Dadurch entstehen zusätzliche Terme, die die Relativbewegung zwischen beiden Koordinatensystemen berücksichtigen. Außerdem ist bei Simulationen mit beweglichen Phasengrenzflächen die Lage derselben Teil der Lösung. Sie ist also vorher nicht bekannt (PASCHEDEAG, 2004). Die Herleitung der Rand- und Übergangsbedingungen an der Phasengrenze ist ausführlich in PASCHEDEAG (2004) oder DEEN (1998) zu finden und wird hier nicht mehr wiederholt. Die Randbedingungen selbst werden im Kapitel 3.3.5 aufgeführt.

3.3 Numerische Simulation von Strömungen

Die in Kapitel 3.2 vorgestellten Gleichungen können aufgrund ihrer Komplexität für die hier vorgestellten Fälle nur numerisch gelöst werden. Das heißt, dass für die betrachteten Strömungen algebraische Näherungsgleichungen hergeleitet werden, die für diskrete Punkte des Lösungsgebietes Näherungslösungen für die partiellen Differentialgleichungen bieten (PASCHEDEAG, 2004). Die dafür notwendigen Grundlagen werden in diesem Kapitel vorgestellt.

3.3.1 Eigenschaften numerischer Verfahren

Eine numerische Lösungsmethode sollte gewisse Eigenschaften haben. Dazu zählen Konsistenz, Stabilität, Konvergenz, Konservativität, Beschränktheit, Realisierbarkeit und Genauigkeit.

Konsistenz

Eine Methode wird als konsistent bezeichnet, wenn der Unterschied zwischen der Lösung der diskretisierten und der kontinuierlichen Gleichungen mit kleiner werdendem Gitterabstand verschwindet, d.h. der Diskretisierungsfehler ε_D (vgl. Kapitel 3.4.3) soll verschwinden.

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \varepsilon_D = 0 \quad (3-51)$$

mit Δx Gitterabstand, m

Dasselbe gilt für den Zeitschritt Δt bei instationären Simulationen.

Selbst wenn die Methode konsistent ist, heißt das nicht, dass bei einem unendlich feinen Gitter die Lösung exakt ist. Damit das passiert, muss die Methode auch stabil sein (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

Stabilität

Eine numerische Approximation ist dann stabil, wenn sie Fehler, die während des Lösungsprozesses auftreten, nicht verstärkt.

Bei iterativen Lösungsverfahren bedeutet Stabilität, dass die Lösung nicht divergiert. Einige Methoden sind nur dann stabil, wenn gewisse Kriterien eingehalten werden, z.B. wenn der Zeitschritt kleiner als ein bestimmter Wert ist. Sind die verwendeten Methoden stabil und konsistent, streben die Ergebnisse gegen eine gitterunabhängige Lösung (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

Konvergenz

Als konvergent wird eine Methode bezeichnet, wenn die Lösung der diskretisierten Gleichungen f bei unendlich kleinen Gitterabständen gegen die exakte Lösung f_{exakt} tendiert, also

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} f = f_{\text{exakt}}. \quad (3-52)$$

Offensichtlich ist ein konsistentes Verfahren nutzlos, wenn die Lösung nicht gegen die exakte tendiert (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

Konservativität

Konservativität bezeichnet die Erfüllung der Erhaltungsgleichungen, sowohl lokal als auch global. Wenn die streng konservative Form der Gleichungen und eine Finite-Volumen-Methode verwendet werden, ist die Erhaltung der Variablen für jedes Kontrollvolumen und auch für das gesamte Strömungsgebiet garantiert. Diese Eigenschaft ist sehr wichtig für eine Lösungsmethode, weil sie den Lösungsfehler beschränkt. Wenn Masse, Impuls und Energie erhalten werden, wirkt sich der Fehler nur auf die Verteilung dieser Variablen im Lösungsgebiet aus, nicht aber auf ihre Gesamtgröße (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

Beschränktheit

Die Beschränktheit besagt, dass die numerische Lösung innerhalb bestimmter sinnvoller Grenzen liegen sollte. Diese Grenzen sind für jede Größe anders, z.B. muss der Phasenanteil zwischen 0 und 1 liegen. Die Beschränktheit ist aber nur schwer zu garantieren. Jede Methode höherer Ordnung kann unbeschränkte Lösungen produzieren. Dazu kommt, dass Methoden, die zu unbeschränkten Lösungen neigen, oft auch Stabilitäts- und Konvergenzprobleme haben (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

Realisierbarkeit

Unter Realisierbarkeit wird verstanden, dass Modelle von Phänomenen, die (noch) nicht direkt beschrieben werden können, wie z.B. Turbulenz oder Mehrphasenströmungen, so gestaltet sind, dass sie physikalisch realistische Lösungen liefern (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

Genauigkeit

Numerische Lösungen von Strömungsproblemen sind nur Näherungslösungen. Es ist wichtig, sich darüber bewusst zu sein, dass Fehler existieren (sie werden in Kapitel 3.4 näher beschrieben) und sie zu unterscheiden. Denn es ist möglich, dass sich verschiedene Fehler gegeneinander aufheben, so dass eine Lösung auf einem groben Netz besser zu experimentellen Daten passen kann als die auf einem feinen Gitter, obwohl letztere eigentlich per Definition genauer sein müsste. Es obliegt dem Anwender die auftretenden Fehler – soweit möglich – zu kontrollieren und niedrig zu halten bzw. sie abzuschätzen (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

3.3.2 Die Finite-Volumen-Methode

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, die partiellen Differentialgleichungen der Bilanzgleichungen aus Abschnitt 3.2 zu lösen. Neben der Finite-Volumen-Methode (FVM) können zur Lösung der partiellen Differentialgleichungen in der numerischen Strömungssimulation auch die Finite-Differenzen-Methode (ANDERSON, 1998; SCHWARZ, 1993), die Finite-Elemente-Methode (BATHE, 1986; BURNETT, 1987) oder die Lattice-Boltzmann-Methode (WOLF-GLADROW, 2004; SUCCI, 2001) verwendet werden. Hier wird nur die Methode der Finiten Volumina ausführlich vorgestellt, da sie für die vorliegende Arbeit verwendet wurde. Für die anderen Verfahren wird der Leser auf die angegebene Literatur verwiesen.

Für die Diskretisierung werden bei der Methode der Finiten Volumina die partiellen Differentialgleichungen über jedes Kontrollvolumen integriert und dann die Flüsse über die Bilanzgrenzen ermittelt. Damit gibt es eine enge Verknüpfung zwischen der mathematischen Methode und der physikalischen Bedeutung (PASCHEDAG, 2004). Deshalb wird die Integralform der Erhaltungsgleichung als Ausgangspunkt für die Diskretisierung verwendet. Für eine stationäre Strömung mit Quelltermen ergibt sich aus der Kontrollvolumengleichung (3-31) (FERZIGER und PERIĆ, 2008)

$$\iint_{A_{KV}} \rho \phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dA = \iint_{A_{KV}} \Gamma \nabla \phi \cdot \mathbf{n} \, dA + \iiint_{V_{KV}} q_\phi \, dV. \quad (3-53)$$

Die allgemeine Integralform der Erhaltungsgleichung (3-53) gilt für jedes einzelne Kontrollvolumen aber auch für das gesamte Lösungsgebiet. Werden die Gleichungen für alle Kontrollvo-

lumina addiert, heben sich die Oberflächenintegrale für die innen liegenden Seiten auf und es wird die integrale Gleichung für das gesamte Lösungsgebiet erhalten. Die diskreten Punkte bzw. die Kontrollvolumina, in denen Gleichung (3-53) gelöst wird, werden durch ein Gitter festgelegt. Dabei kann der Rechenpunkt bzw. die Stützstelle im Inneren einer Netzzelle (engl. *cell centered*) liegen oder auf einem Knotenpunkt (engl. *vertex centered*). Im ersten Fall sind die Ränder im Gitter auch die Grenzen der Kontrollvolumina. Im zweiten Fall wird der Rechenpunkt auf sich schneidende Gitterlinien gelegt und das Kontrollvolumen um ihn herum konstruiert. Die Prinzipien der Diskretisierung sind für beide Wege gleich (FERZIGER und PERIĆ, 2008). Ursprünglich wurde die Finite-Volumen-Methode für strukturierte Gitter entwickelt. Mittlerweile ist sie auch auf blockstrukturierte und unstrukturierte Gitter anwendbar, liefert aber auf strukturierten Gittern immer noch die genauesten Ergebnisse (PASCHEDAG, 2004).

3.3.3 Rechengitter

Mit dem Gitter – oder auch Netz – wird das Rechengebiet in Teilbereiche zerlegt, auf denen die numerische Lösung bestimmt wird. Diese Teilstücke heißen für die Finite-Volumen-Methode Kontrollvolumen. Sie füllen das Gebiet vollständig und nicht überlappend aus, d.h. jede Kontrollvolumen-Seite ist den beiden angrenzenden Kontrollvolumen zugeordnet, die sie trennt. Das ist für die Konservativität der Methode wichtig (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

Grundsätzlich wird zwischen strukturierten und unstrukturierten Gittern unterschieden. Bei strukturierten Gittern wird das Rechengebiet im Raum durch drei Flächenscharen geteilt. Sind diese zu den Koordinatenachsen parallel, wird von orthogonalen Netzen gesprochen. Sind die Abstände zwischen allen Parallelverschiebungen der Flächen gleich, sind die Gitter äquidistant.

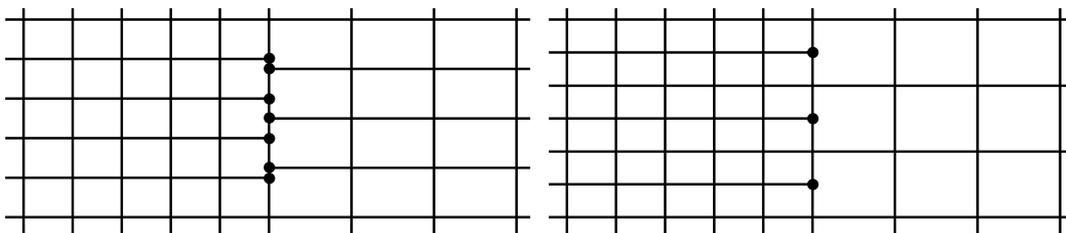


Abbildung 3-8: Beispiele blockstrukturierter Gitter mit hängenden Knoten (●).

Ein Sonderfall bei den strukturierten Gittern sind die blockstrukturierten. Sie sind aus mehreren strukturierten Einzelteilen zusammengesetzt, so dass es zu hängenden Knoten kommen kann. Letztere sind in Abbildung 3-8 dargestellt. In den Kontrollvolumen mit hängenden Knoten kann

es zu Problemen bei der Berechnung des Flusses kommen. Dann ist es möglich, dass die globale Erhaltung der Größen auf dem Rechenggebiet nicht mehr gewährleistet ist (PASCHEDAG, 2004).

Unstrukturierte Gitter werden hauptsächlich aus Tetraedern oder Pentaedern zusammengesetzt, also Prismen, Pyramiden oder eben Tetraedern. Die Mischung der verschiedenen Formen macht es möglich, auch komplizierte Geometrien leicht vernetzen zu können. Letzteres stellt bei strukturierten Gittern oft ein Problem dar und macht die Gittergenerierung sehr aufwendig. Es gibt aber Abweichungen von der Grundform des strukturierten Netzes – auch H-Netz genannt –, nämlich Anpassungen an runde oder dreieckige Formen wie das O-Netz oder das Y-Netz. Diese Sonderformen des strukturierten Netzes zeigt Abbildung 3-9.

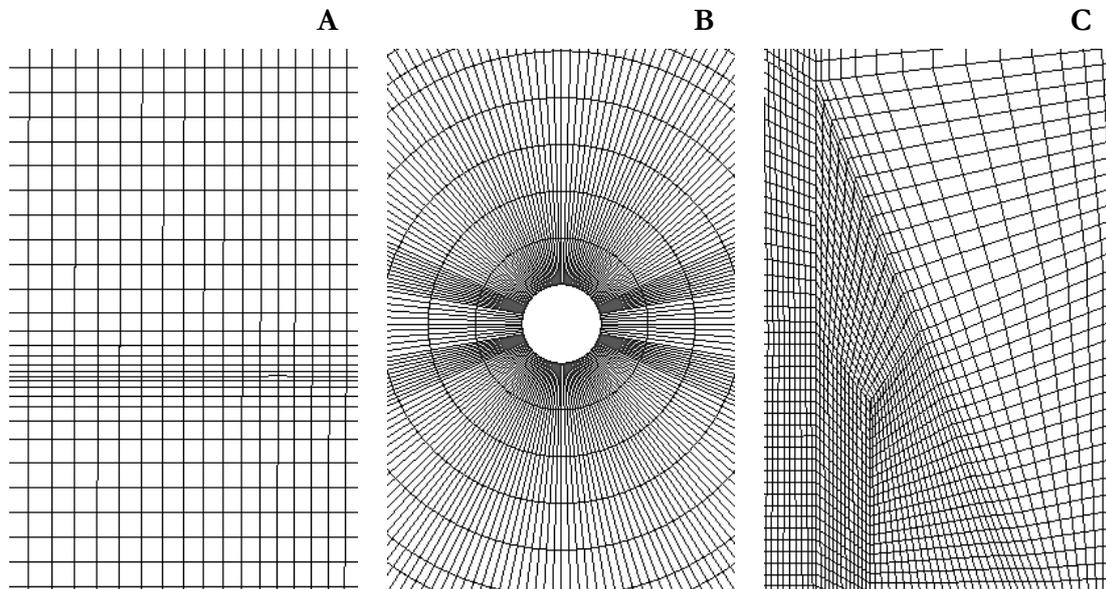


Abbildung 3-9: Unterschiedliche Gitterformen des strukturierten Gitters. H-Gitter (A), O-Gitter (B) und Y-Gitter (C).

Weiterhin lässt sich in manchen Fällen ein strukturiertes Gitter durch Koordinatentransformationen an die Geometrie anpassen. Dann müssen aber auch alle Gleichungen transformiert werden. Das kann teilweise sehr aufwendig sein (PASCHEDAG, 2004).

An ein Gitter werden verschiedene Anforderungen gestellt. Das fängt, wie schon oben erwähnt, damit an, dass die gesamte Geometrie von den Kontrollvolumen bedeckt sein soll, ohne dass sich diese überlappen. Außerdem soll jede Zelle vollständig zum Rechenggebiet gehören. Dafür ist es günstig, wenn die Kanten der Kontrollvolumen mit den Kanten der Geometrie übereinstimmen. In der Regel ist das mit unstrukturierten Gittern am einfachsten zu erreichen.

Als nächstes sollte sich das Netz an der Form der Lösung der partiellen Differentialgleichungen orientieren. Das heißt, in Regionen mit großen Gradienten und starken Krümmungen sollte die

Zelldichte hoch sein, während in den Gebieten, in denen sich die Variablen nicht stark ändern und wo die Kurvenverläufe flach sind, das Netz auch gröber sein kann. Wenn nicht im Voraus bekannt ist, wie sich die zu berechnende Strömung auf dem Lösungsgebiet verhält, kann das Gitter iterativ angepasst werden. Zur Abstimmung des Netzes mit der Lösung gehört auch, dass bei zweiphasigen Rechnungen mit einer freien Oberfläche diese fein aufgelöst wird. Außerdem muss beachtet werden, dass bei Verwendung des Euler-Euler-Modells die Blasen kleiner als die Kontrollvolumina sein sollten, damit die Kontinuumsannahme gemittelter Größen weiterhin Gültigkeit besitzt (MARSCHALL et al., 2011b).

Welcher Gittertyp verwendet werden soll, hängt auch von dem Programm ab, das für die Lösung der Gleichungen benutzt werden soll. Es wird durch die Umsetzung des Algorithmus entschieden, ob ein Löser nur strukturierte oder auch unstrukturierte Netze verarbeiten kann. Generell unterscheiden sich die Netze dadurch, wie die Datenstrukturen abgelegt werden. Strukturierte Gitter können dabei wie unstrukturierte behandelt werden, umgekehrt ist das aber nicht möglich. Zusätzlich entscheidet das verwendete numerische Verfahren darüber, wie groß der Fehler auf dem ausgewählten Gitter ist, da der Diskretisierungsfehler eine Funktion des Gitterabstands ist (vgl. Kapitel 3.3.1 oder 3.4). Die Numerik hat somit auch Einfluss auf die Auswahl des Netzes bzw. seine Feinheit.

Generell ist darauf zu achten, dass das Gitter eine gewisse Qualität hat. Damit ist meist gemeint, dass die Gitterzellen eine möglichst regelmäßige Form haben und die Größenunterschiede zwischen zwei benachbarten Zellen nicht zu groß sein sollen. Bezüglich der Regelmäßigkeit heißt das, dass die Winkel der Kontrollvolumina möglichst nah an denen der regulären Formen liegen sollen, also 90° für Rechtecke und 60° für Dreiecke. Außerdem soll das Seitenlängenverhältnis bei eins liegen (PASCHEDAG, 2004). Wie streng die Kriterien eingehalten werden müssen, hängt vom verwendeten Programm ab. Bei den Winkeln sollten im vorliegenden Fall keine kleineren als 20° auftreten. Das Seitenlängenverhältnis kann zwischen 0,01 und 100 betragen (ANSYS INC., 2010c und 2010f). Kritischer ist die Veränderung der Kantenlängen von zwei benachbarten Zellen in eine Richtung. Ist diese zu groß, kann es zu Oszillationen oder unphysikalischen Sprüngen in der Lösung kommen (PASCHEDAG, 2004). Das Verhältnis der Kantenlängen sollte hier 1,3 nicht übersteigen (ANSYS INC., 2010c).

Für diese Forschungsarbeit wurden ausschließlich strukturierte Gitter ohne hängende Knoten verwendet.

3.3.4 Örtliche Diskretisierung

Für die Beschreibung der Diskretisierungsalgorithmen in der Finiten-Volumen-Methode wird eine spezielle Notation verwendet, die Kompassnotation. Diese ist in Abbildung 3-10 für ein zweidimensionales Gitter zu sehen.

Der betrachtete Rechenpunkt erhält den Namen P und seine direkten Nachbarn im Uhrzeigersinn die Buchstaben N, E, S und W nach den englischen Bezeichnungen der Himmelsrichtungen (*north*, *east*, *south* und *west*). Für den dreidimensionalen Fall werden die Namen um T (engl. *top*) für den oberen und B (engl. *bottom*) für den unter P gelegenen Rechenpunkt erweitert. Die diagonalen Nachbarn werden im Uhrzeigersinn mit NE, SE, SW und NW (engl. *northeast*, *southeast* usw.) bezeichnet. Für die Rechenpunkte der Kontrollvolumina neben den direkt benachbarten werden die Buchstaben jeweils verdoppelt, also NN, EE usw. Die Punkte, an denen die Verbindungen der Stützstellen (gestrichelte Linien in Abbildung 3-10) die Kontrollvolumen-Grenzen schneiden, werden mit den entsprechenden Kleinbuchstaben benannt. Zunächst soll nur der stationäre Fall betrachtet werden. Die Diskretisierung der Zeit wird dann in Kapitel 3.3.6 behandelt.

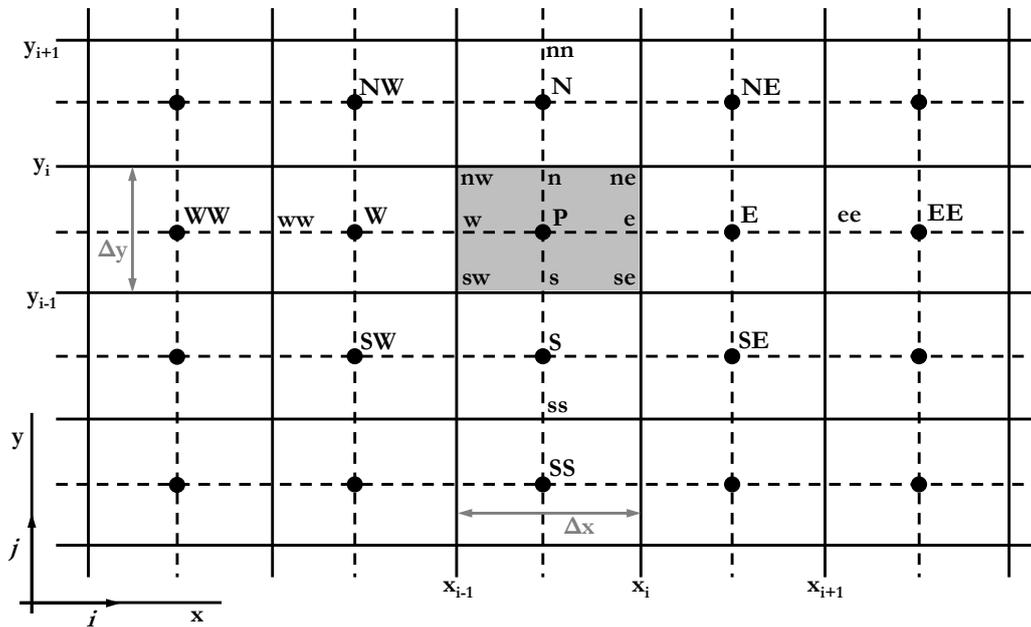


Abbildung 3-10: Finite-Volumen-Nomenklatur für ein zweidimensionales Gitter (modifiziert nach PASCHE-DAG, 2004). Das betrachtete Kontrollvolumen ist grau hinterlegt.

Der Einfachheit halber werden die Ableitungen der Diskretisierungen für äquidistante, eindimensionale Gitter aufgeführt. Die Rechenpunkte liegen hier genau im Mittelpunkt der Kontrollvolumina. Die Nomenklatur für den eindimensionalen Fall findet sich in Abbildung 3-11.

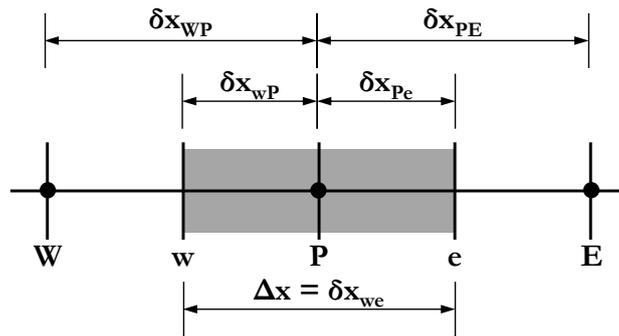


Abbildung 3-11: Finite-Volumen-Nomenklatur für ein eindimensionales System (modifiziert nach PASCHEDAG, 2004). Das betrachtete Kontrollvolumen ist grau hinterlegt.

Für höhere Dimensionen und variable Gitterabstände sind die Diskretisierungen analog herzuleiten. Zunächst werden die einzelnen Terme der allgemeinen Integralform der Erhaltungsgleichung (Gleichung (3-53)) separat diskretisiert. Um die vollständige Diskretisierung zu erhalten, können die Einzelteile einfach wieder zusammengefügt werden (PASCHEDAG, 2004).

Zunächst soll die Diskretisierung der diffusiven Terme betrachtet werden, also des ersten Terms auf der rechten Seite von Gleichung (3-53).

$$0 = \iint_{A_{KV}} \Gamma \nabla \phi \cdot \mathbf{n} \, dA \quad (3-54)$$

Dieses Integral wird nun in Teile zerlegt, die die Flüsse über die jeweiligen Zellflächen beschreiben.

$$0 = \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w \quad (3-55)$$

Die Flächen A sind durch das Gitter vorgegeben, der molekulare Transportkoeffizient Γ ist in den meisten Fällen bekannt bzw. kann bei einer Abhängigkeit von ϕ durch Iteration bestimmt werden. Dann müssen nur die Ableitungen von ϕ ersetzt werden. Dies geschieht so, dass in der neuen Gleichung nur Werte von ϕ an den Stützstellen enthalten sind (PASCHEDAG, 2004).

$$\left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e = \Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) \quad \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w = \Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right) \quad (3-56)$$

Für die Substitution der Ableitungen wurde ein zentraler Differenzenquotient gewählt, da es bei Diffusionstermen sinnvoll ist, dass der Wert von den Nachbarzellen gleichermaßen abhängt. Nach Einsetzen und Umformen wird Gleichung (3-55) zu (PASCHEDAG, 2004)

$$\left(\frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{PE}} + \frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{WP}} \right) \phi_P = \left(\frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{WP}} \right) \phi_W + \left(\frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{PE}} \right) \phi_E. \quad (3-57)$$

Werden dann die Konstanten zu Koeffizienten zusammengefasst

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E \quad (3-58)$$

und miteinander verglichen, wird klar, dass

$$a_P = a_W + a_E. \quad (3-59)$$

Die Beziehung (3-59) gilt in dieser Form auch bei höherdimensionalen Systemen und auch, wenn später die konvektiven Terme dazu genommen werden (PASCHEDAG, 2004).

Die Diskretisierung des Quellterms bzw. des zweiten Terms auf der rechten Seite von Gleichung (3-53) wird nun gezeigt.

$$0 = \iiint_{V_{KV}} q_\phi \, dV \quad (3-60)$$

Weil bei der Diskretisierung der Quellen wie für alle Variablen ein gemittelter Wert für das ganze Kontrollvolumen verwendet wird, kann das Integral in Gleichung (3-60) einfach ersetzt werden.

$$\iiint_{V_{KV}} q_\phi \, dV = \bar{q}_\phi V_{KV} \quad (3-61)$$

Da die mittlere Quellstärke oft von ϕ abhängt, wird sie durch einen linearen Ansatz beschrieben. Der Ansatz muss linear sein, damit am Schluss auch ein lineares Gleichungssystem erhalten wird. Nichtlineare Abhängigkeiten können iterativ behandelt werden (PASCHEDAG, 2004).

$$\bar{q}_\phi = Q_U + Q_P \phi_P \quad (3-62)$$

Der Faktor Q_P muss in physikalisch stabilen Systemen negativ sein, damit nicht mit zunehmender Quellstärke ϕ noch stärker ansteigt. Q_U ist eine Konstante.

Nun soll die Diskretisierung des konvektiven Terms erläutert werden. Dies ist der Term auf der linken Seite von Gleichung (3-53). Auch hier wird nur ein eindimensionales System betrachtet.

$$0 = \iint_{A_{KV}} \rho \phi u \cdot \mathbf{n} \, dA \quad (3-63)$$

Die Zerlegung des Integrals erfolgt analog wie für die diffusiven Terme, so dass danach die konvektiven Flüsse über die Kontrollvolumengrenzen ermittelt werden müssen.

$$0 = (\mu A \phi)_e - (\mu A \phi)_w \quad (3-64)$$

Die Geschwindigkeit wird zunächst als bekannt vorausgesetzt. Wie Gleichungen zu handhaben sind, bei denen ϕ und \mathbf{v} voneinander abhängen – wie im Fall der Impulsgleichung, wo $\phi = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$, wird später erklärt.

Bei konvektiven Termen ist die Abschätzung von ϕ an der Kontrollvolumengrenze nicht mehr so eindeutig wie bei den diffusiven Termen (PASCHEDAG, 2004). Je nach Fall werden unterschiedliche Ansätze verwendet, von denen im Folgenden die verwendeten vorgestellt werden. Ausführlichere Informationen auch zu weiteren Interpolations- und Differentiationsmethoden finden sich z.B. in PATANKAR (1980).

Aufwind-Interpolation

Die Aufwind-Interpolation – auch Aufwinddifferenz oder *Upwind-Verfahren* (von engl. *upwind differencing*) genannt – ist ein einfaches, robustes, nichtoszillierendes Verfahren erster Ordnung, das als einziges bedingungslos beschränkte Lösungen produziert. Der jeweilige Variablenwert ϕ ist hier abhängig von der Strömungsrichtung (FERZIGER und PERIĆ, 2008):

$$\begin{aligned} \phi_e &= \phi_P & \text{für } (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_e > 0 \\ \phi_e &= \phi_E & \text{für } (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_e < 0. \end{aligned} \quad (3-65)$$

Dieses Verfahren wurde für konvektionsdominierte Prozesse erdacht, bei denen der Einfluss des stromaufwärts liegenden Knotens deutlich stärker ist als der des stromabwärts liegenden. Das Prinzip dieser Methode ist in Abbildung 3-12 verdeutlicht.

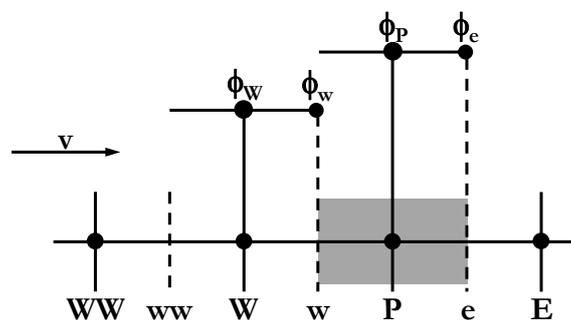


Abbildung 3-12: Aufwind-Interpolation erster Ordnung für konvektionsdominierte Strömungen (modifiziert nach PASCHEDAG, 2004). Das betrachtete Kontrollvolumen ist grau hinterlegt.

Der Nachteil dieser Methode ist, dass sie numerisch diffusiv ist. Das heißt, ihr führender Abbruchfehlerterm ähnelt einem diffusiven Fluss. Dies wird deutlich, wenn die Taylorreihenentwicklung um den Punkt P für $(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_e > 0$ betrachtet wird (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

$$\phi_e = \phi_P + \delta x_{Pe} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_P + \frac{\delta x_{Pe}^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_P + H \quad (3-66)$$

Hier bezeichnet H die Terme höherer Ordnung. Das Aufwind-Verfahren enthält nur den ersten Term auf der rechten Seite, deshalb ist es ein Verfahren erster Ordnung. Nun wird auch klar, warum der führende Abbruchfehlerterm ε_{nd} sich diffusiv verhält:

$$\varepsilon_{nd} = \left(\Gamma_{nd} \frac{d\phi}{dx} \right)_e. \quad (3-67)$$

Der Koeffizient der numerischen Diffusion Γ_{nd} auch künstliche oder falsche Diffusion genannt, ist (FERZIGER und PERIĆ, 2008):

$$(\Gamma_{nd})_e = (\rho u)_e \frac{\Delta x}{2}. \quad (3-68)$$

Die numerische Diffusion wird in mehrdimensionalen Problemen verstärkt, wenn die Strömung diagonal zum Gitter verläuft. Dann wird sowohl normal zur Strömung als auch in Strömungsrichtung falsche Diffusion erzeugt. Weil die Rate der Fehlerreduzierung nur erster Ordnung ist, müssen sehr feine Gitter verwendet werden, um mit dieser Methode exakte Lösungen zu erhalten.

Die nächste präsentierte Diskretisierungsmethode für den konvektiven Term in Gleichung (3-53) basiert ebenfalls auf dem Prinzip stromaufwärts gelegene Stützstellen für die Beschreibung zu verwenden. Sie hat allerdings eine Fehlerordnung von zwei.

Lineare Aufwind-Approximation

Die lineare Aufwind-Approximation (engl. *linear upwind differencing*, LUD) ist eine Interpolation des Knotenwertes, bei der nicht ein der Stützstelle direkt benachbarter Punkt für die Interpolation verwendet wird, sondern zwei stromaufwärts liegende Rechenpunkte.

$$\begin{aligned} \phi_e &= \phi_P + 0,5(\phi_P - \phi_W) & \text{für } (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_e > 0 \\ \phi_e &= \phi_E + 0,5(\phi_E - \phi_{EE}) & \text{für } (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_e < 0 \end{aligned} \quad (3-69)$$

Dies zeigt die Abbildung 3-13. Diese Methode hat eine Genauigkeit zweiter Ordnung und kann nicht beschränkte Lösungen produzieren. Wie das Aufwind-Verfahren erster Ordnung ist es absolut stabil (SOKOLICHIN, 2004).

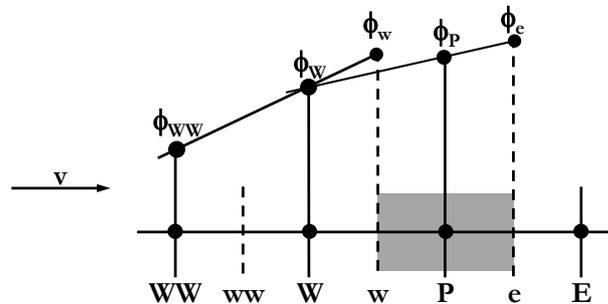


Abbildung 3-13: Lineare Aufwind-Approximation zweiter Ordnung für konvektionsdominierte Strömungen (modifiziert nach SOKOLICHIN, 2004). Das betrachtete Kontrollvolumen ist grau hinterlegt.

Sollen die Vorteile beider bisher vorgestellten Verfahren verbunden werden, kommen Hybridverfahren zum Einsatz.

Hybridverfahren

Um die Eigenschaften der Lösung zu verbessern und trotzdem den numerischen Aufwand in Grenzen zu halten, können zwei Diskretisierungsverfahren zu einem Hybridverfahren kombiniert werden, z.B. wie im vorliegenden Fall Aufwind-Diskretisierungen erster und zweiter Ordnung.

Die Diskretisierung erfolgt nach folgendem Schema:

$$\phi_e = \phi_U + \beta \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_e. \quad (3-70)$$

β ist ein Wichtungsfaktor, der zwischen 0 und 1 liegt. Für $\beta = 0$ entspricht das Verfahren der Aufwind-Interpolation erster Ordnung. Der zweite Term auf der rechten Seite von Gleichung (3-70) kann als Korrekturterm für die numerische Diffusion angesehen werden. Ist $\beta = 1$, hat das Schema formal eine Ordnung von 2. Für ein festgelegtes β ist das Schema aber – obwohl genauer als das erster Ordnung – nicht begrenzt und kann Oszillationen in der Lösung hervorrufen.

Anstatt β auf dem gesamten Rechengebiet fest vorzugeben, kann es auch basierend auf dem lokalen Lösungsfeld durch das Computerprogramm bestimmt werden. Wie β und der gesamte Korrekturterm genau ermittelt werden, ist nicht zugänglich (ANSYS INC., 2010f). In Bereichen starker Gradienten wird aber eher die Aufwind-Interpolation erster Ordnung benutzt, um Über- und

Unterschwingen der Lösung zu vermeiden, und in Gebieten mit flachem Lösungsverlauf wird aus Gründen der Genauigkeit die Methode zweiter Ordnung verwendet (ANSYS INC., 2010e).

In Tabelle 3-1 werden noch einmal alle drei vorgestellten Diskretisierungen des konvektiven Terms verglichen.

Aufgrund der Vor- und Nachteile wird für die Diskretisierung des konvektiven Terms in dieser Forschungsarbeit das Hybridverfahren zweiter Ordnung mit lokal angepasstem Wichtungsfaktor β benutzt, da es robust und stabil ist und beschränkte Lösungen produziert. Außerdem bietet es aufgrund der Fehlerordnung von zwei den Vorteil, dass die Netze nicht so fein sein müssen wie für eine Methode erster Ordnung.

Tabelle 3-1: Vergleich der vorgestellten Diskretisierungen des konvektiven Terms in Gleichung (3-53).

	Vorteile	Nachteile
Aufwind-Interpolation	stabil nichtoszillierend beschränkt robust	1. Ordnung starke numerische Diffusion
Lineare Aufwind-Approximation	2. Ordnung stabil	nicht beschränkt oszillierend wenig robust numerische Diffusion
Hybridverfahren mit veränderlichem β	2. Ordnung robust stabil beschränkt	wenig numerische Diffusion oszillierend

Druck-Geschwindigkeitskopplung

Wenn die Finite-Volumen-Methode für die Lösung von Geschwindigkeitsfeldern verwendet werden soll, ergibt sich das Problem, dass das mit den oben beschriebenen Diskretisierungen entstehende Gleichungssystem nicht mehr linear ist. Außerdem steht in der Impulsbilanz der Gradient des Drucks, für den es keine eigene Gleichung zur Bestimmung gibt.

Die erste Schwierigkeit kann dadurch behoben werden, dass das Geschwindigkeitsfeld iterativ ausgehend von einer ersten Schätzung gelöst wird. Ob die Lösung konvergiert und wie viel numerischer Aufwand dafür nötig ist, hängt von den Anfangswerten ab.

Für kompressible Strömungen ist eine Gleichung zur Berechnung des Druckes mit den Zustandsgleichungen schnell gefunden. Da diese den Druck mit der Dichte, die auch in der Konti-

nuitätsgleichung vorkommt, in Beziehung setzen, kann das System – obwohl nichtlinear und stark gekoppelt – gelöst werden (PASCHEDAG, 2004).

Wenn die Strömung jedoch inkompressibel ist, enthält die Kontinuitätsgleichung die Dichte nicht, und es kann keine Kopplung des Drucks mit der Geschwindigkeit über die Dichte geben. Weil mit der Kontinuitätsgleichung nicht mehr die Dichte bestimmt werden muss, kann sie für die Berechnung des Druckes herangezogen werden. Sie wird also zur druckbestimmenden Gleichung. Das lässt sich so verstehen, dass der Druck so ermittelt werden muss, dass das Geschwindigkeitsfeld, das mit diesem Druck aus der Impulsbilanz entsteht, die Massenbilanz erfüllt. Dabei ist zu beachten, dass bei inkompressiblen Strömungen der absolute Druck unwichtig ist. Nur die Druckdifferenz beeinflusst die Strömung (FERZIGER und PERIĆ, 2008). Deshalb muss an einer Stelle des Rechengebietes der Absolutdruck vorgegeben werden (PASCHEDAG, 2004).

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, den Druck bei inkompressiblen Strömungen zu ermitteln. Übersichten sind z.B. in FERZIGER und PERIĆ (2008) oder PASCHEDAG (2004) zusammengestellt. Im vorliegenden Fall wird die Druck-Geschwindigkeitskopplung nach RHIE und CHOW (1983) verwendet. In dieser Methode werden Impuls- und Massenbilanz kombiniert und dann entsprechend diskretisiert, um den Druck und die Geschwindigkeit zu verbinden. Mehr Details dazu finden sich in RHIE und CHOW (1983).

3.3.5 Randbedingungen

Jedes Kontrollvolumen liefert durch die Diskretisierung eine algebraische Gleichung. Das daraus entstehende Gleichungssystem ist so lange nicht geschlossen, wie die Flüsse durch die Seiten der am Rand des Rechengebietes gelegenen Kontrollvolumina nicht bekannt sind oder diese sich nicht durch die inneren Werte darstellen lassen. Weil es keine Rechenpunkte außerhalb des Randes gibt, müssen zur Diskretisierung der Flüsse durch den Rand des Rechengebietes einseitige Differenzen oder Interpolationen verwendet werden.

In der Regel werden konvektive Flüsse an Einlässen vorgegeben. An Auslässen wird normalerweise angenommen, dass die Ableitungen aller Variablen in Strömungsrichtung gleich null sind. An undurchlässigen Wänden und Symmetrieebenen sind die konvektiven Flüsse und bei letzteren auch die Gradienten senkrecht zur Symmetrieebene gleich null (Neumann-Randbedingung) (FERZIGER und PERIĆ, 2008). An Wänden mit Haftbedingung ist die Geschwindigkeit des Fluids an der Wand gleich der Geschwindigkeit der Wand (Dirichlet-Randbedingung), bei Wänden ohne

Haftbedingung hat das Fluid entlang der Wand eine finite Geschwindigkeit, aber die Fluidgeschwindigkeit senkrecht zur Wand und die Wandschubspannung sind null (ANSYS INC., 2010f).

Für mehrphasige Systeme gelten an den Phasengrenzen von nicht-dispersen Systemen besondere Randbedingungen. Zunächst gibt es die kinematische Randbedingung. Sie besagt, dass die freie Oberfläche eine scharfe Grenze zwischen beiden Fluiden ohne Durchfluss ist (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

$$[(\mathbf{v} - \mathbf{v}_{KV}) \cdot \mathbf{n}]_{fo} = 0 \quad (3-71)$$

mit \mathbf{v} Vektor der Fluidgeschwindigkeit, m s^{-1}
 \mathbf{v}_{KV} Vektor der Geschwindigkeit, mit der sich das Kontrollvolumen bewegt, m s^{-1}
 \mathbf{n} Einheitsvektor senkrecht zur Phasengrenzfläche, -

Der Index „fo“ bezeichnet hier die freie Oberfläche. Diese Randbedingung besagt, dass die Fluidgeschwindigkeit in Richtung der Normalen der freien Oberfläche gleich der Geschwindigkeit ist, mit der sich die freie Oberfläche in diese Richtung bewegt (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

Dann gibt es die dynamische Randbedingung, die verlangt, dass die Kräfte, die auf das Fluid an der Phasengrenzfläche wirken, im Gleichgewicht sind. Also besitzen die normalen Kräfte auf jeder Seite der freien Oberfläche den gleichen Betrag, aber die entgegengesetzte Richtung, während die tangentialen Kräfte den gleichen Betrag und die gleiche Richtung haben (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

3.3.6 Zeitliche Diskretisierung

Bisher wurde nur die Diskretisierung für stationäre Strömungen vorgestellt. Bei instationären Problemen muss eine vierte Dimension, nämlich die Zeit, mitberücksichtigt werden. Diese wird im Prinzip wie der Raum diskretisiert. Allerdings unterscheiden sich Raum- und Zeitkoordinaten in ihrer Wirkungsrichtung. Einflüsse auf die Strömung zu einem gewissen Zeitpunkt haben nur Folgen für ihre zukünftige Entwicklung, nicht auf die Vergangenheit. Im Raum kann eine Störung die Strömung überall beeinflussen. Da es keinen rückwirkenden Einfluss der Zeit gibt, können außer den Anfangsbedingungen zu späteren Zeitpunkten nur noch Randbedingungen vorgegeben werden (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

In Abschnitt 3.3.4 wurden die Diskretisierungen für diffusive und konvektive Flüsse im Raum für zeitunabhängige Probleme dargestellt. Sie können genauso für instationäre Strömungen angewandt werden. Es muss nur festgelegt werden, für welchen Zeitschritt (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

Die Diskretisierung der Zeit soll wieder anhand eines räumlich eindimensionalen Falls hergeleitet werden. Die Erweiterung auf höhere Dimensionen und mehr Terme erfolgt wie bei der örtlichen Diskretisierung. Die betrachtete Gleichung – die instationäre Diffusionsgleichung – lautet (PASCHEDAG, 2004)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right). \quad (3-72)$$

Das betrachtete Kontrollvolumen soll im Raum wieder von w bis e reichen (vgl. Abbildung 3-11), und die zeitliche Diskretisierung wird von t bis $t + \Delta t$ durchgeführt. Die Reihenfolge der Integration ist egal.

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial \phi}{\partial t} dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dt \quad (3-73)$$

Weil ϕ innerhalb einer Zelle – und deshalb auch die Ableitung von ϕ nach der Zeit – konstant ist, kann die linke Seite der obigen Gleichung einfach aufgelöst werden (PASCHEDAG, 2004).

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial \phi}{\partial t} dt dx = \delta x_{we} (\phi_P^{t+\Delta t} - \phi_P^t) \quad (3-74)$$

Das Raumintegral auf der rechten Seite von Gleichung (3-73) wird – wie in Kapitel 3.3.4 beschrieben – umgeformt.

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dt = \int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\Gamma_e (\phi_E - \phi_P)}{\delta x_{PE}} - \frac{\Gamma_w (\phi_P - \phi_W)}{\delta x_{WP}} \right) dt \quad (3-75)$$

Für die Auflösung des Zeitintegrals soll zunächst nur eine Funktion der Zeitschritte t und $t + \Delta t$ verwendet werden.

Im Folgenden wird ausschließlich die verwendete zeitliche Diskretisierung – das implizite Euler-Verfahren – vorgestellt. Weitere Möglichkeiten zur zeitlichen Diskretisierung finden sich z.B. in PASCHEDAG (2004) und FERZIGER und PERIĆ (2008).

Im impliziten (Rückwärts-) Euler-Verfahren wird ein Zeitintegral unter Zuhilfenahme der Zeitschritte t und $t + \Delta t$ folgendermaßen aufgelöst (PASCHEDAG, 2004)

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi_P dt = \phi_P^{t+\Delta t} \Delta t. \quad (3-76)$$

Damit wird aus Gleichung (3-75) bzw. Gleichung (3-73)

$$\frac{\delta x_{ne}}{\Delta t} (\phi_P^{t+\Delta t} - \phi_P^t) = \left(\frac{\Gamma_e (\phi_E^{t+\Delta t} - \phi_P^{t+\Delta t})}{\delta x_{PE}} - \frac{\Gamma_w (\phi_P^{t+\Delta t} - \phi_W^{t+\Delta t})}{\delta x_{WP}} \right). \quad (3-77)$$

Der Wert im Punkt P zum neuen Zeitschritt hängt also vom Wert im Punkt P zum alten Zeitschritt und von den Werten der Nachbarpunkte zum neuen Zeitschritt ab. Dies ist in Abbildung 3-14 verdeutlicht.

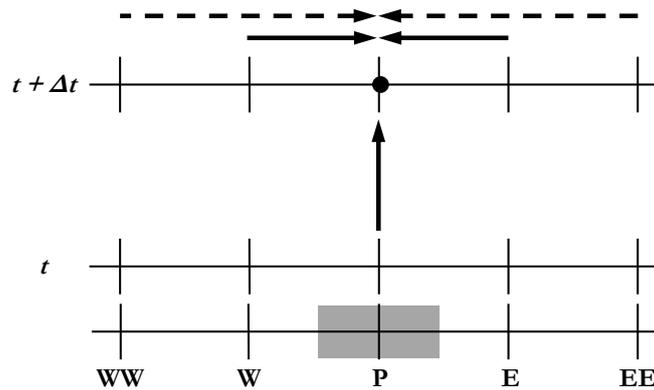


Abbildung 3-14: Herkunft der Werte bei impliziten Diskretisierungen der Zeit (modifiziert nach PASCHEDAG, 2004). Verfahren erster Ordnung: \longrightarrow . Verfahren zweiter Ordnung: \dashrightarrow .

Dieses Verfahren ist erster Ordnung und unbedingt stabil. Damit sind beliebig große Zeitschritte Δt erlaubt. Außerdem ist die Methode beschränkt und konservativ in Bezug auf die Zeit (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

Da das Verfahren aber nur eine Genauigkeit erster Ordnung hat, entsteht – ähnlich wie bei der Aufwind-Approximation erster Ordnung – ein Fehler, der sich diffusiv verhält. Um dies zu umgehen, kann ein weiter zurückliegender Zeitschritt $t - \Delta t$ hinzugenommen werden (ANSYS INC., 2010f). Dann entsteht ein so genanntes Drei-Ebenen-Modell (FERZIGER und PERIĆ, 2008) und Gleichung (3-76) wird zu

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi_P dt = (1,5 \phi_P^{t+\Delta t} - 2 \phi_P^t + 0,5 \phi_P^{t-\Delta t}) \Delta t. \quad (3-78)$$

Dieses Schema ist zweiter Ordnung in Bezug auf die Zeit und ebenso stabil und konservativ und kommt mit beliebigen Zeitschritten zurecht wie das Verfahren erster Ordnung. Allerdings ist es nicht mehr begrenzt und kann oszillieren.

Obwohl implizite Verfahren für alle gewählten Zeitschritte stabil sind, soll trotzdem kurz auf die Stabilitätskriterien für explizite Verfahren eingegangen werden. Bei expliziten Verfahren hängt

der Wert im Punkt P zum neuen Zeitschritt nur von den Werten der Nachbarpunkte des alten Zeitschritts ab. Für konvektionsdominierte Prozesse muss bei einer expliziten zeitlichen Diskretisierung für jedes Kontrollvolumen die Courant-Zahl CFL kleiner als eins sein. Dies wird Courant-Friedrichs-Lewy-Kriterium genannt (COURANT et al., 1928). Die Courant-Zahl CFL ist folgendermaßen definiert (FERZIGER und PERIĆ, 2008):

$$\text{CFL} = \frac{u \Delta t}{\Delta x} \quad (3-79)$$

mit u charakteristische Geschwindigkeit, m s^{-1}
 Δt Zeitschritt, s
 Δx Gitterabstand, m.

Anschaulich entspricht die Courant-Zahl der Anzahl an Zellen, die ein Fluidelement während eines Zeitschritts durchströmt. Und auch wenn für implizite Verfahren die Courant-Zahl nicht unterhalb einer bestimmten Grenze liegen muss, lässt sich doch mit ihrer Hilfe abschätzen, welche Zeitschritte noch akzeptabel sind, um physikalisch sinnvolle Ergebnisse zu erhalten. Es gibt Verfahren zur Zeitdiskretisierung, die lokale Courant-Zahlen von etwa 100 tolerieren, aber generell sollte die Courant-Zahl den Wert 5 bis 10 nicht überschreiten (PASCHEDAG, 2004).

Für die zeitliche Diskretisierung von instationären Termen wird in dieser Arbeit das implizite Euler-Verfahren zweiter Ordnung verwendet.

3.3.7 Direkte numerische Simulation (DNS)

Bei der direkten numerischen Simulation muss das verwendete räumliche Gitter – und bei instationären Rechnungen auch der Zeitschritt – so fein sein, dass alle räumlichen Strukturen (und zeitlichen Veränderungen) abgebildet werden können. Bei turbulenten Strömungen bedeutet das, dass alle Wirbelstrukturen bis hin zur Kolmogorov-Länge l_k aus Gleichung (3-13) erfasst werden müssen, weil diese für die ganze Strömung eine große Bedeutung haben. Gleichzeitig darf für instationäre Rechnungen die Courant-Zahl (vgl. Abschnitt 3.3.6) nicht größer als eins sein, d.h. ein Fluidelement der Länge l_k legt während eines Zeitschritts maximal den Weg durch ein Kontrollvolumen zurück (VERSTEEG und MALALASEKERA, 2007).

Für technische Strömungen ist die direkte numerische Simulation wegen des hohen Rechenaufwands zum Zeitpunkt des Entstehens dieser Arbeit weder möglich noch sinnvoll. Denn meist interessieren Größen wie eine Geschwindigkeitsverteilung oder ein Massenstrom, aber nicht die räumliche und zeitliche Verteilung der turbulenten Schwankungsbewegung (HERWIG, 2006).

Um dennoch Strömungen numerisch simulieren zu können – jedoch ohne die feinsten Raum- und Zeitskalen auflösen zu müssen – werden die Grundgleichungen einer Zeitmittelung unterzogen, so dass die Turbulenz als Summe einer mittleren Bewegung und einer überlagerten Schwankungsbewegung dargestellt werden kann. Dann allerdings muss die Turbulenz modelliert werden, was im nächsten Kapitel 3.3.8 beschrieben wird.

3.3.8 Turbulenzmodellierung

Für die im vorigen Kapitel erwähnte Zeitmittelung der Strömungsgrößen ist die Zerlegung einer beliebigen Strömungsgröße ϕ in einen zeitunabhängigen Mittelwert und einen Schwankungswert nötig (HERWIG, 2006).

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (3-80)$$

mit $\bar{\phi}$ Mittelwert der Strömungsgröße ϕ
 ϕ' Schwankungswert der Strömungsgröße ϕ

Dann finden sich die zeitlichen Schwankungen der Hauptströmung im Mittelwert und die turbulenten Schwankungen im Schwankungswert wieder.

Die konventionelle Mittelung von ϕ lautet (HERWIG, 2006)

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi \, dt \quad \overline{\phi'} = 0. \quad (3-81)$$

Für Strömungen mit einer veränderlichen Dichte ρ kann es von Vorteil sein, diese ebenfalls in die Mittelung einzubeziehen. Dann kommt es zu einer massengewichteten Mittelung. Für eine konstante Dichte sind beide Mittelungen gleich (HERWIG, 2006).

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\bar{\rho} \Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi \rho \, dt \quad \overline{\rho \phi'} = 0 \quad (3-82)$$

Um die Gleichungen aus Abschnitt 3.2 über die Zeit zu mitteln, müssen zunächst die Momentangrößen ϕ durch die Summe aus Mittelwert und Schwankungswert ersetzt werden. Dann erfolgt die Mittelung der Bilanz nach Gleichung (3-81) bzw. (3-82). Für die Mittelungen gelten die folgenden Regeln (HERWIG, 2006):

$$\overline{\bar{\phi}} = \bar{\phi} \quad \overline{\phi + \varphi} = \bar{\phi} + \bar{\varphi} \quad \overline{\phi \varphi} = \bar{\phi} \bar{\varphi} \quad \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} = \bar{\frac{\partial \phi}{\partial x}} \quad (3-83)$$

Die so entstehenden Gleichungen werden oft nach dem englischen *Reynolds averaged Navier Stokes*, als RANS-Gleichungen bezeichnet. Für den instationären Fall heißen sie URANS (engl. *unsteady Reynolds averaged Navier Stokes*).

Durch die Mittelung entstehen aber nicht nur Gleichungen mit den Mittelwerten. Überall wo nichtlineare Terme oder Produkte in den Bilanzgleichungen auftreten, erscheinen zusätzliche Terme in den gemittelten Gleichungen. Die Kontinuitätsgleichung (3-33) bleibt in ihrer ursprünglichen Form bis auf die Verwendung der Mittelwerte erhalten (HERWIG, 2006).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \nabla \bar{\mathbf{v}} = 0 \quad (3-84)$$

Bei der Impulsbilanz kommen aber nach der Mittelung neun neue Terme vor, die als zusätzliche Spannungen interpretiert werden können. Sie werden im turbulenten (oder Reynoldsschen) Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}_t$ zusammengefasst (HERWIG, 2006).

$$\rho \frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial t} + \rho \bar{\mathbf{v}} \nabla \bar{\mathbf{v}} = \nabla \boldsymbol{\tau}_t + \eta \nabla^2 \bar{\mathbf{v}} - \nabla \bar{p} + \rho \mathbf{g} \quad (3-85)$$

mit

$$\boldsymbol{\tau}_t = \begin{pmatrix} \overline{\rho v'_x v'_x} & \overline{\rho v'_x v'_y} & \overline{\rho v'_x v'_z} \\ \overline{\rho v'_y v'_x} & \overline{\rho v'_y v'_y} & \overline{\rho v'_y v'_z} \\ \overline{\rho v'_z v'_x} & \overline{\rho v'_z v'_y} & \overline{\rho v'_z v'_z} \end{pmatrix} \quad (3-86)$$

Aus der gemittelten Impulsbilanz (3-85) lässt sich der Zusammenhang für die kinetische Energie der Strömung ableiten, wenn die Impulsbilanz in x -Richtung mit \bar{u} , die Impulsbilanz in y -Richtung mit \bar{v} und die Impulsbilanz in z -Richtung mit \bar{w} multipliziert und dann alle Gleichungen addiert werden. Dann ergibt sich nach Umformungen als Erhaltungsgleichung für die kinetische Energie der Strömung unter Vernachlässigung von Volumenkräften (VERSTEEG und MALALASEKERA, 2007)

$$\frac{\partial(\rho e_{kin})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j e_{kin})}{\partial x_j} = - \frac{\partial(u_j p)}{\partial x_j} + 2\eta \frac{\partial(u_j \overline{\mathbf{s}_{ij}})}{\partial x_j} + \frac{\partial(u_j \overline{\boldsymbol{\tau}_{t,ij}})}{\partial x_j} - 2\eta \overline{\mathbf{s}_{ij}} \cdot \overline{\mathbf{s}_{ij}} + \overline{\boldsymbol{\tau}_{t,ij}} \cdot \overline{\mathbf{s}_{ij}} \quad (3-87)$$

(I) (II) (III) (IV) (V) (VI) (VII)

mit dem Tensor der Verformungsrate

$$\underline{\mathbf{s}}_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) & \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} \right) & \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \end{pmatrix}. \quad (3-88)$$

Die einzelnen Terme in Gleichung (3-87) stehen für (KOCK, 2003)

die zeitliche Änderung der kinetischen Energie der Strömung e_{kin} (I),

den konvektiven Transport von e_{kin} (II),

den Transport von e_{kin} durch Druckunterschiede (III),

die molekulare Diffusion von e_{kin} (IV),

die turbulente Diffusion von e_{kin} (V),

die direkte Dissipation von e_{kin} (VI) und

den dissipativen Anteil von e_{kin} , der zur Turbulenzbildung beiträgt (VII).

Die turbulenten Zusatzterme, die in den Gleichungen (3-85) und (3-87) auftauchen, sind zusätzliche Unbekannte des Gleichungssystems, so dass mehr Unbekannte als Gleichungen vorhanden sind. Dies wird als Schließungsproblem der Turbulenz bezeichnet. Weil die Zusatzgleichungen nicht vollständig aus den Grundgleichungen abgeleitet werden können, werden teilweise empirische Modellvorstellungen zur Beschreibung der Turbulenz und ihrer Wirkung, die so genannten Turbulenzmodelle, verwendet.

In den Bilanzen treten nach der Mittelung neun turbulente Terme auf, die modelliert werden müssen. Selbst wenn der turbulente Spannungstensor symmetrisch ist und nur sechs neue Terme dazu kommen, ist der Rechenaufwand beträchtlich. Werden die einzelnen Terme des Reynoldsschen Spannungstensors direkt modelliert, wird dies Reynolds-Spannungs-Modell (RSM, engl. *Reynolds stress model*) genannt. Soll der höhere Rechenaufwand vermieden werden, wird häufig der Ansatz der Wirbelviskosität (engl. *eddy viscosity*) zur Turbulenzmodellierung verwendet. Dann gilt (ANSYS INC., 2010f)

$$\eta_{eff} = \eta + \eta_t \quad (3-89)$$

mit η_{eff} effektive Viskosität, mPa s

η dynamische Viskosität, mPa s

η_t Wirbelviskosität, mPa s.

Bei Verwendung von Wirbelviskositätsmodellen muss die Viskosität in den Gleichungen (3-85) und (3-87) durch die effektive Viskosität aus Gleichung (3-89) ersetzt werden.

Die Wirbelviskosität η_t wird analog zum Newtonschen Reibungsgesetz (3-2) als Strömungsgröße definiert (HERWIG, 2006).

$$\tau_t = \eta_t \frac{d\bar{u}}{dy} \quad (3-90)$$

Der wichtigste Unterschied zwischen der dynamischen Viskosität η und der Wirbelviskosität η_t ist, dass erstere ein Stoffwert ist, der für newtonsche Fluide hauptsächlich von der Temperatur abhängt. Die Wirbelviskosität ist aber eine Strömungsgröße, die auf dem Rechengebiet sehr unterschiedliche Werte annehmen kann. Durch die Wirbelviskosität werden die Turbulenzeigenschaften beschrieben. Da sie keinerlei Richtungsabhängigkeit besitzt, wird auch von einem isotropen Wirbelviskositätsmodell gesprochen. Wirbelviskositätsmodelle unterscheiden sich dadurch, auf welche Weise die Wirbelviskosität beschrieben wird. Je nach der Anzahl der partiellen Differentialgleichungen, die zusätzlich gelöst werden müssen, werden sie in Null-, Ein- und Zwei-Gleichungs-Modelle eingeteilt. Sehr oft werden Zwei-Gleichungs-Modelle verwendet. Zu ihnen zählen beispielsweise das k - ε -Modell oder das k - ω -Modell (HERWIG, 2006). Im vorliegenden Fall wird ebenfalls ein Zwei-Gleichungs-Modell verwendet, nämlich das Scherspannungstransport- oder SST-Modell (engl. *shear stress transport*) nach Menter (MENTER, 2009; MENTER et al., 2003; MENTER, 1994).

Das SST-Modell ist eine Mischform von k - ε - und k - ω -Modell. In der Nähe von Wänden wird das k - ω -Modell verwendet und in den anderen Bereichen das k - ε -Modell (WILCOX, 1988). Diese Aufteilung ergibt sich aus den Stärken des jeweiligen Ursprungs-Turbulenzmodells. In der wandnahen Strömung erzielt das k - ω -Modell bessere Ergebnisse. Deshalb wird es dort benutzt. In der freien Strömung liefert das k - ε -Modell realistischere Werte, so dass es an diesem Ort verwendet wird. Die Wirbelviskosität berechnet sich aus

$$\eta_t = C_t \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3-91)$$

bzw. mit

$$\varepsilon = k \omega \quad (3-92)$$

aus

$$\eta_t = C_t \rho \frac{k}{\omega}. \quad (3-93)$$

Die partiellen Differentialgleichungen für die Berechnung der turbulenten kinetischen Energie k und der Frequenz der turbulenten Schwankungsbewegung ω werden unten in Gleichung (3-94) und (3-95) aufgeführt. Die Gleichung für die kinetische Energie der turbulenten Schwankungsbewegung (3-94) entsteht, indem die ungemittelte Impulsbilanz (vgl. Gleichung (3-41)) in x -Richtung mit u' , die ungemittelte Impulsbilanz in y -Richtung mit v' und die ungemittelte Impulsbilanz in z -Richtung mit w' multipliziert und dann alle Gleichungen addiert werden. Anschließend wird das Vorgehen mit der gemittelten Impulsbilanz (3-85) wiederholt und die beiden entstandenen Gleichungen werden subtrahiert. Nach Umformungen wird die Gleichung für die kinetische Energie der turbulenten Schwankungsbewegung erhalten. Für Strömungen mit hohen Reynoldszahlen gilt für die kinetische Energie der turbulenten Schwankungsbewegung dasselbe wie für die kinetische Energie der Strömung: nämlich, dass die turbulenten Terme in Gleichung (3-94) sehr viel höher als ihre viskosen Entsprechungen sind (VERSTEEG und MALALASEKERA, 2007).

Die Gleichung der turbulenten Energiedissipation ε wird durch Einsetzen von Gleichung (3-92) in die ω -Gleichung (3-95) ermittelt. Weiterführende Details und die Werte der Konstanten in den Gleichungen (3-94) und (3-95) finden sich z.B. in ANSYS INC. (2010f), MENTER et al. (2003) oder ESCH und MENTER (2003).

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\eta + \frac{\eta_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + \eta_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta_k \rho k \omega \quad (3-94)$$

(I) (II) (III) (IV) (V)

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \omega)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\eta + \frac{\eta_t}{\sigma_{\omega,1}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + \alpha \frac{\omega}{k} \eta_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta_\omega \rho \omega^2 + (1-F) 2 \rho \sigma_{\omega,2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (3-95)$$

- mit k turbulente kinetische Energie, $\text{m}^2 \text{s}^{-2}$
 σ_k Konstante, -
 P_k Turbulenzproduktion durch Scherkräfte, $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-3}$
 β_k Konstante, -
 ω Frequenz der turbulenten Schwankungsbewegung, s^{-1}
 $\sigma_{\omega,1}$ Konstante, -
 α Konstante, -
 β_ω Konstante, -

F Übergangsfunktion, -

$\sigma_{\omega,2}$ Konstante, -

Die Terme in den Gleichungen (3-94) und (3-95) entsprechen jeweils (KOCK, 2003)

der zeitlichen Änderung der turbulenten, kinetischen Energie k bzw. der Frequenz der

turbulenten Schwankungsbewegung ω (I),

dem konvektiven Transport von k bzw. ω (II),

dem diffusiven Transport von k bzw. ω (III),

der Produktion von k bzw. ω (IV) und

der Dissipation von k bzw. ω (V).

Der letzte Term in Gleichung (3-95) sorgt für den Wechsel zwischen der ω - und ε -Gleichung entsprechend der Lage im Rechengebiet.

Das SST-Modell wird hier verwendet, weil es die Vorteile von k - ε - und k - ω -Modell in einer Formulierung vereint und darüber hinaus im Gegensatz zur Benutzung eines Reynolds-Spannungs-Modells viel Rechenzeit gespart wird.

3.3.9 Modellierung von bewegten Einbauten in Rührkesseln

Sollen Rührkessel mit bewegten Einbauten simuliert werden, wird die Berechnung des Strömungsfeldes komplizierter, weil die Rührerdrehung abgebildet werden muss. Ein Weg, dieses Problem anzugehen, ist, das Gitter in zwei Teile zu zerlegen, in einen stationären und einen beweglichen. Eine mögliche Aufteilung des Rechengebietes ist in Abbildung 3-15 gezeigt. Für zeitlich unabhängige Simulationen kann die Drehung der Einbauten durch Koordinatentransformationen des beweglichen Gitterteils, also eine Rechnung mit mehreren Bezugssystemen (engl. *multiple frames of reference*, MFR), dargestellt werden, ohne dass das Netz wirklich bewegt werden muss. Für instationäre Probleme wird das bewegliche Gitter entsprechend der Rührergeschwindigkeit in jedem Zeitschritt gedreht und die Strömung für diese Rührerstellung im jeweiligen Zeitschritt gelöst. Diese Technik wird auf Englisch *sliding mesh* genannt (ANSYS INC., 2010e und 2010f). An den Übergängen zwischen den beiden Gitterbereichen treten zusätzliche Randbedingungen auf, die denen an Phasengrenzen ähnlich sind. Dort müssen Kopplungs- und Erhaltungsbedingungen für alle Variablen eingehalten werden. Sie sind implizit und konservativ formuliert, so dass sich die Anwesenheit der Grenze zwischen beiden Gitterbereichen möglichst

wenig auf die Lösung auswirkt und alle Größen erhalten werden. Bei instationären Rechnungen wird in jedem Zeitschritt zunächst die neue Position des Rührers berechnet, bevor die Strömungsgleichungen diskretisiert werden. Dafür werden zuerst die Werte aller betrachteten Variablen in den Kontrollvolumen, die an die Grenzfläche stoßen, ausgewertet, so dass dann entschieden werden kann, welche Knotenwerte für die Diskretisierung verwendet werden sollen. Das genaue Vorgehen wird in ANSYS INC. (2010f) beschrieben.

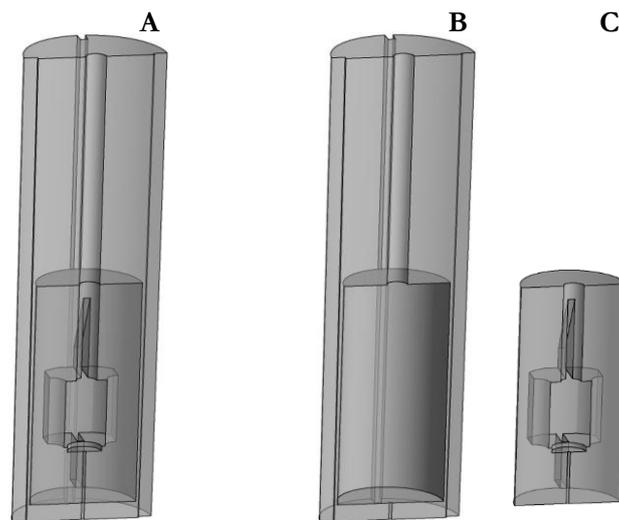


Abbildung 3-15: Beispiel einer Teilung der Reaktor­geometrie für die Simulation sich drehender Einbauten mit nicht­überlappenden Netzen. Zusammengesetzte Geometrie mit statischem und rotierendem Teil (A) und der äußere statische (B) und der innere rotierende (C) Bereich einzeln dargestellt.

In der vorliegenden Arbeit werden für die stationären Rechnungen mehrere Bezugssysteme für die Implementierung der Rührerdrehung verwendet, während in den instationären Simulationen der Teil des Netzes, der den Rührer enthält, gedreht wird.

3.3.10 Modellierung mehrphasiger Strömungen

Für die Lösung der Gleichungen von Mehrphasensystemen nach der Euler-Euler-Methode sind dieselben numerischen Methoden wie für einphasige Strömungen geeignet.

Um Strömungen mit freien Oberflächen numerisch lösen zu können, müssen diese im Algorithmus gesondert beschrieben werden. Dazu eignen sich die so genannte Verfolgung der Phasengrenze (engl. *interface tracking*) oder die Erfassung der Phasengrenze (engl. *interface capturing*). Hier wird nur letztere Möglichkeit näher erläutert, da sie während dieser Arbeit Verwendung findet. Details der Methode zur Verfolgung der Phasengrenze werden z.B. in FERZIGER und PERIĆ (2008) oder PASCHEDAG (2004) aufgeführt.

Zu den Methoden der Phasengrenzenerfassung zählen die Fluidvolumen- bzw. *Volume of Fluid*-Methoden – oder abgekürzt VOF. Diese wurden erstmals von HIRT und NICHOLS (1981) entwickelt. Hier wird zusätzlich zu den üblichen Bilanzgleichungen eine weitere für den Phasenanteil α (bei Systemen mit einem Gas und einer Flüssigkeit meist den der letzteren) gelöst (FERZIGER und PERIĆ, 2008):

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{v}) = 0 \quad (3-96)$$

bzw. in Integralform

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{V_{KV}} \alpha \, dV + \iint_{A_{KV}} \alpha \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dA = 0. \quad (3-97)$$

Bei inkompressiblen Strömungen mit zwei Phasen kann mit

$$\alpha_{F,2} = 1 - \alpha_{F,1} \quad (3-98)$$

einfach die Bilanzgleichung für das jeweils andere Fluid gebildet werden.

Besonders wichtig ist hier die Diskretisierung des konvektiven Terms in Gleichung (3-97), weil Methoden niedriger Ordnung (wie z.B. die Aufwind-Interpolation erster Ordnung) die Phasengrenze verschmieren und zu einer künstlichen Vermischung der beiden Phasen führen. Deshalb werden Methoden höherer Ordnung verwendet. Außerdem muss sichergestellt werden, dass sich der Phasenanteil nur in seinen physikalischen Grenzen bewegt, also $0 \leq \alpha \leq 1$. Das heißt, die Methode darf kein Unter- bzw. Überschwingen der Lösung erzeugen (FERZIGER und PERIĆ, 2008). Meistens wird zur Diskretisierung eine Mischung aus Auf- und Abwindapproximationen verwendet, wie z.B. das Verfahren zur hochauflösenden Grenzflächenerfassung (HRIC-Modell von engl. *high resolution interface capturing*) (MUZAFERIJA und PERIĆ, 1999). Diese Methoden zielen auf einen möglichst scharfen Sprung des Phasenanteils von 0 auf 1. Im Bereich der Phasengrenze ist aber trotzdem eine hohe Netzfeinheit wichtig, weil die Phasengrenze dennoch über ein bis zwei Kontrollvolumen verschmieren kann (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

3.3.11 Simulation des Stoffübergangs aus der Gas- in die Flüssigphase

Soll der Stoffübergang einer Komponente aus der Gas- in die Flüssigphase modelliert werden, sind keine besonderen numerischen Methoden nötig. Für die Simulation des Stoffübergangs werden die Gleichungen aus Kapitel 3.1.4 – besonders aber Gleichung (3-24) und k_L -Korrelatio-

nen (z.B. Gleichung (3-28)) – verwendet. Sollen Konzentrationsverteilungen des übergehenden Stoffes dargestellt werden, muss eine weitere partielle Differentialgleichung für die Konzentration der transferierenden Komponente (vgl. Kapitel 3.2.2 Gleichung (3-35)) gelöst werden. Der flüssigkeitsseitige Stoffübergangskoeffizient k_L wird in Form einer Korrelation vorgegeben, deren Wert während der Simulation lokal (bzw. zeitlich) aufgelöst bestimmt wird. Die Größe der volumenbezogenen Phasengrenzfläche a wird während der Simulation durch das Programm berechnet und ist damit bekannt, so dass dann der Übergang des betrachteten Stoffes, z.B. Sauerstoff, aus der einen in die andere Phase bestimmt werden kann. Bei diesem Vorgehen muss die Beziehung, mit der k_L berechnet werden soll, gut gewählt werden, damit sie den jeweiligen Fall richtig wiedergibt und exakte Ergebnisse liefert. Wenn der Stoffübergang auf diese Weise modelliert wird, können für die Berechnung des k_L lokale Werte der Simulation, die auf dem aktuellen Strömungsfeld basieren, und nicht nur globale, gemittelte Größen, die örtliche Schwankungen auf dem Rechengebiet nicht abbilden können, verwendet werden. Mit dieser Methode können dann auch Verläufe der übergehenden Substanz, z.B. des Sauerstoffs, in der Flüssigkeit dargestellt werden (GOBBY, 2008).

Interessieren die genauen Konzentrationsverteilungen des übergehenden Stoffes nicht, sondern ist nur der Wert des $k_L a$ zu ermitteln, können k_L und a separat wie oben beschrieben berechnet werden, aber ohne die übergehende Komponente zu betrachten. Damit muss eine partielle Differentialgleichung weniger gelöst werden. Auch dieses Vorgehen ist recht verbreitet (z.B. MOILANEN et al., 2007; GARCIA-OCHOA und GOMEZ, 2004; ALVES et al., 2004; MORAVEJI et al., 2011) und wird ebenfalls in dieser Arbeit benutzt.

3.4 Verifizierung und Validierung numerischer Simulationen

Bei der Auswertung von Simulationen muss grundsätzlich entschieden werden, ob mit den Ergebnissen der Simulation die zuvor gestellte Frage beantwortet werden kann. Das hängt von der Genauigkeit der Ergebnisse ab. Ist diese nicht hoch genug, sind die Resultate nicht oder nur eingeschränkt brauchbar. Deshalb ist die Abschätzung der Fehler numerischer Lösungen von großer Bedeutung. Dabei werden für die numerische Strömungssimulation Verifizierung und Validierung unterschieden, obwohl beide Begriffe sehr ähnliche Bedeutungen haben. Zur Begriffsklärung bietet sich eine Veröffentlichung von PELLETIER (2010) an. Darin wird Verifizierung als das „richtige Lösen der Gleichungen“ beschrieben, wohingegen Validierung das „Lösen der richtigen Gleichungen“ ist. Danach beinhaltet die Verifizierung die Abschätzung der numerischen und mathematischen Fehler und die Validierung die des Modellfehlers.

Es gibt vier verschiedene Fehlerarten, die während einer Simulation auftreten. Prinzipiell kann keiner der Fehler vollständig vermieden werden. Sie lassen sich jedoch beeinflussen, so dass sie sich in vernünftigen Größenordnungen bewegen. Der Gesamtfehler setzt sich additiv aus den Einzelfehlern zusammen. Diese sind der Rundungsfehler, der Iterationsfehler, der Diskretisierungsfehler und der Modellfehler, die im Folgenden näher erläutert werden. Es ist günstig, zuerst die Rundungs- und Iterationsfehler, dann die Diskretisierungsfehler und als letztes die Modellfehler zu ermitteln. Falls möglich, sollte jeder Fehler um eine Größenordnung kleiner sein als der vorherige, weil sonst die Abschätzung der Fehler auf der nächsten Ebene nicht zuverlässig ist (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

3.4.1 Rundungsfehler

Da für die Darstellung einer Zahl im Rechner nur ein gewisser Speicherplatz vorgesehen ist, kann diese nur mit einer bestimmten Genauigkeit angegeben werden. Dies nennt sich Maschinengenauigkeit. Als Rundungsfehler wird hier der Unterschied zwischen der exakten Zahl und ihrer Darstellung im Rechner bezeichnet. Bei den meisten CFD-Simulationen sind die Rundungsfehler bei Rechnungen mit doppelter Genauigkeit so gering, dass sie im Vergleich mit den übrigen Fehlern nicht ins Gewicht fallen (PASCHEDAG, 2004). Für Rechnungen mit einfacher Genauigkeit kann numerische Diffusion ein ernsthaftes Problem darstellen (JAWORSKI et al., 2000).

3.4.2 Iterationsfehler

Für die Lösung der Gleichungen werden iterative Verfahren verwendet. Dabei nähert sich die numerische Lösung mit jedem Iterationsschritt der tatsächlichen Lösung an. Wird die Iteration beendet, ist die verbleibende Differenz zwischen iterierter und exakter Lösung der diskretisierten Gleichungen der Abbruchfehler iterativer Verfahren (PASCHEDAG, 2004). Dieser wird auch oft als Iterationsfehler oder Konvergenzfehler bezeichnet.

Für Programme, bei denen die Koeffizientenmatrix bekannt ist, gibt es eine Möglichkeit, den Iterationsfehler direkt zu bestimmen. Dies wurde z.B. in FERZIGER und PERIĆ (1996) beschrieben. Trifft das nicht zu, muss der Iterationsfehler abgeschätzt werden. Meist geschieht das anhand von Residuen. Diese sind ähnlich definiert wie die Iterationsfehler selbst (ANSYS INC., 2010f). Das Residuum des linearen Gleichungssystems

$$\mathbf{A} \varphi = \mathbf{b} \tag{3-99}$$

ist festgelegt als

$$\mathbf{r}_n = \mathbf{b} - \mathbf{A}\varphi_n \quad (3-100)$$

- mit \mathbf{r}_n Residuum nach dem n-ten Iterationsschritt
 \mathbf{A} Koeffizientenmatrix
 φ_n Lösungsvektor des linearen Gleichungssystems nach dem n-ten Iterationsschritt
 \mathbf{b} Vektor der rechten Seite des linearen Gleichungssystems.

Um die Residuen von verschiedenen Bilanzen vergleichen zu können, werden sie normiert. Im vorliegenden Fall wird dazu das Residuum aus Gleichung (3-100) auf einen repräsentativen Variablenbereich und einen Wert, der die Größe des Kontrollvolumens berücksichtigt, bezogen. Die genaue Berechnung und Herleitung der Normierung der Residuen ist für den vorliegenden Fall nicht zugänglich (ANSYS INC., 2010f). Alternativ zu Gleichung (3-100) können Residuen auch als die Differenz der Lösung an zwei aufeinanderfolgenden Iterationsschritten definiert werden (PASCHEDAG, 2004).

$$\mathbf{r}_n = |\varphi_n - \varphi_{n-1}| \quad (3-101)$$

Die Residuen sollen mit zunehmender Iterationszahl sinken. Dann konvergiert das Verfahren. Für steigende Residuen über den gesamten Lösungsverlauf divergiert der Iterationsprozess. Anhand des Wertes der normierten Residuen kann ein Abbruchkriterium für die Rechnung festgelegt werden. Dieses Vorgehen ist ein Kompromiss, wenn der Iterationsfehler selbst nicht genau bestimmt werden kann. Trotzdem ist es nicht ratsam, das Abbruchkriterium nur mithilfe des Residuums zu bestimmen. Denn wenn das Residuum klein ist, muss nicht notwendigerweise auch der Fehler niedrig sein. Dies ist in Abbildung 3-16 gezeigt. Bei langsam konvergierenden Verfahren sind am Anfang die Residuen deutlich kleiner als bei schnell konvergierenden, obwohl die Abweichung von der exakten Lösung dort größer ist.

Damit das Residuum ein verlässliches Mittel ist, um den Iterationsfehler zu beurteilen, ist die Normierung wichtig (FERZIGER und PERIĆ, 1996). Residuen und Fehler verringern sich zu Anfang des Iterationsprozesses normalerweise nicht auf die gleiche Weise. Später zeigen sie aber einen Verlauf, der dem des Fehlers ähnlich ist, d.h. Fehler und Residuum sinken beispielsweise mit derselben Rate, haben aber einen anderen absoluten Wert. Deshalb kann mithilfe des Residuums zwar die Entwicklung des Iterationsfehlers, nicht aber dessen absoluter Wert abgeschätzt werden. Das Abbruchkriterium sollte also so formuliert werden, dass das Anfangsresiduum um z.B. drei bis fünf Größenordnungen sinken muss, bevor die Rechnung beendet werden darf (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

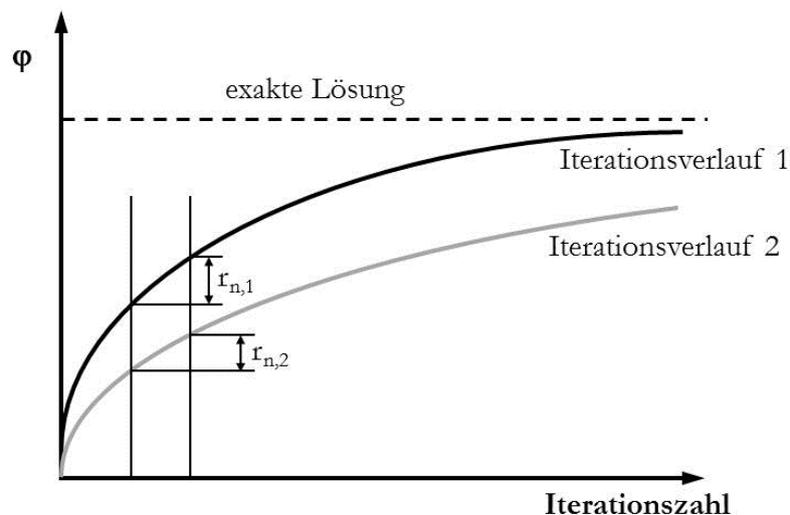


Abbildung 3-16: Iterationsverlauf bei besserer (—) und schlechterer (—) Konvergenz mit Residuen gemäß Gleichung (3-101) (modifiziert nach PASCHEDAG, 2004).

Zuletzt ist zum Iterationsfehler zu sagen, dass das Abbruchkriterium auf feinen Gittern strenger sein sollte, weil dort der Diskretisierungsfehler niedriger ist. Und da der Iterationsfehler immer deutlich kleiner sein muss als der Diskretisierungsfehler, sollte das Residuum auf feineren Netzen eben auch auf geringere Werte sinken (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

3.4.3 Diskretisierungsfehler

Jede numerische Methode produziert Näherungslösungen, weil bestimmte Approximationen verwendet werden müssen, damit die Erhaltungsgleichungen mit einem Rechner gelöst werden können. Der Diskretisierungsfehler schließt alle Abweichungen ein, die durch die Übersetzung der partiellen Differentialgleichungen mit Anfangs- und Randbedingungen auf einem kontinuierlichen Gebiet in ein algebraisches Gleichungssystem auf einem diskretisierten Gebiet entstehen (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

Für die Bestimmung des Diskretisierungsfehlers lassen sich in der Literatur verschiedene Vorgehensweisen finden. Teilweise wird lediglich die Netzunabhängigkeit geprüft, also ob sich der Verlauf der Variablen mit feiner werdenden Gittern einem Endwert asymptotisch annähert (z. B. AUBIN und XUERE, 2006; KELLY und GIGAS, 2003; CASEY und WINTERGERSTE, 2000). Außerdem besteht bei selbst geschriebenen Programmen die Möglichkeit, Ausdrücke für Fehlerabschätzungen oder Sensitivitäten direkt in den Code einzuarbeiten (z. B. PELLETIER et al., 2003). Quantitativ können Diskretisierungsfehler (wenn der Quellcode nicht zugänglich ist) einfach über eine Studie mit systematisch verfeinerten Gittern mit sehr kleinen Iterationsfehlern und einer

anschließenden Richardson-Extrapolation abgeschätzt werden (FERZIGER und PERIĆ, 1996 und 2008; ROACHE, 1998; RICHARDSON, 1910). Die Richardson-Extrapolation wird im folgenden Kapitel 3.4.4 näher erläutert.

3.4.4 Bestimmung des Diskretisierungsfehlers mit der Richardson-Extrapolation

Bei der Richardson Extrapolation wird angenommen, dass eine diskrete Lösung f folgende Reihenentwicklung besitzt (ROACHE, 1998):

$$f = f_{\text{exakt}} + g_1 b + g_2 b^2 + g_3 b^3 + \dots \quad (3-102)$$

mit b repräsentativer Gitterabstand, m
 g_i Koeffizienten der Reihenentwicklung

Aus Gleichung (3-102) ergibt sich eine Abschätzung der exakten Lösung (bei Vernachlässigung der Terme mit höherer Ordnung), wenn zwei diskrete Lösungen, die auf unterschiedlich feinen Rechengittern bestimmt wurden, kombiniert werden. Diese Abschätzung ist genauer als die diskrete Lösung auf dem feinsten Gitter (ROACHE, 1998).

$$f_{\text{exakt}} \approx f_1 + \frac{f_1 - f_2}{r^p - 1} \quad (3-103)$$

mit f_1 diskrete Lösung auf dem feinen Netz
 f_2 diskrete Lösung auf dem groben Netz
 r Verfeinerungsfaktor ($r > 1$)
 p beobachtete Konvergenzordnung des Diskretisierungsschemas

Für das Verhältnis der Gitterabstände sollte mindestens $r > 1,2$ gelten (ROACHE, 1998). Teilweise wird sogar $r \geq 1,5$ verlangt (FERZIGER und PERIĆ, 2008). Das Verhältnis der Netzweiten bzw. der Verfeinerungsfaktor wird für nicht-kartesische, der Geometrie angepasste oder unstrukturierte Gitter bestimmt nach (ROACHE, 1998)

$$r = \left(\frac{N_1}{N_2} \right)^{1/D} \quad (3-104)$$

mit N_1 Elementanzahl des feinen Netzes, -
 N_2 Elementanzahl des groben Netzes, -
 D Dimension des Netzes.

Die Konvergenzordnung des Diskretisierungsschemas p gibt die Qualität der verwendeten Approximation an und verbindet den Abbruchfehler der Diskretisierung mit dem Gitterabstand (oder der Zeitschrittweite) zu einer bestimmten Potenz. Das bedeutet beispielsweise, dass bei

einem Verfahren zweiter Ordnung bei einer Halbierung der Netzweite der Fehler geviertelt wird. Allerdings ist die Ordnung kein direktes Maß für den Betrag des Fehlers. Sie zeigt nur an, wie sich der Fehler ändert, wenn der Abstand verändert wird (FERZIGER und PERIĆ, 2008). Generell kann aber bei Diskretisierungsverfahren mit vergleichbarer Struktur davon ausgegangen werden, dass das Verfahren höherer Ordnung genauer als das Verfahren niedrigerer Ordnung ist (PASCHEDAG, 2004).

Die theoretische Ordnung einer Diskretisierung und die tatsächlich beobachtete müssen nicht zwangsläufig übereinstimmen. Die beobachtete Konvergenzordnung p wird für $r = \text{const}$ berechnet nach (ROACHE, 1998)

$$p = \frac{\ln\left(\frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1}\right)}{\ln(r)} \quad (3-105)$$

mit f_1 diskrete Lösung auf dem feinen Netz
 f_2 diskrete Lösung auf dem mittleren Netz
 f_3 diskrete Lösung auf dem groben Netz.

Mit Hilfe der Gleichungen (3-104) und (3-105) kann dann der Fehler der Diskretisierung ε_D bestimmt werden (Roache 1998).

$$\varepsilon_{D,12} \approx \frac{f_1 - f_2}{r^p - 1} \quad (3-106)$$

Die Richardson-Extrapolation sollte nur angewandt werden, wenn der Diskretisierungsfehler proportional zum führenden Term der Taylor-Reihe ist. Dies ist für ausreichend feine Gitter der Fall (FERZIGER und PERIĆ, 2008). Überprüfen lässt sich dieser Sachverhalt, indem die Diskretisierungsfehler, die mithilfe des feinen und mittleren Netzes ($\varepsilon_{D,12}$) und mit dem mittleren und groben Netz ($\varepsilon_{D,23}$) berechnet werden, verglichen werden. Wenn sich der Zusammenhang zwischen beiden Fehlerabschätzungen mit der folgenden Formel (3-107) beschreiben lässt, ist der Einfluss des führenden Terms der Taylor-Reihe dominierend (ROACHE, 1998).

$$\varepsilon_{D,23} \approx r^p \cdot \varepsilon_{D,12} \quad (3-107)$$

Die genaue Herleitung der Gleichungen und die Bestimmung der beobachteten Konvergenzordnung findet sich z. B. in RICHARDSON und GAUNT, 1927; ROACHE, 1998 oder FERZIGER und PERIĆ (2008).

3.4.5 Modellfehler

Obwohl die Gleichungen aus Kapitel 3.2 als exakt formuliertes mathematisches Modell angenommen werden können, ist es für die meisten Strömungen unmöglich, sie zu lösen, so dass oft weitere Modelle oder Vereinfachungen verwendet werden müssen. Dazu zählen Turbulenzmodelle, der Ausschluss gewisser Variablen (z.B. bei isothermer Rechnung), die Vernachlässigung von Abhängigkeiten, Annahmen für Randbedingungen, Annahmen für Symmetrien, so dass nicht das gesamte reale Strömungsgebiet gerechnet werden muss, usw. Deshalb ist der Modellfehler als die Differenz zwischen der tatsächlichen Strömung und der exakten Lösung des mathematischen Modells definiert (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

Modellfehler sind in der Regel die, die im Gesamtfehler am meisten ins Gewicht fallen, und sie sind am schwersten zu ermitteln, weil dafür Daten der realen Strömung nötig sind. Diese sind oft nicht vorhanden, so dass Modellfehler, wenn es möglich ist, von einer genauen direkten numerischen Simulation oder Experimenten geschätzt werden. Bei den Experimenten muss bedacht werden, dass diese ebenfalls nicht exakt sind, sondern auch Fehler haben, über die Klarheit herrschen sollte, bevor die Experimente zur Validierung herangezogen werden (FERZIGER und PERIĆ, 2008). Außerdem unterscheiden sich die Modellfehler für verschiedene Größen, d.h. sie müssen für jede Variable separat bestimmt werden, und die Einzelfehler der verschiedenen Modelle addieren sich nicht zwingend zum Gesamtfehler. Meist sind sie eher nichtlinear verbunden, wobei auch dieser Zusammenhang in der Regel unbekannt ist (PASCHEDAG, 2004).

4 Material und Methoden

Das Thema dieses Kapitels sind die Systeme, Materialien und Computerprogramme, die im Rahmen dieses Forschungsprojekt verwendet wurden. Dabei wird in Unterkapitel 4.1 zunächst auf das simulierte parallele Milliliter-Bioreaktorsystem und die simulierten Rührer eingegangen. Danach werden in Teilkapitel 4.2 die benutzten Fluide mit ihren Stoffwerten eingeführt. Anschließend wird mit einer Vorstellung der Computerprogramme und Netze in den Abschnitten 4.3 und 4.5 fortgefahren, bevor in Unterkapitel 4.6 die Einstellungen der Simulationen zur Sprache kommen. Das Kapitel schließt in Abschnitt 4.7 mit einer Erklärung, wie die Diskretisierungsfehler abgeschätzt werden.

4.1 Simuliertes paralleles Milliliter-Bioreaktorsystem

In den Simulationen wurde ein paralleles Bioreaktorsystem (2mag AG, München, Deutschland) mit 48 Einzelreaktoren im Milliliter-Maßstab abgebildet (WEUSTER-BOTZ et al., 2005). Es ist in Abbildung 4-1 A dargestellt. Dabei stand jeweils ein einzelner Bioreaktor im Fokus der Rechnungen. Ein solcher Einwegbioreaktor ist in Abbildung 4-1 B zu sehen.

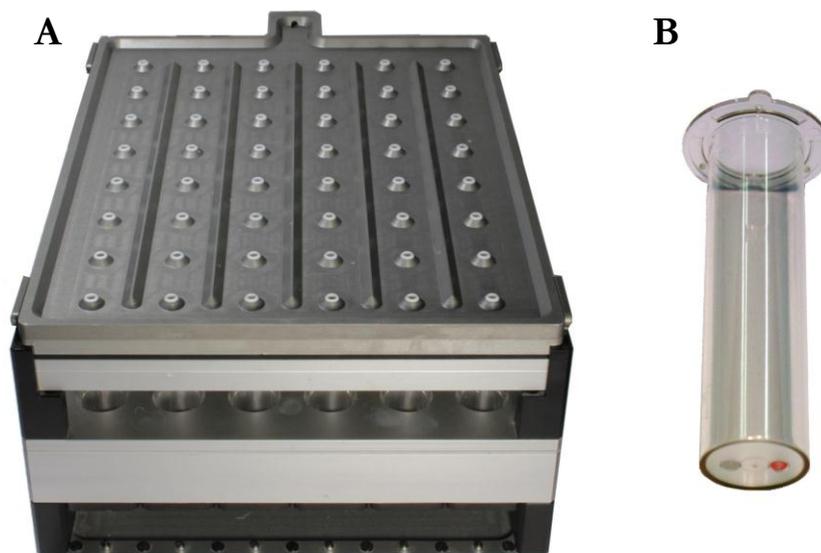


Abbildung 4-1: Gerührtes paralleles Bioreaktorsystem im Milliliter-Maßstab. A: Bioreaktorblock. B: Unbewehrter Einwegbioreaktor im Milliliter-Maßstab.

Die Simulationen schlossen sowohl bewehrte als auch unbewehrte Reaktoren ein, deren Innendurchmesser 20,3 mm beträgt. Die vier Strombrecher weisen in den bewehrten Reaktoren eine Breite von 2 mm auf. Die Rührer lagern frei drehbar auf einer starren Achse und werden magnetisch induktiv angetrieben. Das simulierte Füllvolumen betrug – wenn nicht anders erwähnt – jeweils 10 mL.

4.1.1 Gasinduzierender Rührer

Der gasinduzierende Rührer (PUSKEILER, 2004) dient zur Kultivierung von gängigen Mikroorganismen, wie z.B. *Escherichia coli*, *Bacillus subtilis* (VESTER et al., 2009) oder *Saccharomyces cerevisiae* (GEBHARDT, 2010). Ab einer Rührerdrehzahl von 1800 min^{-1} wird durch die Hohlachse Gas angesaugt und über die diagonalen Bohrungen in der Flüssigkeit dispergiert. So kommt es zu einer sehr guten Durchmischung des Reaktorinhalts und zu einem hohen Sauerstoffeintrag. In Abbildung 4-2 ist die Geometrie des Rührers zu sehen.

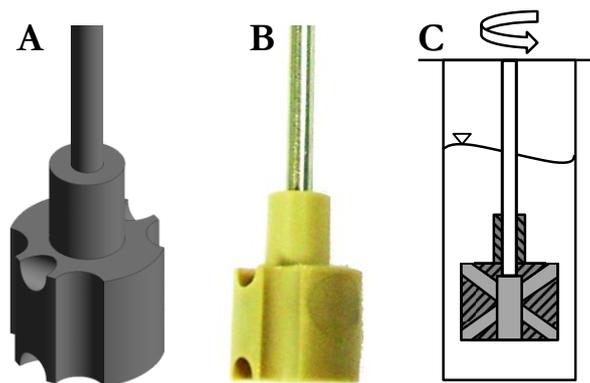


Abbildung 4-2: Gasinduzierender Rührer für die Kultivierung von Mikroorganismen. A: Isometrische Ansicht des gasinduzierenden Rührers. B: Foto des gasinduzierenden Rührers von vorn. C: Schematische Skizze des gasinduzierenden Rührers in einem Milliliter-Bioreaktor.

Der Rührerdurchmesser beträgt 14,5 mm, und der Rührerkörper ist 12 mm hoch. Mit diesem Rührorgan werden bewehrte Reaktoren und ein Füllvolumen von 12 mL verwendet. Es wurde ein Drehzahlbereich von 1800 min^{-1} bis 3000 min^{-1} simuliert.

4.1.2 Paddelrührer

Bei der Kultivierung von morphologisch veränderlichen und scherempfindlichen Mikroorganismen, wie z.B. *Streptomyces tendae*, kommt es durch das Wachstum der Mikroorganismen zu großen Viskositätsschwankungen des Mediums. Außerdem kommt es bei solchen Kultivierungen oft zu einem Wandwachstum. Für Organismen dieser Art wurde der Paddelrührer entwickelt.

Abbildung 4-3 zeigt die Geometrie des Rührers. Er funktioniert über einen großen Viskositätsbereich. Während der Drehung wird die Flüssigkeit im Reaktor vor dem Rührer hergeschoben, und es bildet sich eine Flüssigkeitslamelle an der Wand aus. Durch die Bewegung des Rührers entlang der Wand wird dort das Wachstum der Mikroorganismen verhindert. Außerdem entsteht eine tiefe Trombe, die eine große Phasengrenzfläche für die Oberflächenbegasung erzeugt (HORTSCH et al., 2010).

Im Betrieb überstreicht der Rührer im Reaktor einen Durchmesser von 19 mm. Die Höhe des Rührorgans beträgt 58 mm. Der Paddelrührer wird in Reaktoren ohne Strombrecher verwendet. Es wurde ein Drehzahlbereich von 600 min^{-1} bis 1600 min^{-1} betrachtet.

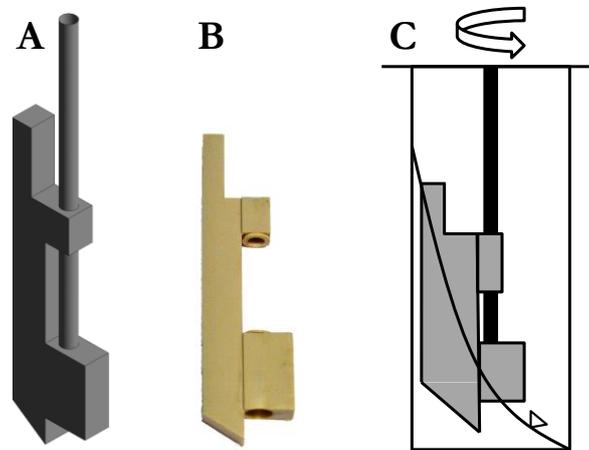


Abbildung 4-3: Paddelrührer für die Kultivierung morphologisch veränderlicher Mikroorganismen. A: Isometrische Ansicht des Paddelrührers. B: Foto des Paddelrührers von vorn. C: Schematische Skizze des Paddelrührers in einem Milliliter-Bioreaktor.

4.1.3 H- und S-Rührer

Bei der enzymatischen Hydrolyse von organischen Feststoffen, wie z.B. Maisspindelgranulat, müssen hochviskose Flüssigkeiten und Feststoffsuspensionen durchmischt werden. Dafür wurden H- und S-Rührer entwickelt (RIEDLBERGER und WEUSTER-BOTZ, 2010). Die Rührergeometrien sind in Abbildung 4-4 dargestellt.

Der Durchmesser beider Rührorgane beträgt 14,4 mm. Der Rührerkörper hat eine Höhe von 11 mm. Die oberen Fortsätze sind 9,5 mm hoch und die unteren 7 mm. Die zwei Rührer können sowohl in bewehrten als auch in unbewehrten Reaktoren betrieben werden. Normalerweise werden sie aber in Reaktoren ohne Strombrecher benutzt, da sonst leicht größere Feststoffpartikel den Rührer blockieren können. Für die Ermittlung der Mischzeit wurde ein Drehzahlbereich

von 100 min^{-1} bis 1000 min^{-1} simuliert, während für die Bestimmung des Leistungseintrags auch Rührerdrehzahlen von bis zu 2500 min^{-1} betrachtet wurden.

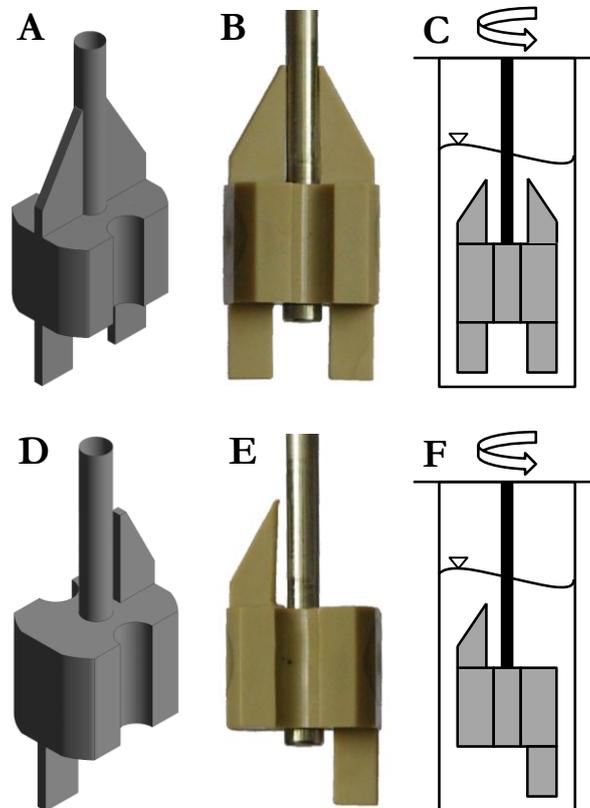


Abbildung 4-4: H- (A, B, C) und S-Rührer (D, E, F) für die enzymatische Hydrolyse organischer Feststoffe.

A: Isometrische Ansicht des H-Rührers. B: Foto des H-Rührers von vorn. C: Schematische Skizze des H-Rührers in einem Milliliter-Bioreaktor. D: Isometrische Ansicht des S-Rührers. E: Foto des S-Rührers von vorn. F: Schematische Skizze des S-Rührers in einem Milliliter-Bioreaktor.

4.2 Simulierte Fluide

In den Simulationen wurden verschiedene Flüssigkeiten verwendet: Wasser, drei Glycerin-Wasser-Mischungen und eine Xanthan-Lösung. Diese Fluide wurden ausgewählt, um unterschiedliche Viskositäten und rheologisches Verhalten abzubilden. Die Gasphase für zweiphasige Simulationen bestand aus Luft.

Wasser und Luft sind im Simulationsprogramm ANSYS CFX schon vordefiniert – also bereits enthalten – und können einfach ausgewählt werden. Die Glycerin-Wasser-Mischungen und die Xanthan-Lösung müssen in ANSYS CFX als neues Fluid erstellt werden. Die Stoffwerte der Fluide, die für die Simulationen benötigt werden, sind in Tabelle 4-1 zusammengefasst.

Tabelle 4-1: Stoffwerte der simulierten Fluide (ANDRUSSOW und SCHRAMM, 1969; BRIMBLECOMBE, 1986; FRIMMEL, 1999).

		Luft (trocken)	Wasser	Glycerin 14 mPa s	Glycerin 34 mPa s	Glycerin 91 mPa s	Xanthan 0,5 % w/w
Zustand		gasförmig	flüssig	flüssig	flüssig	flüssig	flüssig
Dichte	kg m ⁻³	1,185	997	1175,65	1202,4	1219,65	1010
dynamische Viskosität	mPa s	0,01831	0,8899	14,1	33,9	91,2	
Fließindex	-						0,36
Konsistenzindex	Pa s ⁿ						1,1792
Oberflächenspannung	N m ⁻¹		0,072				

4.3 Verwendete Computerprogramme

Alle Simulationen wurden mit dem Computerprogramm ANSYS CFX, Version 13.0 (ANSYS Inc., Canonsburg, USA) durchgeführt. ANSYS CFX hat drei Einzelprogramme mit graphischen Benutzeroberflächen: einen Präprozessor zum Aufsetzen der Rechnungen (CFX-Pre, ANSYS INC., 2010b), den Löser zur Berechnung der Ergebnisse (CFX-Solver bzw. CFX-Solver Manager, ANSYS INC., 2010d) und einen Postprozessor für die Auswertungen der Simulationen (CFD-Post, ANSYS INC., 2010a).

Der iterative, gekoppelte Löser von ANSYS CFX basiert auf der Finite-Volumen-Methode (vgl. Kapitel 3.3.2) und kann sowohl strukturierte als auch unstrukturierte Gitter (siehe Abschnitt 3.3.3) verwenden. Der Quellcode des Programms sowie die Koeffizientenmatrix des linearen Gleichungssystems sind nicht zugänglich.

Alle verwendeten Gitter wurden mit ANSYS ICEM CFD, Version 13.0 (ANSYS Inc., Canonsburg, USA) generiert. Dieses Programm bietet die Möglichkeit, Geometriedateien einzulesen und so direkt auf der Basis der technischen CAD-Zeichnung das Netz zu erstellen. Es können sowohl strukturierte als auch unstrukturierte Gitter erzeugt werden. Außerdem kann mit ANSYS ICEM CFD die Qualität der generierten Netze überprüft und die schlechten Gitterzellen können sichtbar gemacht werden (ANSYS INC., 2010g und 2010h).

4.4 Verwendete Hardware

Die Simulationen wurden hauptsächlich auf einem Arbeitsplatzcomputer mit 64 Bit durchgeführt. Er war mit einem Intel® Core™ i7-950 Prozessor mit einer Taktfrequenz von 3,07 GHz und 24 MB Arbeitsspeicher ausgestattet. In der Regel wurden vier bis sechs Threads für eine Rechnung verwendet.

Außerdem wurde teilweise auf dem Supercomputer des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften „SuperMUC“ gerechnet. Auch dort wurden pro Rechnung vier bis sechs Threads benutzt.

4.5 Verwendete Rechengitter

Die Geometrien zur Simulation der H- und S-Rührer, des Paddelrührers sowie des gasinduzierenden Rührers wurden strukturiert vernetzt. Für jeden Rührer wurden drei Gitter erstellt: ein grobes, ein mittleres und ein feines. Dies ist nötig, um den Diskretisierungsfehler mithilfe der Richardson-Extrapolation abschätzen zu können. Die Anzahlen der finiten Volumina der einzelnen Netze sind in Tabelle 4-2 und die Verfeinerungsfaktoren nach Gleichung (3-104) in Tabelle 4-3 zusammengestellt.

Tabelle 4-2: Anzahl der finiten Volumen der verwendeten Netze für alle simulierten Rührer.

	H-Rührer			S-Rührer		
	grob	mittel	fein	grob	mittel	fein
mit Stromstörern	-	-	2173192	65662	731940	5796566
ohne Stromstörer	-	-	2072816	99508	651400	4696830

	Paddelrührer			gasinduzierender Rührer		
	grob	mittel	fein	grob	mittel	fein
mit Stromstörern	-	-	-	161756	953916	3586320
ohne Stromstörer	21980	135788	750392	-	-	-

Tabelle 4-3: Verfeinerungsfaktoren für die Richardson-Extrapolation der verwendeten Netze.

	S-Rührer		Paddelrührer		gasinduzierender Rührer	
	mittel / grob	fein / mittel	mittel / grob	fein / mittel	mittel / grob	fein / mittel
mit Stromstörern	2,23	1,99	-	-	1,81	1,56
ohne Stromstörer	1,87	1,93	1,83	1,77	-	-

Im Anhang finden sich in Tabelle 13-1 bis Tabelle 13-8 Übersichten der wichtigsten Qualitätskriterien der benutzten Gitter. Es werden drei Kriterien des Netzgenerators (ANSYS ICEM CFD) sowie drei Angaben aus der Ausgabedatei des Löser (ANSYS CFX-Solver) angegeben.

Für die Qualitätsmerkmale des Netzgenerators sind jeweils der Minimal-, der Mittel- und der Maximalwert aufgeführt. Zum einen wird der minimale Winkel jedes Elements angegeben, dann die Volumenänderung benachbarter Elemente und zuletzt ein Maß für die Schiefe bzw. Asymmetrie. Die genauen Definitionen der Qualitätsmerkmale können in ANSYS INC. (2010g) nach-

gelesen werden. Der kleinste Winkel in jedem Element sollte größer als 20° sein. Akzeptable Werte für die Volumenänderung liegen unter 10 und für das Maß der Schiefe des Elements über 0,2.

Die Qualitätsmerkmale, die der Löser betrachtet, bewerten ähnliche Kriterien. Dort werden die Orthogonalität des Netzes, das Verhältnis der Ausdehnung der Elemente und das Seitenlängenverhältnis beurteilt. Der Orthogonalitätswinkel sollte größer als 20° , der Ausdehnungsfaktor kleiner als 20 und das Seitenlängenverhältnis niedriger als 100 – bei Rechnungen mit doppelter Genauigkeit geringer als 1000 – sein (ANSYS INC., 2010e). Es wird jeweils der schlechteste Wert auf dem gesamten Netz angegeben.

Für das grobe Netz des gasinduzierenden Rührers können nicht alle Qualitätskriterien eingehalten werden. Dies ist eine Folge der komplizierten Geometrie mit den spitzen Winkeln, die durch die Bohrungen im Inneren des Rührerkörpers zustande kommen. Da das Netz aber nur zur Fehlerermittlung mithilfe der Richardson-Extrapolation dient, wird es trotzdem zu diesem Zweck verwendet.

4.6 Einstellungen und Modelle der Simulationen

Für alle Simulationen wurden die Finite-Volumen-Methode und strukturierte Gitter verwendet (siehe Abschnitte 3.3.2 und 3.3.3). Außerdem wurden die vereinfachten Gleichungen zur Beschreibung der Strömung benutzt (vgl. Unterkapitel 3.2.4). Zur örtlichen Diskretisierung des konvektiven Terms diente das Hybridverfahren zweiter Ordnung (vgl. Kapitel 3.3.4). Für instationäre Simulationen wurde für die Diskretisierung der Zeit das implizite Euler-Verfahren zweiter Ordnung verwendet (siehe Abschnitt 3.3.6). Bei turbulenter Strömung wurde als Turbulenzmodell das Scherspannungstransport-Modell nach Menter benutzt (siehe Kapitel 3.3.8). Alle weiteren verwendeten Einstellungen und Modelle sowie Besonderheiten der Simulationen eines jeden Rührers sind unten aufgeführt. Zur Implementierung der Rührerdrehung wurden für stationäre Rechnungen mehrere Bezugssysteme verwendet, während für instationäre Simulationen der Bereich des Netzes, der den Rührer enthält, tatsächlich bewegt wird (vgl. Abschnitt 3.3.9). Bei beiden Methoden erfolgt die Drehung des bewegten Teils des Gitters in mathematisch positiver Richtung, also gegen den Uhrzeigersinn.

4.6.1 Simulation des gasinduzierenden Rührers

Bei der Simulation des gasinduzierenden Rührers war das Ziel, den eintretenden Gasvolumenstrom zu ermitteln, da dieser sich abhängig von der Rührerdrehzahl und den Fluideigenschaften einstellt, aber nicht gemessen werden kann. Deshalb sollte in zweiphasigen, instationären Simulationen mit einem festgelegten eintretenden Gasvolumenstrom die Phasengrenzfläche berechnet werden, um dann mit diesem Wert den integralen Stoffübergangskoeffizienten $k_L a$ zu ermitteln. Anhand dieses Wertes sollte dann über den Vergleich mit gemessenen $k_L a$ bei verschiedenen Drehzahlen auf den tatsächlich eintretenden Gasvolumenstrom geschlossen werden. Außerdem sollte zusätzlich auch eine einphasige Leistungscharakteristik für den gasinduzierenden Rührer bestimmt werden.

Der gasinduzierende Rührer wurde also sowohl einphasig als auch zweiphasig simuliert. Die Simulationen wurden mit Wasser bzw. Wasser und Luft durchgeführt. Für alle betrachteten Rührerdrehzahlen wurde in den Rechnungen das Scherspannungstransport-Turbulenzmodell verwendet.

Bei den einphasigen, stationären Simulationen wurde die freie Oberfläche der Flüssigkeit durch eine ebene Wand-Randbedingung ohne Haftbedingung (engl. *free slip wall*) ersetzt. Das heißt, das Netz schließt nur den Bereich der Geometrie ein, der mit Flüssigkeit gefüllt ist. Dies ist möglich, weil der gasinduzierende Rührer mit Strombrechern betrieben wird und sich deshalb keine Trombe ausbildet. Die freie Oberfläche der Flüssigkeit durch eine Randbedingung zu ersetzen, vereinfacht die Simulation erheblich, weil auf die Betrachtung der zweiten kontinuierlichen Phase oberhalb der Flüssigkeit verzichtet werden kann.

Für die zweiphasigen, instationären Simulationen wird ebenfalls nur der anfangs flüssigkeitsgefüllte Bereich der Geometrie abgebildet. Damit dies möglich ist, muss eine spezielle Randbedingung an der eigentlichen freien Oberfläche verwendet werden. Sie wird als Auslass definiert, aber mit einer „Entgasungsbedingung“ (englische Bezeichnung in ANSYS CFX: *Degassing Condition*). Das bedeutet, dass für die kontinuierliche Phase (in diesem Fall Wasser) die Randbedingung eine Wand ohne Haftbedingung ist, während die disperse Phase (hier Luft) das Rechengebiet verlassen kann (ANSYS INC., 2010e). Um die Stabilität und Robustheit der Simulationen zu erhöhen, wird der gasansaugende Charakter des Rührers mit den Simulationen zunächst nicht nachgebildet. Stattdessen wird für die Begasung im inneren Querschnitt der Hohlachse ein Gaseinlass definiert und ein fester eintretender Gasvolumenstrom bestimmt. Außerdem werden bei der zweiphasigen Rechnung außer der Widerstandskraft (engl. *drag force*) keine weiteren Phasenwechselwirkungskräfte berücksichtigt. Die Modellierung der zweiphasigen

Strömung erfolgt für den gasinduzierenden Rührer nach dem Euler-Euler-Modell. Für die instationären Rechnungen wird ein Zeitschritt gewählt, der einer Courant-Zahl von 5 entspricht. Die übrigen Zeitschritte und die Verfeinerungsfaktoren, die für die Abschätzung des zeitlichen Diskretisierungsfehlers bei einer Rührerdrehzahl von 1500 min^{-1} nötig sind, zeigt Tabelle 4-4.

Tabelle 4-4: Zeitschritte, Courant-Zahlen und Verfeinerungsfaktoren für die Bestimmung des zeitlichen Diskretisierungsfehlers des gasinduzierenden Rührers bei einer Rührerdrehzahl von 1500 min^{-1} auf dem Netz mit mittlerer Elementanzahl.

	gasinduzierender Rührer		
	grob	mittel	fein
Zeitschritt, s	0,0021	0,00103	0,00021
Courant-Zahl, -	10	5	1
Verfeinerungsfaktor, -		2	5

Um die Drehung des Rührers zu implementieren, ist das verwendete Netz in zwei Bereiche geteilt. Die Aufteilung ist in Abbildung 4-5 gezeigt. Der äußere Teil ist statisch und enthält die Stromstörer (Abbildung 4-5 A), während der innere Bereich den Rührer einschließt und mit der jeweiligen Rührerdrehzahl rotiert (Abbildung 4-5 B).

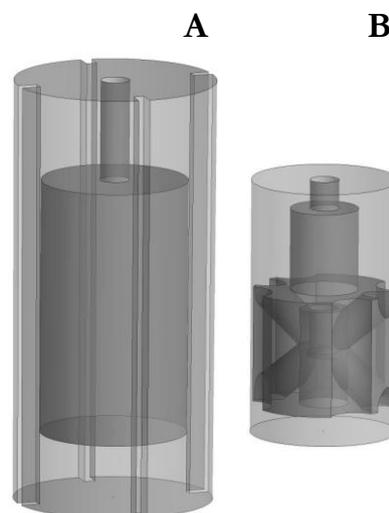


Abbildung 4-5: Aufteilung des Netzes in den statischen, äußeren Teil (A) und den inneren drehenden Teil (B) zur Modellierung der Rührerdrehung während der Simulation des gasinduzierenden Rührers.

Die weiteren verwendeten Einstellungen und Modelle sind im Anhang für die stationären Simulationen in Tabelle 13-9 und für die instationären Simulationen in Tabelle 13-10 zusammengefasst.

4.6.2 Simulation des Paddelrührers

Mit den Simulationen des Paddelrührers sollten vor allem die Größe und Form der Phasengrenzfläche ermittelt werden, die durch den Betrieb des Rührers entstehen. Auf der Basis dieser Größen wurde dann der integrale Stoffübergangskoeffizient $k_L a$ bestimmt.

Der Paddelrührer wurde mehrphasig mit zwei kontinuierlichen Fluiden instationär und mit einem Zeitschritt, der einer Courant-Zahl von 3 entsprach, simuliert. Für die Abschätzung des örtlichen Diskretisierungsfehlers wurde der Zeitschritt für das grobe, mittlere und feine Gitter entsprechend so angepasst, dass die Courant-Zahl konstant bei $CFL = 3$ blieb. Für die Bestimmung des zeitlichen Diskretisierungsfehlers wurden die Zeitschritte bzw. Courant-Zahlen verwendet, die in Tabelle 4-5 aufgeführt sind. Für alle betrachteten Drehzahlen wird die Turbulenz der Strömung mit dem Scherspannungstransport-Turbulenzmodell abgebildet.

Tabelle 4-5: Zeitschritte, Courant-Zahlen und Verfeinerungsfaktoren für die Bestimmung des zeitlichen Diskretisierungsfehlers des Paddelrührers bei einer Rührerdrehzahl von 1000 min^{-1} auf dem feinen Netz.

	Paddelrührer		
	grob	mittel	fein
Zeitschritt, s	0,00373	0,00155	0,00093
Courant-Zahl, -	12	5	3
Verfeinerungsfaktor, -		2,4	1,67

Die Höhe der freien Oberfläche zwischen beiden Phasen wird über die Anfangswerte der Volumenanteile vorgegeben. Dazu wird eine Stufenfunktion verwendet, die den Phasenanteil als Funktion der Flüssigkeitshöhe ausdrückt. Wenn angenommen wird, dass z die Höhenkoordinate ist, lautet die Definition des Volumenanteils für die Gasphase (ANSYS INC., 2010e)

$$\alpha_G = \text{step} \left(\frac{z - b}{1 \text{ m}} \right) \quad (4-1)$$

mit α_G Volumenanteil der Gasphase, -
 z Höhenkoordinate, m
 b Flüssigkeitshöhe, m.

Die Stufenfunktion step ist bereits im Simulationsprogramm hinterlegt. Sobald das Argument der Funktion negativ wird (in diesem Fall unterhalb der Flüssigkeitsoberfläche), liefert sie den Wert 0. Ist das Argument positiv (oberhalb der Flüssigkeitsoberfläche), gibt step 1 zurück. Wenn das Argument den Wert 0 annimmt, ist der zurückgegebene Wert 0,5. Das Argument der Stufenfunktion muss dimensionslos sein (ANSYS INC., 2010c). Deshalb wird durch 1 m geteilt. Bei den Si-

mulationen des Paddelrührers sorgt die Benutzung dieser Funktion dafür, dass der Volumenanteil der Gasphase zu Beginn der Rechnung, wenn sich noch keine Trombe ausgebildet hat, oberhalb der Flüssigkeitsoberfläche 1 ist und darunter 0. Der Volumenanteil für die Flüssigkeit kann dann einfach über Gleichung (3-46) berechnet werden.

Als Flüssigkeit dient für die Simulation des Paddelrührers Wasser bzw. ein Glycerin-Wasser-Gemisch mit einer Viskosität von 91 mPa s. Die Gasphase ist Luft. Weil es sich hier um eine Simulation mit zwei kontinuierlichen Fluiden handelt, wird das Fluidvolumen-Modell (VOF-Modell) verwendet, um die zweiphasige Strömung abzubilden.

Da der Paddelrührer in einem Reaktor ohne Strombrecher betrieben wird, muss das Netz nicht in zwei Bereiche eingeteilt werden. Es wird, um die Rührerdrehung nachzubilden, komplett bewegt. Weil in diesem Fall die Wände mitrotieren würden, sind sie mit einer besonderen Wandrandbedingung belegt. Damit die Außenwände statisch sind, werden sie mit der gleichen Geschwindigkeit wie das Netz – aber in die entgegengesetzte Richtung – gedreht. Dies nennt sich in ANSYS CFX *Counter Rotating Wall*.

Außerdem ist es für diese Simulation wichtig, mit den richtigen Anfangswerten zu beginnen, da sonst unphysikalische Verteilungen der Volumenanteile erhalten werden. Für die tangentielle Geschwindigkeitskomponente der Flüssigkeit muss die Rührerumfangsgeschwindigkeit u_{ip} angegeben werden, während die beiden anderen Geschwindigkeitskomponenten 0 m s^{-1} betragen. Die Umfangsgeschwindigkeit lautet

$$u_{ip} = \pi \cdot d \cdot N \quad (4-2)$$

mit d Rührerdurchmesser, m
 N Rührerdrehzahl, s^{-1} .

Der Stoffübergangskoeffizient k_L wurde nach der Korrelation von LAMONT und SCOTT (1970) ausgewertet (siehe Gleichung (3-28)) und dann mit der simulierten Phasengrenzfläche und dem Füllvolumen des Reaktors der integrale Stoffübergangskoeffizient k_{La} berechnet. Als Diffusionskoeffizient von Sauerstoff in Wasser wurde $D_L = 2,3 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ verwendet (D'ANS und LAX, 1967).

Die übrigen verwendeten Einstellungen und Modelle zeigt Tabelle 13-11 im Anhang.

4.6.3 Simulation von H- und S-Rührer

Mit den Simulationen des H- und S-Rührers sollte vorrangig deren Homogenisierverhalten beurteilt werden. Außerdem wurde der Auslegungsprozess und die Optimierung der Rührergeometrie mit Simulationen begleitet.

Beide Rührer wurden einphasig simuliert, indem die freie Oberfläche der Flüssigkeit durch eine ebene Wand-Randbedingung ohne Haftbedingung (engl. *free slip wall*) ersetzt wurde. Bei H- und S-Rührer ist dies auch für den unbewehrten Reaktor möglich, weil sich bei den simulierten viskosen Fluiden keine deutliche Trombe ausbildet. Außerdem sind die Reynoldszahlen meist kleiner als 300 (vgl. Kapitel 3.1). Die freie Oberfläche durch eine Randbedingung zu ersetzen, vereinfacht – wie schon beim gasinduzierenden Rührer in Abschnitt 4.6.1 erwähnt – die Simulation erheblich, weil auf die Betrachtung der zweiten Phase verzichtet werden kann. Als Fluide für den H- und S-Rührer werden die drei Glycerin-Wasser-Mischungen und die Xanthan-Lösung verwendet.

Für die Beschreibung des nicht-newtonschen Fluidverhaltens von Xanthan wird das Ostwald-de Waele-Gesetz (Gleichung (3-3)) mit den in Tabelle 4-1 angegebenen Werten verwendet. Zur Gewährleistung der Stabilität des Lösers wird die Scherrate für den Potenzansatz zwischen $0,001 \text{ s}^{-1}$ und 4000 s^{-1} begrenzt.

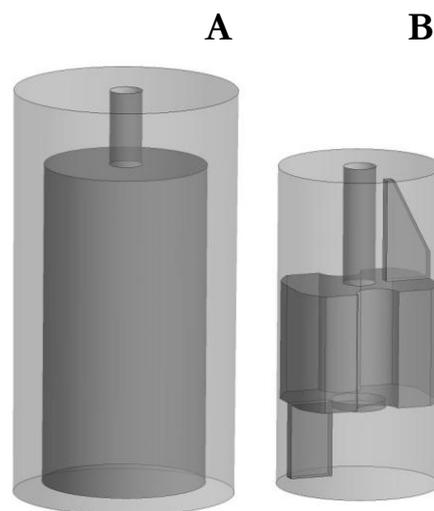


Abbildung 4-6: Aufteilung des Netzes in den statischen, äußeren Teil (A) und den drehenden, inneren Teil (B) zur Modellierung der Rührerdrehung während der Simulation des S-Rührers. Die Teilung des Netzes des H-Rührers erfolgte analog.

Ab einer Reynoldszahl von $Re > 50$ wurde für die Simulationen das Scherspannungstransport-Turbulenzmodell verwendet. Für $Re \leq 50$ erfolgte die Rechnung laminar ohne Turbulenzmodell.

Um die Drehung des Rührers zu implementieren, wurde das verwendete Netz in zwei Bereiche geteilt. Der äußere Teil ist statisch (Abbildung 4-6 A) und enthält – bei Verwendung eines bewehrten Reaktors – die Stromstörer, und der innere Bereich (Abbildung 4-6 B) schließt den Rührer ein und rotiert mit der jeweiligen Rührerdrehzahl.

Für die Simulation der Mischzeit wurde zunächst das Geschwindigkeitsfeld stationär bestimmt. Auf der Basis dieser Geschwindigkeiten ließ sich anschließend die Verteilung einer Markierungssubstanz im Reaktorinhalt instationär berechnen. Dabei wurden die Gleichungen der Impulsbilanzen und des gewählten Turbulenzmodells nicht erneut gelöst. Für die instationären Rechnungen entsprach der Zeitschritt einer Courant-Zahl von $CFL = 10$. Die weiteren Zeitschritte und die Verfeinerungsfaktoren, die für die Abschätzung des zeitlichen Diskretisierungsfehlers bei einer Rührerdrehzahl von 300 min^{-1} verwendet wurden, zeigt Tabelle 4-6.

Tabelle 4-6: Zeitschritte, Courant-Zahlen und Verfeinerungsfaktoren für die Bestimmung des zeitlichen Diskretisierungsfehlers des S-Rührers bei einer Rührerdrehzahl von 300 min^{-1} auf dem Netz mit mittlerer Elementanzahl.

	S-Rührer		
	grob	mittel	fein
Zeitschritt, s	0,1	0,0111	0,0011
Courant-Zahl, -	90	10	1
Verfeinerungsfaktor, -		9	10

Wird die Verteilung einer Markierungssubstanz in einer Flüssigkeit berechnet, muss dazu eine zusätzliche Variable (englische Bezeichnung in ANSYS CFX: *Additional Variable*) definiert werden. Sie wird im vorliegenden Fall als inerte, skalare Komponente betrachtet, die durch die Strömung transportiert wird. ANSYS CFX interpretiert die zusätzliche Variable in Fluiden als Konzentration (ANSYS INC., 2010e). Die zusätzlich zu lösende Differentialgleichung wurde im Unterkapitel 3.2.2 vorgestellt. Da sich die Markierungssubstanz nicht nur aufgrund der Konvektion, sondern auch diffusiv im Fluid verteilt, muss ein Diffusionskoeffizient vorgegeben werden. Hier wird ein Diffusionskoeffizient verwendet, wie er typischerweise in Flüssigkeiten vorkommt – nämlich $D_L = 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ (ROTH und SCHEEL, 1923; KRAUME, 2003).

Die Markierungssubstanz wird an einem vorher festgelegten Quellpunkt (englische Bezeichnung in ANSYS CFX: *Source Point*) zugegeben. Dieser liegt nah an der Randbedingung, die die freie Oberfläche der Flüssigkeit ersetzt, um z.B. das Auftropfen von Natriumchlorid-Lösung während des Experiments nachzubilden. Da die Zugabe der Markierungssubstanz als Stoß erfolgen soll, wird die Quelle über eine Stufenfunktion definiert.

$$\dot{m}_{\text{Marker, ein}} = 0,001 \frac{\text{kg}}{\text{s}} \cdot \text{step} \left(\frac{\Delta t + 10^{-8} \text{ s} - t}{1 \text{ s}} \right) \quad (4-3)$$

mit $\dot{m}_{\text{Marker, ein}}$ einströmender Massenstrom der Markierungssubstanz, kg s^{-1}
 Δt Zeitschritt, s
 t Zeitkoordinate, s

Die Funktionsweise der Stufenfunktion step wurde bereits in Abschnitt 4.6.2 erläutert.

Die Addition von 10^{-8} s im Zähler der Stufenfunktion in Gleichung (4-3) führt dazu, dass das Argument der Stufenfunktion nicht genau null werden kann, sie also nicht den Wert 0,5 annimmt. Auf diese Weise kann die Zugabe der Markierungssubstanz auf den ersten Zeitschritt begrenzt werden.

Die Auswertung der globalen Mischzeiten erfolgte nach Gleichung (3-7). Die Zeit, bei der der Wert der globalen Mischgüte 0,97 beträgt, wird als Mischzeit festgelegt. So entspricht der Homogenisierungsgrad im Rührkessel zu diesem Zeitpunkt 97 %.

Die weiteren verwendeten Einstellungen und Modelle sind im Anhang für die stationären Simulationen in Tabelle 13-12 und für die instationären Simulationen in Tabelle 13-13 zusammengefasst.

4.7 Abschätzung des Diskretisierungsfehlers nach Richardson

Die Diskretisierungsfehler nach Richardson wurden mit den in diesem Kapitel vorgestellten Gleichungen abgeschätzt (ROACHE, 1998; FREITAS und CELIK, 2004).

Zunächst werden die Anzahlen der finiten Volumina für jedes Netz und daraus die Verfeinerungsfaktoren r_{12} und r_{23} bestimmt.

$$r_{12} = \left(\frac{N_1}{N_2} \right)^{\frac{1}{D}} \quad r_{23} = \left(\frac{N_2}{N_3} \right)^{\frac{1}{D}} \quad (4-4)$$

mit N_1 Elementanzahl des feinen Netzes, -
 N_2 Elementanzahl des mittleren Netzes, -
 N_3 Elementanzahl des groben Netzes, -
 D Dimension des Netzes

Gleichung (4-4) gilt in dieser Form für die Abschätzung des örtlichen Diskretisierungsfehlers. Zur Bestimmung des zeitlichen werden in Gleichung (4-4) statt der Elementanzahlen die drei verwendeten Zeitschritte bzw. Courant-Zahlen eingesetzt. Alle anderen Größen in den folgenden Gleichungen müssen ebenfalls entsprechend ersetzt werden. Das heißt, dass dann statt der dis-

kreten Lösung auf dem feinen Netz die diskrete Lösung mit dem kleinsten Zeitschritt verwendet werden muss usw.

Außerdem ist bei instationären Simulationen wichtig, dass zur Bestimmung des örtlichen Diskretisierungsfehlers die Courant-Zahl auf allen betrachteten Gittern konstant sein muss (PASCHEDAG, 2004).

Die beobachtete Konvergenzordnung wird iterativ ermittelt. Dazu wird Gleichung (4-5) benutzt.

$$p = \frac{\left| \ln \left| \frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1} \right| + \ln \left(\frac{r_{12}^p - 1 \cdot \operatorname{sgn} \left(\frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1} \right)}{r_{23}^p - 1 \cdot \operatorname{sgn} \left(\frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1} \right)} \right) \right|}{\ln(r_{12})} \quad (4-5)$$

mit f_1 diskrete Lösung auf dem feinen Netz
 f_2 diskrete Lösung auf dem mittleren Netz
 f_3 diskrete Lösung auf dem groben Netz

Für konstante Verfeinerungsfaktoren ($r_{12} = r_{23}$) fällt der zweite Term im Nenner von Gleichung (4-5) weg und p kann direkt ohne Iterationen berechnet werden. Außerdem dürfen die Differenzen der diskreten Lösungen auf den verschiedenen Netzen nicht zu nah an 0 liegen.

Der Diskretisierungsfehler des feinen Netzes ergibt sich dann zu

$$\varepsilon_{D,12} \approx \frac{\left| \frac{f_1 - f_2}{f_1} \right|}{r_{12}^p - 1} \quad (4-6)$$

und der des mittleren Netzes ist

$$\varepsilon_{D,23} \approx \frac{\left| \frac{f_2 - f_3}{f_2} \right|}{r_{23}^p - 1}, \quad (4-7)$$

während der des groben Netzes

$$\varepsilon_{D,32} \approx \frac{\left| \frac{f_2 - f_3}{f_2} \right| \cdot r_{23}^p}{r_{23}^p - 1} \quad (4-8)$$

beträgt.

5 Iterations- und Diskretisierungsfehler

Da für die Beurteilung der Ergebnisse einer Simulation die Kenntnis der numerischen Fehler sehr wichtig ist, werden diese als Erstes präsentiert, bevor die Ergebnisse vorgestellt werden. Zuerst wird auf die Iterationsfehler und die Abbruchkriterien eingegangen. Dann werden die Diskretisierungsfehler abgeschätzt. Damit sind dann alle Fehler eingeführt, die vor dem Vergleich der Simulationen mit experimentellen Daten bekannt sein müssen, um beurteilen zu können, wie gut die gewählten Modelle der Simulationen reale Vorgänge in der Strömung bzw. Messungen nachbilden können.

Deswegen werden in diesem Kapitel die verschiedenen numerischen Fehler, die in den Abschnitten 3.4.1 bis 3.4.3 eingeführt wurden, für die einzelnen Simulationen besprochen und nach Möglichkeit quantitativ bestimmt. Dabei sind drei Rührer berücksichtigt worden. Es wird zunächst in Unterkapitel 5.1 auf den gasinduzierenden Rührer eingegangen, bevor in Abschnitt 5.2 die Iterations- und Diskretisierungsfehler des Paddelrührers erläutert werden. Die numerischen Fehler bei der Simulation des S-Rührers finden in Abschnitt 5.3 Beachtung. Das Kapitel schließt mit einem Vergleich der drei betrachteten Rührer im Unterkapitel 5.4.

5.1 Simulation des gasinduzierenden Rührers

5.1.1 Iterationsfehler und Abbruchkriterium

Da der Iterationsfehler nicht genau bestimmt werden kann, ist die Wahl eines geeigneten Abbruchkriteriums für die Simulationen wichtig. Seine Bestimmung und die Auswirkungen der Maschinengenauigkeit auf die Lösung werden in diesem Kapitel vorgestellt.

Die Auswirkungen der Maschinengenauigkeit auf Simulationsergebnisse gilt es, zuerst zu überprüfen. Sie schlagen sich im Rundungsfehler nieder. Für die Prüfung wurden jeweils eine Rechnung mit einfacher und eine mit doppelter Genauigkeit (vgl. Kapitel 3.4.1) durchgeführt und beide dann in Abbildung 5-1 verglichen.

Es sind nur wenige deutliche Abweichungen zwischen den Simulationen in Abbildung 5-1 A und B zu erkennen. Abbildung 5-1 C zeigt Differenzen, die bis zu 25,6 % der Ausgangswerte betragen können. Diese Prozentzahl ergibt sich aus dem maximalen beobachteten Unterschied

(Abbildung 5-1 C) von $0,0435 \text{ m s}^{-1}$ bezogen auf den kleinsten angegebenen Geschwindigkeitswert (Abbildung 5-1 A und B) von $0,17 \text{ m s}^{-1}$.

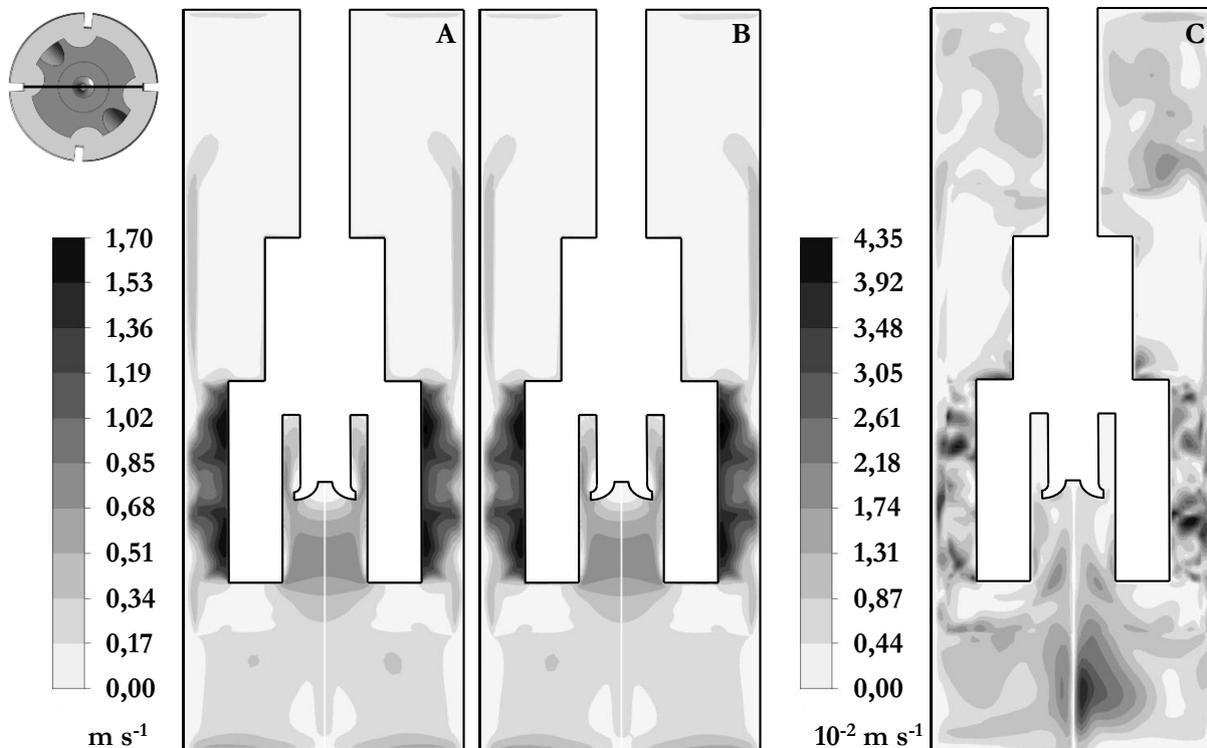


Abbildung 5-1: Vergleich der Geschwindigkeit in der vertikalen Mittelebene des bewehrten Reaktors mit dem gasinduzierenden Rührer für Simulationen mit einfacher (A) und doppelter (B) Genauigkeit und Darstellung des absoluten Geschwindigkeitsunterschieds (C) zwischen beiden Rechnungen bei einer Rührerdrehzahl von 1500 min^{-1} auf dem Netz mit mittlerer Elementezahl. Die Darstellung des Reaktors in der Draufsicht oben links verdeutlicht die Lage der gezeigten Ebene.

Das Abbruchkriterium wird mithilfe von Residuen definiert (vgl. Abschnitt 3.4.2). Für jede Simulation muss bestimmt werden, bei welchem Wert der Residuen die iterative Lösung des Gleichungssystems beendet werden kann, damit der Iterationsfehler nicht zu groß ist. Da der Iterationsfehler selbst nicht zu ermitteln ist, wird das Abbruchkriterium wie unten beschrieben festgelegt.

Während der Simulation werden nicht nur die Residuen sondern auch weitere Größen – wie z.B. die Fluidgeschwindigkeit oder das Drehmoment des Rührers – beobachtet. Wenn die Residuen während des Simulationsverlaufs fallen, können die zusätzlich betrachteten Variablen über den

Residuen aufgetragen werden. Dies ist in Abbildung 5-2 B zu sehen. Abbildung 5-2 A zeigt den Verlauf der Residuen über der Anzahl der Iterationsschritte.

Da die Residuen mit steigender Zahl der Iterationsschritte sinken, schreitet der Simulationsverlauf in Abbildung 5-2 B von rechts nach links fort. Die Rechnung beginnt also am rechten Ende der Abszissenachse und hört am linken auf. Dies wird durch den Pfeil unter dem Diagramm verdeutlicht.

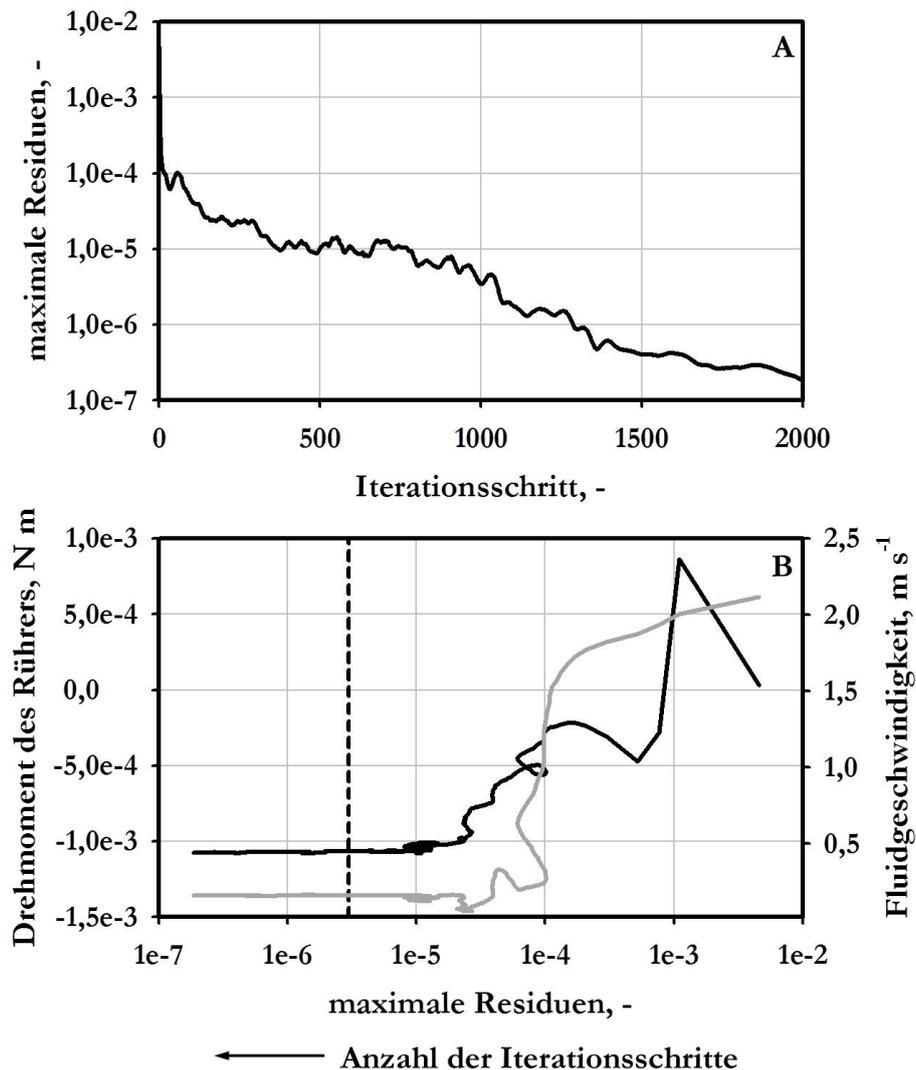


Abbildung 5-2: Bestimmung des Abbruchkriteriums der stationären Simulationen des gasinduzierenden Rührers. Fallende Residuen während der Simulation (A) und Ermittlung des Abbruchkriteriums bei konstantem Variablenverlauf (B) mithilfe des Drehmoments des Rührers (—) und der Fluidgeschwindigkeit im Reaktor (—). Residuenwert, unterhalb dessen sich die Werte der Variablen nicht mehr ändern: - - - -.

Die Residuen in Abbildung 5-2 A fallen zwar, aber nicht monoton. Zwischendurch sind immer wieder kleinere Anstiege der Residuen zu verzeichnen. Das Rührerdrehmoment und die Fluidge-

schwindigkeit in Abbildung 5-2 B sinken während der Simulation und zeigen unterhalb von etwa $r_n = 10^{-5}$ einen konstanten Verlauf. Um sicherzugehen, dass alle Variablen konstant sind, wird ein Wert von $r_n = 3 \cdot 10^{-6}$ als Abbruchkriterium gewählt, so dass sich die Variablenverläufe über mindestens 500 Iterationen nicht mehr ändern.

Die Simulation beginnt mit Residuenwerten von etwa $5 \cdot 10^{-3}$. Während der Rechnung verringern sich die Residuen also um etwa drei Größenordnungen.

Diskussion

Die maximal möglichen Unterschiede zwischen den Rechnungen mit einfacher und doppelter Genauigkeit sind mit bis zu 25,6 % deutlich. Es ist aber davon auszugehen, dass die Abweichungen meistens niedriger liegen. Dennoch werden alle weiteren Simulationen mit doppelter Genauigkeit gerechnet, weil dann der Rundungsfehler niedriger ist (PASCHEDAG, 2004).

Ohne Zugang zur exakten Lösung und zur Koeffizientenmatrix des Gleichungssystems ist der Iterationsfehler nicht quantitativ bestimmbar (FERZIGER und PERIĆ, 1996). Deshalb wird das Abbruchkriterium für die Simulationen ermittelt, wie es in Abbildung 5-2 dargestellt ist. Diese Vorgehensweise ist verbreitet (AUBIN et al., 2004; AUBIN und XUEREB, 2006; CELIK und KARATEKIN, 1997; HAQUE et al., 2006; JAWORSKI et al., 2000; KELLY und GIGAS, 2003; KERDOUSS et al., 2006).

Für die Simulationen des gasinduzierenden Rührers veränderten sich die beobachteten Variablen nicht mehr, wenn die Residuen unter $3 \cdot 10^{-6}$ fielen. Deshalb wurden die Rechnungen beendet, sobald die Residuen kleiner als dieser Wert waren.

Während der Simulation fallen die Residuen um etwa drei Größenordnungen. Dies ist ausreichend, damit sich der Fehler auch entsprechend verringern kann (vgl. Kapitel 3.4.2). Auch diese Bedingung ist mit dem gewählten Abbruchkriterium von $3 \cdot 10^{-6}$ erfüllbar. Deshalb kann es problemlos verwendet werden.

5.1.2 Diskretisierungsfehler

In diesem Abschnitt wird nun der Diskretisierungsfehler abgeschätzt. Normalerweise leistet er den größten Beitrag zum numerischen Gesamtfehler. Aus diesem Grund ist seine Bestimmung sehr wichtig. Die Vorgehensweise zur Abschätzung des Diskretisierungsfehlers wurde in Kapitel 4.7 beschrieben. Zunächst wird der örtliche Diskretisierungsfehler ermittelt. Anschließend geht es

mit der Betrachtung des zeitlichen Diskretisierungsfehlers weiter. Zuletzt wird auf die numerische Diffusion eingegangen (vgl. Abschnitt 3.3.4).

Die Werte, die für die Abschätzung des örtlichen und zeitlichen Diskretisierungsfehlers notwendig sind, finden sich in Tabelle 4-2 bzw. Tabelle 4-3 und Tabelle 4-4.

Zuerst wird also der örtliche Diskretisierungsfehler abgeschätzt. Die Ergebnisse bei drei verschiedenen Drehzahlen für alle verwendeten Netze sind in Abbildung 5-3 dargestellt. Die dunkelgrauen Balken in Abbildung 5-3 stehen für den Fehler des Rührerdrehmoments und die hellgrauen Balken in Abbildung 5-3 entsprechen dem Fehler der Fluidgeschwindigkeit im Reaktor.

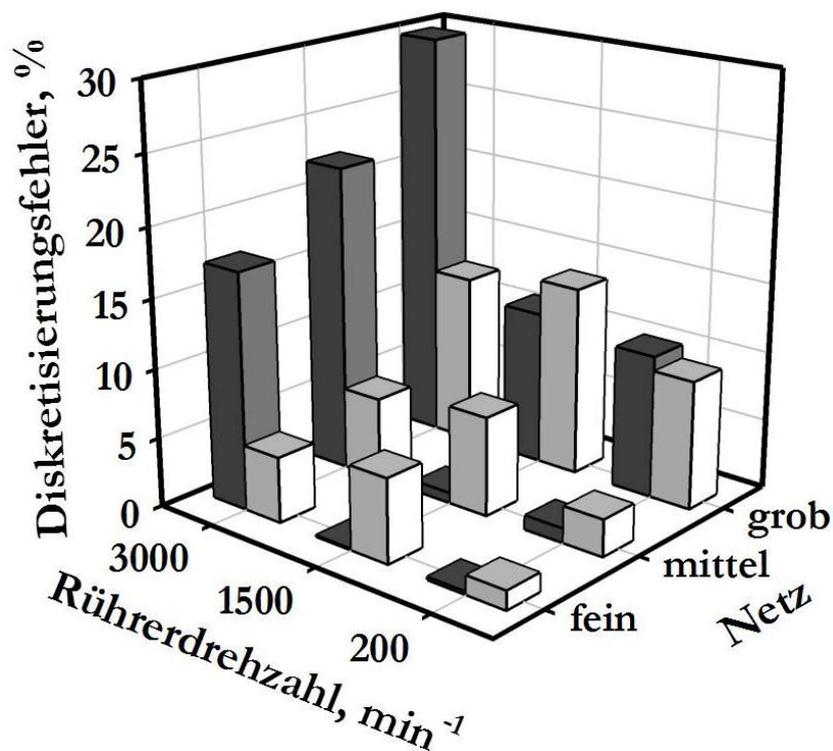


Abbildung 5-3: Örtliche, stationäre Diskretisierungsfehler nach Richardson für den gasinduzierenden Rührer im bewehrten Reaktor mit Wasser bei unterschiedlichen Drehzahlen auf dem groben, mittleren und feinen Netz. ■ Diskretisierungsfehler für das Drehmoment des Rührers. □ Diskretisierungsfehler für die mittlere Geschwindigkeit im Reaktor.

Zunächst fällt auf, dass die Diskretisierungsfehler auf dem größten Gitter am größten sind und dann mit jeder Verfeinerung des Netzes sinken. Die absolute Reduktion des Fehlers vom groben zum mittleren Gitter ist höher als für den Schritt von mittleren zum feinen Netz. Für das Rührerdrehmoment sind die Fehler für jedes Gitter jeweils bei einer Drehzahl von 3000 min^{-1} am höchsten, während sie für die Geschwindigkeit auf jedem Netz bei 1500 min^{-1} am höchsten sind.

Die größten Fehler, die überhaupt bestimmt wurden, sind die des Drehmoments bei 3000 min^{-1} . Auf dem groben Gitter beträgt der maximale Fehler 29,7 %, während er auf dem mittleren untersuchten Netz bei 22,2 % und auf dem feinen bei 17,1 % liegt.

Als Nächstes sollte der zeitliche Diskretisierungsfehler auf dem mittleren Netz bei unterschiedlichen Zeitschritten geschätzt werden. Aus Zeitgründen sollte die Ermittlung des zeitlichen Diskretisierungsfehlers nur auf dem Gitter mit mittlerer Anzahl finiter Volumina und bei einer Rührerdrehzahl erfolgen. Während aller durchgeführten instationären Simulationen kam es aber zu Abbrüchen des Lösers, so dass kein Endergebnis ermittelt werden konnte. Deshalb war es auch nicht möglich, einen zeitlichen Diskretisierungsfehler zu bestimmen.

Also wird nun als Letztes die numerische Diffusion betrachtet. Numerische Diffusion tritt während einer Simulation auf jeden Fall auf. Für Aufwind-Diskretisierungen, wie sie für die vorliegenden Rechnungen verwendet werden, ist sie ein bekanntes Problem (PASCHEDAG, 2004). Ohne Zugang zum Quellcode des verwendeten Simulationsprogramms lässt sich ihr Ausmaß aber nicht quantitativ ermitteln.

Also werden hier stattdessen Lösungen verglichen, die aus Simulationen mit der Aufwind-Interpolation erster Ordnung und dem Hybridverfahren zweiter Ordnung stammen. Bei der Diskretisierungsmethode zweiter Ordnung tritt zwar genauso numerische Diffusion auf wie bei der erster Ordnung, aber in geringerem Maße (PASCHEDAG, 2004). Abbildung 5-4 A bzw. B zeigt die Ergebnisse der Rechnungen mit den verschiedenen Diskretisierungsmethoden, während die absoluten Unterschiede zwischen beiden Simulationen in Abbildung 5-4 C zu sehen sind.

Die Unterschiede zwischen dem Diskretisierungsverfahren erster und zweiter Ordnung liegen weniger im Betrag der Geschwindigkeit als in ihrer Verteilung. Trotzdem kann es, obwohl die Differenzen in Abbildung 5-4 A und B nur an wenigen Stellen deutlich zu erkennen sind, für die gezeigten Geschwindigkeiten zu Abweichungen von bis zu 188,8 % kommen. Diese Prozentzahl ergibt sich – wie schon in Abschnitt 5.1.1 – aus dem maximalen beobachteten Unterschied (Abbildung 5-4 C) von $0,321 \text{ m s}^{-1}$ bezogen auf den kleinsten angegebenen Geschwindigkeitswert (Abbildung 5-4 A und B) von $0,17 \text{ m s}^{-1}$.

Bei genauer Betrachtung der Geschwindigkeitsgradienten zwischen Rührerkörper und Wand für beide Diskretisierungsverfahren in der Vergrößerung in Abbildung 5-5 A und B ist zu sehen, dass die Gradienten der Geschwindigkeit mit dem Hybridverfahren zweiter Ordnung (Abbildung 5-5 B) steiler als die der Aufwind-Interpolation erster Ordnung (Abbildung 5-5 A) sind.

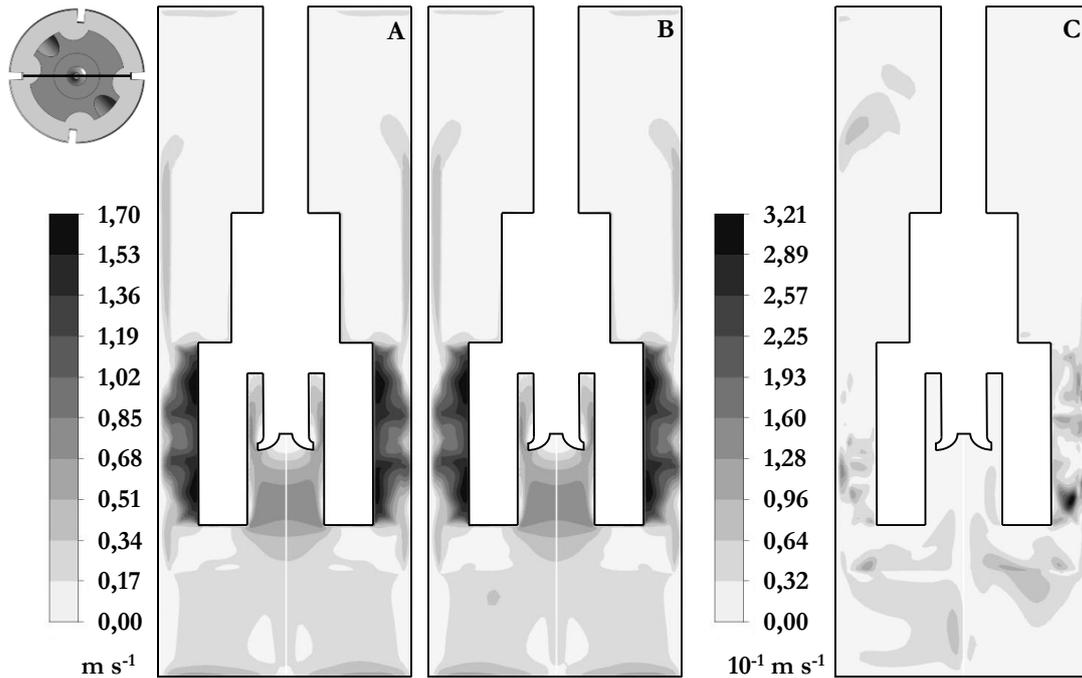


Abbildung 5-4: Vergleich der Geschwindigkeit in der vertikalen Mittelebene des bewehrten Reaktors mit dem gasinduzierenden Rührer für Simulationen mit Aufwind-Interpolation erster Ordnung (A) und Hybridverfahren zweiter Ordnung (B) und Darstellung des absoluten Geschwindigkeitsunterschieds (C) zwischen beiden Rechnungen bei einer Rührerdrehzahl von 1500 min^{-1} auf dem Netz mit mittlerer Elementezahl. Die Darstellung des Reaktors in der Draufsicht oben links verdeutlicht die Lage der gezeigten Ebene.

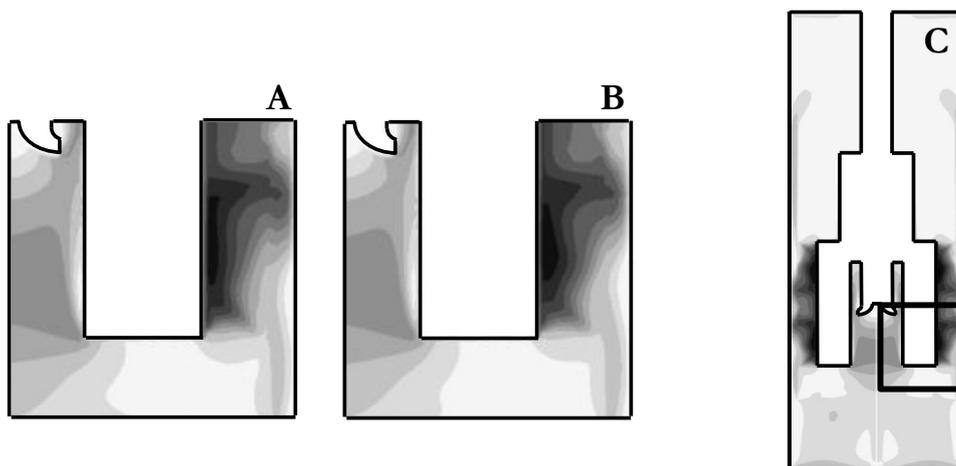


Abbildung 5-5: Vergrößerung des Geschwindigkeitsverlaufs in der vertikalen Mittelebene des bewehrten Reaktors mit dem gasinduzierenden Rührer für Simulationen mit Aufwind-Interpolation erster Ordnung (A) und Hybridverfahren zweiter Ordnung (B) bei einer Rührerdrehzahl von 1500 min^{-1} auf dem Netz mit mittlerer Elementezahl und Darstellung des Ausschnitts der Vergrößerung (C).

Diskussion

Dass die abgeschätzten örtlichen Diskretisierungsfehler auf dem gröbsten Netz am größten sind und sich dann mit jeder Verfeinerung des Gitters verringern, entspricht den Erwartungen, denn es ist die Bedingung für ein konsistentes Lösungsverfahren (vgl. Abschnitt 3.3.1 Konsistenz). Die Verwendung des groben Netzes birgt zwar den Vorteil, dass die Simulationen schnell beendet werden können, aber da der Fehler auf dem groben Gitter am größten ist, wird es nicht weiter genutzt. Außerdem war es aufgrund der komplexen Geometrie des gasinduzierenden Rührers mit vielen spitzen Winkeln nicht möglich, beim groben Netz die gewählten Qualitätskriterien einzuhalten (siehe Kapitel 4.5 bzw. Tabelle 13-1).

Da die Simulationen auf dem feinen Netz bis zum Dreifachen der Zeit in Anspruch nehmen, die für die Rechnungen auf dem mittleren Gitter nötig ist, wird für die weiteren Simulationen das Netz mit der mittleren Anzahl finiter Volumina verwendet.

Nun wird der Einfluss des Diskretisierungsschemas bzw. die numerische Diffusion diskutiert. Schon im Vorfeld der Simulationen bei der Erstellung der Rechengitter kann das Ausmaß der numerischen Diffusion reduziert werden. Dies lässt sich bewerkstelligen, indem das Netz nach Möglichkeit senkrecht zur Strömungsrichtung ausgerichtet wird. Durch die Benutzung von strukturierten Gittern – wie im vorliegenden Fall – kann das so gut wie möglich erreicht werden (vgl. Abschnitt 3.3.4). Eine andere Möglichkeit, die numerische Diffusion zu betrachten, außer dem hier verwendeten und beschriebenen Vorgehen, ist nicht bekannt (CASEY und WINTERGERSTE, 2000).

Die Reynoldszahlen liegen für den simulierten Drehzahlbereich mit dem verwendeten Fluid Wasser zwischen $700 < Re < 10500$. Es kann also von einer turbulenten Strömung ausgegangen werden bzw. davon, dass der Umschlag zur Turbulenz schon fortgeschritten ist (siehe Kapitel 3.1). Die Strömung wird deshalb von Konvektion dominiert. Für solche Strömungen wurde die Aufwind-Interpolation erster Ordnung ursprünglich entwickelt (FERZIGER und PERIĆ, 2008). Deshalb werden die prozentualen Abweichungen zwischen den zwei betrachteten Verfahren deutlich unterhalb von 188,8 % angesiedelt sein. Denn die höchsten absoluten Differenzen zwischen beiden Diskretisierungsmethoden zeigen hauptsächlich die Stellen, wo die Geschwindigkeiten auch groß sind. Aber trotzdem können sie nicht vernachlässigt werden.

Ebenso ist der Einfluss der numerischen Diffusion in der Simulation mit dem Diskretisierungsverfahren erster Ordnung in der Vergrößerung in Abbildung 5-5 sichtbar. Dass sich die Geschwindigkeitsgradienten in dem in Abbildung 5-5 A gezeigten Ausschnitt auf eine größere

Fläche verteilt als in Abbildung 5-5 B, ist auf die numerische Diffusion zurückzuführen, die die Gradienten abflacht.

Da auch für eine konvektionsdominierte Strömung der Einfluss eines Diskretisierungsverfahrens erster Ordnung und der numerischen Diffusion sichtbar ist und die Abweichungen zum Hybridverfahren zweiter Ordnung mindestens etwa 18,9 % betragen, wird letzteres für alle folgenden Simulationen des gasinduzierenden Rührers verwendet.

5.1.3 Zusammenfassung

Die Unterschiede zwischen den Rechnungen mit einfacher und doppelter Genauigkeit sind mit bis zu 25,5 % deutlich. Deshalb werden alle folgenden Simulationen mit doppelter Genauigkeit gerechnet.

Die Simulationen werden abgebrochen, sobald die Residuen unter $3 \cdot 10^{-6}$ fallen. Die Residuen können sich während der Rechnungen um mindestens drei Größenordnungen verringern.

Wie zu erwarten, sind die Diskretisierungsfehler auf dem groben Netz im Vergleich mit den beiden anderen Gittern am größten und werden mit jeder weiteren Verfeinerung des Netzes geringer. Da für das feine Netz der zeitliche Aufwand für die Simulationen groß ist, wird bei allen weiteren Simulationen das Gitter mit mittlerer Anzahl an finiten Volumina benutzt, auf dem der maximale ermittelte, örtliche Diskretisierungsfehler $\varepsilon_D \leq 22,2 \%$ beträgt.

Für die instationären Rechnungen konnte kein zeitlicher Diskretisierungsfehler bestimmt werden, da alle instationären Simulationen abbrechen und kein Endergebnis ermittelt werden konnte.

Um die numerische Diffusion in Grenzen zu halten, wurden strukturierte Netze gewählt. Außerdem wird für die weiteren Rechnungen ausschließlich das Hybridverfahren zweiter Ordnung benutzt.

5.2 Simulation des Paddelrührers

5.2.1 Iterationsfehler und Abbruchkriterium

Zunächst sollen die Auswirkungen der Maschinengenauigkeit auf die Simulationen des Paddelrührers überprüft werden. Sie hat Konsequenzen für den Rundungsfehler der Rechnungen. Zur Überprüfung werden Simulationen, die mit einfacher und doppelter Genauigkeit durchgeführt wurden, in Abbildung 5-6 verglichen.

Abbildung 5-6 A und B zeigen die größten Unterschiede am rechten Rand des Behälters oberhalb des Rührers und am linken Rand des Reaktors im oberen Bereich der Flüssigkeitsstrombe. Die Abweichungen zwischen den beiden Simulationen in den oben beschriebenen Gebieten, die Abbildung 5-6 C zeigt, betragen bis zu 100 %. Ansonsten beträgt der größtmögliche Fehler 50 %. Diese Prozentangabe kommt dadurch zustande, dass die maximale Abweichung von $0,05 \text{ m s}^{-1}$ in Abbildung 5-6 C durch die kleinste Geschwindigkeit von $0,1 \text{ m s}^{-1}$, die in der Legende von Abbildung 5-6 A und B angegeben ist, geteilt wird.

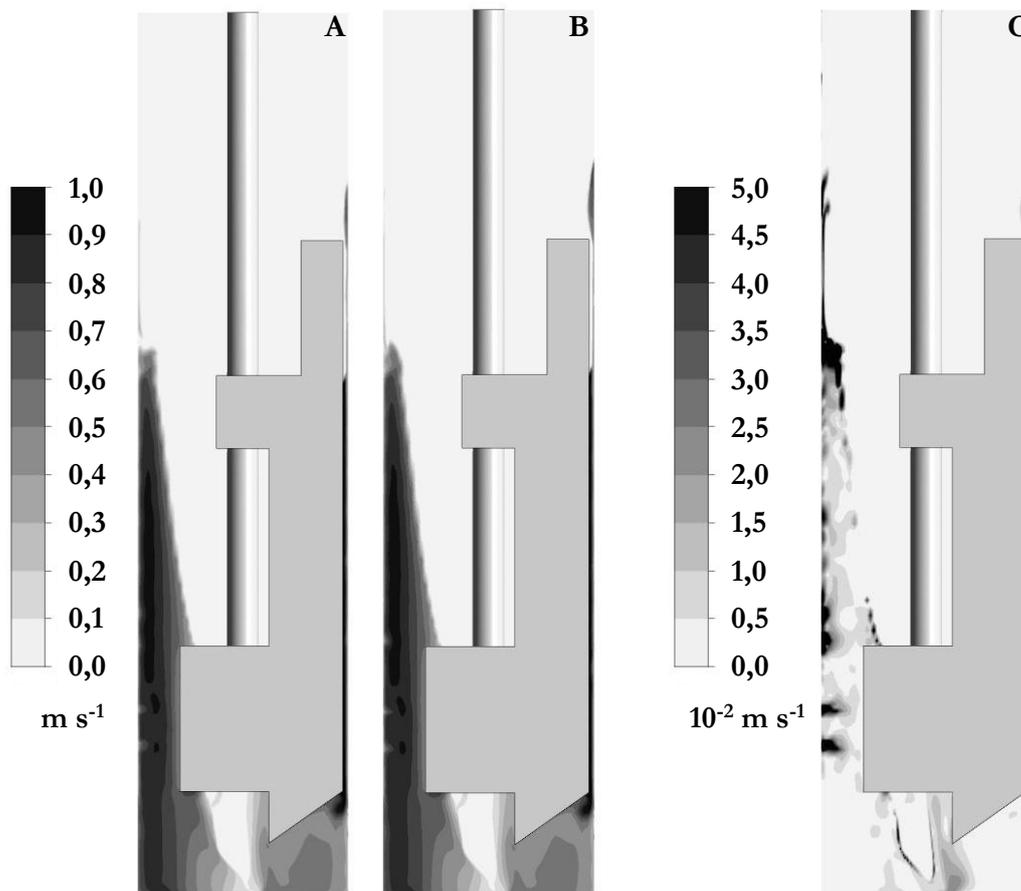


Abbildung 5-6: Vergleich der Geschwindigkeit von Wasser in der vertikalen Mittelebene des unbewehrten Reaktors mit dem Paddelrührer für Simulationen mit einfacher (A) und doppelter (B) Genauigkeit und Darstellung des absoluten Geschwindigkeitsunterschieds (C) zwischen beiden Rechnungen bei einer Rührerdrehzahl von 1000 min^{-1} auf dem feinen Netz.

Für die Simulationen des Paddelrührers wird das Abbruchkriterium in Abbildung 5-7 bestimmt. Seine Festlegung ist wichtig, um den Iterationsfehler so gering wie möglich zu halten.

Der Paddelrührer wird instationär simuliert. Deshalb muss kein Abbruchkriterium derselben Art für die Rechnungen wie für den gasinduzierenden Rührer in Kapitel 5.1.1 festgelegt werden. Ein

Residuenwert – ähnlich dem Abbruchkriterium in Abschnitt 5.1.1 – , unterhalb dessen die Iterationen beendet werden können, wird bei instationären Rechnungen nur für die inneren Iterationen des jeweiligen Zeitschritts (englische Bezeichnung in ANSYS CFX: *Coefficient Loop Iteration*) benötigt. Mit diesen inneren Iterationen wird nach Möglichkeit der Zeitschritt zur Konvergenz gebracht. Als Abbruchkriterium für die Rechnung an sich dient die Anzahl an simulierten Zeitschritten. Meist liegt das Augenmerk bei instationären Simulationen auch auf der zeitlichen Auflösung des betrachteten Prozesses. In diesem Fall wird die Rechnung dann beendet, wenn das gewünschte Phänomen in der Simulation abgebildet wurde. Ist weniger der zeitliche Verlauf der Strömung, sondern eher deren generelle Abbildung von Interesse, wird die Simulation abgebrochen, wenn sich die Strömung vollständig ausgebildet hat und sich wichtige Strömungsvariablen nicht mehr ändern.

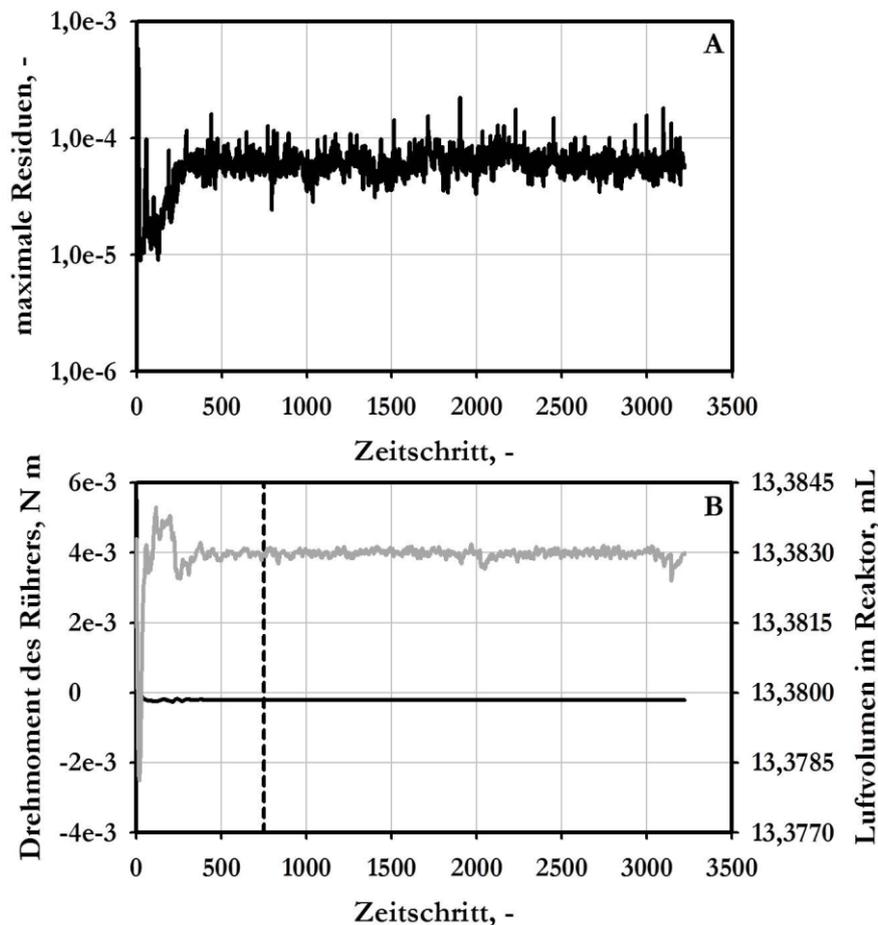


Abbildung 5-7: Bestimmung des Abbruchkriteriums der Simulationen des Paddelrührers. Residuenverlauf während der Simulation (A) und Ermittlung des Zeitpunktes konstanten Variablenverlaufs (B) mithilfe des Drehmoments des Rührers (—) und des Volumens, das die Luft im Reaktor einnimmt (---). Anzahl der Zeitschritte, nach der sich die Werte der Variablen nicht mehr ändern: - - - -.

In Abbildung 5-7 A ist der Verlauf der Residuen während der Simulation dargestellt. Auffallend ist, dass die Residuen nicht fallen, sondern zunächst leicht ansteigen und sich dann im Mittel leicht unter 10^{-4} bewegen. Der Verlauf ist nicht monoton. In Abbildung 5-7 B sind die Verläufe des Rührerdrehmoments und des Volumens, das die Luft bei der zweiphasigen Strömung im Reaktor einnimmt, während der Simulation zu erkennen. Das Rührerdrehmoment ist nach etwa 300 Zeitschritten konstant, während das Luftvolumen zu keiner Zeit der Rechnung vollständig konstant wird. Aber nach etwa 750 Zeitschritten sind die Schwankungen dieses Werts nur noch sehr gering.

Diskussion

Die Unterschiede zwischen den Simulationen mit einfacher und doppelter Genauigkeit betragen nur deshalb bis zu 100 %, weil die Flüssigphase in der Rechnung mit doppelter Genauigkeit höher über den Rührer reicht als in der Rechnung mit einfacher Genauigkeit. Also unterscheidet sich in den Simulationen eher die Phasenverteilung als die Geschwindigkeitsverteilung, und das auch nur geringfügig. Da es sich um verschiedene instationäre Simulationen handelt, sind leicht abweichende Phasenverteilungen möglich. Auch die Abweichungen im übrigen Behälter werden niedriger als 50 % liegen. Dennoch werden alle folgenden Simulationen mit doppelter Genauigkeit ausgeführt.

Da die Variablenverläufe über den inneren Iterationen nicht ausgegeben werden können, ist es nicht möglich, für die inneren Iterationen ein Abbruchkriterium nach dem Muster, das in Abschnitt 5.1.1 beschrieben wurde, zu bestimmen. Deshalb wurde das Abbruchkriterium für die inneren Iterationen auf 10^{-6} festgelegt. Obwohl dieser Wert nicht in jedem Zeitschritt erreicht werden konnte, verringerten sich die Residuen während der inneren Iterationen eines Zeitschritts doch von etwa $5 \cdot 10^{-2}$ auf ca. $6 \cdot 10^{-5}$ – also um etwa drei Größenordnungen. Dies wird als ausreichend angesehen, damit der Iterationsfehler in genügendem Maß sinken kann (FERZIGER und PERIĆ, 2008).

Die Variablenverläufe in Abbildung 5-7 B sind nach etwa 750 Zeitschritten konstant bzw. ändern sich nur noch marginal. 750 Zeitschritte entsprechen etwa 12 Rührerumdrehungen. Weil diese Dauer zu gering erscheint, damit sich die Strömung vollständig ausbilden kann, werden die Simulationen fortgesetzt, bis 50 Rührerumdrehungen mit den Rechnungen abgebildet werden. Das entspricht im vorliegenden Fall – unabhängig von der Rührerdrehzahl – 3222 Zeitschritten. Nach dieser Anzahl werden die Simulationen beendet.

5.2.2 Diskretisierungsfehler

Nun geht es um die Abschätzung des Diskretisierungsfehlers. Die Werte, die zu seiner Bestimmung nötig sind, zeigen Tabelle 4-2 bzw. Tabelle 4-3 und Tabelle 4-5.

In diesem Abschnitt wird zuerst der örtliche Diskretisierungsfehler beschrieben, bevor zum zeitlichen Diskretisierungsfehler übergegangen wird. Das Kapitel schließt mit der Betrachtung der numerischen Diffusion.

Als Erstes wird der örtliche Diskretisierungsfehler besprochen. Abbildung 5-8 zeigt die abgeschätzten örtlichen Diskretisierungsfehler für den Paddelrührer bei drei verschiedenen Drehzahlen auf den drei betrachteten Gittern.

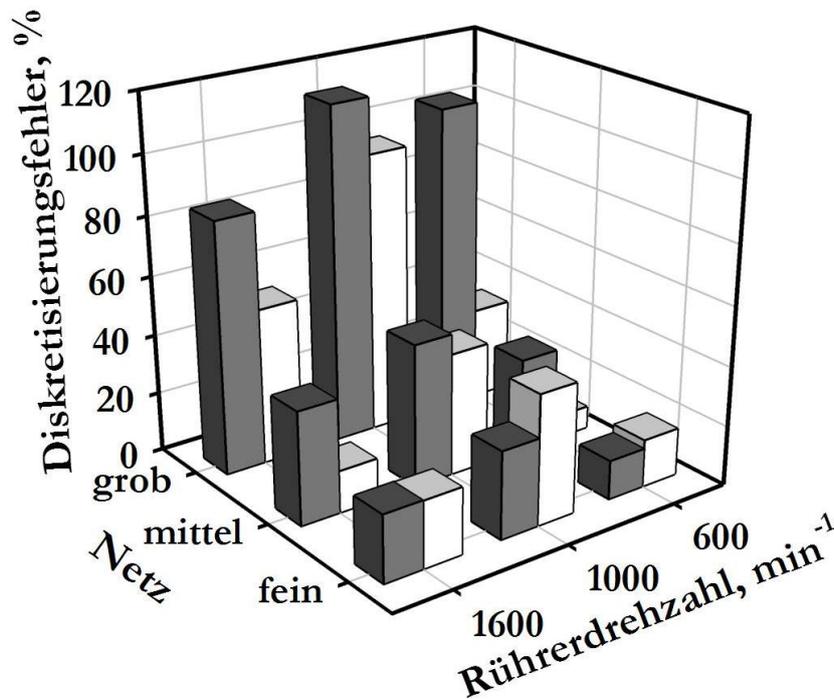


Abbildung 5-8: Örtliche, instationäre Diskretisierungsfehler nach Richardson für den Paddelrührer im unbewehrten Reaktor mit Wasser und Luft bei unterschiedlichen Drehzahlen auf dem groben, mittleren und feinen Netz mit einer Courant-Zahl von $CFL = 3$. ■ Diskretisierungsfehler für das Drehmoment des Rührers. □ Diskretisierungsfehler für die mittlere Geschwindigkeit von Wasser im Reaktor.

Die Fehler auf dem groben Netz sind für beide untersuchte Größen bei allen drei Drehzahlen die höchsten. Mit jeder Verfeinerung des Gitters werden auch die örtlichen Diskretisierungsfehler kleiner. Der größte bestimmte Fehler auf dem groben Netz beträgt 113,3 %, wohingegen er auf dem mittleren Gitter bei 48,1 % und auf dem feinen bei 43,7 % liegt.

Bezüglich der Rührergeschwindigkeiten lassen aus Abbildung 5-8 sich für die Diskretisierungsfehler keine eindeutigen Tendenzen ablesen. Meist sind die Fehler des Drehmoments höher als die der Geschwindigkeit.

Als Nächstes wird der zeitliche Diskretisierungsfehler der instationären Simulationen beschrieben. Er ist für die Größe der Phasengrenzfläche in Abbildung 5-9 gezeigt.

Die Abnahme des Fehlers mit sinkender Courant-Zahl ist in Abbildung 5-9 gut zu erkennen. Für die niedrigste betrachtete Courant-Zahl von $CFL = 3$ beträgt der zeitliche Fehler 1,2 %.

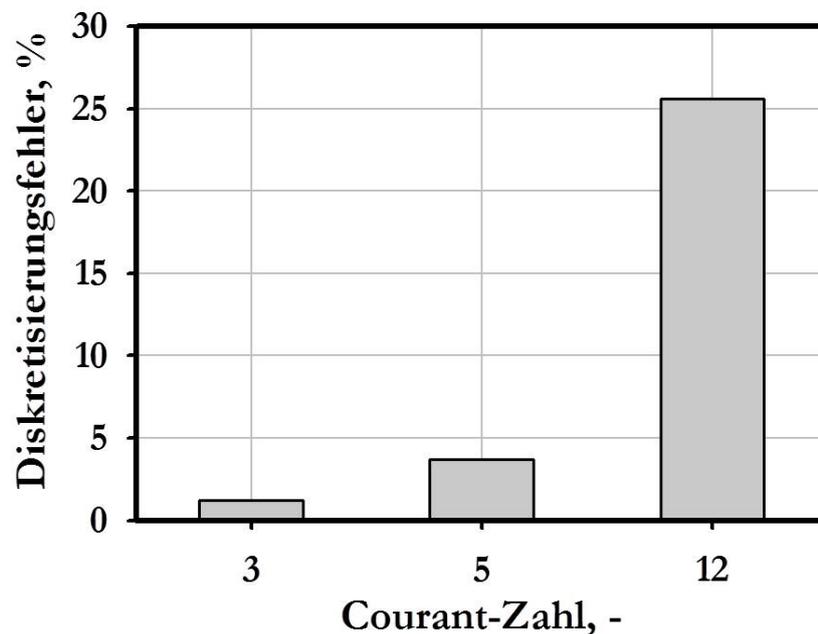


Abbildung 5-9: Zeitliche, instationäre Diskretisierungsfehler der Größe der Phasengrenzfläche nach Richardson für den Paddelrührer im unbewehrten Reaktor mit Wasser und Luft bei unterschiedlichen Courant-Zahlen für eine Rührerdrehzahl von 1000 min^{-1} auf dem feinen Netz.

Als letzter Punkt dieses Abschnitts wird nun die numerische Diffusion erläutert. Zur Beurteilung ihres Ausmaßes werden in Abbildung 5-10 Simulationen verglichen, die mit der Aufwind-Interpolation erster Ordnung (Abbildung 5-10 A) und dem Hybridverfahren zweiter Ordnung (Abbildung 5-10 B) durchgeführt wurden. Abbildung 5-10 C zeigt die absoluten Differenzen zwischen beiden Rechnungen.

Wie schon bei der Betrachtung der Auswirkungen der Maschinengenauigkeit auf die Simulationen in Abbildung 5-6, zeigt auch Abbildung 5-10 die Unterschiede zwischen den beiden Rechnungen hauptsächlich am rechten Rand des Reaktors oberhalb des Rührers und im linken Wandbereich im oberen Bereich der Flüssigkeitstrombe. Dort betragen die Abweichungen in

Abbildung 5-10 C bis zu 100 %. Im übrigen Behälter ähneln sich die Verteilungen der Geschwindigkeit zwischen den Simulationen in Abbildung 5-10 A und B stark. Die prozentualen Fehler liegen hier bei maximal 50 %. Dieser Wert ergibt sich aus dem Verhältnis der maximalen angegebenen Differenz von $0,05 \text{ m s}^{-1}$ in Abbildung 5-10 C und der minimalen Geschwindigkeit von $0,1 \text{ m s}^{-1}$ in Abbildung 5-10 A und B.

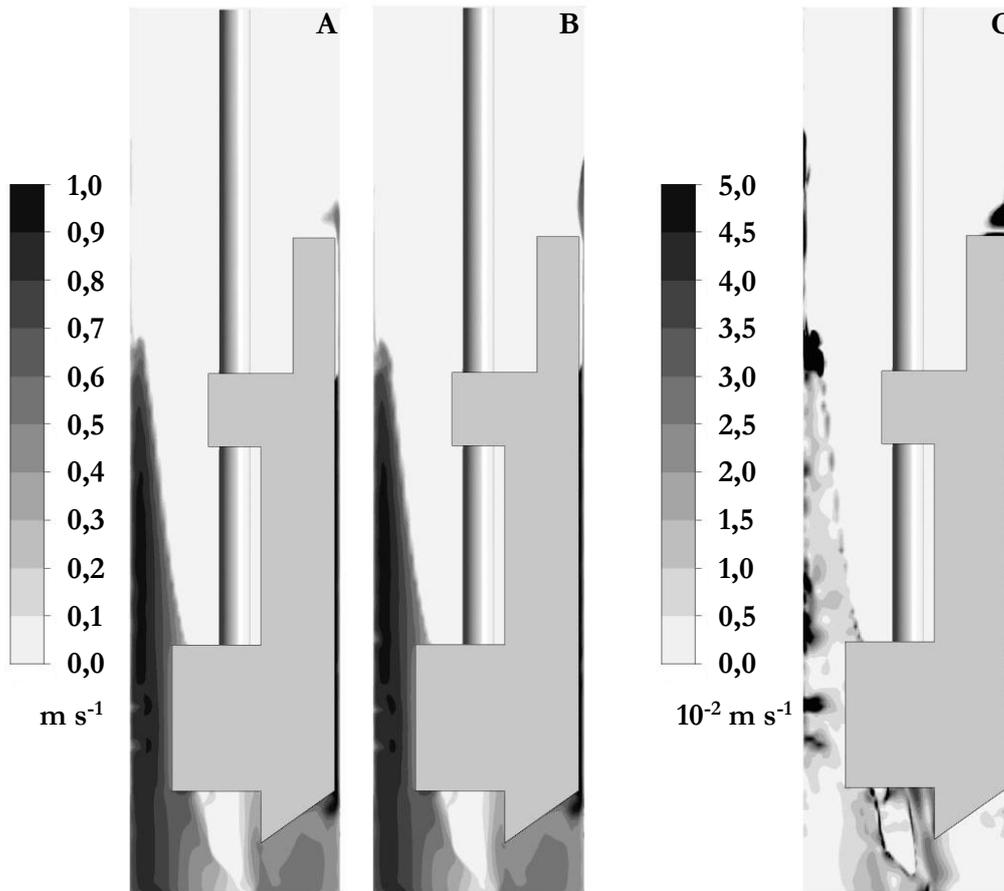


Abbildung 5-10: Vergleich der Geschwindigkeit von Wasser in der vertikalen Mittelebene des unbewehrten Reaktors mit dem Paddelrührer für Simulationen mit Aufwind-Interpolation erster Ordnung (A) und Hybridverfahren zweiter Ordnung (B) und Darstellung des absoluten Geschwindigkeitsunterschieds (C) zwischen beiden Rechnungen bei einer Rührerdrehzahl von 1000 min^{-1} auf dem feinen Netz.

Diskussion

Dass der örtliche Diskretisierungsfehler mit jeder Verfeinerung des Netzes abnimmt, war zu erwarten (vgl. Kapitel 3.3.1 Konsistenz). Die abgeschätzten Fehler sind vergleichsweise hoch. Ein Grund dafür ist, dass die Netze des Paddelrührers im Gegensatz zu denen des gasinduzierenden Rührers (siehe Tabelle 4-2) weniger finite Volumina besitzen. Die Entscheidung, die Gitter für den Paddelrührer gröber zu gestalten als für die anderen Rührer, wurde aus Zeitgründen

getroffen. Die instationären Simulationen auf dem feinen Netz benötigten für die Berechnung der 3222 Zeitschritte bzw. der 50 Rührerumdrehungen (vgl. Kapitel 5.2.1) mit sechs Threads (siehe Abschnitt 4.4) etwa drei Wochen. Eine weitere Verfeinerung der Gitter hätte den Zeitaufwand noch stärker erhöht.

Aus diesem Grund musste der Fehler des feinen Netzes auf der Basis der beiden gröberen Gitter bestimmt werden. Da aber definitionsgemäß die Lösungen, die mit groben Netzen erhalten werden, ungenauer sind als die auf feinen Gittern (siehe Kapitel 3.3.1), ergeben sich auch für die Abschätzung des Diskretisierungsfehlers auf dem feinen Netz im vorliegenden Fall höhere Werte.

Für die weiteren Simulationen wird das feine Gitter verwendet. Obwohl die Fehler dort noch recht hoch sind, würde – wie schon oben erwähnt – ein Netz mit einer noch höheren Anzahl finiter Volumina den Zeitaufwand der Simulationen zu stark steigern. Das grobe und das mittlere Gitter werden nicht weiter verwendet, da die abgeschätzten Fehler auf beiden Netzen zu hoch sind.

Was den zeitlichen Diskretisierungsfehler anbelangt, wird für die weiteren Simulationen der kleinste Zeitschritt bzw. die kleinste betrachtete Courant-Zahl verwendet. Zwar ist der abgeschätzte Fehler für die mittlere Courant-Zahl mit 3,7 % auch akzeptabel, aber da die entstehende Strömung im Rührreaktor mit dem Paddelrührer sehr komplex ist und es sich darüber hinaus um eine mehrphasige Strömung handelt, wird dennoch die kleinste Courant-Zahl von $CFL = 3$ gewählt.

Die Auswahl eines Diskretisierungsverfahrens erster oder zweiter Ordnung hat für die Simulationen des Paddelrührers in erster Linie dort Einfluss, wo sich die Phasenverteilungen unterscheiden. Diese Unterschiede, die in Abbildung 5-10 zu sehen sind, lassen sich – wie schon in Abschnitt 5.2.1 – darauf zurückführen, dass bei instationären Simulationen die Lösungen leicht voneinander abweichen können. In den übrigen Bereichen des Behälters dürfte der Fehler deutlich geringer als der angegebene Maximalwert von 50 % sein. Als Grund für diese vergleichsweise geringen Differenzen kann angegeben werden, dass für den Paddelrührer die Strömung nahezu überall im Reaktor senkrecht zu den finiten Volumina verläuft, da ohne Stromstörer die tangential Richtung in der Strömung dominiert. Die Strömung quer zu den finiten Volumina lässt sich durch die Benutzung eines strukturierten Gitters erreichen. In Abschnitt 3.3.4 wurde erläutert, dass dies zu einer Reduktion der numerischen Diffusion führt. Zusätzlich liegen für eine Rührerdrehzahl von 1000 min^{-1} so hohe Fluidgeschwindigkeiten vor, dass Konvektion in der Strömung vorherrscht. Für solche Strömungen wurde die Aufwind-Interpolation erster Ordnung entwickelt (vgl. Kapitel 3.3.4). Ihre Anwendung könnte deshalb für den vorliegenden Fall erfolgen.

Dennoch wird für die weiteren Simulationen das Hybridverfahren zweiter Ordnung benutzt, da davon ausgegangen werden kann, dass es genauere Ergebnisse liefert (PASCHEDAG, 2004).

5.2.3 Zusammenfassung

Die Auswirkungen der Maschinengenauigkeit auf die Rechnungen sind gering. Trotzdem werden alle folgenden Simulationen mit doppelter Genauigkeit gerechnet.

Als Abbruchkriterium wurden 3222 Zeitschritte festgelegt. Diese Anzahl entspricht 50 Rührerumdrehungen. Danach wurden die instationären Simulationen beendet. Als Abbruchkriterium für die inneren Iterationen wurde 10^{-6} gewählt.

Alle weiteren Simulationen werden auf dem feinen Netz durchgeführt. Weil der örtliche Diskretisierungsfehler auf der Basis der beiden gröberen Gitter bestimmt wurde, ist er dort noch vergleichsweise hoch. Eine weitere Verfeinerung des Netzes war aber aus Zeitgründen nicht möglich. Das grobe und das mittlere Gitter werden nicht weiter verwendet.

Als Zeitschritt wird für alle nachfolgenden Rechnungen die kleinste Courant-Zahl von $CFL = 3$ gewählt, da die entstehende Strömung sehr komplex und mehrphasig ist.

Für die weiteren Simulationen wird das Hybridverfahren zweiter Ordnung zur Diskretisierung verwendet.

5.3 Simulation des S-Rührers

5.3.1 Iterationsfehler und Abbruchkriterium

Wie schon bei den vorherigen Rührern werden auch hier die Auswirkung der Maschinengenauigkeit auf die Simulation und die Ermittlung des Abbruchkriteriums zuerst präsentiert.

Zur Beurteilung der Auswirkungen der Maschinengenauigkeit auf die Simulationsergebnisse wurden je eine Rechnung mit einfacher und eine mit doppelter Genauigkeit durchgeführt und die Geschwindigkeiten der beiden in Abbildung 5-11 verglichen.

Es ist kaum eine Abweichung zwischen den Simulationen zu erkennen. Erst die Darstellung des absoluten Unterschieds in Abbildung 5-11 C zeigt geringe Differenzen von höchstens 0,5 %. Diese Angabe ist das Verhältnis der größten dargestellten Abweichung von $0,0002 \text{ m s}^{-1}$ in Abbildung 5-11 C und der kleinsten dargestellten Geschwindigkeit von $0,04 \text{ m s}^{-1}$ in Abbildung 5-11 A und B.

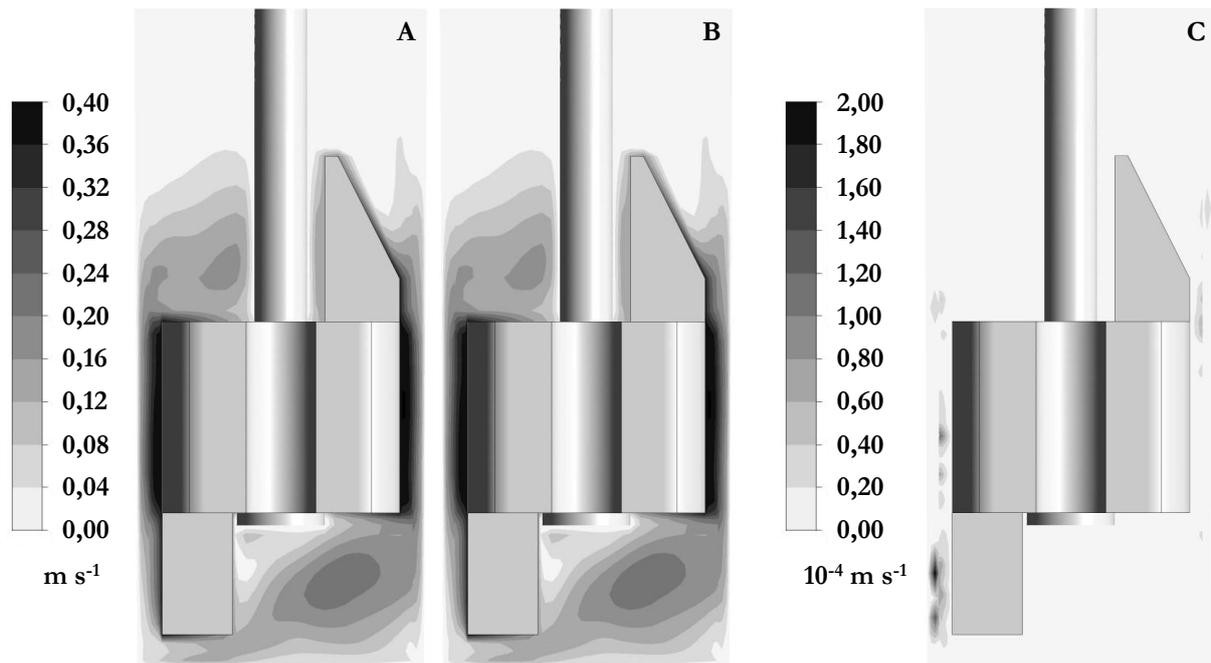


Abbildung 5-11: Vergleich der Geschwindigkeit in der vertikalen Mittelebene des bewehrten Reaktors mit dem S-Rührer für Simulationen mit einfacher (A) und doppelter (B) Genauigkeit und Darstellung des absoluten Geschwindigkeitsunterschieds (C) zwischen beiden Rechnungen bei Verwendung von Glycerin mit 14 mPa s bei einer Rührerdrehzahl von 500 min⁻¹.

Das Abbruchkriterium für die iterative Lösung des Gleichungssystems während der Simulation wird wie schon in Abschnitt 5.1 festgelegt. Die Entwicklung des Drehmoments und der Fluidgeschwindigkeit während der Simulation wurden über den Residuen aufgetragen, wie in Abbildung 5-12 B dargestellt.

Bei der Betrachtung der Abbildung 5-12 B ist zu beachten, dass sich die Residuen während der Simulation verringern. Das heißt, dass die Zahl der Iterationsschritte von rechts nach links ansteigt, was durch den Pfeil verdeutlicht wird. Alle betrachteten Variablen bleiben konstant, wenn die maximalen Residuen auf dem Rechengebiet kleiner als 10⁻⁴ sind. Um sicherzustellen, dass alle Variablen konstant sind, wird 10⁻⁵ als Abbruchkriterium gewählt.

Der Wert der Residuen zu Beginn der Rechnung liegt bei etwa 0,3. Während der Simulation fallen sie also um etwas mehr als vier Größenordnungen.

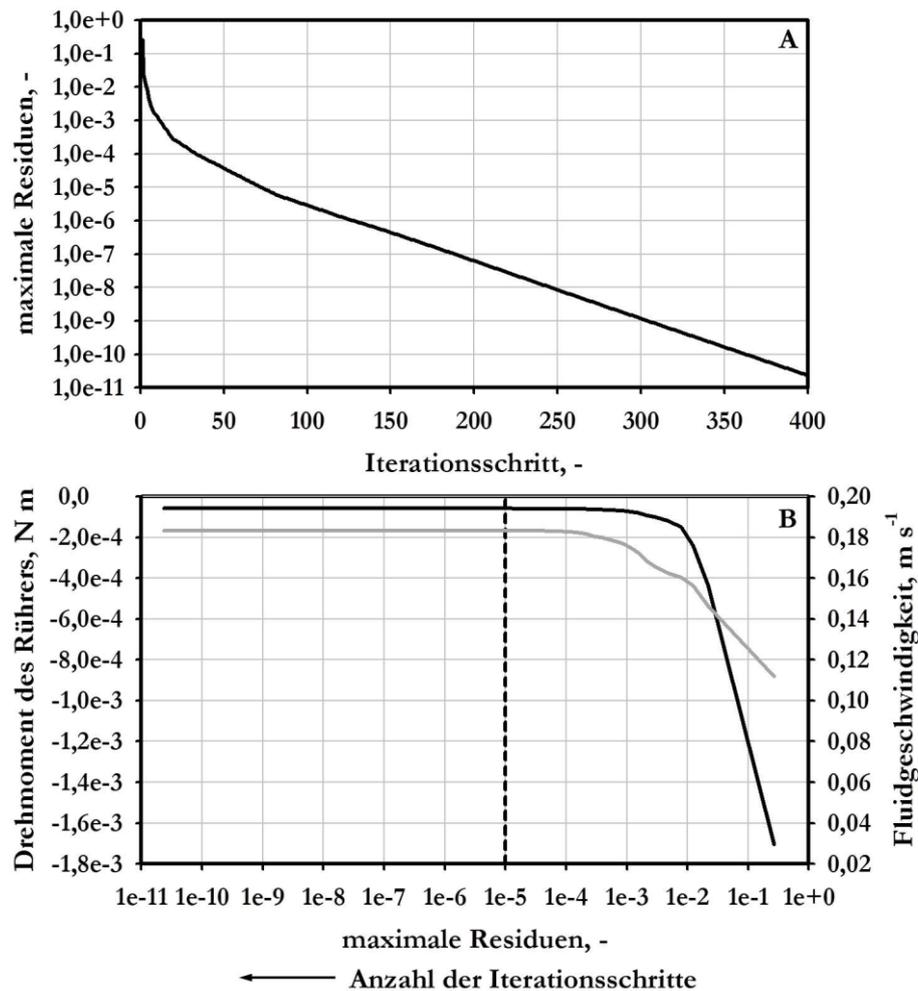


Abbildung 5-12: Bestimmung des Abbruchkriteriums der Simulationen des S-Rührers. Stetig fallende Residuen während der Simulation (A) und Ermittlung des Abbruchkriteriums bei konstantem Variablenverlauf (B) mithilfe des Drehmoments des Rührers (—) und der Fluidgeschwindigkeit im Reaktor (—). Residuenwert, unterhalb dessen sich die Werte der Variablen nicht mehr ändern: - - - -.

Diskussion

Es kann davon ausgegangen werden, dass der Rundungsfehler geringer ist, wenn – wie im vorliegenden Fall – mit doppelter Genauigkeit gerechnet wird. Es wird, wenn der Rundungsfehler oder die Maschinengenauigkeit in der Literatur erwähnt werden, lediglich die Anmerkung gemacht, dass z.B. numerische Diffusion in Rechnungen mit einfacher Genauigkeit ein größeres Problem darstellt (JAWORSKI et al., 2000). Eine genaue Bestimmung findet sich nicht. Der Vergleich von Rechnungen mit einfacher und doppelter Genauigkeit zeigt bei der Betrachtung der Geschwindigkeiten des S-Rührers nur geringe Abweichungen in der Größenordnung von höchstens 0,5 % zwischen beiden Einstellungen. Diese Differenz ist sehr gering. Trotzdem wird für die Lösung aller folgenden Simulationen doppelte Genauigkeit gewählt.

In der Literatur wird das Abbruchkriterium auf dieselbe Weise ermittelt, wie in Abbildung 5-12 gezeigt (AUBIN et al., 2004; AUBIN und XUERE, 2006; CELIK und KARATEKIN, 1997; HAQUE et al., 2006; JAWORSKI et al., 2000; KELLY und GIGAS, 2003; KERDOUSS et al., 2006).

Im vorliegenden Fall änderten sich die Variablenwerte nicht mehr, wenn die maximalen Residuen auf dem Rechengebiet unter 10^{-5} fielen. Deshalb wird dieser Wert als Abbruchkriterium für die Simulationen des S-Rührers verwendet. Zusätzlich sollte sich das Residuum aber während der Rechnung auch um drei bis fünf Größenordnungen verringert haben, bevor die Simulation beendet wird (vgl. Abschnitt 3.4.2), damit der Fehler etwa um den gleichen Betrag sinken kann. Weil sich während einer Simulation die Residuen von etwa 0,3 auf 10^{-5} – also um etwa vier Größenordnungen – verringern, können alle Anforderungen mit dem gewählten Abbruchkriterium erfüllt werden.

5.3.2 Diskretisierungsfehler

In diesem Unterkapitel wird der Diskretisierungsfehler abgeschätzt. Die Angaben für die Abschätzung der Fehler finden sich in Tabelle 4-2 bzw. Tabelle 4-3 und Tabelle 4-6. Zuerst wird der örtliche Diskretisierungsfehler vorgestellt. Als zweiter Punkt erfolgt die Bestimmung des zeitlichen Diskretisierungsfehlers. Zuletzt wird die numerische Diffusion betrachtet, die einen nicht zu vernachlässigenden Teil des Diskretisierungsfehlers ausmacht.

Als Erstes wird also der örtliche Diskretisierungsfehler betrachtet. In Abbildung 5-13 sind die örtlichen Diskretisierungsfehler aus stationären Simulationen für den S-Rührer dargestellt, die mithilfe der Richardson-Extrapolation für das Drehmoment des Rührers (dunkelgraue Balken in Abbildung 5-13) und die mittlere Fluidgeschwindigkeit im Reaktor (hellgraue Balken in Abbildung 5-13) geschätzt wurden. Weil der S-Rührer in der Regel mit unbewehrten Reaktoren verwendet wird, wurden für diesen Typ Diskretisierungsfehler für alle drei simulierten Viskositäten ermittelt. Für den Behälter mit Stromstörern sind im Gegensatz dazu nur für die Glycerin-Wasser-Lösung der mittleren Viskosität von 34 mPa s die örtlichen Diskretisierungsfehler berechnet worden.

Aus Abbildung 5-13 lassen sich die folgenden allgemeinen Tendenzen ablesen. Zunächst wird der Diskretisierungsfehler vom groben zum feinen Netz immer kleiner. Außerdem steigt im unbewehrten Behälter der Fehler für jedes Gitter mit sinkender Viskosität. Dazu lässt sich erkennen, dass der Fehler oft mit steigender Drehzahl größer wird. Zuletzt ist der Fehler des Drehmoments im Reaktor ohne Stromstörer meist kleiner als der der Geschwindigkeit. Für den

Reaktor mit Strombrechern können keine Angaben über das Verhalten des Fehlers im Zusammenhang mit der Viskosität gemacht werden, da nur eine betrachtet wurde.

Der maximale ermittelte Fehler im Behälter ohne Strombrecher auf dem groben Gitter liegt bei 7,5 % (14 mPa s, 500 min⁻¹), wohingegen er im bewehrten Behälter 48,8 % (34 mPa s, 300 min⁻¹) beträgt. Im unbewehrten Behälter bei Benutzung des Netzes mit mittlerer Elementezahl liegt der maximale bestimmte Diskretisierungsfehler bei 6 % (14 mPa s, 500 min⁻¹). Im Reaktor mit Strombrechern ist der größte bestimmte Diskretisierungsfehler auf dem mittleren Gitter 4,7 % (34 mPa s, 1000 min⁻¹). Auf dem feinen Netz beträgt der größte Fehler im unbewehrten Behälter 4,8 % (14 mPa s, 500 min⁻¹), während er im Reaktor mit Stromstörern bei 3,2 % (34 mPa s, 1000 min⁻¹) liegt.

Im unbewehrten Behälter sind für alle drei Netze die Diskretisierungsfehler der mittleren Geschwindigkeit größer als die des Drehmoments des Rührers, außer für die Datenpunkte (14 mPa s, 300 min⁻¹), (14 mPa s, 500 min⁻¹) und (34 mPa s, 500 min⁻¹). Zusätzlich sind die Diskretisierungsfehler des Drehmoments dort im Vergleich mit den anderen Werten am größten. Aber auch für die Fehler der Geschwindigkeit treten an diesen Stellen die Maxima auf. Für den Reaktor mit Stromstörern lässt sich nicht beobachten, dass die größten Fehler für beide betrachteten Größen auf jedem Netz bei denselben Viskositäten und Drehzahlen zu finden sind. Dort sind je nach Netz einmal die Fehler des Drehmoments und ein anderes Mal die der Geschwindigkeit höher.

Als Zweites folgt – wie oben bereits erwähnt – die Bestimmung des zeitlichen Diskretisierungsfehlers. Dazu wurde das Netz mit mittlerer Anzahl finiter Volumina bei einer Rührerdrehzahl von 300 min⁻¹ für drei verschiedene Zeitschritte in instationären Simulationen betrachtet. Aufgrund der sehr langen Dauer der Simulationen mit der niedrigsten Courant-Zahl bzw. dem niedrigsten Zeitschritt durch die zehnfache Anzahl an Zeitschritten wurde darauf verzichtet, den zeitlichen Diskretisierungsfehler bei weiteren Drehzahlen zu ermitteln.

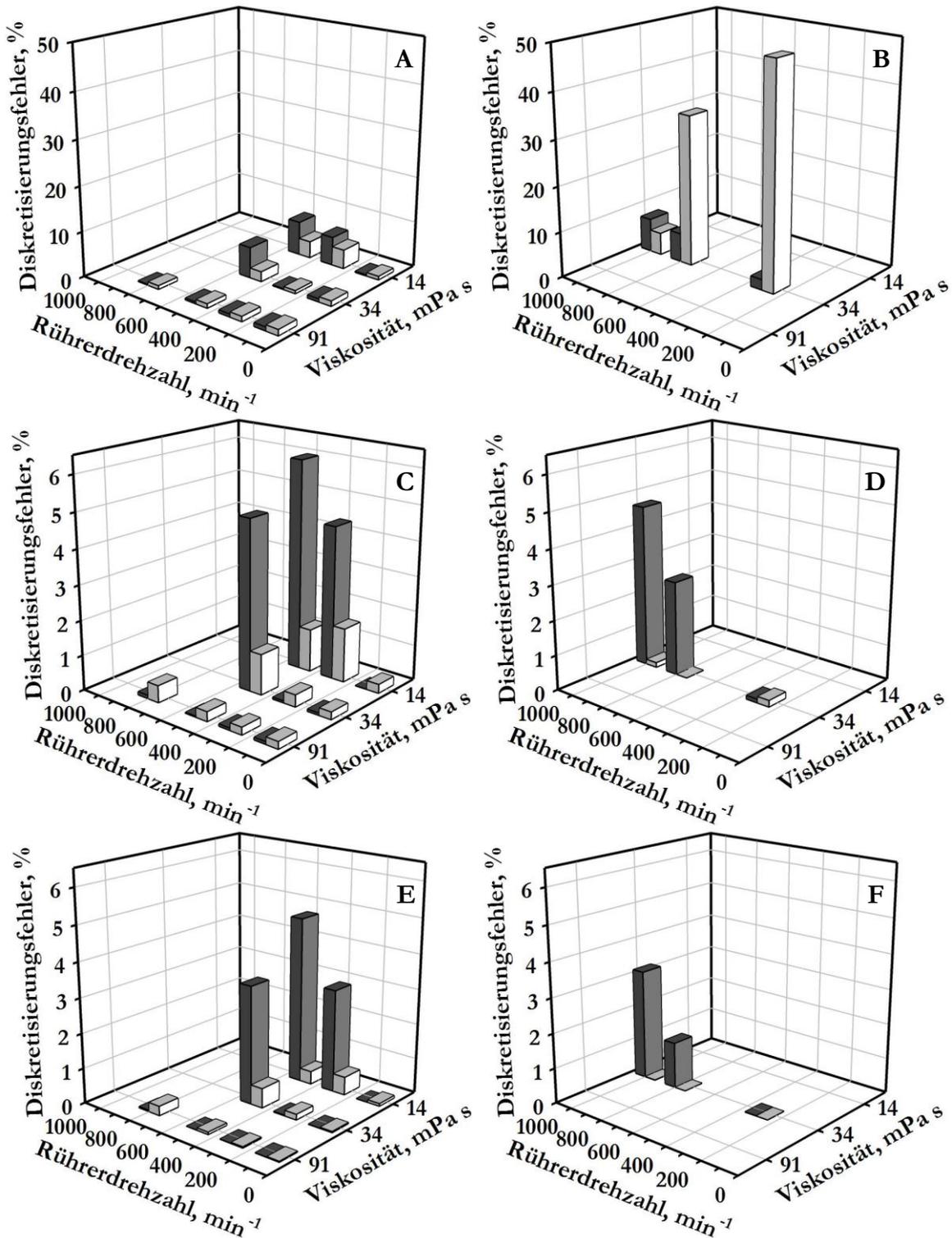


Abbildung 5-13: Örtliche, stationäre Diskretisierungsfehler nach Richardson für den S-Rührer im unbewehrten (A, C, E) und bewehrten (B, D, F) Reaktor mit Glycerin-Wasser-Mischungen bei unterschiedlichen Drehzahlen und Viskositäten auf dem groben (A, B), mittleren (C, D) und feinen (E, F) Netz. ■ Diskretisierungsfehler für das Drehmoment des Rührers. □ Diskretisierungsfehler für die mittlere Geschwindigkeit im Reaktor.

Abbildung 5-14 zeigt die zeitlichen Diskretisierungsfehler der Mischzeit im unbewehrten Reaktor bei unterschiedlichen Viskositäten und Courant-Zahlen für eine Rührerdrehzahl von 300 min^{-1} .

Die größten Fehler treten bei der höchsten untersuchten Courant-Zahl von 90 auf und nehmen dann mit sinkender Courant-Zahl ab. Dabei fällt der zeitliche Diskretisierungsfehler bei einer Verringerung der Courant-Zahl um etwa eine Größenordnung in ähnlichem Maße. Der maximale Diskretisierungsfehler bei $\text{CFL} = 90$ beträgt $11,2 \%$ für eine Viskosität von 91 mPa s , bei $\text{CFL} = 10$ liegt er für 34 mPa s bei $1,5 \%$ und für $\text{CFL} = 1$ bei ebenfalls 34 mPa s bei $0,2 \%$. Eine Tendenz bezüglich der Viskosität lässt sich nur für die höchste betrachtete Courant-Zahl von 90 erkennen. Dort ist der zeitliche Diskretisierungsfehler proportional zur Viskosität, d.h. er nimmt mit sinkender Zähigkeit des Fluids ebenfalls ab.

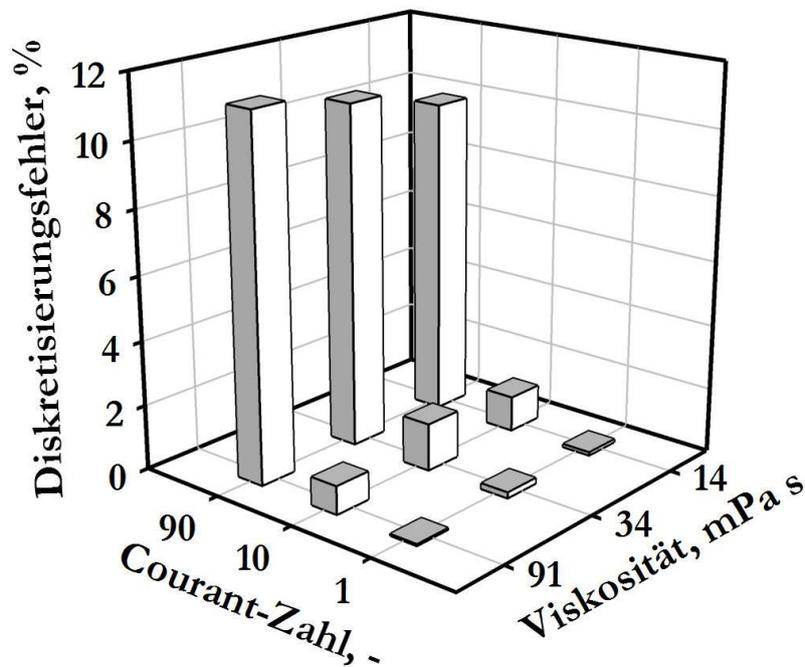


Abbildung 5-14: Zeitliche, instationäre Diskretisierungsfehler der Mischzeit nach Richardson für den S-Rührer im unbewehrten Reaktor mit Glycerin-Wasser-Mischungen bei unterschiedlichen Viskositäten und Courant-Zahlen für eine Rührerdrehzahl von 300 min^{-1} auf dem mittleren Netz.

Als letzter Punkt dieses Abschnitts wird nun auf die numerische Diffusion eingegangen. In Abbildung 5-15 wird der Unterschied zwischen Simulationen betrachtet, die mit der Aufwind-Interpolation (Abbildung 5-15 A) und dem Hybridverfahren (Abbildung 5-15 B) durchgeführt wurden. Das heißt, es werden Diskretisierungsmethoden erster und zweiter Ordnung verglichen. Des Weiteren ist bei diesem Vergleich zu beachten, dass der Diskretisierungsfehler nicht nur aus

numerischer Diffusion – also einem Abbruchfehler erster Ordnung – sondern auch aus Termen höherer Ordnung besteht, die einen Beitrag leisten.

Die Unterschiede zwischen beiden Diskretisierungsverfahren in Abbildung 5-15 A und B liegen weniger in der Größe der berechneten Geschwindigkeiten als in ihrer Verteilung. In Abbildung 5-15 A breiten sich die Gradienten über einen größeren Bereich als in Abbildung 5-15 B aus, was besonders oberhalb des Rührerkörpers auffällt. Die Benutzung des hybriden Aufwindverfahrens zweiter Ordnung ergibt also steilere Gradienten als die Aufwind-Interpolation erster Ordnung.

Die Betrachtung von Abbildung 5-15 C zeigt, dass sich die Geschwindigkeitsunterschiede aufgrund der verschiedenen Diskretisierungsverfahren praktisch über die gesamte Geometrie ausdehnen. Dabei treten die größten absoluten Differenzwerte dort auf, wo im Reaktor mittlere bis niedrige Geschwindigkeiten vorherrschen. Das entspricht prozentualen Abweichungen von maximal 224,7 %. Dieser Wert ergibt sich, wenn der höchste Differenzwert von $0,08537 \text{ m s}^{-1}$ in Abbildung 5-15 C durch die niedrigste angegebene Geschwindigkeit von $0,038 \text{ m s}^{-1}$ in Abbildung 5-15 A und B geteilt wird.

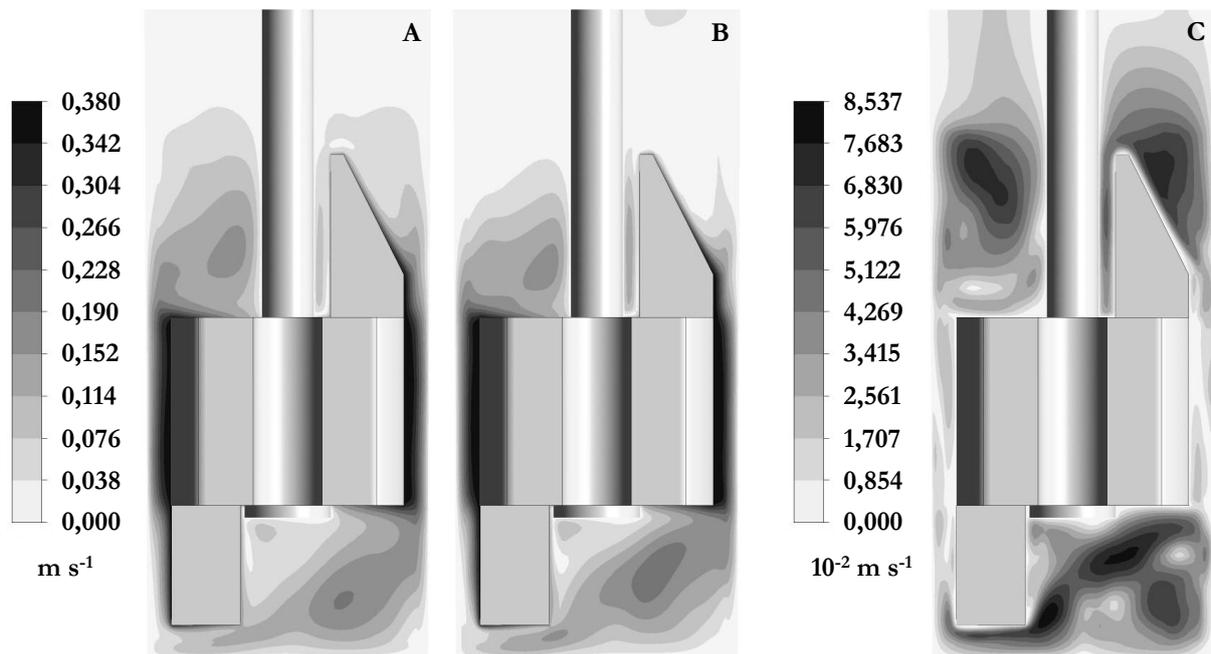


Abbildung 5-15: Vergleich der Geschwindigkeit in der vertikalen Mittelebene des bewehrten Reaktors mit dem S-Rührer für Simulationen mit Aufwind-Interpolation erster Ordnung (A) und Hybridverfahren zweiter Ordnung (B) und Darstellung des absoluten Geschwindigkeitsunterschieds (C) zwischen beiden Rechnungen bei Verwendung von Glycerin mit 14 mPa s bei einer Rührerdrehzahl von 500 min^{-1} auf dem Netz mit mittlerer Elementezahl.

Diskussion

Beim örtlichen Diskretisierungsfehler sind die Abschätzungen des Fehlers – wie zu erwarten war – auf dem groben Netz im Vergleich mit den beiden anderen Gittern am höchsten und werden mit jeder weiteren Verfeinerung des Netzes geringer.

Bei der Betrachtung der örtlichen Diskretisierungsfehler in Abbildung 5-13 fallen im unbewehrten Reaktor für alle Netze drei Datenpunkte auf, in denen die Fehler deutlich über den übrigen liegen. Das sind für die niedrige simulierte Viskosität (14 mPa s) die beiden höchsten betrachteten Rührerdrehzahlen (300 min^{-1} , 500 min^{-1}) und für die mittlere Viskosität (34 mPa s) die höchste Drehzahl (500 min^{-1}). Werden die Reynoldszahlen berechnet, ergeben sich für 14 mPa s und 300 min^{-1} $Re = 87$ und für 14 mPa s und 500 min^{-1} $Re = 144$, während für 34 mPa s und 500 min^{-1} die Reynoldszahl bei 70 liegt. Das legt die Vermutung nahe, dass die größeren Fehler bei diesen Datenpunkten auf den beginnenden Umschlag von der laminaren zur turbulenten Strömung zurückzuführen sind. Zusätzlich spielt eine Rolle, dass für $Re \leq 50$ die Strömung laminar berechnet wurde. Erst ab $Re > 50$ wurde ein Turbulenzmodell benutzt. Die drei Datenpunkte mit den höchsten Fehlern im unbewehrten Behälter sind also genau die, bei denen ein Turbulenzmodell verwendet wurde. Für die größte simulierte Viskosität von 91 mPa s sind die Reynoldszahlen bis zu einer Rührerdrehzahl von 1000 min^{-1} geringer als 50, so dass in diesem Fall kein Turbulenzmodell verwendet wurde. Ein Turbulenzmodell und die damit verbundene Beschreibung der turbulenten Strömung erfordern für einen geringen Diskretisierungsfehler demnach ein feineres Netz als die Berechnung laminarer Strömungen.

Im bewehrten Reaktor passen die hohen örtlichen Diskretisierungsfehler des Drehmoments auf den drei Netzen zu der im vorigen Absatz beschriebenen Argumentation. Zusätzlich treten auf dem groben Netz die höchsten Fehler auf, die während der Bestimmung des örtlichen Diskretisierungsfehlers für diesen Rührer überhaupt ermittelt wurden, und zwar bei einer Rührerdrehzahl von 300 min^{-1} ($Re = 37$), wo noch laminar ohne Turbulenzmodell gerechnet wurde. Diese Fehler der Geschwindigkeit werden auf das grobe Gitter zurückzuführen sein, dessen Verwendung für den bewehrten Behälter bei der Diskretisierung offensichtlich zu einem Gleichungssystem führt, das die Strömung im Raum aufgrund der zu geringen Anzahl an Stützstellen nur unzureichend beschreiben kann.

Aufgrund der oben erläuterten Punkte wurde das grobe Netz nach der Bestimmung der örtlichen Diskretisierungsfehler nicht weiter verwendet. Zwar bietet es den Vorteil, dass die Simulationen wegen der niedrigen Elementzahl schneller als auf dem mittleren oder feinen Gitter beendet sind, aber da die Fehler bis zu 50 % der Lösung betragen, wird von einem weiteren Gebrauch

abgesehen. Die Reduktion des Fehlers auf dem feinen Gitter im Vergleich zu den örtlichen Diskretisierungsfehlern, die auf dem mittleren Netz erhalten wurden, liegt zwar im Mittel bei etwa einer Größenordnung, aber der höhere Zeitaufwand von bis zu dreifacher Länge, der für die Simulationen mit dem feinen Gitter nötig ist, rechtfertigt die Benutzung desselben nicht mehr. Es wird deshalb für die weiteren Simulationen das Netz mit mittlerer Anzahl an finiten Volumen ausgewählt.

Bei der Betrachtung des zeitlichen Diskretisierungsfehlers treten entsprechend dem erwarteten Verhalten die größten Fehler bei der höchsten untersuchten Courant-Zahl von $CFL = 90$ auf und nehmen dann mit sinkender Courant-Zahl ab.

Weil die Simulationen bei der kleinsten betrachteten Courant-Zahl sehr viel Zeit in Anspruch nehmen (zehnfache Anzahl an Zeitschritten) und der Fehler bei einer Courant-Zahl von $CFL = 90$ für alle Viskositäten etwa 10 % beträgt, wird für die weiteren Rechnungen $CFL = 10$ gewählt, bei der der zeitliche Diskretisierungsfehler nur bei ca. 1 % liegt und der zeitliche Aufwand für die Simulationen noch akzeptabel ist.

Die Verwendung einer konstanten Courant-Zahl für die instationären Simulationen bedeutet, dass sich der Zeitschritt auf dem Netz der Wahl für jede Rührerdrehzahl ändert. Je höher die Drehzahl ist, desto größer ist auch die Fluidgeschwindigkeit im Reaktor. Der Zeitschritt muss deshalb folgerichtig mit zunehmender Drehzahl sinken, damit pro Zeitschritt weiterhin nur ein finites Volumen von einem Fluidteilchen durchquert wird.

Abschließend wird nun die numerische Diffusion diskutiert. In der Veröffentlichung von COCKX et al. (2001) wurde das Ausmaß der numerischen Diffusion quantitativ bestimmt. Allerdings ist nicht beschrieben, wie dazu vorgegangen wurde. Auch im Leitfaden für empfohlenes Vorgehen der europäischen Forschungsgemeinschaft für Strömung, Turbulenz und Verbrennung (*European Research Community on Flow, Turbulence and Combustion*, ERCOFTAC) findet sich keine gesonderte Methode zur Bestimmung der numerischen Diffusion (CASEY und WINTERGERSTE, 2000).

Um sie so gering wie möglich zu halten, wurde – soweit durchführbar – darauf geachtet, dass die Strömung senkrecht zu den Gitterzellen verläuft (vgl. Kapitel 3.3.4). Deswegen wurden strukturierte Netze verwendet, mit denen dies leichter zu erreichen ist.

Beim Vergleich von Lösungen aus Simulationen mit Aufwind-Diskretisierungen unterschiedlicher Ordnung in Abbildung 5-15 fällt auf, dass sich die Geschwindigkeitsgradienten für das Aufwind-Verfahren erster Ordnung auf einen größeren Bereich verteilen als für die hybride Aufwindmethode zweiter Ordnung. Dieser Effekt des „Verschmierens“ wird auf die numerische Diffusion

zurückzuführen sein. Außerdem zeigt dieser Vergleich, dass die Auswahl des Diskretisierungsverfahrens erhebliche Auswirkungen auf die Lösung hat, da mitunter mehr als doppelt so hohe bzw. weniger als halb so große Geschwindigkeiten an derselben Stelle ermittelt werden, je nachdem welche Diskretisierung benutzt wurde. Es ist bekannt, dass die numerische Diffusion beim Hybridverfahren geringer ist als bei der Aufwind-Interpolation (PASCHEDEG, 2004). Deshalb wird für die weiteren Simulationen ausschließlich das Hybridverfahren zweiter Ordnung verwendet, um die numerische Diffusion zu verringern.

5.3.3 Zusammenfassung

Alle folgenden Simulationen werden mit doppelter Genauigkeit durchgeführt, obwohl im Vergleich zwischen Rechnungen mit einfacher und doppelter Genauigkeit lediglich ein Unterschied von maximal 0,5 % festgestellt werden konnte.

Das Abbruchkriterium für die Simulationen beträgt in diesem Fall 10^{-5} . Es wurde darauf geachtet, dass sich die Residuen um mindestens drei Größenordnungen verringert haben, bevor die Rechnungen beendet wurden, damit auch der Fehler in ausreichendem Maße sinken kann.

Wie zu erwarten war, sind die Diskretisierungsfehler auf dem groben Netz bzw. beim größten gewählten Zeitschritt im Vergleich mit den beiden anderen Gittern bzw. Zeitschritten am höchsten und werden mit jeder weiteren Verfeinerung des Netzes oder der Zeitschrittweite geringer.

Es wird für die weiteren Simulationen das Netz mit mittlerer Anzahl an finiten Volumen ausgewählt, auf dem der ermittelte maximale, örtliche Diskretisierungsfehler bei $\varepsilon_D \leq 6\%$ liegt.

Für die instationären Rechnungen wird im Folgenden $CFL = 10$ verwendet, wo der zeitliche Diskretisierungsfehler der Mischzeit etwa 1 % beträgt.

Um das Ausmaß der numerischen Diffusion in Grenzen zu halten, werden strukturierte Netze genutzt. Außerdem wird für die weiteren Simulationen ausschließlich das Hybridverfahren zweiter Ordnung für die Diskretisierung des konvektiven Terms verwendet.

5.4 Vergleich der drei untersuchten Rührer

Der Verwendungszweck, die benutzten Fluide sowie die Art der Rührorgane unterscheiden sich stark bei den drei betrachteten Rührertypen. Dennoch lassen sich einige allgemeingültige Tendenzen aus Kapitel 5 zusammenfassen.

Was die Maschinengenauigkeit angeht, waren die Unterschiede zwischen einfacher und doppelter Genauigkeit nur für den gasinduzierenden Rührer nicht vernachlässigbar. Trotzdem werden alle

folgenden Rechnungen mit doppelter Genauigkeit durchgeführt, da der zusätzliche Zeitaufwand klein ist und bei doppelter Genauigkeit der Rundungsfehler geringer ist. Außerdem kann bei Simulationen mit einfacher Genauigkeit numerische Diffusion ein Problem darstellen (JAWORSKI et al., 2000).

Als Abbruchkriterium für die Simulationen wird im ANSYS CFX-Handbuch ein Residuum von weniger als 10^{-4} als ausreichend angegeben (ANSYS INC., 2010e). Bei dem gasinduzierenden Rührer und dem S-Rührer erwies sich dies als zu hoch und die Abbruchkriterien für diese Simulationen wurden deshalb mindestens eine Größenordnung niedriger angesetzt. Aus diesem Grund wurde auch für das Abbruchkriterium der inneren Iterationen bei den instationären Rechnungen des Paddelrührers ein deutlich kleinerer Wert festgelegt, auch wenn dort der Verlauf von Variablenwerten über den Residuen für die inneren Iterationen nicht betrachtet werden kann. Bei den instationären Simulationen des Paddelrührers wird darauf geachtet, dass sich die Strömung in hohem Maße ausbilden kann. 50 Rührerumdrehungen wurden dafür als ausreichend angesehen. Deshalb werden diese Rechnungen abgebrochen, sobald sich der Paddelrührer 50-mal gedreht hat.

Der örtliche Diskretisierungsfehler hängt – wie zu erwarten – sehr von der Anzahl der Gitterzellen pro Volumeneinheit ab. Zusätzlich hat aber auch die Art der Strömung Auswirkungen auf ihn. Aus diesem Grund sind auch die in diesem Kapitel abgeschätzten örtlichen Diskretisierungsfehler sehr unterschiedlich. Für die komplexeste Strömung in dieser Arbeit – die des Paddelrührers – ist er jeweils auf dem verwendeten Netz am größten und am geringsten für die einfachste – die einphasige Strömung des S-Rührers. Außerdem wirkt sich aus, ob das Netz, das schließlich für die Simulationen verwendet werden soll, das feine Gitter oder das mit mittlerer Anzahl finiter Volumina ist. Dadurch, dass der Diskretisierungsfehler durch eine Netzstudie auf drei unterschiedlich feinen Gittern extrapoliert wird, fällt er für das Netz, auf dem die Simulationen später gerechnet werden sollen, etwas niedriger aus, wenn dieses das mittlere Gitter ist. Deshalb sind die örtlichen Diskretisierungsfehler der Simulationen des Paddelrührers auf dem Rechennetz höher als die für die beiden anderen Rührer. Für den gasinduzierenden Rührer und den S-Rührer wird für die weiteren Rechnungen das mittlere Netz und für den Paddelrührer das feine Gitter der Netzstudie gewählt.

Für instationäre Simulationen muss zur Ermittlung des Zeitschritts die Courant-Zahl festgelegt werden. Ihre Größe beeinflusst den zeitlichen Diskretisierungsfehler stark. Für jede Strömung mit einem anderen Rührer unterscheiden sich die Courant-Zahlen. Wie hoch sie maximal sein

sollten, hängt vom jeweiligen Fall ab. Dies wird auch hier deutlich. Die instationären Mischzeit-simulationen mit dem S-Rührer werden bei einer Courant-Zahl von $CFL = 10$ durchgeführt. Für die Betrachtung des Paddelrührers dagegen wird $CFL = 3$ gewählt. Allgemein lässt sich sagen, dass die Courant-Zahl umso kleiner sein sollte, desto komplizierter die Strömung ist.

Die numerische Diffusion ist ein bekanntes Phänomen für Aufwinddiskretisierungen niedriger Ordnung (FERZIGER und PERIĆ, 2008). Sie fällt geringer aus, wenn die Strömung senkrecht zu den Gitterlinien verläuft. Dies lässt sich leichter realisieren, wenn strukturierte Gitter für die Vernetzung der Geometrien verwendet werden. Bei unstrukturierten Netzen verläuft die Strömung selten senkrecht zu den finiten Volumina. Aus diesem Grund wurden für diese Arbeit ausschließlich strukturierte Gitter zur Vernetzung benutzt.

Deshalb war der Unterschied zwischen Simulationen, bei denen für die örtliche Diskretisierung des konvektiven Terms die Aufwind-Interpolation erster Ordnung oder das Hybridverfahren zweiter Ordnung verwendet wurde, für die betrachteten Fälle meist klein. Dennoch soll für alle folgenden Simulationen das Hybridverfahren zweiter Ordnung verwendet werden, weil mit dieser Diskretisierung davon ausgegangen werden kann, dass die auftretenden Fehler generell geringer sind (PASCHEDAG, 2004).

6 Simulation des Leistungseintrags

Die Bestimmung des Leistungseintrags von Rührorganen ermöglicht die Berechnung der Newton-Zahl, mit der die Leistungscharakteristiken der betrachteten Rührer ermittelt werden können. Der Leistungseintrag kann sowohl über die Energiedissipation ε als auch über das Drehmoment M des Rührers berechnet werden (vgl. Kapitel 3.1.3). Beide Wege werden hier gezeigt. Da die Energiedissipation in den Simulationen über das Turbulenzmodell berechnet wird, werden hier nur Energiedissipationen und daraus abgeleitete Größen der Rechnungen dargestellt, die eine turbulente Strömung aufweisen. Als Leistungscharakteristik wird die Auftragung der Newton-Zahl über der Reynoldszahl bezeichnet. Anhand dieser lassen sich die Strömungsbereiche der Rührorgane feststellen, also ob laminare oder turbulente Strömung im Rührbehälter vorliegt. Die Aufnahme von Leistungscharakteristiken ist Teil der verfahrenstechnischen Beschreibung von Rührern. Deshalb werden die simulierten Leistungscharakteristiken der in dieser Arbeit untersuchten Rührorgane hier vorgestellt und diskutiert.

Die Beschreibung der Simulationen der Energiedissipation und des Leistungseintrags beginnt im Abschnitt 6.1 mit dem gasinduzierenden Rührer, bevor im nächsten Unterkapitel 6.2 auf den Paddelrührer eingegangen wird. Die Abschnitte 6.3 und 6.4 setzen das Kapitel 6 mit den Leistungseinträgen des H-Rührers und des S-Rührers fort, bevor es mit einem Vergleich der verschiedenen Rührerarten in Unterkapitel 6.5 schließt.

6.1 Gasinduzierender Rührer

Die Energiedissipation, der Leistungseintrag und die Leistungscharakteristiken wurden für den gasinduzierenden Rührer im bewehrten Reaktor, der mit Wasser gefüllt war, bestimmt.

Abbildung 6-1 zeigt die simulierte, maximale Energiedissipation des gasinduzierenden Rührers mit Wasser. Mit steigender Rührerdrehzahl wird auch die maximale Energiedissipation größer.

Das simulierte Verhältnis zwischen maximaler und mittlerer Energiedissipation im Reaktor beträgt etwa 29. Damit liegt es etwa dreimal höher als der Wert von 10, der für die Messdaten gefunden wurde (HORTSCH und WEUSTER-BOTZ, 2010a).

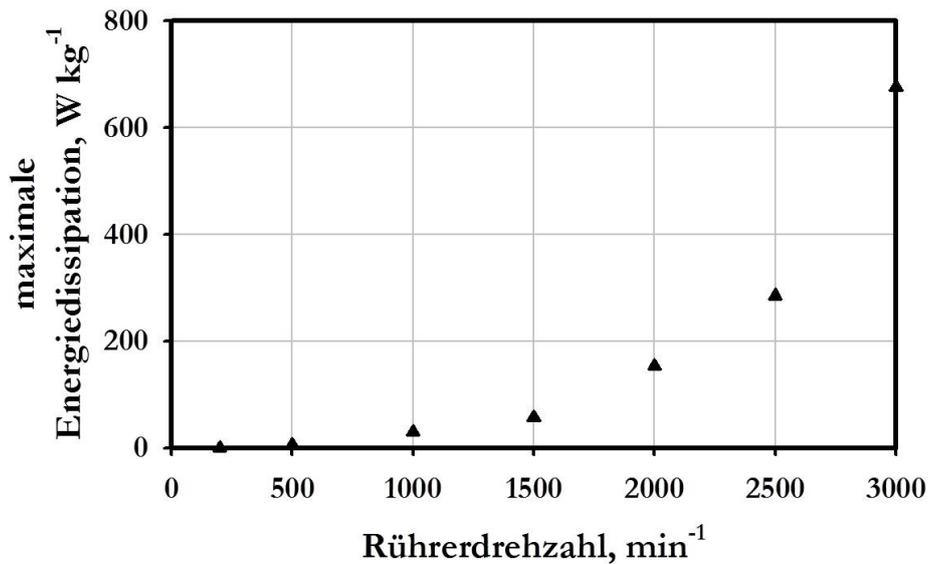


Abbildung 6-1: Simulierte, maximale Energiedissipation (▲) des gasinduzierenden Rührers im bewehrten Reaktor mit Wasser.

In Abbildung 6-2 sind die volumenbezogenen Leistungseinträge zu sehen, die aus der Integration der Energiedissipation im Reaktor und über das Rührerdrehmoment berechnet wurden. Experimentelle Daten aus HORTSCH und WEUSTER-BOTZ (2010a) wurden zum Vergleich ebenfalls im Diagramm dargestellt. Zunächst fällt auf, dass der volumenbezogene Leistungseintrag aus den Messungen sehr gut mit dem übereinstimmt, der über das Rührerdrehmoment aus den Simulationen berechnet wurde. Der simulierte, volumenbezogene Leistungseintrag aus der turbulenten Energiedissipation liegt im Diagramm unter den beiden anderen dargestellten Kurven. Ab einer Drehzahl von etwa 1000 min^{-1} ist er ungefähr halb so hoch wie der, der über das Rührerdrehmoment bestimmt wurde.

Die simulierte Leistungscharakteristik ist in Abbildung 6-3 dargestellt. Die Newton-Zahlen wurden über das Rührerdrehmoment bestimmt. Die Messergebnisse, mit denen verglichen wurde, stammen aus HORTSCH und WEUSTER-BOTZ (2010a). Die aus den Versuchsdaten ermittelten Newton-Zahlen sinken für $\text{Re} < 3500$ mit steigender Reynoldszahl. Danach bleiben sie konstant bei $\text{Ne} \approx 3,2$. Bei den Simulationen dagegen ist der Abfall der Newton-Zahl mit steigender Reynoldszahl nicht zu sehen. Die Abweichungen zwischen Experiment und Simulation betragen ab $\text{Re} > 3500$ weniger als 4 %. Vorher wird die Differenz mit steigender Reynoldszahl immer kleiner.

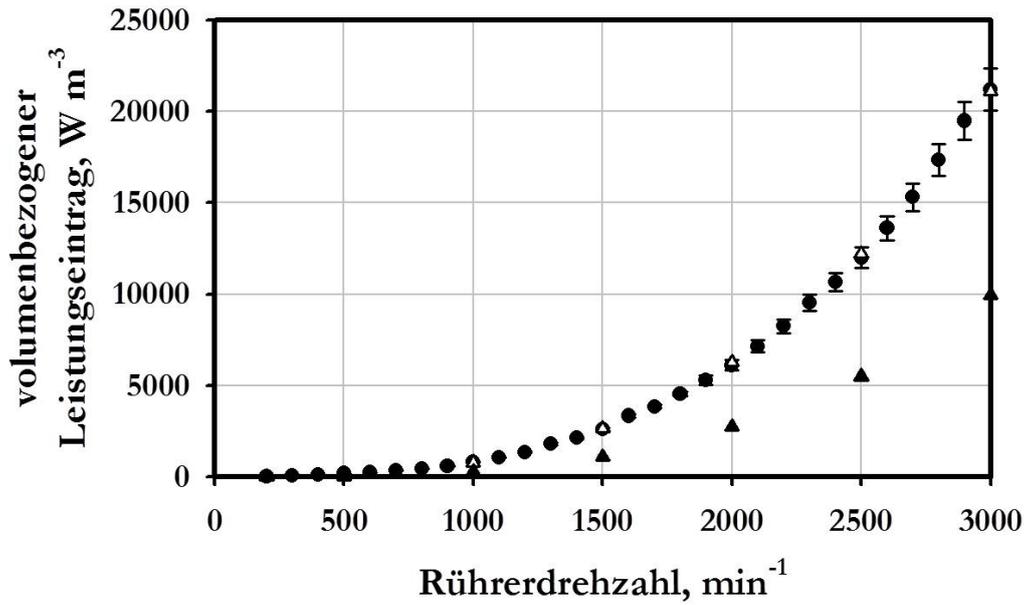


Abbildung 6-2: Volumenbezogener Leistungseintrag des gasinduzierenden Rührers im bewehrten Reaktor mit Wasser. Vergleich von Experiment (●) und Simulation (▲, Δ). Der Leistungseintrag der Simulation wurde über das Rührerdrehmoment (Δ) und die Integration der Energiedissipation im Reaktor (▲) berechnet. Die Simulationen wurden auf dem Netz mit mittlerer Anzahl finiter Volumina durchgeführt.

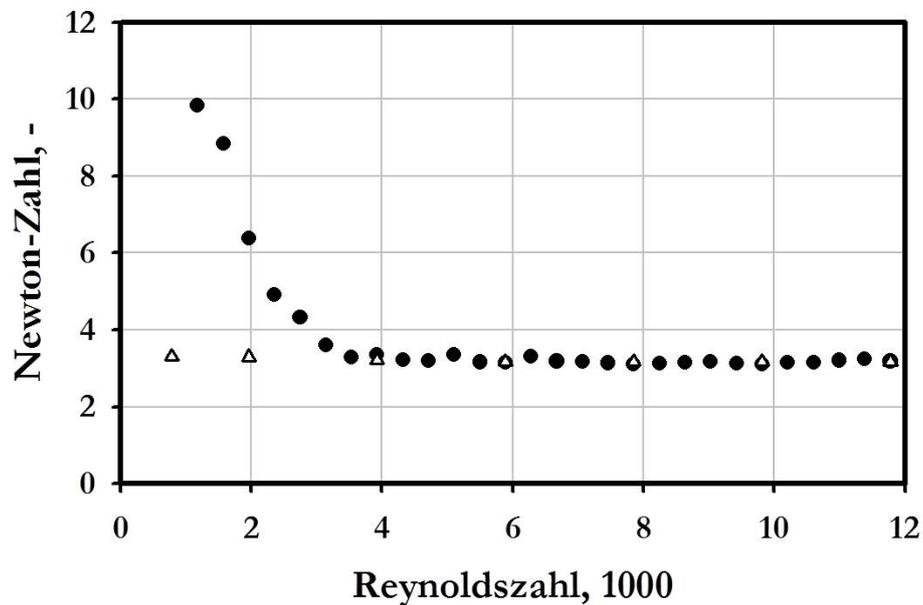


Abbildung 6-3: Leistungscharakteristik des gasinduzierenden Rührers im bewehrten Reaktor mit Wasser. Vergleich von Experiment (●) und Simulation (Δ). Die Simulationen wurden auf dem Netz mit mittlerer Anzahl finiter Volumina durchgeführt.

6.1.1 Diskussion

Nach LIEPE et al. (1988) folgt die maximale Energiedissipation ε_{\max} im Rührbehälter der Abhängigkeit

$$\varepsilon_{\max} \propto N^3 \quad (6-1)$$

mit ε_{\max} maximale Energiedissipation im Reaktor, W kg^{-1}
 N Rührerdrehzahl, s^{-1} .

Die simulierten Daten geben diese Abhängigkeit sehr gut wieder.

Wird auf der Basis der Energiedissipation der volumenbezogene Leistungseintrag berechnet und mit Messdaten verglichen, so ist er um etwa die Hälfte zu niedrig. Der Grund für die Abweichung liegt darin, dass bei der Ermittlung des Leistungseintrags über die turbulente Energiedissipation unter Benutzung von Zwei-Gleichungs-Turbulenzmodellen nach dem Wirbelviskositätsprinzip der molekulare Anteil der Viskosität nicht berücksichtigt wird. Deutlich wird dies aus den Energiebilanzen der kinetischen Energie der Strömung und der kinetischen Energie der turbulenten Schwankungsbewegung. Im stationären Zustand wird Gleichung (3-87) zu

$$W_W = 2\pi \int N \cdot M dt = 2 \iiint \eta_{\text{eff}} \overline{\mathbf{s}_{ij}} \cdot \overline{\mathbf{s}_{ij}} dV, \quad (6-2)$$

wenn berücksichtigt wird, dass es sich um eine inkompressible Flüssigkeit handelt, der Rührer dem System Wellenarbeit W_W in einer bestimmten Zeit Δt zuführt und kein Transport über die Integrationsgrenzen stattfindet. Das entspricht der vollständigen Dissipation der durch den Rührer zugeführten Wellenarbeit im Rührbehälter (HERWIG und KAUTZ, 2007).

Genauso gilt im stationären Fall für die kinetische Energie der turbulenten Schwankungsbewegung, dass die „produzierte“ Energie (Term IV aus Gleichung (3-94)) wieder vollständig dissipiert (Term V aus Gleichung (3-94)) wird. Also vereinfacht sich – mit denselben Annahmen wie für Gleichung (6-2) – Gleichung (3-94) unter Zuhilfenahme von Gleichung (3-92) zu

$$\iiint \eta_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dV = \iiint \rho \varepsilon dV. \quad (6-3)$$

Hier lassen sich in den Gleichungen (6-2) und (6-3) die Grundzüge der Gleichungen (3-15) und (3-16) wiedererkennen. Beim Vergleich der Gleichungen (6-2) und (6-3) wird nun auch klar, warum sich bei der Ermittlung des Leistungseintrags über die Integration der Wellenarbeit ein höherer Wert als bei der Integration der turbulenten Energiedissipation ergibt. In Gleichung (6-2) steht die effektive Viskosität η_{eff} während in Gleichung (6-3) nur die Wirbelviskosität η_t auftritt.

Nach Gleichung (3-89) setzt sich die effektive Viskosität aus der molekularen Viskosität und der Wirbelviskosität zusammen:

$$\eta_{eff} = \eta + \eta_t. \quad (6-4)$$

Damit also die Gleichungen (6-2) und (6-3) dasselbe Ergebnis liefern, muss

$$\eta_{eff} \approx \eta_t \quad (6-5)$$

gelten. Das ist aber nur bei ausreichend hohen Reynoldszahlen der Fall.

Die Strömung im vorliegenden Fall weist zwar Reynoldszahlen bis 12000 auf, was aber nach dem Vergleich der beiden Wege zur Berechnung des Leistungseintrags nicht ausreicht, um den Anteil der molekularen Viskosität zu vernachlässigen.

Wie nach der bisherigen Diskussion der Ergebnisse zu erwarten, stimmt der volumenbezogene Leistungseintrag, der mithilfe des Rührerdrehmoments (Gleichung (6-2)) bestimmt wurde, sehr gut mit den Messdaten überein.

Das simulierte Verhältnis von der maximalen zur mittleren Energiedissipation im Rührbehälter ist etwa dreimal so hoch wie das experimentell bestimmte. Das spricht – wie der Leistungseintrag, der über die simulierte Energiedissipation bestimmt wurde – dafür, dass einerseits die mittlere, turbulente Energiedissipation im Reaktor zu niedrig und andererseits die maximale, turbulente Energiedissipation durch die Simulationen zu hoch berechnet wurde.

Für die Messdaten der Leistungscharakteristik in Abbildung 6-3 ist der erwartete, klassische Verlauf in einem bewehrten Reaktor zu sehen (vgl. Abbildung 3-4). Für die laminare Strömung und den Übergangsbereich fällt die Newton-Zahl mit steigender Reynoldszahl, bis erstere konstante Werte annimmt, wenn Turbulenz im Rührkessel herrscht. Das ist für den gasinduzierenden Rührer mit Wasser bei $Re > 3500$ der Fall. Der Umschlagpunkt zur turbulenten Strömung für den gasinduzierenden Rührer von $Re = 3500$ stimmt mit den in Kapitel 3.1 vorgestellten Größenordnungen überein. Der konstante Wert von $Ne \approx 3,2$ im turbulenten Regime entspricht dem, der für einen Kreuzbalkenrührer in einem Behälter mit Stromstörern angegeben wird (ZLOKARNIK, 2005). Für Kultivierungen von Mikroorganismen, die auch mit dem gasinduzierenden Rührer im Millilitermaßstab durchgeführt werden können, werden im Laborrührreaktor meist Sechsblassscheibenrührer verwendet. Für diese ist im turbulenten Regime eine Newton-Zahl von 5 angegeben (ZLOKARNIK, 2005). Dieser Unterschied lässt sich durch das größere Durchmesser Verhältnis zwischen Rührer und Behälter d/D^{-1} des gasinduzierenden Rührers

erklären, da die Newton-Zahl mit steigendem Durchmesser Verhältnis abnimmt (KRAUME, 2003). Der Leistungseintrag beider Rührer ist also vergleichbar.

Die Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit den Messdaten ist für das turbulente Strömungsregime sehr gut. Die Abweichung von maximal 4 % ist geringer als die Diskretisierungsfehler oder die zu erwartende Messgenauigkeit. Für das Übergangsgebiet ist der Unterschied mit bis zu 63 % allerdings beträchtlich. Da die niedrigste untersuchte Reynoldszahl 785 beträgt, wurden alle Simulationen mit dem Scherspannungstransport-Turbulenzmodell gerechnet, auch wenn sich die Strömung noch im Übergangsgebiet befand. Die Differenzen zwischen Experiment und Simulation in diesem Bereich sind darauf zurückzuführen, dass das Turbulenzmodell Strömungen im Transitionsgebiet nicht korrekt beschreiben kann. Das Rührerdrehmoment – und damit auch jede davon abgeleitete Größe – ist zu niedrig. Die Simulation mit Turbulenzmodell unterschätzt also im Übergangsbereich die im Reaktor auftretenden Kräfte und Energien.

6.1.2 Zusammenfassung

Die Übereinstimmung zwischen Simulationsergebnissen und Messdaten ist im turbulenten Strömungsregime sehr gut. Letzteres beginnt für den gasinduzierenden Rührer bei $Re = 3500$.

Die Leistungseinträge werden über eine Integration der turbulenten Energiedissipation unterschätzt, obwohl Reynoldszahlen bis 12000 vorliegen. Die Leistungseinträge, die über die eingetragene Wellenarbeit bzw. das Rührerdrehmoment bestimmt wurden, stimmen gut mit den Messdaten überein.

6.2 Paddelrührer

Die Energiedissipation und der Leistungseintrag des Paddelrührers in einen unbewehrten Reaktor – gefüllt mit Wasser und Luft – wurden simuliert und mit Messdaten verglichen. Die experimentellen Werte stammen aus HORTSCH et al. (2010).

Abbildung 6-4 zeigt die simulierte, maximale Energiedissipation bei verschiedenen Drehzahlen. Die maximale Energiedissipation steigt im untersuchten Bereich mit der Drehzahl an. Sie liegt in derselben Größenordnung wie die Werte, die von HORTSCH et al. (2010) berichtet wurden. Für die Simulationsdaten ergibt sich für das Verhältnis der maximalen zur mittleren Energiedissipation im Reaktor ein Wert von etwa 7, während es für die Messungen bei ca. 6 liegt (HORTSCH et al., 2010).

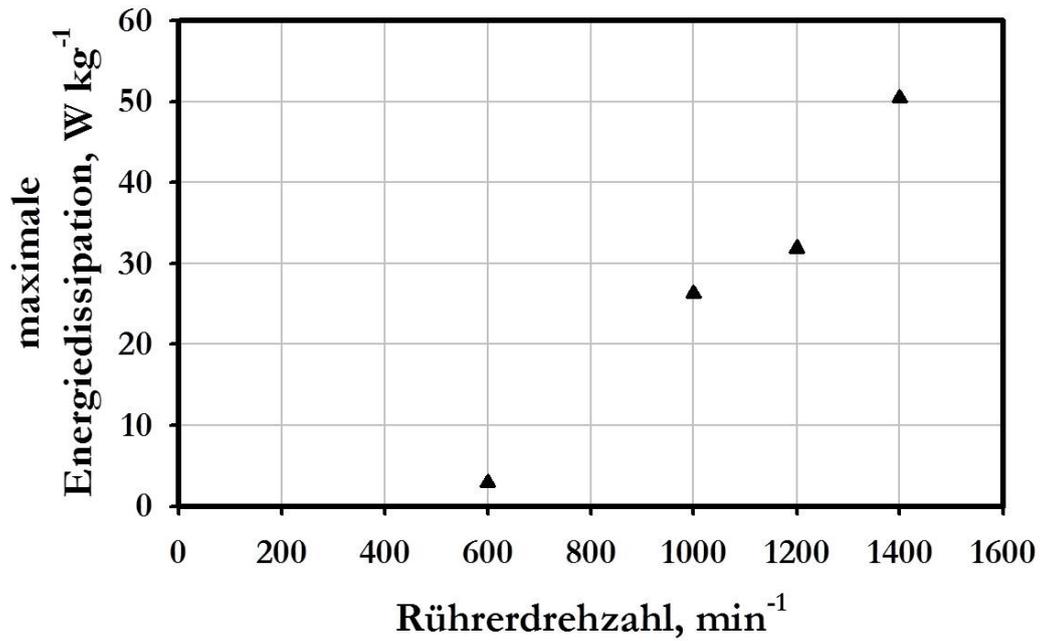


Abbildung 6-4: Simulierte, maximale Energiedissipation (▲) des Paddelrührers im unbewehrten Reaktor mit Wasser und Luft. Die Simulationen wurden auf dem feinen Netz und mit einer Courant-Zahl von CFL = 3 durchgeführt.

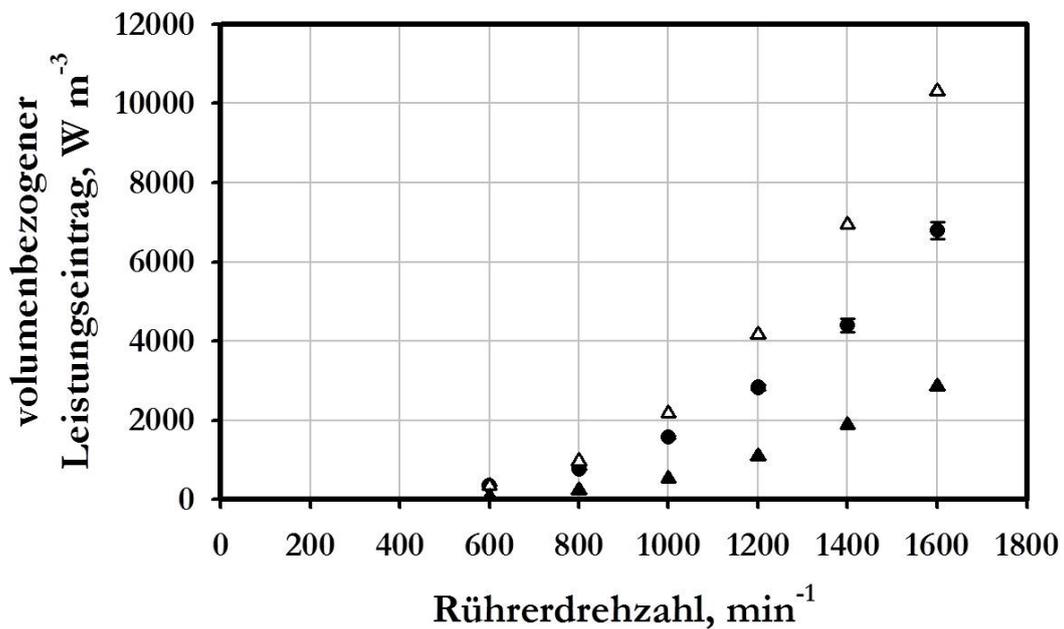


Abbildung 6-5: Volumenbezogener Leistungseintrag des Paddelrührers im unbewehrten Reaktor mit Wasser und Luft. Vergleich von Experiment (●) und Simulation (▲, Δ). Der Leistungseintrag der Simulationen wurde über das Rührerdrehmoment (Δ) und die Integration der Energiedissipation im Reaktor (▲) berechnet. Die Simulationen wurden auf dem feinen Netz und mit einer Courant-Zahl von CFL = 3 durchgeführt.

In Abbildung 6-5 ist der volumenbezogene Leistungseintrag dargestellt. Aus den Simulationsdaten wurde der Leistungseintrag über das Rührerdrehmoment und über die turbulente Energiedissipation berechnet.

Der volumenbezogene Leistungseintrag, der mit dem Drehmoment bestimmt wurde, ist etwa vier- bis fünfmal so hoch wie der, der auf der Basis der Energiedissipation berechnet wurde. Die Messdaten liegen zwischen den beiden simulierten Kurven. Die Messwerte betragen etwa 66 % bis 80 % der über das Rührerdrehmoment berechneten Leistungseinträge. Der qualitative Verlauf aller Kurven ist vergleichbar.

Aus den auf der Basis des Rührerdrehmoments berechneten Leistungseinträgen wurden die Newton-Zahlen bestimmt und über den jeweiligen Reynoldszahlen aufgetragen. Das Resultat dieses Vorgehens ist in Abbildung 6-6 dargestellt. Aus der gezeigten Leistungscharakteristik können dann die Strömungsbereiche abgelesen werden. Bei den Messwerten liegen im Rahmen der Beobachtungsvarianz die Newtonzahlen konstant bei etwa $Ne \approx 1,4$. Bei den Simulationen steigt die Newton-Zahl bis zu einer Reynoldszahl von $Re \approx 8100$ und bleibt erst dann konstant bei ca. $Ne \approx 2,1$. Die Abweichung zwischen den konstanten Werten der Newton-Zahl beträgt etwa 30 %.

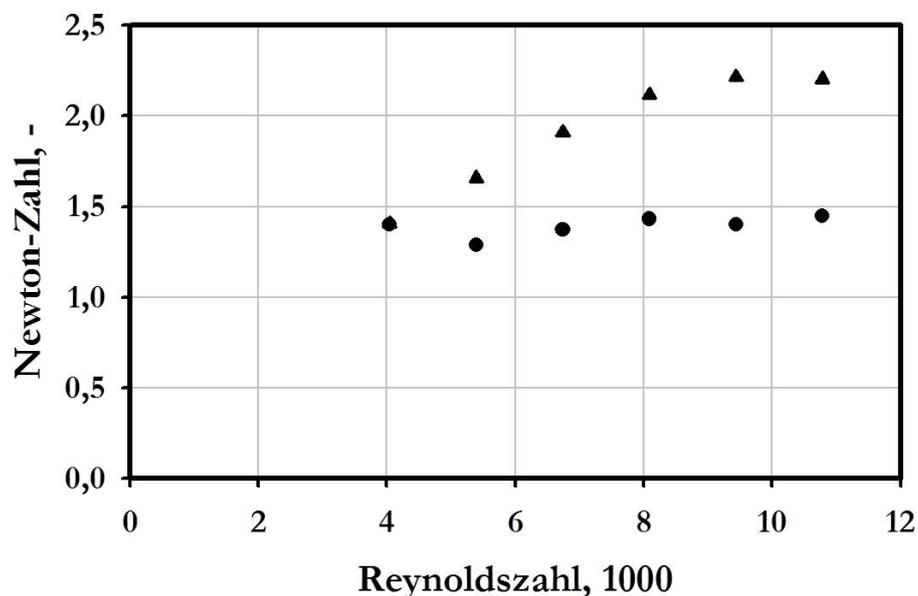


Abbildung 6-6: Leistungscharakteristik des Paddelrührers im unbewehrten Reaktor mit Wasser und Luft.

Vergleich von Experiment (●) und Simulation (▲). Die Simulationen wurden auf dem feinen Netz und mit einer Courant-Zahl von $CFL = 3$ durchgeführt.

6.2.1 Diskussion

Die Abhängigkeit der maximalen Energiedissipation von der Rührerdrehzahl, die in Abschnitt 6.1.1 vorgestellt wurde, ist auch hier mit zufriedenstellender Übereinstimmung zu erkennen.

Ebenso wie schon in Unterkapitel 6.1.1 liegt der über die Integration der turbulenten Energiedissipation berechnete Leistungseintrag unter den Messwerten. Die Gründe dafür sind dieselben, die schon dort erläutert wurden.

Dass der auf der Basis des Rührerdrehmoments bestimmte volumenbezogene Leistungseintrag höher ist als die Messdaten, wird darauf zurückzuführen sein, dass die Phasenverteilung im Reaktor von den Simulationen nicht ganz korrekt wiedergegeben wurde.

Das Verhältnis aus maximaler und mittlerer Energiedissipation wird im Vergleich mit den Messwerten allerdings durch die Simulationen sehr gut abgebildet. Das Größenverhältnis beider Variablen wird also – trotz der quantitativen Abweichung der Simulationsergebnisse von den Messungen – durch die Modellierung richtig wiedergegeben.

Auch für die Leistungscharakteristik in Abbildung 6-6 ist die im vorigen Absatz erwähnte Abweichung zwischen Experiment und Simulation zu erkennen. Die Messdaten deuten auf eine turbulente Strömung mit konstanter Newton-Zahl hin (vgl. Gleichung (3-19)). Die Höhe des bestimmten Umschlagpunkts zur turbulenten Strömung von $Re > 4000$ stimmt mit den in Abschnitt 3.1 erwähnten Größenordnungen überein. Der in den Messungen gefundene Wert der konstanten Newton-Zahl liegt mit 1,5 deutlich niedriger als der Wert für einen Sechsblasscheibenrührer ($Ne = 5$), aber höher als der eines Wendel- oder Ankerrührers (beide $Ne = 0,35$) (KRAUME, 2003). Das bedeutet, dass mit dem Paddelrührer eine schonendere Durchmischung des Reaktorinhalts erfolgt als mit einem Sechsblasscheibenrührer.

Die beobachteten Differenzen zwischen Simulation und Messung sind mit großer Wahrscheinlichkeit auf zwei Phänomene zurückzuführen: zum einen auf die zweiphasige Strömung und zum anderen darauf, dass ein Behälter ohne Bewehrung betrachtet wird.

Die entstehende Strömung mit der großen Phasengrenzfläche ist komplex und – wie das Verhalten der Residuen und der übrigen Fehler in Kapitel 5.2 schon gezeigt hat – eine Herausforderung bei der Simulation. Die modellierten Leistungseinträge, die über das Rührerdrehmoment berechnet wurden, sind etwas höher als die experimentellen, was sich dementsprechend auch auf die Newton-Zahlen auswirkt. Die beiden Phasen Wasser und Luft leisten nicht denselben Beitrag zu den Kräften, die auf den Rührer wirken. Aus diesem Grund kann eine simulierte Phasen-

verteilung, die nicht der tatsächlichen im Rührkessel entspricht, die Abweichungen beim Rührerdrehmoment bewirken, die für die Unterschiede zwischen Simulations- und Messdaten verantwortlich sind. Dafür spricht, dass die Abweichungen mit steigender Reynoldszahl größer werden. Denn auch das Strömungsbild und die Phasengrenzfläche werden mit zunehmender Rührerdrehzahl komplexer.

Außerdem hat der hier simulierte Behälter keine Strombrecher. Dadurch wird die Strömung nicht abgelenkt, und die vorherrschende Richtung der Strömung ist die tangential – vorgegeben durch die Drehung des Rührers. Es ist aber bekannt, dass eine starke Krümmung der Stromlinien zu Problemen bei der Turbulenzmodellierung führen kann (AUBIN et al., 2004; HAQUE et al., 2006; NIENOW, 2010). Zusätzlich kann die Turbulenzmodellierung mehrphasiger Strömungen Probleme verursachen, da für die einzelnen Phasen oft die herkömmlichen Turbulenzmodelle verwendet werden, die die Wechselwirkungen zwischen den Phasen nicht korrekt wiedergeben (MARSCHALL et al., 2011a).

6.2.2 Zusammenfassung

Nach den Messergebnissen befindet sich die Strömung im Rührkessel mit dem Paddelrührer im turbulenten Regime. Alle betrachteten Reynoldszahlen waren größer als 4000.

Für die Abweichungen zwischen Simulationen und Messdaten lassen sich zwei Gründe angeben. Zunächst kann eine abweichende Phasenverteilung in der Rechnung für den Unterschied verantwortlich sein.

6.3 H-Rührer

Die Energiedissipation wurde für den H-Rührer nicht bestimmt, weil die Strömung im Reaktor hauptsächlich im Transitionsregime lag. Der volumenbezogene Leistungseintrag wurde für den H-Rührer im bewehrten und unbewehrten Behälter mit Glycerin bei einer Viskosität von 34 mPa s ermittelt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 6-7 im Vergleich mit Messwerten (RIEDLBERGER, 2012; RIEDLBERGER et al., 2012) dargestellt. Die Übereinstimmung zwischen den simulierten und gemessenen Leistungseinträgen ist gut. Die modellierten Werte sind für beide Reaktorarten etwas höher als die Messdaten. Die Abweichungen liegen im bewehrten Behälter zwischen 10 % und 23 % und im unbewehrten zwischen 5 % und 17 %. Außerdem ist zu erkennen, dass im Behälter mit Stromstörern größere volumenbezogene Leistungseinträge als im Behälter ohne Stromstörer erreicht werden.

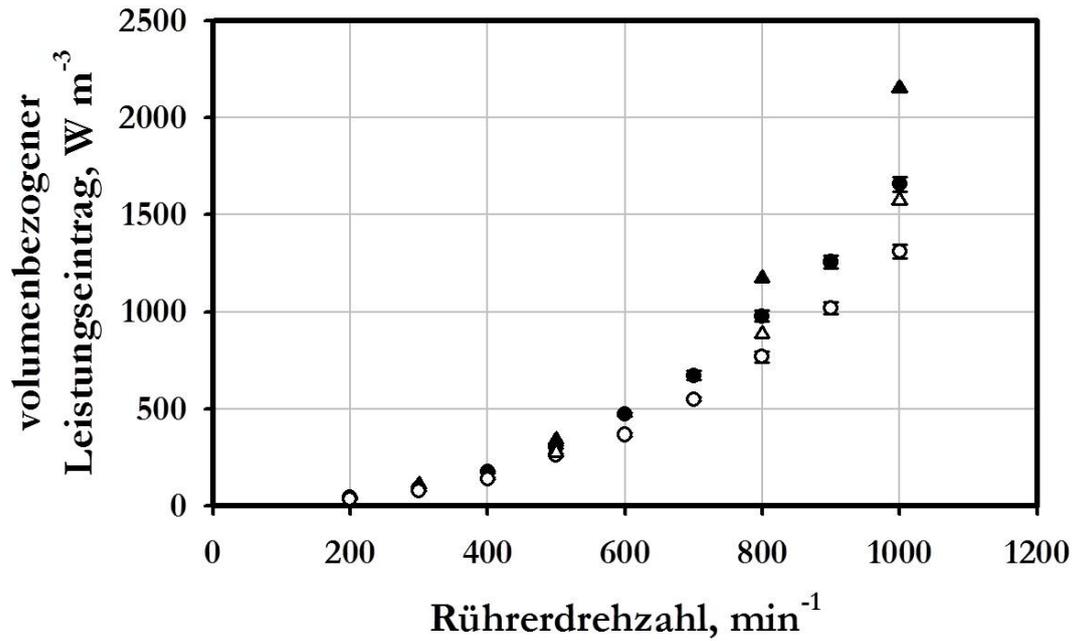


Abbildung 6-7: Volumenbezogener Leistungseintrag des H-Rührers im bewehrten (●, ▲) und unbewehrten (○, Δ) Reaktor für Glycerin mit einer Viskosität von $34 mPa s$. Vergleich von Experiment (●, ○) und Simulation (▲, Δ). Der Leistungseintrag der Simulation wurde über das Rührerdrehmoment bestimmt.

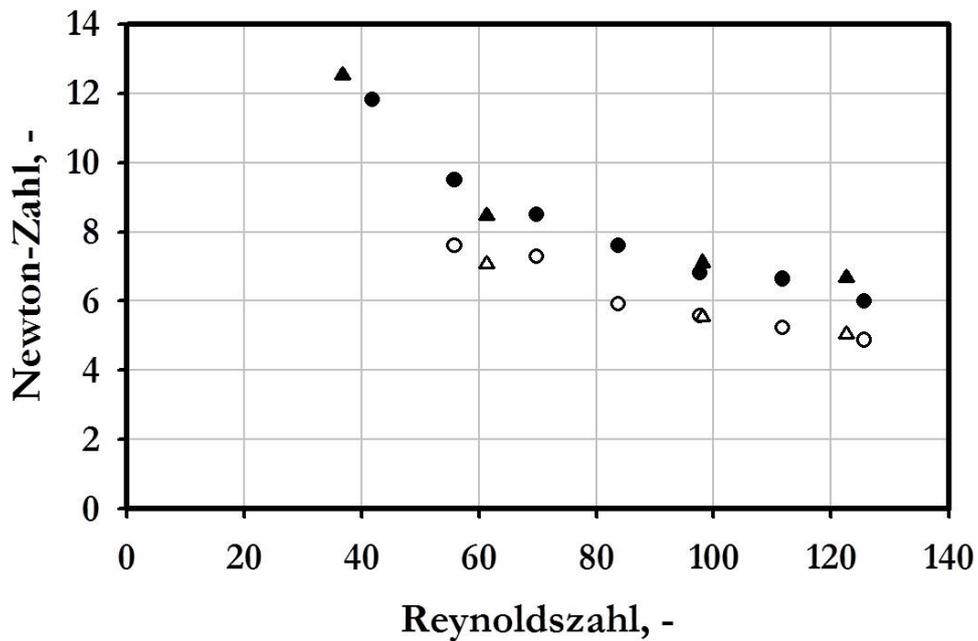


Abbildung 6-8: Leistungscharakteristik des H-Rührers im bewehrten (●, ▲) und unbewehrten (○, Δ) Reaktor für Glycerin mit einer Viskosität von $34 mPa s$. Vergleich von Experiment (●, ○) und Simulation (▲, Δ).

Aus den Leistungseinträgen wurden die entsprechenden Newton-Zahlen bestimmt und über den zugehörigen Reynoldszahlen aufgetragen, um so die Leistungscharakteristiken für die zwei betrachteten Rührer-Reaktor-Kombinationen in Abbildung 6-8 zu erhalten. Die Übereinstimmung der Rechnungen mit den experimentellen Daten in Abbildung 6-8 ist sehr gut. Die Abweichung beträgt maximal 7 %. Außerdem ist zu sehen, dass sowohl für die Simulationen als auch für die Versuche die Newton-Zahlen des bewehrten Reaktors über denen des Behälters ohne Stromstörer liegen. Für beide Behälterarten wird der konstante Bereich nicht erreicht. In der Leistungscharakteristik bedeutet eine konstante Newton-Zahl, dass turbulente Strömung herrscht (vgl. Gleichung (3-19)).

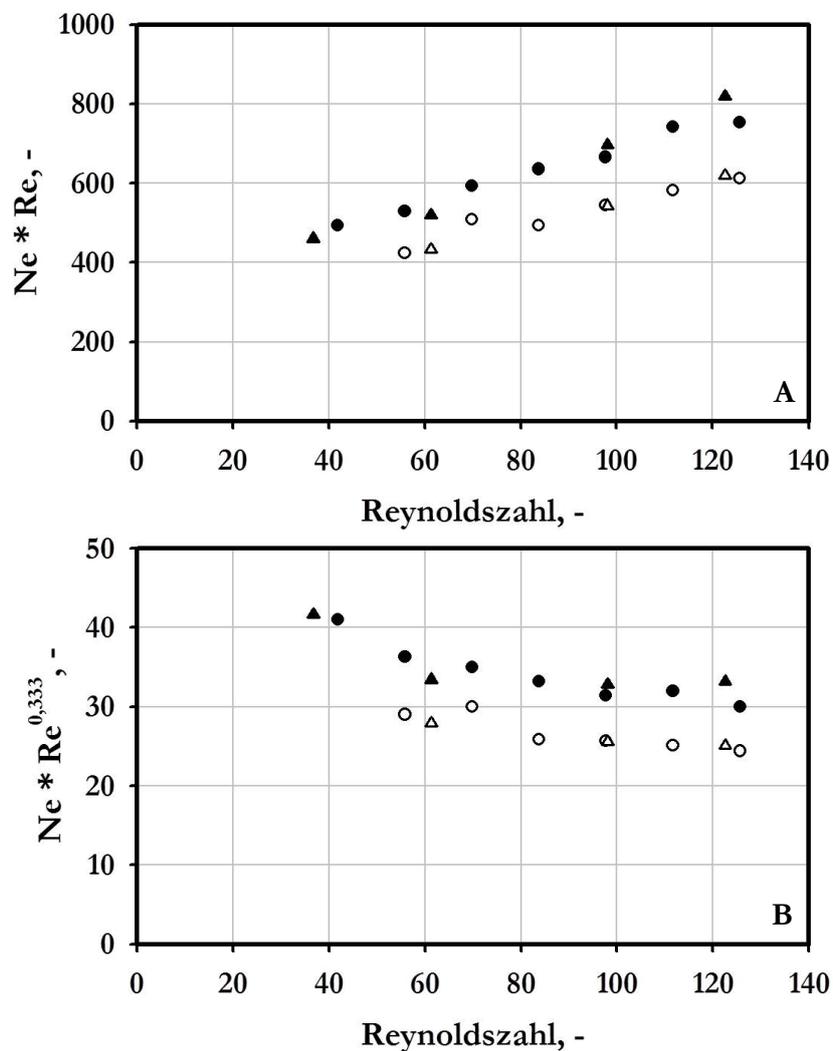


Abbildung 6-9: Alternative Auftragungen der Leistungscharakteristik des H-Rührers im bewehrten (●, ▲) und unbewehrten (○, △) Reaktor für Glycerin mit einer Viskosität von 34 mPa s. Vergleich von Experiment (●, ○) und Simulation (▲, △). A: Auftragung von $Ne \cdot Re$ zur Ermittlung des laminaren Strömungsbereichs (Gleichung (3-18)). B: Auftragung von $Ne \cdot Re^{0,333}$ zur Ermittlung des Transitionsgebietes der Strömung (Gleichung (3-20)).

Weil sich aus Abbildung 6-8 nicht eindeutig ablesen lässt, in welchem Regime sich die Strömung befindet, wurde in Abbildung 6-9 die Leistungscharakteristik modifiziert aufgetragen, um besser erkennen zu können, ob Gleichung (3-18) (Abbildung 6-9 A) oder Gleichung (3-20) (Abbildung 6-9 B) erfüllt sind.

Gleichung (3-18) gilt im laminaren Strömungsregime, wenn das Produkt aus Newton- und Reynoldszahl konstant bleibt, während Gleichung (3-20) im Übergangsgebiet den Zusammenhang zwischen Newton-Zahl und Reynoldszahl richtig beschreibt, wenn $Ne \cdot Re^{0,333}$ konstant ist.

Für beide untersuchten Reaktorarten sind weder in den Simulationen noch bei den Experimenten in Abbildung 6-9 A konstante Werte zu sehen. In Abbildung 6-9 B ist für die simulierten Werte im bewehrten Behälter bei $60 < Re < 125$ ein konstanter Abschnitt zu sehen. Die Versuchsdaten des unbewehrten Reaktors erfüllen Gleichung (3-20) zwischen $80 < Re < 115$.

6.3.1 Diskussion

Die Übereinstimmung zwischen Messungen und Simulationen ist sowohl für den Behälter mit Stromstörern als auch für den ohne gut. Dies gilt für den volumenbezogenen Leistungseintrag ebenso wie für die ermittelten Newton-Zahlen. Dass der Verlauf der Kurven des bewehrten Behälters in Abbildung 6-7 und Abbildung 6-8 über dem des unbewehrten liegt, entspricht den Erwartungen (vgl. Abbildung 3-4). Die Abweichung zwischen Modellierung und Versuch hat für die meisten Datenpunkte dieselbe Größenordnung wie der Diskretisierungsfehler.

Anhand der Leistungscharakteristik lassen sich die Strömungsbereiche im Reaktor feststellen. Das turbulente Regime, in dem die Newton-Zahl konstant ist (vgl. Gleichung (3-19)), wurde in Abbildung 6-8 für keinen Behälter erreicht. Das bedeutet, dass weder im Reaktor mit Strombrechern noch im Reaktor ohne Strombrecher das turbulente Strömungsregime im untersuchten Reynoldszahlbereich vorliegt.

Nach Abbildung 6-9 A ist auch für keine Rührer-Behälter-Kombination laminare Strömung erkennbar, d.h. Gleichung (3-18) ist nicht erfüllt. Das Transitionsregime fängt laut Abbildung 6-9 B für den unbewehrten Behälter bei $Re > 80$ an und ist bei der höchsten dargestellten Reynoldszahl von 125 noch nicht abgeschlossen. Dort gilt demnach Gleichung (3-20). Im Reaktor mit Stromstörern beginnt der Übergangsbereich bei etwa $Re > 60$ und ist ebenfalls bei der höchsten betrachteten Reynoldszahl von 125 noch nicht zu Ende. Für beide Reaktorarten kann davon ausgegangen werden, dass für $Re < 80$ bzw. $Re < 60$ annähernd laminare Strömung herrscht, auch

wenn dies wegen beginnender Turbulenz im Rührerstrom nicht eindeutig in Abbildung 6-9 A zu sehen ist (LIEPE, 1973).

Da sich in diesem Abschnitt gezeigt hat, dass Strömungen mit $Re < 50$ noch keine allzu deutlichen Anzeichen von Turbulenz zeigen, werden im Folgenden Strömungen mit $Re \leq 50$ laminar – d.h. ohne Turbulenzmodell – simuliert. Erst für $Re > 50$ wird ein Turbulenzmodell verwendet.

6.3.2 Zusammenfassung

Die Übereinstimmung von experimentellen mit modellierten Daten ist für den H-Rührer im betrachteten Bereich gut und die Abweichungen liegen in derselben Größenordnung wie die zu erwartenden Fehler.

Im Reaktor ohne Stromstörer herrscht für $Re < 80$ laminare Strömung. Der Transitionsvorgang der Strömung ist bis zur höchsten betrachteten Reynoldszahl von 125 noch nicht abgeschlossen.

Im bewehrten Behälter kann der Übergangsbereich etwa für $Re > 60$ beobachtet werden. Vorher ist die Strömung laminar.

Aufgrund des Ergebnisses der Leistungscharakteristik, welches besagt, dass die Strömung für $Re < 50$ annähernd laminar ist, werden alle folgenden Simulationen, für die $Re \leq 50$ gilt, auch laminar gerechnet.

6.4 S-Rührer

Ebenso wie für den H-Rührer wurde auch für den S-Rührer die Energiedissipation nicht bestimmt, da sich die Strömungen weitestgehend im Übergangsbereich befanden. Der volumenbezogene Leistungseintrag wurde für den S-Rührer mit allen drei in Kapitel 4.2 vorgestellten Glycerin-Lösungen in Reaktoren mit und ohne Stromstörer bestimmt und mit Messdaten (RIEDLBERGER, 2012) verglichen. Die verschiedenen Glycerin-Lösungen wurden deshalb verwendet, um Leistungscharakteristiken bei unterschiedlichen Viskositäten zu erhalten. Die Leistungseinträge des S-Rührers wurden bei mehreren Viskositäten betrachtet, weil er der Rührer der Wahl für enzymatische Hydrolysen organischer Feststoffe ist. Im Gegensatz dazu wurde für den H-Rührer nur eine Viskosität berücksichtigt. Die volumenbezogenen Leistungseinträge sind in Abbildung 6-10 zu sehen. Die Übereinstimmung von Messdaten und Simulationsergebnissen ist für alle betrachteten Viskositäten zufriedenstellend, verbessert sich aber mit zunehmender Viskosität. Bei der höchsten untersuchten Viskosität von 91 mPa s beträgt die maximale Abweichung zwischen Modellierung und Experiment lediglich 13 %.

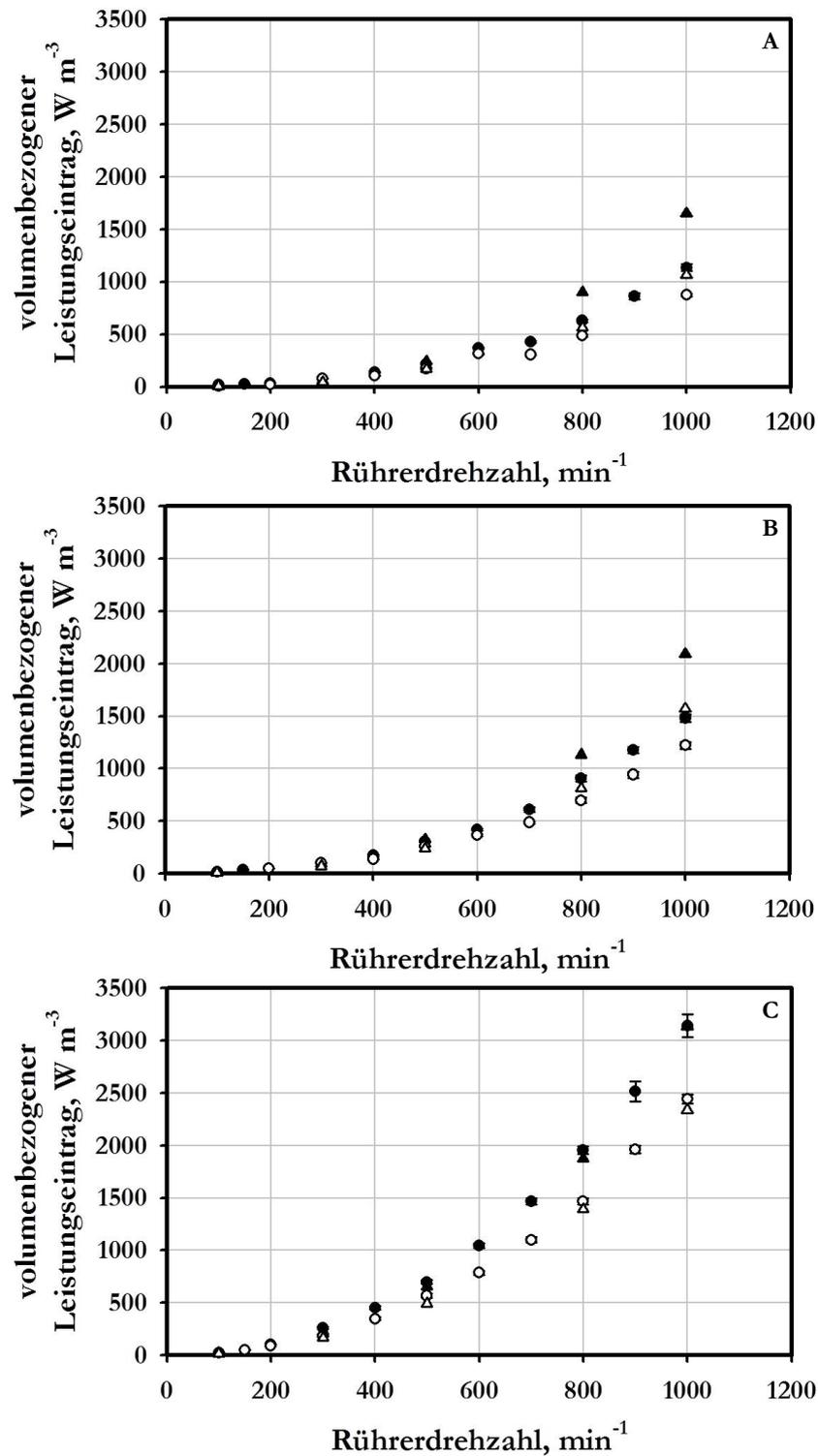


Abbildung 6-10: Volumenbezogene Leistungseinträge des S-Rührers im bewehrten (●, ▲) und unbewehrten (○, △) Reaktor für Glycerin mit den drei betrachteten Viskositäten (A: 14 mPa s. B: 34 mPa s. C: 91 mPa s.) auf dem Netz mit mittlerer Anzahl finiter Volumina. Vergleich von Experiment (●, ○) und Simulation (▲, △). Der Leistungseintrag der Simulationen wurde über das Rührerdrehmoment bestimmt.

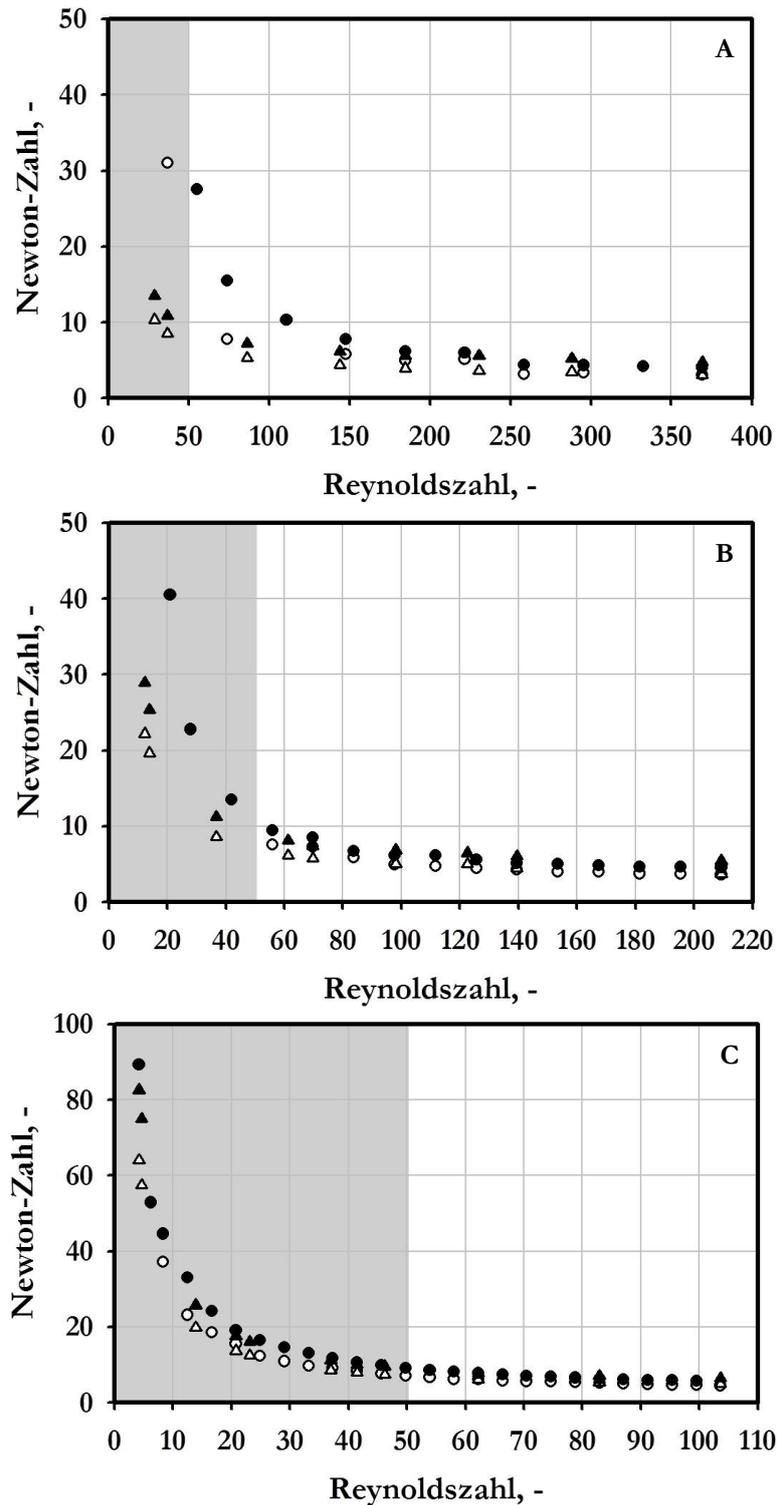


Abbildung 6-11: Leistungscharakteristik des S-Rührers im bewehrten (●, ▲) und unbewehrten (○, △) Reaktor für Glycerin mit den drei betrachteten Viskositäten (A: 14 mPa s. B: 34 mPa s. C: 91 mPa s.) auf dem Netz mit mittlerer Anzahl finiter Volumina. Vergleich von Experiment (●, ○) und Simulation (▲, △). Der grau hinterlegte Bereich zeigt an, dass bis $Re \leq 50$ ohne Turbulenzmodell gerechnet wurde.

Aus den Leistungseinträgen wurden die Newton-Zahlen berechnet. Die ermittelten Newton-Zahlen sind in Abbildung 6-11 über den zugehörigen Reynoldszahlen aufgetragen. Die experimentellen Daten stammen aus RIEDLBERGER et al. (2012).

Dass die Übereinstimmung der Experimente mit den Simulationen – wie auch schon beim Leistungseintrag – von der Viskosität des Mediums abhängt, zeigt sich auch bei der Betrachtung der Leistungscharakteristik in Abbildung 6-11. Mit zunehmender Viskosität wird auch für die niedrigen Reynoldszahlen die Deckung besser. Bei der niedrigsten betrachteten Viskosität von 14 mPa s folgen die Ergebnisse der Rechnungen ab etwa $Re > 175$ den Versuchsdaten des bewehrten Reaktors mit einer Abweichung von weniger als 20 %. Im Behälter ohne Stromstörer beträgt die Differenz in diesem Bereich weniger als 25 %. Für die mittlere Viskosität von 34 mPa s beginnt der Bereich guter Deckung bei etwa $Re > 60$. In den unbewehrten Reaktoren liegt die Differenz zwischen Experiment und Simulation für die mittlere Viskosität bei weniger als 10 %, während sie im Behälter mit Strombrechern kleiner als 15 % ist.

Für die größte simulierte Viskosität von 91 mPa s in Abbildung 6-11 C stimmen experimentelle und modellierte Daten über den gesamten betrachteten Reynoldszahlbereich überein. Dort liegen in beiden Reaktorarten die Abweichungen bei unter 10 %.

Zusätzlich ist zu sehen, dass für alle Viskositäten die Daten des bewehrten Reaktors höher liegen als die des unbewehrten. Für die niedrigste Viskosität von 14 mPa s ist für $Re > 250$ die Newton-Zahl annähernd konstant, während für die beiden höheren betrachteten Viskositäten die Werte weiter sinken. Eine konstante Newton-Zahl in der Leistungscharakteristik bedeutet turbulente Strömung (siehe Gleichung (3-19)).

Da die Strömungsbereiche aus Abbildung 6-11 nicht eindeutig abgelesen werden konnten, wurde die Leistungscharakteristik in Abbildung 6-12 modifiziert aufgetragen. Konstante Werte in den Diagrammen deuten auf laminare Strömung (Abbildung 6-12 A, C, E) bzw. eine Strömung im Übergangszustand (Abbildung 6-12 B, D, F) hin. Bei der Betrachtung der Diagramme des Produkts aus Newton- und Reynoldszahl in der linken Spalte der Abbildung 6-12 fällt nur für die experimentellen Werte einer Viskosität von 14 mPa s im bewehrten Behälter zwischen $70 < Re < 180$ ein konstanter Verlauf auf. Ansonsten kann für keinen Datensatz ein Bereich festgestellt werden, in dem sich das Produkt der beiden Kennzahlen über der Reynoldszahl nicht ändert. Bei der Auftragung der Daten nach Gleichung (3-20) in der rechten Spalte der Abbildung 6-12 finden sich für alle betrachteten Viskositäten Bereiche konstanter Werte.

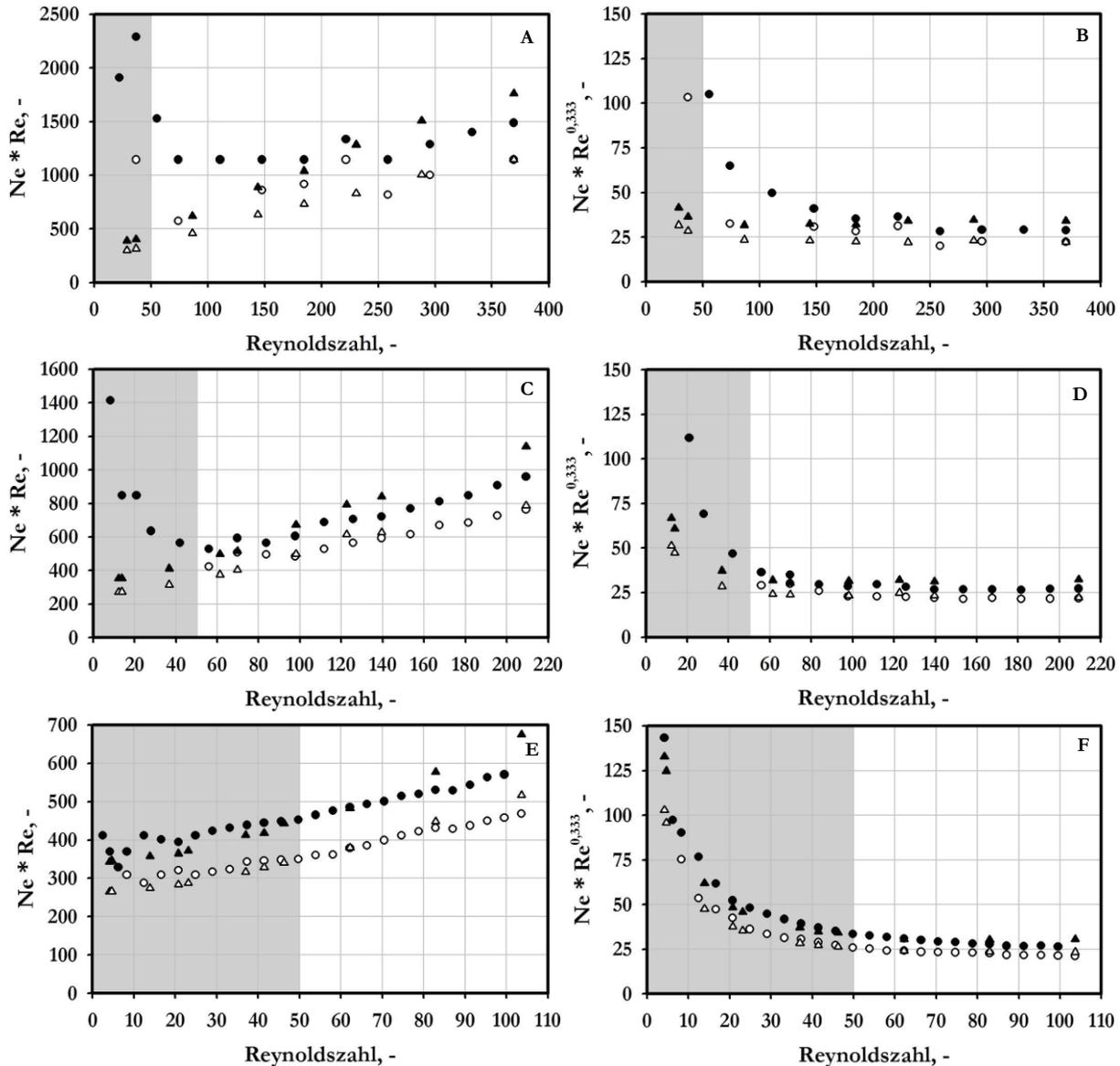


Abbildung 6-12: Alternative Auftragungen der Leistungscharakteristik des S-Rührers im bewehrten (●, ▲) und unbewehrten (○, △) Reaktor für Glycerin mit den drei betrachteten Viskositäten (A, B: 14 mPa s. C, D: 34 mPa s. E, F: 91 mPa s.) auf dem Netz mit mittlerer Anzahl finiter Volumina. Vergleich von Experiment (●, ○) und Simulation (▲, △). A, C, E: Auftragung von $Ne \cdot Re$ zur Ermittlung des laminaren Strömungsbereichs (Gleichung (3-18)). B, D, F: Auftragung von $Ne \cdot Re^{0,333}$ zur Ermittlung des Übergangsbereiches (Gleichung (3-20)). Der grau hinterlegte Bereich zeigt an, dass bis $Re \leq 50$ ohne Turbulenzmodell gerechnet wurde.

Für die kleinste untersuchte Viskosität von 14 mPa s im Behälter mit Stromstörern beginnt er für Simulation und Experiment bei etwa $Re > 225$. Im unbewehrten Reaktor fangen die konstanten Werte der Simulation früher an – nämlich bei $Re > 100$ – und die der Experimente später – bei $Re > 250$. Für die mittlere Viskosität von 34 mPa s beginnt der konstante Verlauf der Simulationsergebnisse in beiden Reaktortypen bei ca. $Re > 70$, während er bei den Experimenten in den

zwei Behälterarten erst bei etwa $Re > 120$ anfängt. Bei der höchsten betrachteten Viskosität von 91 mPa s sind die Simulationsdaten ab etwa $Re > 65$ konstant, während die Versuchsergebnisse im betrachteten Reynoldszahlbereich weiter sinken.

6.4.1 Diskussion

Die Übereinstimmung zwischen Experimenten und Simulationen ist sowohl für den Behälter mit Stromstörern als auch den ohne für die höheren betrachteten Reynoldszahlen gut. Die Tendenzen werden von den Simulationen für alle Viskositäten richtig wiedergegeben. Allerdings zeigt sich, dass sich die Übereinstimmung zwischen experimentellen und simulierten Daten mit zunehmender Viskosität verbessert. Die Abweichungen liegen für die höchste betrachtete Viskosität für den volumenbezogenen Leistungseintrag bei maximal 13 % und für die Leistungscharakteristiken bei höchstens 10 %. Damit sind sie in derselben Größenordnung wie die Diskretisierungsfehler in Abschnitt 5.3.2 und die Fehler bei der Versuchsdurchführung.

Die Kurvenverläufe des bewehrten Behälters in Abbildung 6-10 und Abbildung 6-11 liegen über denen des unbewehrten. Das entspricht den Erwartungen (vgl. Abbildung 3-4). Die Simulationen sind also in der Lage, dies richtig abzubilden.

Mithilfe der Leistungscharakteristik lassen sich die Strömungsbereiche im Reaktor ablesen. Das turbulente Regime konnte in Abbildung 6-11 lediglich bei der niedrigsten verwendeten Viskosität von 14 mPa s für $Re > 250$ erreicht werden. Der laminare Bereich kann nicht festgestellt werden. Der konstante Bereich für 14 mPa s in Abbildung 6-12 A, der auf laminare Strömung hindeutet, ist auf Messfehler zurückzuführen. Dafür spricht auch die Streuung der Messdaten. Außerdem sind die Reynoldszahlen für laminare Strömung zu hoch (vgl. Kapitel 3.1). Dagegen lässt sich für alle Viskositäten und Reaktoren in Abbildung 6-12 auf der rechten Seite eindeutig das Transitionsregime beobachten. Für 14 mPa s beginnt es bei etwa $Re > 225$ im Behälter mit Stromstörern und für die Versuchsdaten im unbewehrten Reaktor, während die Simulationsergebnisse für den Behälter ohne Strombrecher den Transitionsbereich ab $Re > 100$ anzeigen. Bei 34 mPa s fängt das Übergangsgebiet für die Simulationen bei ca. $Re > 70$ und für die Experimente bei etwa $Re > 120$ an. Für die höchste betrachtete Viskosität von 91 mPa s zeigen nur die Simulationen ab $Re > 65$ den Übergangsbereich klar an.

Für alle betrachteten Fälle beginnt das Transitionsregime bei den Simulationen früher als in den Experimenten. Im Zusammenhang mit der bereits erwähnten Problematik der Turbulenzmodellierung bei niedrigen Reynoldszahlen sind diese Ergebnisse also mit Vorsicht zu betrachten.

Bis zu einer Reynoldszahl von 50 wurden die betrachteten Fälle ohne Turbulenzmodell gerechnet, ab $Re > 50$ mit (vgl. Kapitel 6.3.1). Also unterschätzen die laminaren Simulationen die auftretenden Energien und die Turbulenz. Allerdings ist die Annahme, dass laminare Strömung herrscht, nach der Betrachtung der linken Spalte von Abbildung 6-12 auch nicht völlig gerechtfertigt, da eigentlich keine vorliegt. Bei den kleineren Reynoldszahlen, bei denen schon ein Turbulenzmodell verwendet wurde ($Re > 50$), kann dieses die Strömung im Übergangsbereich nicht korrekt wiedergeben. Bei den mittleren untersuchten Reynoldszahlen aber verbessert die Benutzung eines Turbulenzmodells die Übereinstimmung zwischen Experiment und Modellierung, obwohl das turbulente Regime bei den betrachteten Reynoldszahlen nur für die kleinste Viskosität erreicht wird.

Also ist im Transitionsregime die Benutzung eines Turbulenzmodells zwar einerseits notwendig, aber andererseits kann es – besonders im frühen Übergangsbereich – die beginnende Turbulenz nur unzureichend abbilden.

Außerdem ist auffallend, dass sich die Übereinstimmung zwischen modellierten und experimentellen Daten mit zunehmender Viskosität besonders bei den kleinen Reynoldszahlen verbessert. Die Viskosität hat also einen deutlichen Einfluss auf die Simulation und die Übereinstimmung mit den Experimenten. Je viskoser das simulierte Medium ist, desto eher wird eine Deckung mit den Versuchsdaten erreicht. Die Phänomene, die zur falschen Abbildung des Strömungsverhaltens führen, werden also durch die höhere Viskosität gedämpft.

6.4.2 Zusammenfassung

Die Übereinstimmung zwischen Simulationen und Experimenten zur Ermittlung des Leistungseintrags ist gut. Zusätzlich verbessert sie sich mit steigender Viskosität des Mediums und für größere Werte der Reynoldszahl. Die höhere Viskosität dämpft die Turbulenz und die Phänomene in der Strömung, die eine genaue Beschreibung der Fluidbewegung durch die verwendeten Modelle verhindern. Dass die Deckung zwischen Experiment und Simulation mit steigender Reynoldszahl besser wird, liegt daran, dass das Übergangsbereich in Modellierungen mit Turbulenzmodell nur schwer exakt beschrieben werden kann.

Für die niedrigste Viskosität von 14 mPa s ist die Strömung im Rührkessel ab $Re > 250$ turbulent, während sie für alle betrachteten Viskositäten und Reynoldszahlen im Übergangsbereich liegt.

6.5 Vergleich der betrachteten Rührertypen

Die drei in den Simulationen behandelten Rührer unterscheiden sich stark in ihrer Anwendung und deshalb auch in den verwendeten Fluiden bzw. vorliegenden Strömungsbereichen.

Der gasinduzierende Rührer wurde einphasig mit einem niedrigviskosen Fluid (Wasser) bei hohen Drehzahlen simuliert. Dort liegt für die untersuchten Rührerdrehzahlen im Reaktor eine turbulente Strömung bzw. eine Strömung im späten Transitionsregime vor.

Beim Paddelrührer handelt es sich um eine zweiphasige Strömung mit komplexer Phasengrenzfläche. Wie beim gasinduzierenden Rührer wurde in den Simulationen eine Flüssigkeit mit geringer Viskosität (Wasser) betrachtet. Deshalb ist auch dort die Strömung turbulent.

Der H- bzw. S-Rührer wurde einphasig gerechnet. Allerdings wurden dort viskose Fluide untersucht, deren Viskosität etwa das 15- bis 90-fache der Viskosität von Wasser betrug. Die Strömungen lagen für die betrachteten Rührerdrehzahlen hauptsächlich im Übergangsbereich.

Aus den Simulationsergebnissen dieser sehr verschiedenen Kombinationen, die in den Kapiteln 6.1 bis 6.4 vorgestellt wurden, lassen sich die folgenden Schlussfolgerungen bezüglich der Leistungsfähigkeit von numerischer Strömungssimulation für die Vorhersage der Energiedissipation im Reaktor und die Ermittlung von Leistungseinträgen und Leistungscharakteristiken ziehen.

Die Energiedissipation ist eine Größe, die in den Simulationen nur für turbulente Strömungen berechnet wird. Aus diesem Grund wurde sie in diesem Kapitel auch nur für die beiden Rührer mit einer eindeutig turbulenten Strömung ermittelt und diskutiert (vgl. Kapitel 6.1 und 6.2).

Für diese beiden Fälle zeigt sich, dass zwar der qualitative Verlauf der simulierten, maximalen Energiedissipation den erwarteten Abhängigkeiten folgt, sich aber quantitativ deutliche Abweichungen ergeben können. Wird aus der modellierten Energiedissipation der Leistungseintrag berechnet, sind Messungen im Vergleich mit diesen simulierten Werten etwa doppelt bis fünfmal so hoch. Das liegt daran, dass bei der Rechnung über die turbulente Energiedissipation nur der turbulente Anteil der Viskosität berücksichtigt wird (vgl. Unterkapitel 6.1.1).

Wird der Leistungseintrag in den Rührbehälter bzw. die Newton-Zahl jedoch über das simulierte Rührerdrehmoment bestimmt, ist die Vorhersagbarkeit der jeweiligen Größe über numerische Strömungssimulation gut. In besonderem Maße trifft dies auf turbulente, einphasige Strömungen zu (siehe Kapitel 6.1). Aber auch für einphasige Simulationen mit Flüssigkeiten hoher Viskosität, bei denen sich die Strömung im Transitionsgebiet befindet, ist die Strömungssimulation in der Lage, die gewünschten Größen mit guter Genauigkeit vorherzusagen (vgl. Abschnitt 6.3). Aller-

dings nimmt die Aussagekraft der Simulationen mit steigender Viskosität zu und hängt auch von vorhandenen Einbauten – wie z. B. Stromstörern im Reaktor – ab (siehe Kapitel 6.4).

Wie zu erwarten war, stellte sich die rechnerische Bestimmung von Energiedissipation und Leistungseintrag bzw. Leistungscharakteristik für zweiphasige und turbulente Strömungen (vgl. Unterkapitel 6.2) am schwierigsten dar. Als Hauptgrund für die Abweichungen der Simulation von Messdaten wird die Modellierung der zweiphasigen Strömung angesehen. Wegen der Art der Strömung, die durch die Drehung des Paddelrührers entsteht, ist die richtige Ermittlung der Lage der Phasengrenzfläche ausschlaggebend für die korrekte Bestimmung des Leistungseintrags.

7 Simulation des eintretenden Gasvolumenstroms des gasinduzierenden Rührers

Da für einen gasinduzierenden Rührer der eingetragene Gasvolumenstrom von der Rührerdrehzahl abhängt, ist er variabel und im vorliegenden Fall außerdem nicht messbar. Das liegt daran, dass sich im Milliliter-Bioreaktorsystem der zugeführte Gasvolumenstrom auf 48 einzelne Reaktoren verteilt und in jedem Einzelbehälter den Kopfraum durchströmt. Aus diesem Kopfraum saugt der gasinduzierende Rührer das Gas durch die Hohlachse an. Deshalb soll der in die Flüssigkeit eintretende Gasvolumenstrom durch Simulationen ermittelt werden.

Doch bevor dies in Abschnitt 7.2 genauer beschrieben wird, soll zunächst in Unterkapitel 7.1 das entstehende Strömungsbild des gasinduzierenden Rührers näher erläutert werden. Das Kapitel 7 endet mit einer Zusammenfassung in Abschnitt 7.3.

7.1 Strömungsbild

Die einphasige Strömung, die durch die Drehung des gasinduzierenden Rührers im Reaktor entsteht, ist in Abbildung 7-1 für eine Rührerdrehzahl von 3000 min^{-1} dargestellt.

Zunächst fällt in Abbildung 7-1 A die ungleichmäßige Verteilung der Geschwindigkeit im Reaktor auf. Im größten Teil des Rührbehälters sind die Geschwindigkeiten mit etwa einem Zehntel der beobachteten Maximalgeschwindigkeit von 3 m s^{-1} vergleichsweise niedrig, wobei die Werte oberhalb des Rührers geringer sind als unterhalb.

In den schrägen Bohrungen des Rührerkörpers werden die Geschwindigkeiten nach außen hin immer höher und die Maximalgeschwindigkeiten treten an den Ausgängen dieser Bohrungen auf. Außerdem finden sich noch in der senkrechten Bohrung in der Mitte des Rührers hohe Werte der Geschwindigkeit.

In Abbildung 7-1 B lässt sich die Richtung der Strömung erkennen. Die Strömung im Rührbehälter mit dem gasinduzierenden Rührer wird vom Transport des Fluids durch die Bohrungen des Rührers beherrscht. Das Fluid – bzw. bei Gaseintrag die Fluide – wird von unten durch die mittige Bohrung in den Rührerkörper gesaugt und tritt dann durch die schrägen Bohrungen

wieder aus dem Rührer aus und wird im Reaktor verteilt. Die Strömung, die aus den schräg nach unten gerichteten Bohrungen kommt, erzeugt unterhalb des Rührers Wirbel, die wieder in die mittige Bohrung münden. Außerdem sind an den Austritten der Bohrungen und in den schräg nach unten weisenden Bohrungen Rezirkulationszonen zu sehen. Oberhalb des Rührers bewegt sich die Flüssigkeit wellenförmig nach oben und sinkt dann daneben langsam wieder ab.

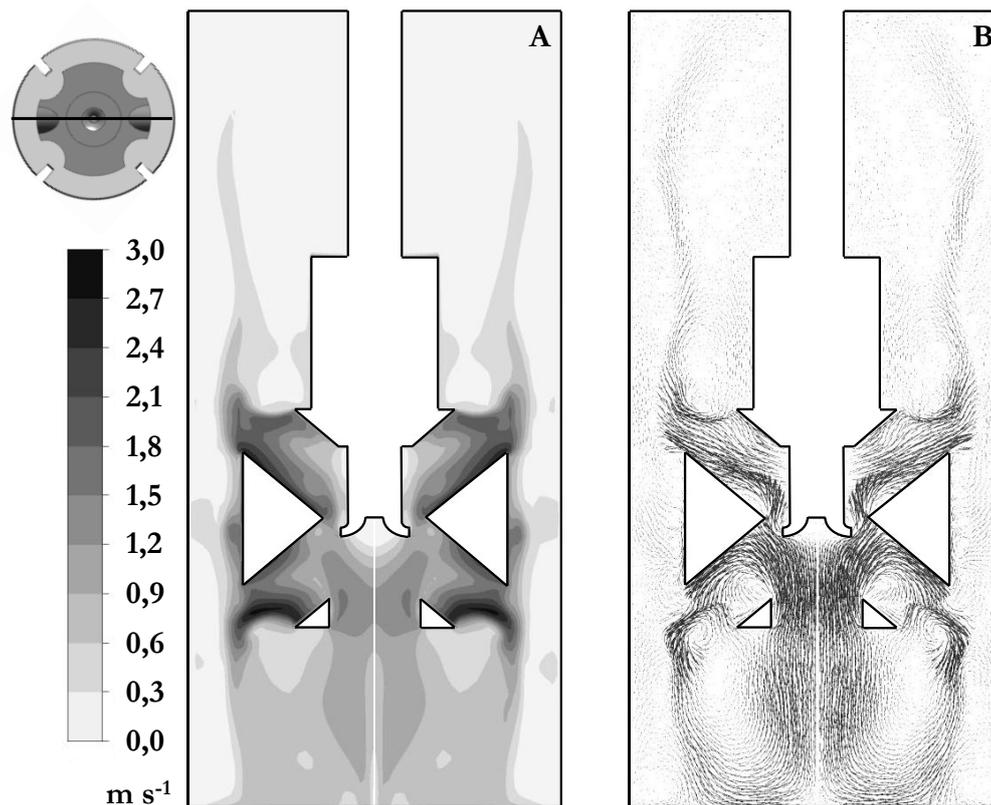


Abbildung 7-1: Profil (A) und Vektordarstellung (B) der Geschwindigkeit in der vertikalen Ebene mittig zwischen den Stromstörern für den gasinduzierenden Rührer bei einer Rührerdrehzahl von 3000 min^{-1} . In der Vektordarstellung (B) wurde die Richtung der Vektoren auf die dargestellte Ebene projiziert. Die Simulationen wurden stationär und einphasig auf dem Netz mit mittlerer Anzahl finiter Volumina gerechnet. Die Darstellung des Reaktors in der Draufsicht oben links verdeutlicht die Lage der gezeigten Ebene.

Abbildung 7-2 zeigt die Verteilung des relativen Drucks im Rührkessel auf derselben Ebene, die schon in Abbildung 7-1 zu sehen war. Im größten Teil des Reaktors ist der Relativdruck null. Druckschwankungen treten vor allem in den Bohrungen des Rührers auf. Außerdem steigt der Druck hinter den Austritten der Rührerbohrungen im Wandbereich leicht an. In der mittigen, senkrechten Bohrung und in den schrägen Bohrungen des Rührers herrscht vorwiegend Unterdruck. Auch unterhalb des Rührers ist der Druck geringer als der atmosphärische Druck.

Teilweise lassen sich im Druckprofil in Abbildung 7-2 die Wirbel der Strömung aus Abbildung 7-1 B wiedererkennen.

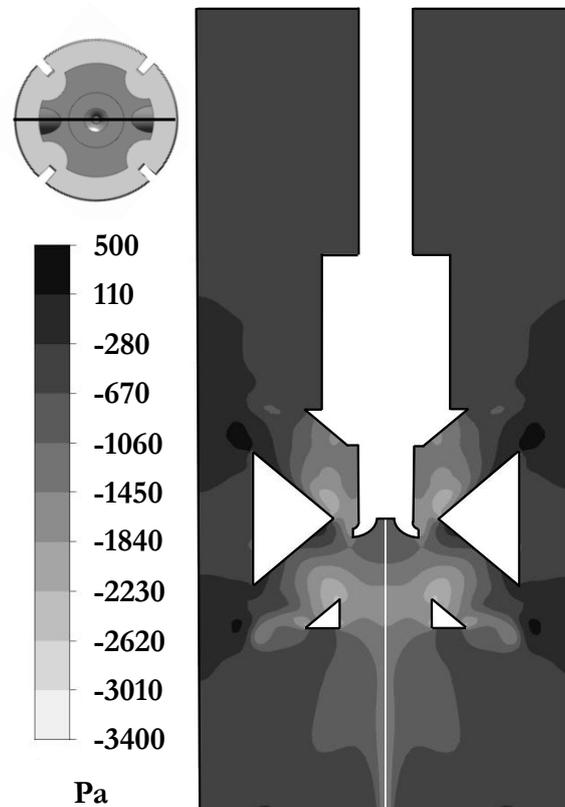


Abbildung 7-2: Verteilung des Relativdrucks in der vertikalen Ebene mittig zwischen den Stromstörern für den gasinduzierenden Rührer bei einer Rührerdrehzahl von 3000 min^{-1} . Die Simulationen wurden stationär und einphasig auf dem Netz mit mittlerer Anzahl finiter Volumina gerechnet. Die Darstellung des Reaktors in der Draufsicht oben links verdeutlicht die Lage der gezeigten Ebene.

Diskussion

Die Strömung im Reaktor mit dem gasinduzierenden Rührer wird von der Bewegung des Fluids durch die Bohrungen des Rührers dominiert, denn dort treten die höchsten Geschwindigkeiten auf.

Die Zunahme der Geschwindigkeit in den schrägen Bohrungen des Rührers sowie die Tatsache, dass die größten Geschwindigkeiten am Austritt der Bohrungen auftreten, ist mit der Beschleunigung des Fluids durch die Rührerdrehung zu erklären. Die Flüssigkeit wird also durch die Bohrungen herausgeschleudert. So kommen auch die hohen Geschwindigkeitswerte in der mittigen

Bohrung zustande, da das Fluid dort nachgesaugt wird, um dann wieder durch die Bohrungen im Rührbehälter verteilt zu werden. Durch die starken Richtungswechsel der Strömung innerhalb des Rührerkörpers bilden sich vor allem in den unteren, schrägen Bohrungen Rezirkulationszonen. Die Druckverteilung bestätigt die Sogwirkung in der mittleren, senkrechten Rührerbohrung, die durch die Bewegung des Fluids durch die Bohrungen nach außen erzeugt wird, denn dort herrscht Unterdruck. Der leicht erhöhte Druck hinter den Austritten der schrägen Bohrungen im Wandbereich des Reaktors lässt sich durch das Auftreffen der Flüssigkeit auf die Wand erklären.

Das Gas tritt durch die Hohlachse in den Rührbehälter ein. Bei der Simulation des Strömungsbildes wurde die zweite Phase nicht mit betrachtet. Deshalb ist sie auch in Abbildung 7-1 nicht erkennbar. Aber die hohen Geschwindigkeiten an der Stelle, wo das Gas in den Reaktor eintritt – nämlich in der Mitte des Rührerkörpers –, sorgen für eine intensive Durchmischung beider Phasen. Außerdem bewirkt die Bewegung der gemischten Fluide durch die schrägen Bohrungen eine gute Verteilung der Gasphase im Reaktor. Auf diese Weise können der gute Sauerstoffeintrag bzw. die hohen gemessenen Stoffübergangskoeffizienten $k_L a$ erklärt werden (WEUSTER-BOTZ, 2005).

7.2 Zweiphasige Simulationen zur Bestimmung des eintretenden Gasvolumenstroms

Zur Bestimmung des eintretenden Gasvolumenstroms werden zweiphasige, instationäre Simulationen durchgeführt. Für diese müssen ein fester Gasvolumenstrom – bzw. eine feste Gasgeschwindigkeit bezogen auf den Eintrittsquerschnitt – und ein monodisperser Blasendurchmesser (vgl. Abbildung 3-7 und Kapitel 3.2.5) vorgegeben werden. In der Rechnung wird dann die sich mit diesen Parametern einstellende Phasengrenze bestimmt. Auf Basis der modellierten Phasengrenzfläche kann anschließend mit einer k_L -Korrelation (Gleichung (3-28) in Abschnitt 3.1.4) der flüssigkeitsseitige Stoffübergangskoeffizient $k_L a$ berechnet werden. Wird dieser bestimmte $k_L a$ mit Messdaten (HORTSCH und WEUSTER-BOTZ, 2010; PUSKEILER, 2004) verglichen, kann iterativ von den Parametern der Simulation auf die tatsächlichen Größen – den Blasendurchmesser und den eintretenden Gasvolumenstrom – geschlossen werden.

Um die gesuchte Größe mit so wenig Simulationsaufwand und Iterationen wie möglich zu finden, wird ein statistischer Versuchsplan eingesetzt. In diesem zentral zusammengesetzten Versuchsplan (engl. *central composite design*) werden drei Faktoren auf je fünf Stufen variiert (KLEPP-

MANN, 2006; MONTGOMERY, 2009). Als Faktoren dienen die Rührerdrehzahl, die Gaseintrittsgeschwindigkeit und der Blasendurchmesser. Die geplanten Faktorstufen sind in Tabelle 7-1 dargestellt. Die aufgeführten Gasgeschwindigkeiten entsprechen bei einem Innendurchmesser der Hohlachse von $d_i = 0,5 \text{ mm}$ Volumenströmen zwischen $8,3 \cdot 10^{-3} \text{ L min}^{-1}$ und $1,9 \cdot 10^{-2} \text{ L min}^{-1}$.

Tabelle 7-1: Geplante Faktorstufen der drei Faktoren des zentral zusammengesetzten Versuchsplans zur Ermittlung des eintretenden Gasvolumenstroms des gasinduzierenden Rührers.

	Faktorstufen				
	$-\alpha$	-1	0	1	α
Blasendurchmesser, mm	1	1,27	2,5	3,74	4
Rührerdrehzahl, min^{-1}	2000	2071	2400	2729	2800
Gasgeschwindigkeit am Eintritt, m s^{-1}	0,7	0,78	1,15	1,52	1,6

Die Zielgröße des Versuchsplans ist die Phasengrenzfläche. Mit den Ergebnissen der Simulationen soll eine Wirkungsfläche (engl. *response surface*) bestimmt werden. Diese Wirkungsfläche entspricht einem funktionalen Zusammenhang zwischen den drei Faktoren und der Zielgröße. Da sich aus der simulierten Phasengrenzfläche der $k_L a$ berechnen lässt, bietet die Wirkungsfläche auch einen funktionalen Zusammenhang zwischen dem $k_L a$ und den betrachteten Faktoren.

Nach der Erstellung der ersten Wirkungsfläche im Bereich der Faktorstufen aus Tabelle 7-1 und einem Vergleich mit gemessenen $k_L a$ sollte es möglich sein, den betrachteten Bereich der Faktoren anzupassen und auch deutlich einzugrenzen, z.B. indem nur noch zwei Faktoren betrachtet werden und der dritte – die Rührerdrehzahl oder der Blasendurchmesser – konstant bleibt. So wird der mögliche Bereich, in dem sich der Gasvolumenstrom bewegen kann, immer weiter eingegrenzt.

Bei der Durchführung der zweiphasigen, instationären Simulationen für den zentral zusammengesetzten Versuchsplan kam es immer wieder zu Abstürzen des Löser. Letztendlich konnte keine Simulation vollständig bis zum Erhalt aussagekräftiger Ergebnisse gerechnet werden.

Die Abbrüche traten nicht reproduzierbar während des Lösungsverlaufs auf. Ein Beispiel ist in Abbildung 7-3 zu sehen. Nach etwa 520 Zeitschritten kam es in der dort gezeigten Simulation zu einem sprunghaften Anstieg der Geschwindigkeit bzw. einem sprunghaften Abfall des relativen Druckes. Und obwohl Druck und Geschwindigkeit nach wenigen Zeitschritten am betrachteten Ort im Lösungsgebiet wieder realistischere Werte annahmen, stürzte der Löser trotzdem mit ei-

nem Überlauf-Fehler ab (englische Fehlermeldung des Löser von ANSYS CFX: *Fatal Overflow in Linear Solver*). Der Ablauf der Abstürze verlief immer nach diesem Muster.

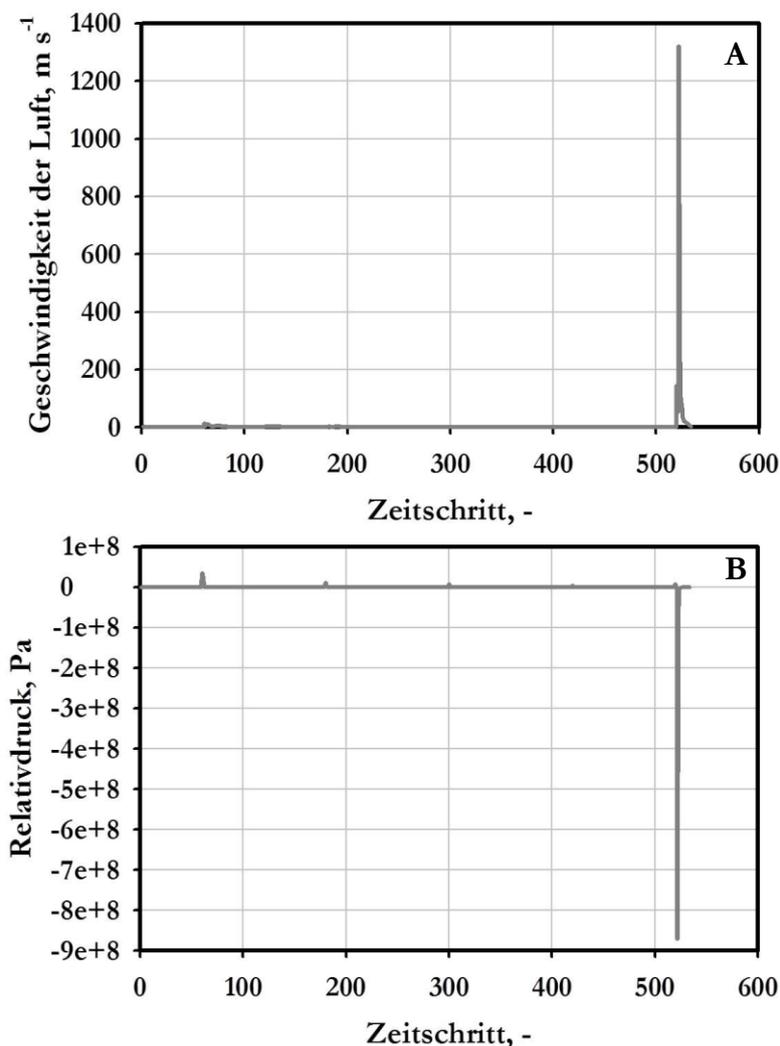


Abbildung 7-3: Geschwindigkeits- (A) und Drucksprung (B) während des Lösungsverlaufs der instationären zweiphasigen Simulationen des gasinduzierenden Rührers.

Die Anzahl der bis zum Abbruch gerechneten Zeitschritte variierte zwischen zwei und über mehreren hundert (vgl. Abbildung 7-3). Bei den Simulationen mit einem späteren Absturz wurde jeweils ein kleinerer Zeitschritt verwendet. Der Zeitpunkt des Abbruches konnte also durch die Wahl des Zeitschrittes zwar beeinflusst, aber nicht verhindert werden: Je kleiner der Zeitschritt war, desto später fand der Absturz statt. Aufgrund der Beobachtungen bei den Abbrüchen wurden für die verschiedenen Simulationen Zeitschritte benutzt, die Courant-Zahlen zwischen 0,5 und 3 gleichkamen. Sie entsprachen Rührerdrehungen von 1° bis etwa 6° pro Zeitschritt unabhängig von der gewählten Rührerdrehzahl.

Nachdem der Löser abgestürzt war, wurden die Simulationen im Postprozessor ausgewertet, um die Stellen zu identifizieren, an denen die Probleme auftraten, die zum Abbruch führten. Sie befanden sich meist in der Nähe einer Wand-Randbedingung und dort, wo hohe Gasvolumenanteile vorlagen. Diese Simulationen waren für die Gasphase ohne Haftbedingung an den Wänden gerechnet worden, um die tatsächliche Strömung im Rührkessel möglichst realistisch nachzubilden. Da so keine numerische Beschränkung der Geschwindigkeit für die Gasphase vorhanden war, konnte sich die Geschwindigkeit der Gasphase beliebig einstellen und sie stieg stark an. Dies führte dann zum Abbruch der Rechnungen. Deshalb wurden die Wand-Randbedingungen für die Gasphase ebenfalls mit einer Haftbedingung versehen. Diese Simulationen liefen zwar stabiler als die ohne Haftbedingung, aber brachen dennoch ab.

Außerdem wurden stationäre, zweiphasige Simulationen durchgeführt, die dann als Anfangswerte für die instationären Simulationen dienten. Mit den stationären Simulationen selbst konnten keine endgültigen Ergebnisse ermittelt werden, da sie das Verhalten der zweiphasigen Strömung mit dem gasinduzierenden Rührer nicht korrekt abbilden. Aber auch diese Vorgabe eines Strömungsfelds als Anfangswerte führte nicht zu stabilen Simulationen.

Zunächst wurde wegen der turbulenten Strömung im Rührkessel in den Simulationen neben der Widerstandskraft auch die turbulente Dispersionskraft bei den Phasenwechselwirkungskräften berücksichtigt (siehe Kapitel 3.2.5). Da ihre Benutzung die Simulationen aber instabiler machte, wurde später wieder darauf verzichtet. Auch die Verwendung unterschiedlicher Modelle zur Bestimmung der Widerstandskraft bzw. des Widerstandsbeiwertes brachte keine Verbesserung des Stabilitätsverhaltens.

Als Nächstes wurde die Wand-Randbedingung mit „Entgasungsbedingung“ an der oberen freien Oberfläche der Flüssigkeit (vgl. Abschnitt 4.6.1) durch eine herkömmliche „Öffnung“ (englische Bezeichnung in ANSYS CFX: *Opening*) ersetzt, da letztere numerisch stabiler ist (ANSYS INC., 2010e). Durch eine Öffnung kann Masse in das System sowohl ein- als auch austreten. Über die Vorgabe der Volumenanteile beider Phasen kann dafür gesorgt werden, dass beide Phasen das System verlassen können, aber nur die Flüssigkeit wieder dazu kommen kann. Mit der Öffnung-Randbedingung liefen die Simulationen zwar stabiler, aber letztendlich brachen auch sie wieder ab.

Auch der Verzicht auf die tatsächliche Bewegung des Netzes während der instationären Simulation zur Implementierung der Rührerdrehung und stattdessen die Benutzung von mehreren Bezugssystemen (siehe Kapitel 3.3.9) brachte keine Besserung der Stabilität der Simulationen.

Um auszuschließen, dass die Ursache der Abbrüche der betrachtete Wertebereich des Versuchsplans war, wurden schließlich auch kleinere Drehzahlen (bis 500 min^{-1}) und Blasendurchmesser (bis $0,5 \text{ mm}$) und größere Gasvolumenströme (bis $0,1 \text{ L min}^{-1}$) überprüft. Allerdings hatte der betrachtete Bereich der untersuchten Faktoren keinen Einfluss auf die Durchführbarkeit der Simulationen.

Ein möglicher Grund für die Abstürze der Simulationen kann darin liegen, dass die Abmessungen der finiten Volumina der Gitter kleiner sind als die Blasendurchmesser während der Rechnung waren (vgl. Abschnitt 3.3.3). So war die Kontinuumsannahme für das Euler-Euler-Modell nicht mehr erfüllt. Allerdings kann aufgrund der Struktur des Netzes diese Anforderung nicht erreicht werden. Denn wenn ein finites Volumen größer sein soll als eine Gasblase, dürfte beispielsweise eine schräge Bohrung im Rührerkörper, die einen Innendurchmesser von etwa $d_i = 3,5 \text{ mm}$ hat, nur mit ein bis zwei Netzelementen über den Querschnitt ausgefüllt werden. Damit könnten dann aber die nötigen Qualitätskriterien nicht erfüllt werden, wie das auch bei dem groben Netz, das für die Abschätzung des Diskretisierungsfehler genutzt wurde, der Fall war. Auf einem Gitter mit unzureichender Qualität kommt es zu Problemen aufgrund der schlechten finiten Volumina, so dass die Nutzung eines sehr groben Netzes das Problem der Abbrüche nicht löst, sondern lediglich die Ursache verlagert. Auch die kleineren verwendeten Blasendurchmesser zeigten keine Verbesserung des Stabilitätsverhaltens der Rechnungen. Dies hätte vermutet werden können, wenn die nicht erfüllte Kontinuumsannahme im Euler-Euler-Modell der alleinige Grund für die Abbrüche der Simulationen wäre. Allerdings war auch der kleinste verwendete Blasendurchmesser noch größer als die mittleren Abmessungen der finiten Volumina.

Eine weitere mögliche Ursache dafür, dass die zweiphasigen Simulationen nicht durchführbar waren, könnte an Problemen in der Numerik liegen.

An anderer Stelle wird berichtet, dass es bei der in Kapitel 3.2.5 vorgestellten Formulierung der Differentialgleichungen für mehrphasige Strömungen (Gleichung (3-48) und (3-49)) zu Problemen kommen kann (TABOR und RUSCHE, 1999). Tatsächlich wird dort ein ähnliches Verhalten beschrieben, das auch im vorliegenden Fall auftrat, nämlich dass es bei sehr kleinen Volumenanteilen zu unphysikalischen Geschwindigkeiten der jeweiligen Phase komme. Dies sei darauf zurückzuführen, dass sich die Geschwindigkeit für Phasenteile $\alpha \rightarrow 0$ beliebig einstellen könne, da in diesem Fall z.B. Gleichung (3-49) zu $0 = 0$ werde. Die Bestimmung eines endlichen Wertes für die Geschwindigkeit sei also schwierig.

Dies wäre eine plausible Erklärung für die Abstürze des Lösers, da Änderungen von verwendeten Modellen oder Randbedingungen keine Verbesserung der Stabilität bewirkten, was für eine Unstimmigkeit in einer grundlegenden Gleichung spricht, wie sie TABOR und RUSCHE (1999) ebenfalls beobachteten.

Da der Quellcode der verwendeten Software nicht zugänglich war, lässt sich diese Hypothese in letzter Konsequenz nicht überprüfen.

7.3 Zusammenfassung

Das Strömungsbild des gasinduzierenden Rührers wird dominiert von den hohen Geschwindigkeiten in den Bohrungen des Rührers.

Da bei Begasung des Rührkessels mit dem gasinduzierenden Rührer die Gasphase an dem Punkt eintritt, an dem sich alle Bohrungen im Rührerkörper treffen, wird die Gasphase durch die hohen dort auftretenden Geschwindigkeiten intensiv mit der Flüssigkeit durchmischt und im Reaktor verteilt. So werden hohe Stoffübergangskoeffizienten $k_L a$ erreicht.

Bei der zweiphasigen, instationären Simulation des gasinduzierenden Rührers kam es zu Abstürzen des Lösungsprogramms. Auch vielfältige Variationen der verwendeten Modelle und Randbedingungen oder des Zeitschritts führten nicht zu einer Stabilisierung des Lösers. Deshalb konnten keine Endergebnisse dieser Rechnungen erhalten werden.

Eine mögliche Erklärung der Instabilitäten ist die Formulierung der Differentialgleichungen für die Mehrphasenströmungen. Dadurch, dass jeder Term in den Gleichungen den Phasenanteil enthält, werden für Phasenanteile $\alpha \rightarrow 0$ die Gleichungen zu $0 = 0$, was die Ermittlung einer endlichen Geschwindigkeit schwierig macht.

8 Simulation der Phasengrenzfläche des Paddelrührers

Bei der Simulation des Paddelrührers war das Ziel der Rechnungen die Ermittlung der Größe der Phasengrenzfläche. Durch das sich ergebende komplexe Strömungsbild ist es nur unter großem Aufwand möglich, die Größe der Phasengrenzfläche experimentell zu bestimmen. Deshalb sollte sie simuliert werden.

Dieses Kapitel beginnt mit der Betrachtung von Ergebnissen zweiphasiger Simulationen mit Wasser und Luft. Dabei wird in Abschnitt 8.1 auf das generelle Strömungsbild eingegangen. Anschließend werden in Teilkapitel 8.2 die Ergebnisse der Simulation der Phasengrenzfläche erläutert, bevor in Unterkapitel 8.3 die auf Basis der simulierten Phasengrenzflächen und einer k_L -Korrelation berechneten $k_L a$ diskutiert werden. In Abschnitt 8.4 werden Ergebnisse aus einer Simulation mit einer viskosen Flüssigkeit und Luft vorgestellt. Das Kapitel 8 endet mit einer Zusammenfassung im Teilkapitel 8.5.

8.1 Strömungsbild

Durch die Rotation des Paddelrührers bildet sich im Reaktor eine Flüssigkeitstrombe aus. Mit steigender Drehzahl wird die Trombe immer tiefer. In Abbildung 8-1 ist die Geschwindigkeitsverteilung der Flüssigphase und die Richtung der Geschwindigkeit bei einer Rührerdrehzahl von 1000 min^{-1} in der vertikalen Mittelebene des Rührkessels zu sehen. Dadurch, dass nur die Flüssigkeit berücksichtigt wurde, ist auch die Lage der Phasengrenzfläche in der Darstellung zu erkennen.

Bei der Betrachtung der Geschwindigkeitsverteilung in Abbildung 8-1 A finden sich die höchsten Werte im Wandbereich der dem Rührer abgewandten Reaktorseite und in dem schmalen Spalt zwischen Rührer und Wand. Die niedrigsten Geschwindigkeiten liegen in der Mitte des Behälters vor. Auf der dem Rührer gegenüberliegenden Seite nehmen die Geschwindigkeiten von der Mitte des Rührkessels nach außen hin immer weiter zu, während unterhalb des Rührers eine recht gleichmäßige Geschwindigkeitsverteilung vorliegt.

In Abbildung 8-1 B ist die Richtung der Geschwindigkeit in einer Vektordarstellung zu sehen. Vorrangig bewegt sich die Strömung im Rührkessel in tangentialer Richtung. Die axiale Be-

wegung im Behälter ist gering. Nur im unteren Teil des Reaktors lassen sich kleine Wirbel erkennen.

Was die Verteilung der Phasen in Abbildung 8-1 angeht, zieht sich die Trombe bei einer Drehzahl von 1000 min^{-1} bis unter den Rührer. Auffällig ist, dass sich die Phasen nicht symmetrisch verteilen, sondern dass die Flüssigkeit auf der Seite, auf der sich der Rührer befindet, bis über das obere Ende des Rührorgans reicht.

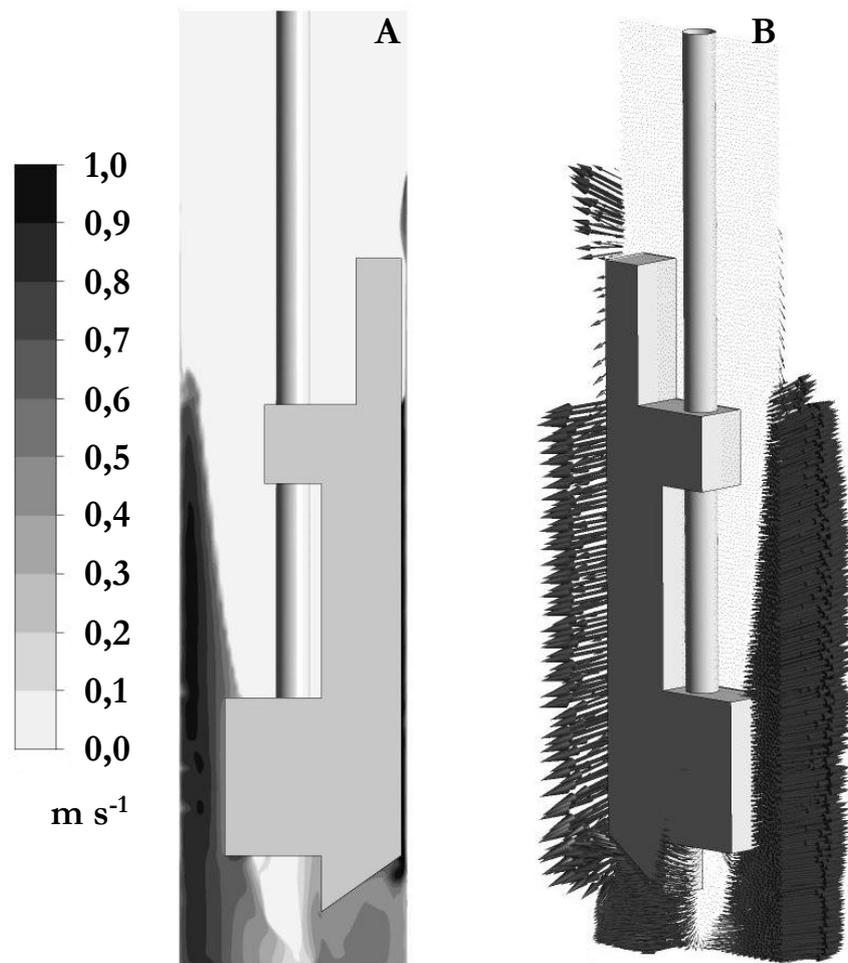


Abbildung 8-1: Profil (A) und Vektordarstellung (B) der Geschwindigkeit in der vertikalen Mittelebene für den Paddelrührer bei einer Rührerdrehzahl von 1000 min^{-1} . Die Simulation wurde auf dem feinen Netz mit einer Courant-Zahl von $\text{CFL} = 3$ gerechnet.

Diskussion

Der Paddelrührer wurde speziell für mycelbildende Mikroorganismen entwickelt. Ein Ausgangsziel war, das Wandwachstum zu verhindern. Deswegen sollte sich der Paddelrührer so nah wie möglich an der Wand entlang bewegen, was Strombrecher unmöglich machte. Dies wirkt sich

auf das Strömungsbild und die Phasengrenzfläche aus, denn es bildet sich eine Flüssigkeitstrombe, die in Abbildung 8-1 zu sehen ist.

Die Flüssigkeit rotiert wegen der fehlenden Bewehrung wie ein Festkörper im Reaktor. Deshalb nimmt auch die Geschwindigkeit der Flüssigkeit in Abbildung 8-1 A von innen nach außen im Rührkessel wie bei der Drehung eines Festkörpers zu. Unterhalb des Rührerblatts lässt sich diese Zunahme der Geschwindigkeit nach außen hin nicht erkennen, da die Wirbel, die sich dort bilden, die Flüssigkeit durchmischen und so die Geschwindigkeitsgradienten ausgleichen.

Aus der Vektordarstellung in Abbildung 8-1 B geht hervor, dass sich die Flüssigkeit im Behälter hauptsächlich tangential mit dem Rührer bewegt. Dies und die nur geringe axiale Geschwindigkeitskomponente stützen die These der Festkörperrotation.

Dass sich auf der Seite des Rührers auch Flüssigkeit an der Wand oberhalb des Rührer befindet, obwohl die Phasengrenze an der gegenüberliegenden Seite tiefer liegt, lässt sich dadurch erklären, dass der Rührer die Flüssigkeit vor sich herschiebt. So türmt sie sich vor und über dem Rührer auf, während auf der gegenüberliegenden Seite die Flüssigkeit der Schwerkraft folgend absinkt, so dass dort die Phasengrenzfläche nicht so hoch reicht. Weil der Rührer so schnell rotiert, kann sich die Flüssigkeit aber während einer Umdrehung nicht vollständig senken, und die Trombe bleibt erhalten.

Das Strömungsbild entspricht den Auslegungskriterien des Paddelrührers. Die Phasengrenzfläche, die durch die Ausbildung der Trombe entsteht, ist sehr groß. Darüber hinaus wird das Wandwachstum durch die Bewegung des Rührers entlang der Wand verhindert.

Da keine Messdaten zur Geschwindigkeit im Reaktor existieren, können die Simulationsergebnisse in diesem Punkt nicht validiert werden.

8.2 Bestimmung der spezifischen Phasengrenzfläche

Die Phasengrenzfläche, die durch die Drehung des Paddelrührers im Reaktor entsteht, wurde bei sechs verschiedenen Rührerdrehzahlen simuliert: 600 min^{-1} , 800 min^{-1} , 1000 min^{-1} , 1200 min^{-1} , 1400 min^{-1} und 1600 min^{-1} . Die daraus berechneten spezifischen Phasengrenzflächen sind in Tabelle 8-1 zusammengestellt. Zusätzlich zu den Rührerdrehzahlen sind in der Tabelle auch die Reynoldszahlen der Flüssigkeitsströmung aufgeführt.

Tabelle 8-1: Spezifische Phasengrenzflächen aus zweiphasigen Simulationen mit Wasser und Luft gerechnet auf dem feinen Netz mit einer Courant-Zahl von CFL = 3 bei verschiedenen Rührerdrehzahlen bzw. Reynoldszahlen.

Rührerdrehzahl, min^{-1}	600	800	1000	1200	1400	1600
Reynoldszahl, -	2356	3141	3926	4711	5496	6281
spezifische Phasengrenzfläche, m^{-1}	76,3	127,3	226,8	281,3	304,7	322,3

Die spezifische Phasengrenzfläche nimmt mit jeder Erhöhung der Drehzahl ebenfalls zu, während die prozentuale Steigerung der Fläche immer geringer wird. Eine Zunahme der Drehzahl um 167 % von 600 min^{-1} auf 1600 min^{-1} bewirkt eine Erhöhung der spezifischen Phasengrenzfläche um 322 % von $76,3 \text{ m}^{-1}$ auf $322,3 \text{ m}^{-1}$.

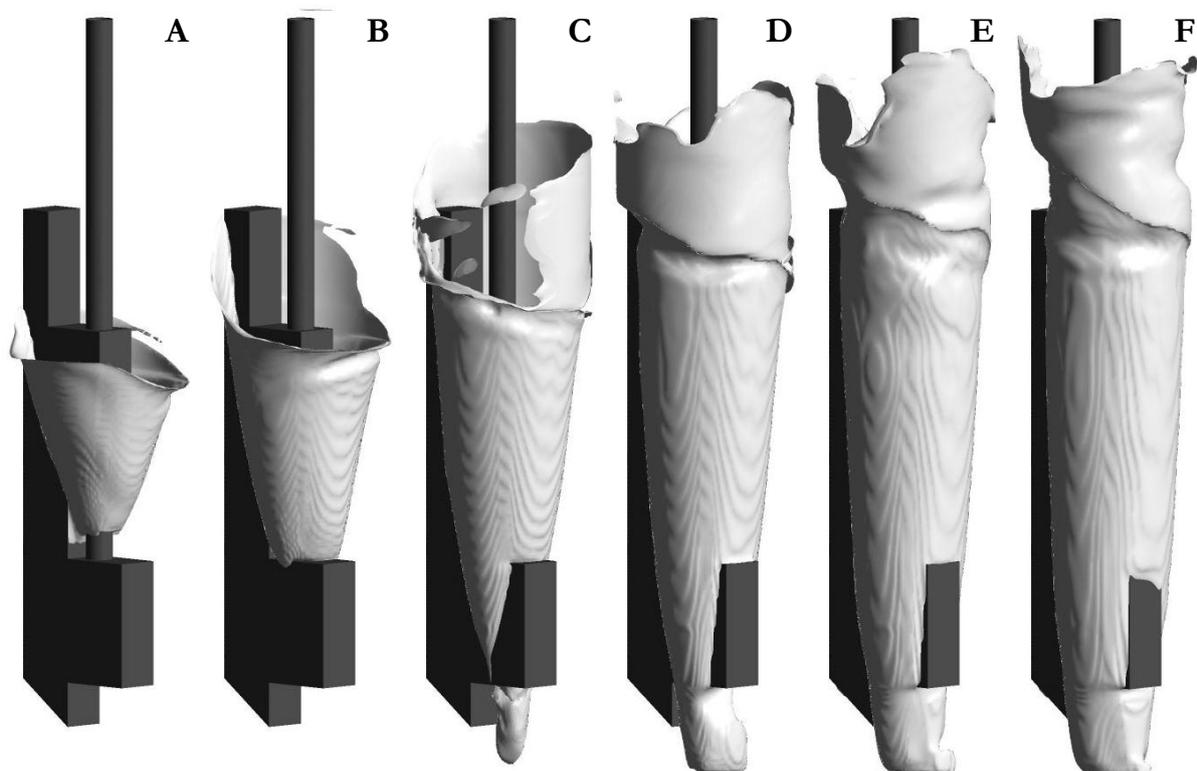


Abbildung 8-2: Phasengrenzfläche des Paddelrührers für den Phasenanteil $\alpha = 0,5$ bei verschiedenen Drehzahlen (A: 600 min^{-1} . B: 800 min^{-1} . C: 1000 min^{-1} . D: 1200 min^{-1} . E: 1400 min^{-1} . F: 1600 min^{-1} .) im unbewehrten Reaktor gerechnet auf dem feinen Netz und mit einer Courant-Zahl von CFL = 3.

Die Formen der Phasengrenzfläche bei den verschiedenen Drehzahlen sind in Abbildung 8-2 zu sehen. Auch hier ist erkennbar, dass die Fläche mit größer werdender Drehzahl zunimmt. Zunächst ist die Trombe trichterförmig, aber ihre Form wird mit jeder Drehzahlsteigerung

komplexer. Ab einer Drehzahl von 1000 min^{-1} zieht sich die Trombe bis unter den Rührer. Bei dieser Rührergeschwindigkeit ist auch das erste Mal Flüssigkeit oberhalb des Rührerblatts zu sehen. Auf den Phasengrenzflächen lassen sich wellenförmige Strukturen feststellen. Außerdem wird in Abbildung 8-2 deutlich, dass im Rührkessel mit dem Paddelrührer zwei kontinuierliche Phasen vorliegen.

In Abbildung 8-3 A ist die Verteilung des Volumenanteils von Wasser auf derselben Ebene wie schon in Abbildung 8-1 gezeigt. Außerdem sind in Abbildung 8-3 B, C und D die Verteilungen des Volumenanteils auf drei horizontalen Ebenen im Reaktor von oben zu sehen. Die gewählten Höhen dieser drei Ebenen sind durch die Pfeile neben der Darstellung in Abbildung 8-3 A angedeutet. Die Pfeile rechts neben den Ebenen B, C und D in Abbildung 8-3 zeigen die Drehrichtung des Rührers an.

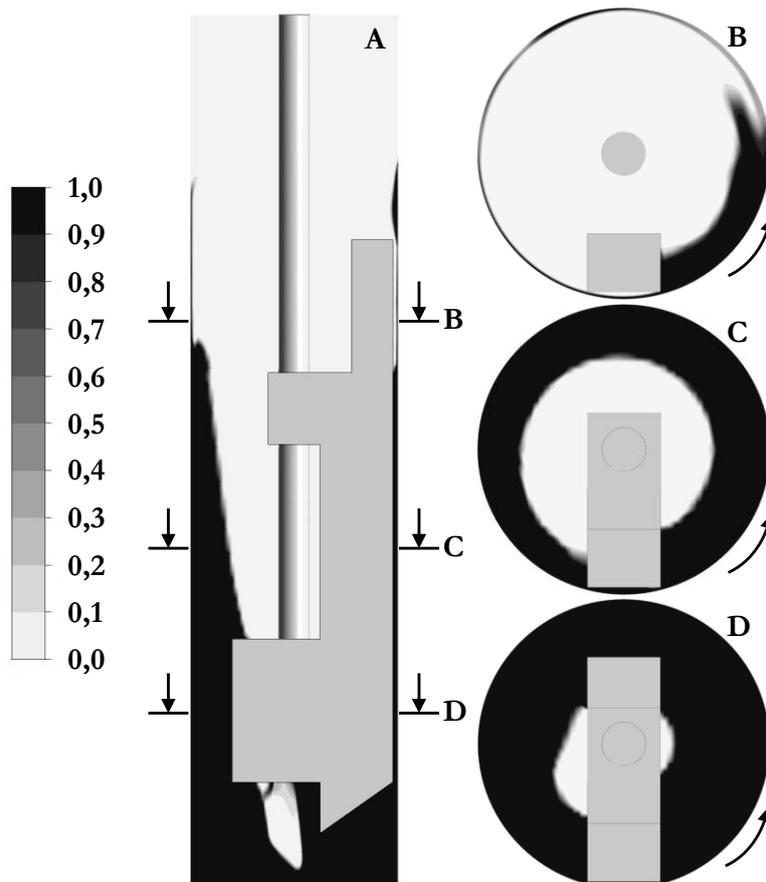


Abbildung 8-3: Verteilung des Phasenanteils für Wasser auf der vertikalen Mittelebene (A) und drei horizontalen Ebenen (B, C, D) im unbewehrten Reaktor bei einer Rührerdrehzahl von 1000 min^{-1} . Die Simulation wurde auf dem feinen Netz bei einer Courant-Zahl von $\text{CFL} = 3$ durchgeführt. Die Lage der Schnittebenen ist neben der vertikalen Ebene (A) dargestellt. Die Pfeile neben den horizontalen Ebenen (B, C und D) verdeutlichen die Drehrichtung des Rührers.

In der vertikalen Ebene (Abbildung 8-3 A) ist der Verlauf der Grenzfläche zu sehen. Besonders auffällig ist in dieser Darstellung der steile Gradient des Volumenanteils. Der Wechsel der Phase von Wasser zu Luft findet für den größten Teil der Phasengrenzfläche über maximal zwei finite Volumina statt. Nur unterhalb des Rührers verteilt sich der Phasenwechsel über eine weitere Fläche.

Zusätzlich ist in den drei horizontalen Ebenen (Abbildung 8-3 B, C und D) zu erkennen, dass sich vor dem Rührer jeweils mehr Flüssigkeit als dahinter befindet. Außerdem nimmt der Flüssigkeitsgehalt mit der Höhe im Reaktor ab. Im niedrigsten dargestellten Reaktorquerschnitt (Abbildung 8-3 D) ist also mehr Wasser als in der höchsten gezeigten Ebene (Abbildung 8-3 B) vorhanden. Im Querschnitt in Abbildung 8-3 B sammelt sich – neben einem dünnen Wasserfilm an der Wand – die Flüssigkeit vollständig vor dem Rührerblatt.

Diskussion

Dass die Phasengrenzfläche mit jeder Steigerung der Rührerdrehzahl größer wird, entspricht den Erwartungen. Ebenso, dass die prozentuale Zunahme dieser Flächenvergrößerung sich antiproportional zur Drehzahl verhält. Ab einer gewissen Rührerdrehzahl kann nicht mehr Flüssigkeit vom Rührorgan verdrängt werden. Dies ergibt die maximal erreichbare Größe der Phasengrenzfläche. Der hier bestimmte Maximalwert der spezifischen Phasengrenzfläche, die für den Paddelrührer bei 1600 min^{-1} erreicht wird, liegt höher als alle, die von ALVES et al. (2004 und 2002) unter nicht-koaleszierenden Bedingungen für zwei Sechsblasscheibenrührer in einem Rührkessel im Labormaßstab bei verschiedenen Drehzahlen und Begasungsraten experimentell ermittelt wurden.

Die Wellenstruktur in Abbildung 8-2 ist auf das verwendete Gitter zurückzuführen. Hier lassen sich die finiten Volumina des Netzes erkennen.

In den horizontalen Reaktorquerschnitten in Abbildung 8-3 B, C und D ist die Drehrichtung des Rührers durch die Verteilung des Fluids gut zu erkennen, da sich vor dem Rührer jeweils mehr Flüssigkeit sammelt. Außerdem lässt sich die Funktionsweise des Rührers erkennen, der das Fluid durch den Reaktor schiebt.

Schließlich zeigt der steile Gradient des Volumenanteils für den größten Bereich der Phasengrenzfläche in Abbildung 8-3, dass das für diese Zweiphasenströmung gewählte Modell die Realität gut abbildet. Denn wenn sich der Gradient des Phasenanteils über eine breitere Fläche ver-

teilt, hat die Wahl des Volumenanteils, bei dem die Phasengrenzfläche dargestellt wird, einen großen Einfluss auf deren Größe. Im vorliegenden Fall ist diese Abhängigkeit gering.

Dass die berechnete, spezifische Phasengrenzfläche größer als die von zwei Sechsblasscheibenrührern unter nicht-koaleszierenden Bedingungen ist, beweist durch die Simulationen, dass der Rührer eine große Flüssigkeitsoberfläche generieren kann.

Da für die Form und Größe der Phasengrenzfläche keine Messdaten vorliegen, können diese Simulationsergebnisse nicht unmittelbar validiert werden. Die Validierung erfolgt über die Berechnung des Massentransportkoeffizienten $k_L a$, in den die spezifische Phasengrenzfläche mit eingeht. Dieses Vorgehen wird im folgenden Kapitel behandelt.

8.3 Bestimmung des Massentransportkoeffizienten

Der Massentransportkoeffizient $k_L a$ wurde über die simulierte spezifische Phasengrenzfläche a aus Abschnitt 8.1 und einem mithilfe einer Korrelation berechneten Stoffübergangskoeffizient k_L ermittelt. Die verwendete k_L -Korrelation geht auf LAMONT und SCOTT (1970) zurück (Gleichung (3-28)). Die Proportionalitätskonstante der Gleichung wurde für den vorliegenden Fall zu 0,167 bestimmt, so dass die Abweichung zwischen Messdaten und Simulationsergebnisse minimal wurde. Die Gleichung zur Bestimmung des flüssigkeitsseitigen Stoffübergangskoeffizienten lautet also hier:

$$k_L = 0,167 \cdot \sqrt{\frac{D_L}{\nu}} \cdot (\varepsilon \nu)^{0,25} \quad (8-1)$$

mit D_L Diffusionskoeffizient in der Flüssigkeit, $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
 ε Energiedissipation, W kg^{-1}
 ν kinematische Viskosität, $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$.

Die mit Gleichung (8-1) und der simulierten spezifischen Phasengrenzfläche berechneten volumenbezogenen Stoffübergangskoeffizienten $k_L a$ werden in Abbildung 8-4 mit Messdaten verglichen, die aus HORTSCH et al. (2010) stammen.

Im Diagramm ist zu erkennen, dass sich sowohl die Ergebnisse der Simulationen als auch die der Experimente sich proportional zur Reynoldszahl erhöhen. Die Übereinstimmung ist gut. Die Abweichungen liegen zwischen 6 % und 35 %.

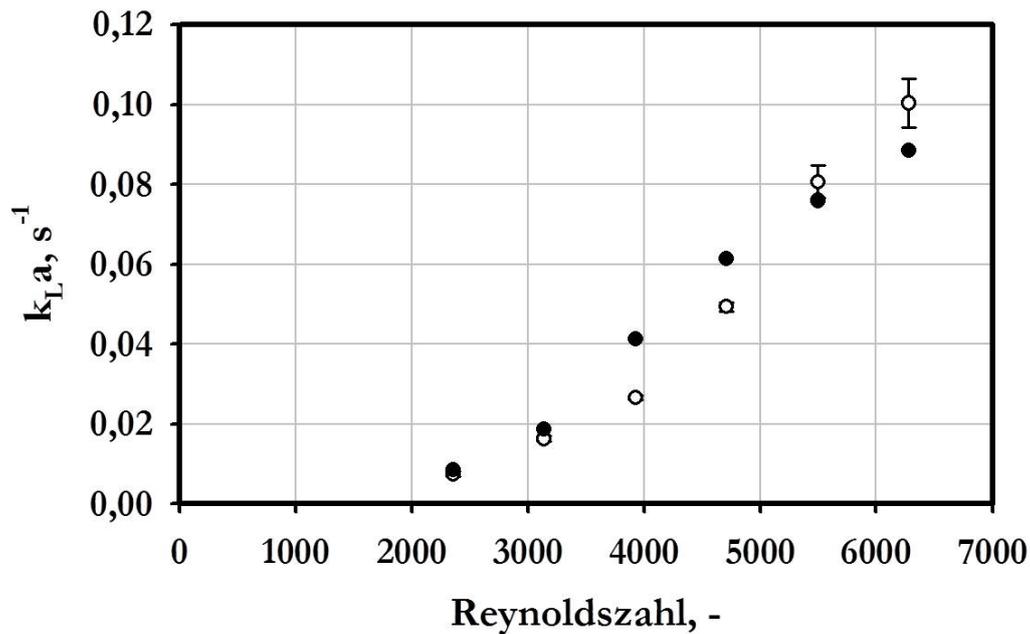


Abbildung 8-4: Vergleich von experimentellen (\circ) und modellierten (\bullet) volumenbezogenen Stoffübergangskoeffizienten k_{La} des Paddelrührers im unbewehrten Reaktor mit Wasser und Luft. Die Simulationen des Paddelrührers wurden auf dem feinen Netz und bei einer Courant-Zahl von CFL = 3 durchgeführt.

Diskussion

Die Deckung zwischen Messdaten und Simulationsergebnissen ist gut. Hier zeigt sich – obwohl noch Schwierigkeiten bei der Modellierung mehrphasiger Strömungen bestehen – die Leistungsfähigkeit der numerischen Strömungssimulation bei der Ermittlung der Phasengrenzfläche für diesen Fall. Auch dass für die Berechnung des k_L über eine Korrelation lokal aufgelöste Werte der Simulation verwendet werden können, ist gerade für die in Gleichung (8-1) einzusetzende Energiedissipation ε im Reaktor ein großer Vorteil gegenüber der Benutzung globaler Werte. Die Unterschiede zwischen experimentellen und simulierten Werten sind aber trotz dieses Vorteils wohl hauptsächlich auf die turbulente Energiedissipation zurückzuführen. Es ist bekannt, dass Turbulenzgrößen durch Wirbelviskositätsmodelle – wie sie im vorliegenden Fall auch verwendet wurden – unter- oder überschätzt werden können (z.B. NG et al., 1998 und YEOH et al., 2005). Besonders für zweiphasige Systeme ist die Bestimmung der turbulenten Strömungsvariablen problematisch (GENTRIC et al., 2005).

Zusätzlich reagiert der Stoffübergangskoeffizient k_{La} unmittelbar auch auf kleine Änderungen der Größe der Phasengrenzfläche. Deshalb muss die Modellierung der Zweiphasenströmung für eine sehr gute Übereinstimmung der Werte die Zustände sehr exakt wiedergeben. Dass die

Deckung von Simulations- mit Messdaten mit zunehmender Reynoldszahl etwas abnimmt, ist darauf zurückzuführen, dass die Phasengrenzfläche mit höherer Rührerdrehzahl immer komplexer wird (siehe auch Abbildung 8-2). Deshalb stimmen dort die Simulationsergebnisse etwas schlechter mit den Messdaten überein.

Der nächste Grund für die Differenzen zwischen Simulation und Experiment liegt in der Benutzung einer Korrelation für die Bestimmung von k_L in den Rechnungen. Die verwendete Gleichung (8-1) basiert auf einer Modellvorstellung, die die Realität nur vereinfacht abbildet (vgl. Kapitel 3.1.4). Deshalb werden auch an dieser Stelle Abweichungen zu den gemessenen Daten erzeugt.

In der Literatur werden für die Proportionalitätskonstante der Modellgleichung Werte zwischen 0,3 und 0,46 angegeben (KAWASE et al., 1992; LAAKKONEN et al., 2006; LAAKKONEN et al., 2007; LAMONT und SCOTT, 1970; TALVY et al., 2007). Diese liegen also etwas höher als im vorliegenden Fall. Allerdings wurden für alle zitierten Literaturstellen Strömungen untersucht, in denen die Gasblasen in der Flüssigkeit dispergiert vorlagen. Hier handelt es sich aber um eine Strömung mit Oberflächenbegasung.

Die experimentell ermittelten $k_L a$ liegen für ein Füllvolumen von 10 mL bei bis zu $0,1 \text{ s}^{-1}$, wie in Abbildung 8-4 gezeigt. Für ein Füllvolumen von nur 8 mL werden sogar $k_L a$ von $0,15 \text{ s}^{-1}$ erreicht (HORTSCH, 2011). Diese Werte liegen deutlich über denen, die sonst für Bioreaktoren mit Oberflächenbegasung – wie Schüttelkolben oder Mikrotiterplatten – angegeben werden (WEUSTER-BOTZ, 2005; MARQUES et al., 2010).

8.4 Simulation der Phasengrenzfläche und des Stoffübergangskoeffizienten mit einem viskosen Fluid

Der Paddelrührer wird bei Kultivierungen von mycelbildenden Mikroorganismen während des Prozessverlaufs auch mit viskosen bzw. nicht-newtonschen Fluiden eingesetzt. Aus diesem Grund wurden ebenfalls Simulationen mit einer Glycerin-Wasser-Mischung mit einer Viskosität von 91 mPa s durchgeführt.

In Abbildung 8-5 A ist der Geschwindigkeitsverlauf der Flüssigkeit in der Mittelebene des Reaktors für eine Rührerdrehzahl von 1200 min^{-1} zu sehen. Die höchsten Geschwindigkeiten treten in dem schmalen Spalt zwischen Rührerblatt und Wand auf und an der dem Rührerblatt gegenüberliegenden Reaktorseite. Tendenziell nehmen die Geschwindigkeiten von der Mitte des Reaktors nach außen hin zu. Unterhalb und oberhalb des Rührerblatts ist die Geschwindigkeitsver-

teilung homogener als im übrigen Behälter. Außerdem ist in Abbildung 8-5 B eine Vektordarstellung der Glyceringeschwindigkeit gezeigt. Auffallend ist die starke tangentielle Komponente der Strömung. Lediglich im unteren Bereich des Rührbehälters sind deutliche Abweichungen von dieser Richtung erkennbar. Der Teil C der Abbildung 8-5 zeigt die Phasengrenzfläche zwischen Glycerin und Luft für einen Phasenanteil von $\alpha = 0,5$. Sie zieht sich für die untersuchte Drehzahl gerade bis unter das Rührerblatt. Über dem Rührer ist die ausgebildete Grenzfläche mit Glycerin komplexer als die, die mit Wasser bei 1200 min^{-1} entsteht (vgl. Abbildung 8-2 D). Außerdem ist im Vergleich mit Abbildung 8-2 D die entstehende Trombe mit Glycerin nicht so spitz und steil, wie die, die mit Wasser gebildet wird.

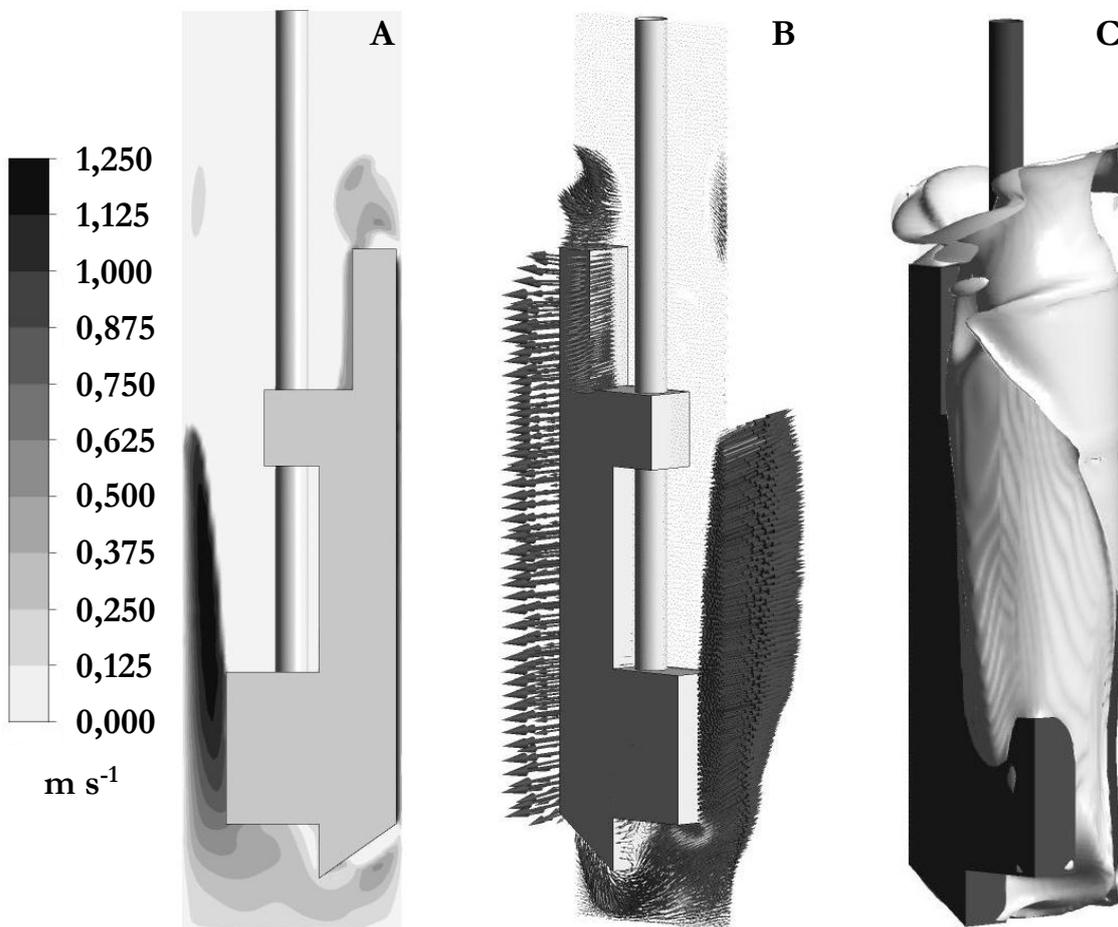


Abbildung 8-5: Profil (A) und Vektordarstellung (B) der Geschwindigkeit in der vertikalen Mittelebene und die Phasengrenzfläche für einen Phasenanteil von $\alpha = 0,5$ (C) für den Paddelrührer im unbewehrten Reaktor bei einer Rührerdrehzahl von 1200 min^{-1} mit Glycerin mit einer Viskosität von 91 mPa s . Die Simulation wurde auf dem feinen Netz mit einer Courant-Zahl von $\text{CFL} = 3$ gerechnet.

Abbildung 8-6 zeigt die Verteilung des Phasenanteils von Glycerin auf der vertikalen Mittelebene und auf drei horizontalen Schnittebenen im Reaktor. Auch in Abbildung 8-6 A ist erkennbar, dass die Flüssigkeit durch die Rührerdrehung bis über das Rührerblatt aufsteigt. Unmittelbar über dem Rührerblatt ist ein Lufteinschluss zu sehen. Die horizontalen Ebenen (Abbildung 8-6 B, C und D) zeigen deutlich die Drehrichtung des Rührers. Fast die gesamte Flüssigkeit wird vor dem Rührer her geschoben. Allein an der Wand befindet sich noch ein dünner Glycerinfilmm. Der Flüssigkeitsgehalt nimmt im Behälter von unten nach oben ab.

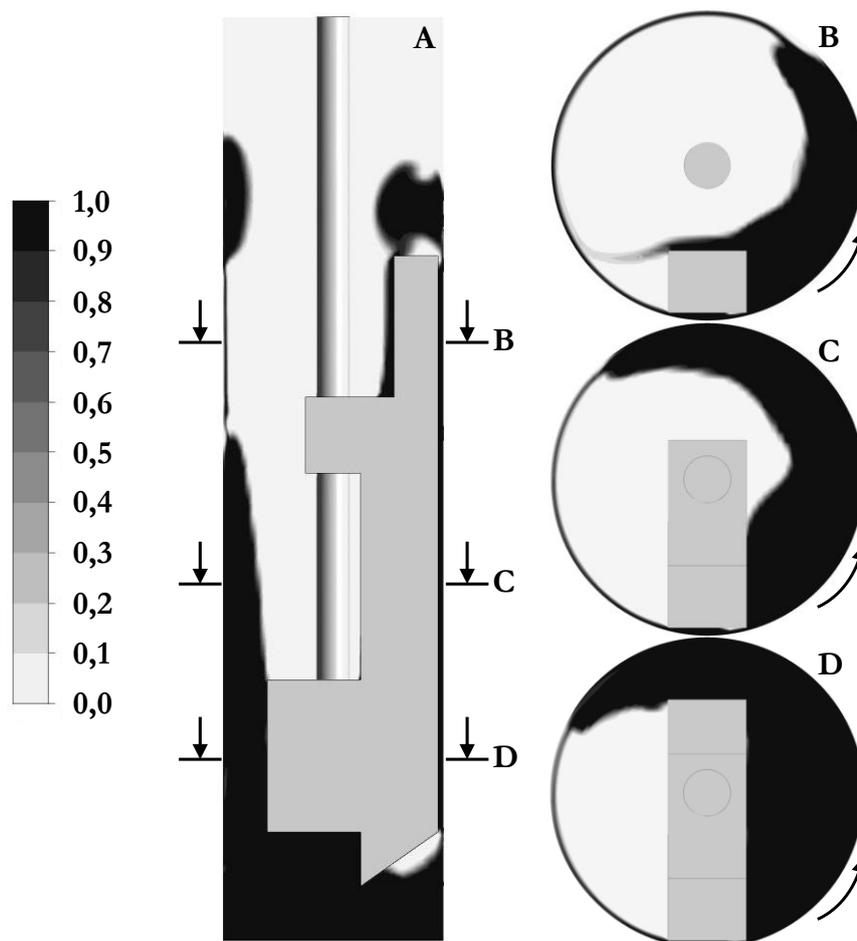


Abbildung 8-6: Verteilung des Phasenanteils für Glycerin mit einer Viskosität von 91 mPa s auf der vertikalen Mittelebene (A) und drei horizontalen Ebenen (B, C, D) im unbewehrten Reaktor bei einer Rührerdrehzahl von 1200 min^{-1} . Die Simulation wurde auf dem feinen Netz bei einer Courant-Zahl von $\text{CFL} = 3$ gerechnet. Die Lage der Schnittebenen ist neben der vertikalen Ebene (A) dargestellt. Die Pfeile neben den horizontalen Ebenen (B, C, D) verdeutlichen die Drehrichtung des Rührers.

Tabelle 8-2 enthält den Wert der simulierten spezifischen Phasengrenzfläche. Im Vergleich mit Tabelle 8-1 zeigt sich, dass die simulierte spezifische Phasengrenzfläche der Strömung mit Glycerin bei 1200 min^{-1} größer als die mit Wasser bei 1600 min^{-1} ist.

Tabelle 8-2: Spezifische Phasengrenzfläche aus einer zweiphasigen Simulation mit Glycerin mit einer Viskosität von 91 mPa s und Luft gerechnet auf dem feinen Netz mit einer Courant-Zahl von CFL = 3 bei einer Rührerdrehzahl von 1200 min⁻¹.

Rührerdrehzahl, min⁻¹	1200
Reynoldszahl, -	56
spezifische Phasengrenzfläche a , m ⁻¹	367,5

Für die Strömung mit Glycerin wurden keine Stoffübergangskoeffizienten bestimmt, da keine Messdaten vorlagen, um die Proportionalitätskonstante verlässlich bestimmen zu können.

Diskussion

Wie schon bei der Strömung mit Wasser bildet sich durch die fehlenden Strombrecher auch bei der Simulation einer viskosen Flüssigkeit eine Festkörperströmung aus. Die Gründe dafür wurden schon in Abschnitt 8.1 erläutert. Die Festkörperrotation zeigt sich durch die von innen nach außen zunehmende Glyceringeschwindigkeit im Reaktor und durch die vorwiegend tangentialer Richtung der Strömung. Abweichungen von dieser Strömungsart finden sich lediglich dort, wo stärkere Verwirbelungen als im Rest des Behälters auftreten. Das ist hauptsächlich oberhalb des Rührerblatts der Fall. Dort bewegt sich die Flüssigkeit aufgrund der Schwerkraft nach unten.

Im Vergleich mit Wasser zeigen sich die Auswirkungen der höheren Viskosität des simulierten Glycerins vor allem in der Form und Größe der ausgebildeten Phasengrenzfläche und der Verteilung des Fluids im Behälter. Durch die Rührerdrehung bilden sich Hohlräume um den Rührer, da das Glycerin wegen seiner höheren Viskosität bei dieser hohen Rührerdrehzahl nicht schnell genug zurückfließen kann. Aufgrund dieser Hohlräume ist auch die spezifische Phasengrenzfläche mit Glycerin höher als die, die unter Verwendung von Wasser erreicht wurde (vgl. Unterkapitel 8.2).

8.5 Zusammenfassung

Die Strömung im Reaktor verläuft hauptsächlich in tangentialer Richtung, und es liegt eine Geschwindigkeitsverteilung wie bei einer Festkörperrotation vor.

Die Flüssigkeitsstrombe, die sich durch die Drehung des Paddelrührers im Rührkessel bildet, kann durch die Simulationen dargestellt und so die Größe der Phasengrenzfläche ermittelt werden. Sie wird im betrachteten Bereich mit jeder Steigerung der Rührerdrehzahl größer. Der simulierte Maximalwert der spezifischen Phasengrenzfläche mit Wasser und Luft ist höher als der Wert, der

unter nicht-koaleszierenden Bedingungen für zwei Sechsblasscheibenrührer in einem Rührkessel im Labormaßstab bei verschiedenen Drehzahlen und Begasungsraten ermittelt wurden (ALVES et al., 2004 und 2002). Bei einer Simulation mit einem viskosen Fluid wurde bei 1200 min^{-1} für die spezifische Phasengrenzfläche ein Wert erhalten, der den für Wasser bei 1600 min^{-1} noch übersteigt.

Obwohl noch Schwierigkeiten bei der Abbildung der zweiphasigen Strömung erkennbar sind, zeigen die mit den simulierten spezifischen Phasengrenzflächen von Wasser und Luft berechneten k_{La} eine gute Übereinstimmung mit Messdaten. Dass für die Berechnung des k_L nach Gleichung (8-1) lokal aufgelöste Simulationsdaten benutzt werden können, ist ein großer Vorteil im Gegensatz zur Verwendung von über den Reaktor gemittelten Werten.

Die Simulationen bestätigen das Rührkonzept des Paddelrührers – hauptsächlich die Erzeugung einer großen Flüssigkeitsoberfläche für die Begasung über dieselbe.

9 Simulation des Homogenisierverhaltens des S-Rührers

Für H- und S- Rührer sollte mit den Simulationen der Auslegungsprozess der Rührer begleitet und die Rührergeometrie optimiert werden. Außerdem war es das Ziel, mithilfe von numerischer Strömungssimulation die Fähigkeit der Rührer zu beurteilen, den Reaktorinhalt zu durchmischen. Ebenfalls wurde überprüft, inwieweit numerische Strömungssimulation in der Lage ist, nicht-newtonsches Fluidverhalten abzubilden.

In diesem Kapitel wird in Abschnitt 9.1 beschrieben, wie der Entwicklungsprozess des H- bzw. S-Rührers mit numerischer Strömungssimulation unterstützt wurde. Im darauf folgenden Unterkapitel 9.2 werden die Ergebnisse der Mischzeitsimulationen vorgestellt und diskutiert. Anschließend wird in Abschnitt 9.3 bewertet, wie gut numerische Strömungssimulation strukturviskoses Fluidverhalten wiedergibt, bevor die Ergebnisse aller Unterkapitel in Abschnitt 9.4 abschließend zusammengefasst werden.

9.1 Optimierung der Rührergeometrie mithilfe von Strömungssimulation

Um hochviskose Flüssigkeiten und Suspensionen, wie sie bei der enzymatischen Hydrolyse von Naturstoffen (z. B. Stroh oder Maisspindelgranulat) vorkommen, zu durchmischen und die Feststoffe zu suspendieren, wurden neue Rührer entworfen. Die gezeigten Geometrien stammen aus RIEDLBERGER (2012) und die experimentellen Mischzeiten aus RIEDLBERGER et al. (2012).

Während des Auslegungsprozesses wurden zunächst einzelne Elemente der Rührergeometrie simuliert, um deren Auswirkungen auf die Strömung zu untersuchen. Dabei handelt es sich um einen einfachen Rührerkörper mit jeweils zwei geraden bzw. zwei schrägen Nuten, dargestellt in Abbildung 9-1 A und B. Außerdem wurden erste Kombinationen von mehreren Geometrieelementen betrachtet. Sie sind in Abbildung 9-1 C und D gezeigt. Abbildung 9-1 C bildet einen abgeflachten Rührerkörper mit vier kurzen Fortsätzen ab, die sich in einer Ebene befinden und von denen jeweils zwei über und zwei unter dem Rührer zu finden sind. In Abbildung 9-1 D ist eine Modifikation der Geometrie aus Abbildung 9-1 C zu sehen. Die zwei kurzen Fortsätze über

dem Rührerkörper wurden verlängert und statt der gegenüberliegenden Abflachungen gerade Nuten verwendet.

Die vergleichsweise großen Rührerkörper und die Abschrägungen der oberen Fortsätze (siehe Abbildung 9-1 D) ergeben sich aus konstruktiven Vorgaben, damit der neu entwickelte Rührer mit dem in Kapitel 4.1 vorgestellten parallelen Bioreaktorsystem verwendet werden kann.

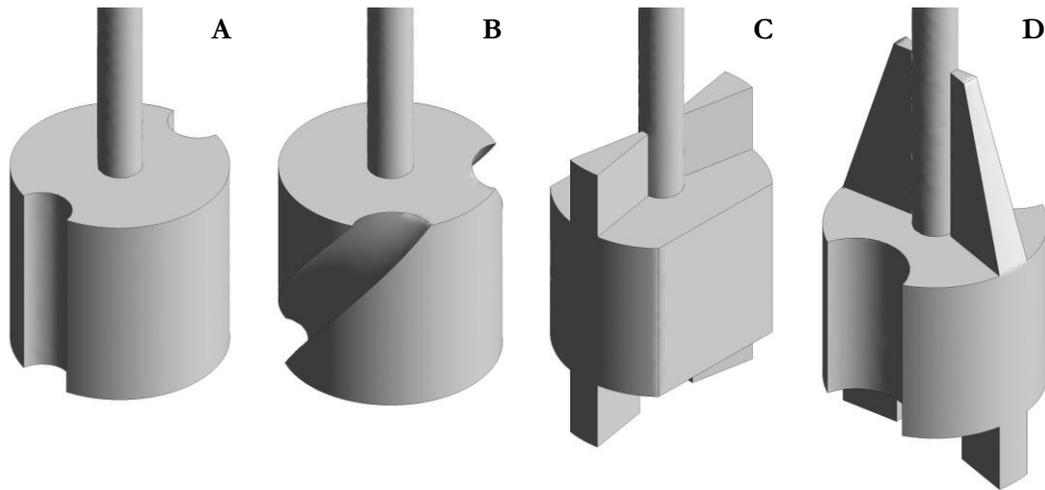


Abbildung 9-1: Erste Entwürfe für Rührergeometrien für die Homogenisierung von hochviskosen Flüssigkeiten und Suspensionen in isometrischer Darstellung. **A:** Rührerkörper mit geraden Nuten. **B:** Rührerkörper mit schrägen Nuten. **C:** Abgeflachter Rührerkörper mit vier kurzen Fortsätzen. **D:** Rührerkörper mit geraden Nuten und zwei kurzen und zwei langen Fortsätzen.

Die Ergebnisse der Simulationen der vorläufigen Rührergeometrien zeigt Abbildung 9-2. In Teil A und B dieser Darstellung sind die Rührerkörper mit geraden bzw. schrägen Nuten zu sehen. Bei der Betrachtung der vertikalen Mittelebene im Reaktor ist auffällig, dass nur in unmittelbarer Umgebung des Rührerkörpers hohe Geschwindigkeiten auftreten. Im übrigen Behälter sind die Geschwindigkeiten niedrig. Was die horizontale Ebene betrifft, zeigt sich beim Rührerkörper mit geraden Nuten in der Vektordarstellung keine Bewegung in axialer Richtung aus dieser Ebene heraus. Bei dem Rührerkörper mit schrägen Nuten dagegen ist eine axiale Geschwindigkeitskomponente in der horizontalen Vektordarstellung sichtbar. In den vertikalen Ebenen in Abbildung 9-2 C und D zeigt sich, dass die Drehung des Rührerkörpers mit Fortsätzen einen größeren Anteil des Reaktorinhalts bewegt als der Rührerkörper ohne Fortsätze. Besonders unterhalb des Rührers ist dies zu erkennen. Allerdings zeigen weder die Geometrie mit Abflachungen in Abbildung 9-2 C noch die mit geraden Nuten in Abbildung 9-2 D eine deutliche axiale Bewegung im Behälter.

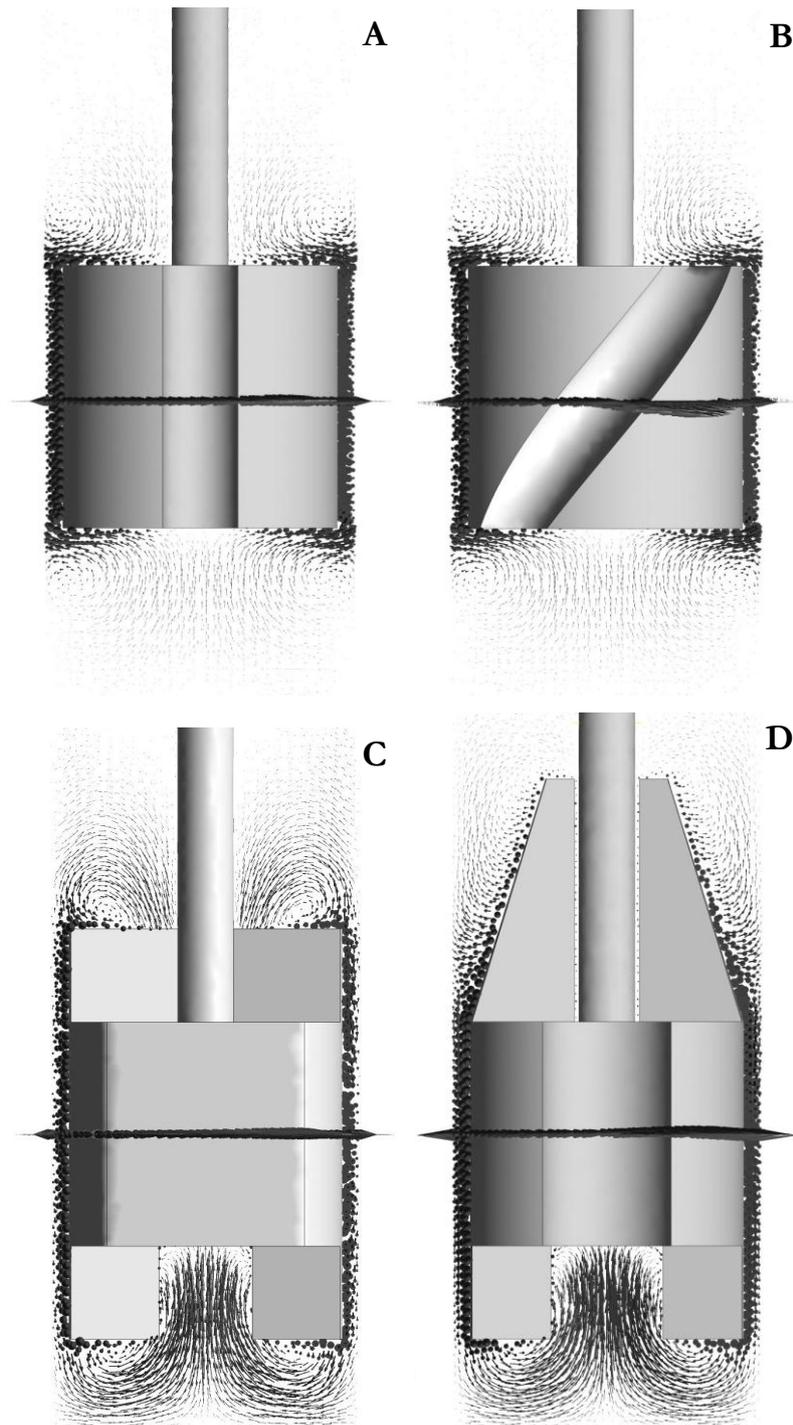


Abbildung 9-2: Vektordarstellungen der simulierten Strömungsfelder der vorläufigen Rührergeometrien für die Homogenisierung von viskosen Flüssigkeiten und Suspensionen jeweils in der vertikalen Mittelebene des Behälters und in einer horizontalen Ebene in der Mitte des Rührerkörpers bei einer Rührerdrehzahl von 500 min^{-1} mit Glycerin mit einer Viskosität von $34 \text{ mPa} \cdot \text{s}$. A: Rührerkörper mit geraden Nuten. B: Rührerkörper mit schrägen Nuten. C: Abgeflachter Rührerkörper mit vier kurzen Fortsätzen. D: Rührerkörper mit geraden Nuten und zwei kurzen und zwei langen Fortsätzen.

Auf der Basis der bisher gezeigten Simulationsergebnisse wurden Rührerprototypen – der H- und der S-Rührer – gefertigt. Die Geometrien wurden bereits in Kapitel 4.1.3 (vgl. Abbildung 4-4) vorgestellt und sind auch in den Abbildungen dieses Kapitels (z.B. Abbildung 9-3) zu sehen.

Abbildung 9-3 zeigt die Verteilung der axialen Geschwindigkeitskomponente in der vertikalen Mittelebene des bewehrten Reaktors für H- und S-Rührer. Da die Höhenkoordinate nach oben gerichtet ist, weist die positive Geschwindigkeit ebenfalls dorthin, während negative Geschwindigkeiten zum Boden des Reaktors zeigen. Dies ist durch die Pfeile neben der Legende in Abbildung 9-3 angedeutet. In Teil A der Abbildung 9-3 ist der H-Rührer zu sehen. Neben den oberen und unteren Rührerfortsätzen sind Wirbel zu erkennen. Des Weiteren ist in der Mitte des Rührerkörpers eine Teilung der Geschwindigkeiten nach der Richtung auffallend. In der oberen Hälfte des Rührerkörpers sind die Geschwindigkeiten im Reaktor hauptsächlich aufwärts gerichtet und in der unteren Hälfte abwärts. Ein Austausch über diese mittlere Ebene findet kaum statt. Dass diese Trennung in Aufwärts- und Abwärtsbewegung nicht nur in der vertikalen Mittelebene des Behälters sondern über die ganze Reaktorgeometrie vorliegt, bestätigen die Vektordarstellungen in Abbildung 9-4 A bzw. C.

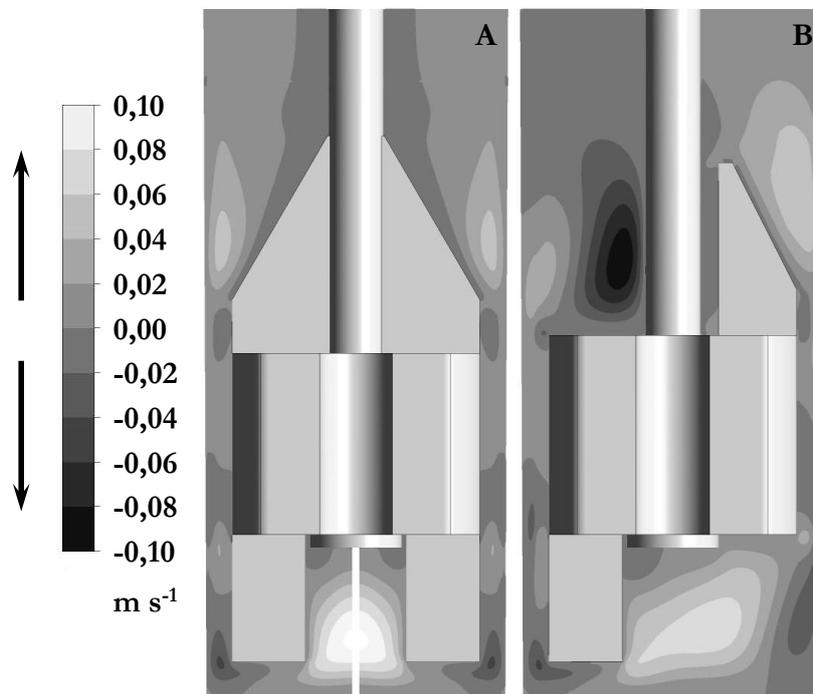


Abbildung 9-3: Profil der axialen Geschwindigkeitskomponente in der vertikalen Mittelebene des bewehrten Reaktors mit H-Rührer (A) und S-Rührer (B) bei Verwendung von Glycerin mit 34 mPa s bei einer Rührerdrehzahl von 500 min^{-1} auf dem Netz mit mittlerer Elementezahl. Positive Geschwindigkeiten sind nach oben gerichtet, negative nach unten.

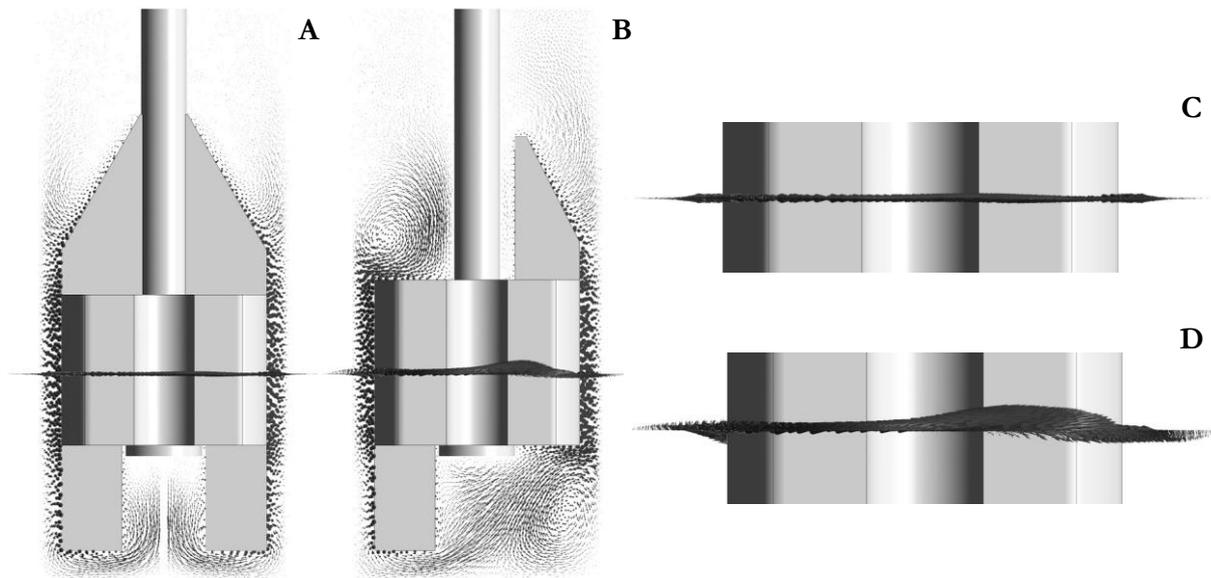


Abbildung 9-4: Vektordarstellung der Geschwindigkeit in der vertikalen Mittelebene des bewehrten Reaktors mit H-Rührer (A) und S-Rührer (B) und vergrößert in der horizontalen Mittelebene des Rührerkörpers von H-Rührer (C) und S-Rührer (D) bei Verwendung von Glycerin mit 34 mPa s bei einer Rührerdrehzahl von 500 min⁻¹ auf dem Netz mit mittlerer Elementezahl.

Für den H-Rührer zeigt sich in der horizontalen Vektordarstellung in der Mitte des Rührers (Abbildung 9-4 C) keine deutliche Bewegung aus der Ebene heraus. Bei der Betrachtung der Vektordarstellung in der vertikalen Ebene (Abbildung 9-4 A) lassen sich die schon erwähnten Wirbel neben den Fortsätzen des Rührers erkennen. Insgesamt ist das Strömungsbild – wie auch die Geometrie des H-Rührers – spiegelsymmetrisch.

Die Verteilung der axialen Geschwindigkeiten in der vertikalen Mittelebene des Reaktors für den S-Rührer zeigt Teil B der Abbildung 9-3. Wie auch für den H-Rührer sind neben den Fortsätzen am Rührerkörper Wirbel zu erkennen. Die Zerteilung des Reaktors in Auf- und Abwärtsbewegung – ausgehend von der Ebene in der Mitte des Rührerkörpers – ist für den S-Rührer in Abbildung 9-3 B aber nicht so deutlich ausgeprägt. Dies bestätigt auch Abbildung 9-4 B bzw. D, wo die Geschwindigkeitsvektoren im Reaktor mit dem S-Rührer dargestellt wurden. Besonders unterhalb des Rührerkörpers lässt sich in der vertikalen Rührerebene (Abbildung 9-4 A) eine Bewegung des Fluids in axialer Richtung erkennen. Deutlicher noch zeigt die Vektordarstellung der Geschwindigkeit in der horizontalen Ebene in Höhe des Rührerkörpers die axiale Komponente der Geschwindigkeit (Abbildung 9-4 D).

Neben dem Strömungsbild wurden zur Beurteilung der Eignung des H-Rührers für die Misch- aufgabe Mischzeitcharakteristiken aufgenommen. Sie sind in Abbildung 9-5 gezeigt. Die Überein-

stimmung zwischen experimentellen und modellierten Werten in Abbildung 9-5 ist gut. Für die meisten dargestellten Datenpaare liegen die Simulationen innerhalb der Messgenauigkeit.

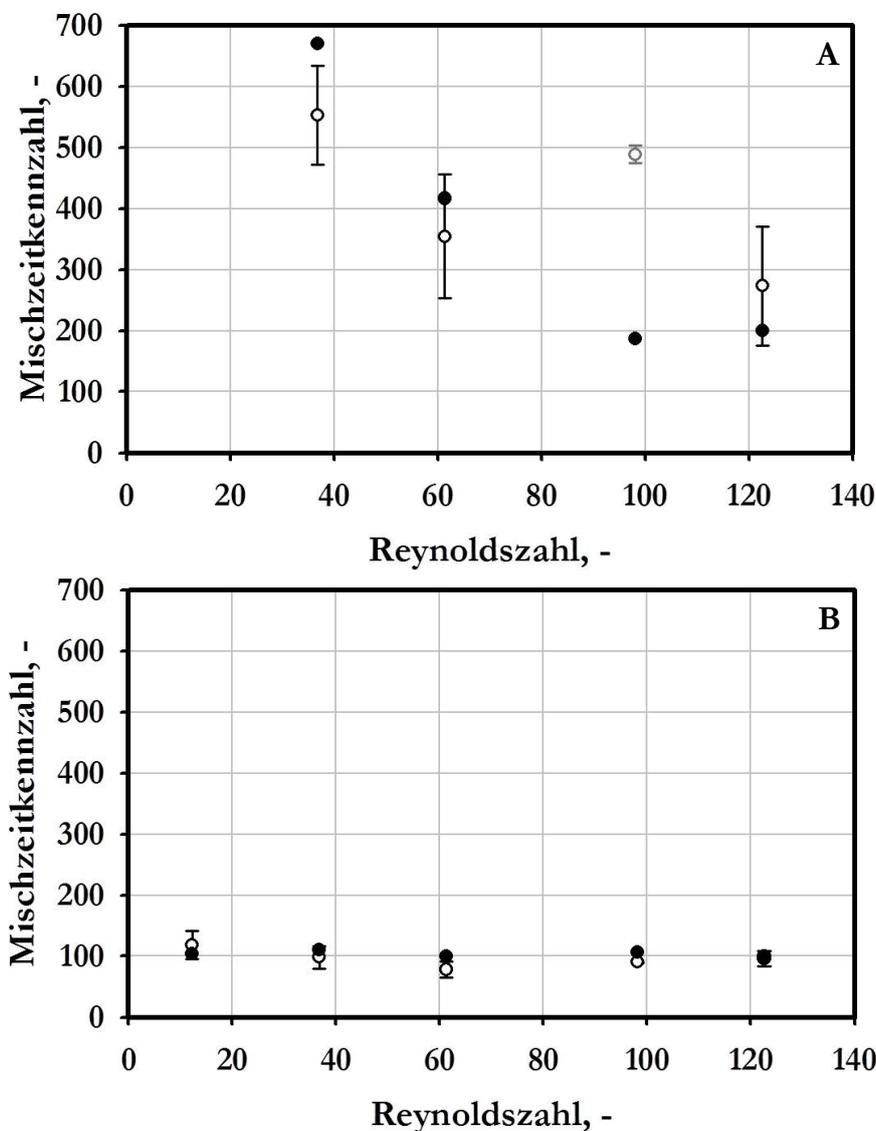


Abbildung 9-5: Vergleich von experimentellen (○) und modellierten (●) Mischzeitcharakteristiken von H- (A) und S-Rührer (B) im bewehrten Reaktor mit Glycerin bei einer Viskosität von 34 mPa s. Die Simulationen des S-Rührers wurden auf dem Netz mit mittlerer Elementzahl und bei einer Courant-Zahl von CFL = 10 durchgeführt. Ausreißer sind grau gefärbt.

Für den H-Rührer in Abbildung 9-5 A fällt die Mischzeitkennzahl mit steigender Reynoldszahl und bleibt dann fast konstant bei etwa 200, wenn der höher liegende Versuchswert bei $Re = 98$ außer Acht gelassen wird. Für $Re = 37$, was einer Rührerdrehzahl von 300 min^{-1} entspricht, liegt die Mischzeitkennzahl (Gleichung (3-4)) des H-Rührers (Abbildung 9-5 A) bei 553 im Experiment bzw. 670 in der Simulation. Zum Erreichen von 97 % der vollständigen Durchmischung sind also 111 s bzw. 134 s erforderlich.

Bei der Betrachtung der Mischzeitcharakteristik des S-Rührers in Abbildung 9-5 B fällt auf, dass bis auf kleinere Schwankungen die Mischzeitkennzahl konstant bei etwa 100 liegt. Für $Re = 37$ bzw. $N = 300 \text{ min}^{-1}$ sind es 100 für die Messung bzw. 110 für die Simulation. Das entspricht 20 s im Experiment bzw. 22 s bei der Modellierung.

Diskussion

Für die zu lösende Mischaufgabe wurden zunächst vorläufige Geometrien entworfen und simuliert. Dabei zeigte sich, dass schräge Nuten im Rührerkörper den axialen Transport im Behälter fördern, während gerade Nuten keinen großen Einfluss darauf zeigen. Außerdem machten die Simulationen deutlich, dass bei viskosen Fluiden die Fortsätze am Rührerkörper nötig sind, um einen großen Anteil des Reaktorinhalts zu bewegen und zu durchmischen.

Auf Basis dieser Erkenntnisse wurde der H-Rührer entworfen. Schräge Nuten im Rührerkörper waren problematisch und teuer bei der Fertigung, so dass gerade Nuten in Kombination mit einer Abflachung des Rührerkörpers umgesetzt wurden. Außerdem wurden die Fortsätze unterhalb des Rührers verlängert, um den Bodenabstand des Rührers zu verringern. Dieser hat einen großen Einfluss auf die Durchmischung im Behälter (KRAUME, 2003).

Die Simulationen der Strömung im Rührkessel mit dem H-Rührer zeigten zunächst die zu erwartenden Wirbel, die durch die Drehung des Rührers neben den oberen und unteren Rührerfortsätzen entstehen. Außerdem wurde durch die Rechnungen eine geringe axiale Bewegung im Reaktor bei Verwendung des H-Rührers aufgedeckt. Dies zeigt sowohl Abbildung 9-3 A als auch die Vektordarstellungen in Abbildung 9-4 A. Die darauf begründete, langsame Homogenisierung konnte zusätzlich durch Mischzeitsimulationen und -experimente belegt werden (vgl. Abbildung 9-5 A). Denn für ein untersuchtes Volumen von 10 mL ist die ermittelte Mischzeit des H-Rührers von über 100 s beträchtlich.

Deshalb wurde die Geometrie modifiziert und der S-Rührer entwickelt. Das Ziel der Modifikation war eine Verstärkung der axialen Bewegung im Reaktor, um den Austausch zwischen dem Bereich oberhalb und unterhalb des Rührers zu erhöhen. Dies wurde dadurch erreicht, dass im Vergleich zum H-Rührer ein oberer Fortsatz und der diagonal gegenüberliegende unterhalb des Rührerkörpers entfernt wurden. Die Geometrie des S-Rührers ist also asymmetrisch. Dies wirkt sich auch auf das Strömungsbild aus. Durch diese Asymmetrie wird die Flüssigkeit im Reaktor stärker axial gefördert. Dies ist auch an der Ausbildung der Wirbel neben den Rührerfortsätzen in Abbildung 9-3 B und Abbildung 9-4 B bzw. D zu erkennen.

Wie der direkte Vergleich der Verteilungen der axialen Geschwindigkeit im Reaktor für beide Rührertypen in Abbildung 9-3 und die Vektordarstellungen in Abbildung 9-4 zeigen, konnte das Auslegungsziel, die axiale Durchmischung im Reaktor zu verstärken, mit dem S-Rührer erreicht werden. Auch durch die Bestimmung der Zeiten, die nötig sind, um 97 % der vollständigen Homogenität zu erreichen, wurde die schnellere Durchmischung mit dem S-Rührer bestätigt. Denn die experimentellen und simulierten Mischzeiten bzw. Mischzeitkennzahlen des H-Rührers liegen doppelt bis sechsmal so hoch wie die des S-Rührers. Die Beschleunigung der Vermischung im Reaktor mit dem S-Rührer ist auf die höhere axiale Geschwindigkeitskomponente zurückzuführen.

Nicht nur anhand einer Leistungscharakteristik sondern auch mithilfe einer Mischzeitcharakteristik können die Strömungsbereiche abgelesen werden. So ist die Mischzeitkennzahl in der Regel für turbulente und zwangsfördernde Systeme konstant. Im laminaren Regime und im Übergangsbereich fällt sie normalerweise mit steigender Reynoldszahl (KRAUME, 2003). Bei der Benutzung des H-Rührers sinkt die Mischzeitkennzahl Θ_N in Abbildung 9-5 A mit größer werdender Reynoldszahl und bleibt dann ab $Re = 98$ bei ca. $\Theta_N = 200$ konstant. Dies widerspricht den Beobachtungen aus Abschnitt 6.3, wo die Leistungscharakteristik das turbulente Regime nicht anzeigte. Deshalb könnte dies auch eine Zwangsförderung bedeuten. Was den S-Rührer betrifft, ist die Mischzeitkennzahl Θ_N für die Simulationen fast konstant. Da in dem hier untersuchten Reynoldszahlbereich in Kapitel 6.4 eine turbulente Strömung ebenfalls nicht festgestellt werden konnte, würde dies – wie beim H-Rührer – auf eine Zwangsförderung hindeuten.

Aufgrund der Ergebnisse der Optimierung der Rührergeometrie wurde für die Durchführung der Mischzeit-Experimente nur noch der S-Rührer verwendet. Das ist auch der Grund, warum die Simulationen ausschließlich mit dem S-Rührer weitergeführt wurden. Also werden im folgenden Kapitel 9.2 nur die Ergebnisse der Mischzeitsimulationen dieses Rührorgans gezeigt.

9.2 Ergebnisse der Mischzeitsimulationen

Zur Beurteilung der Leistungsfähigkeit des S-Rührers bezüglich der Homogenisierung des Reaktorinhalts wurden Verteilungen einer Markierungssubstanz für verschiedene Glycerinviskositäten in bewehrten und unbewehrten Behältern simuliert.

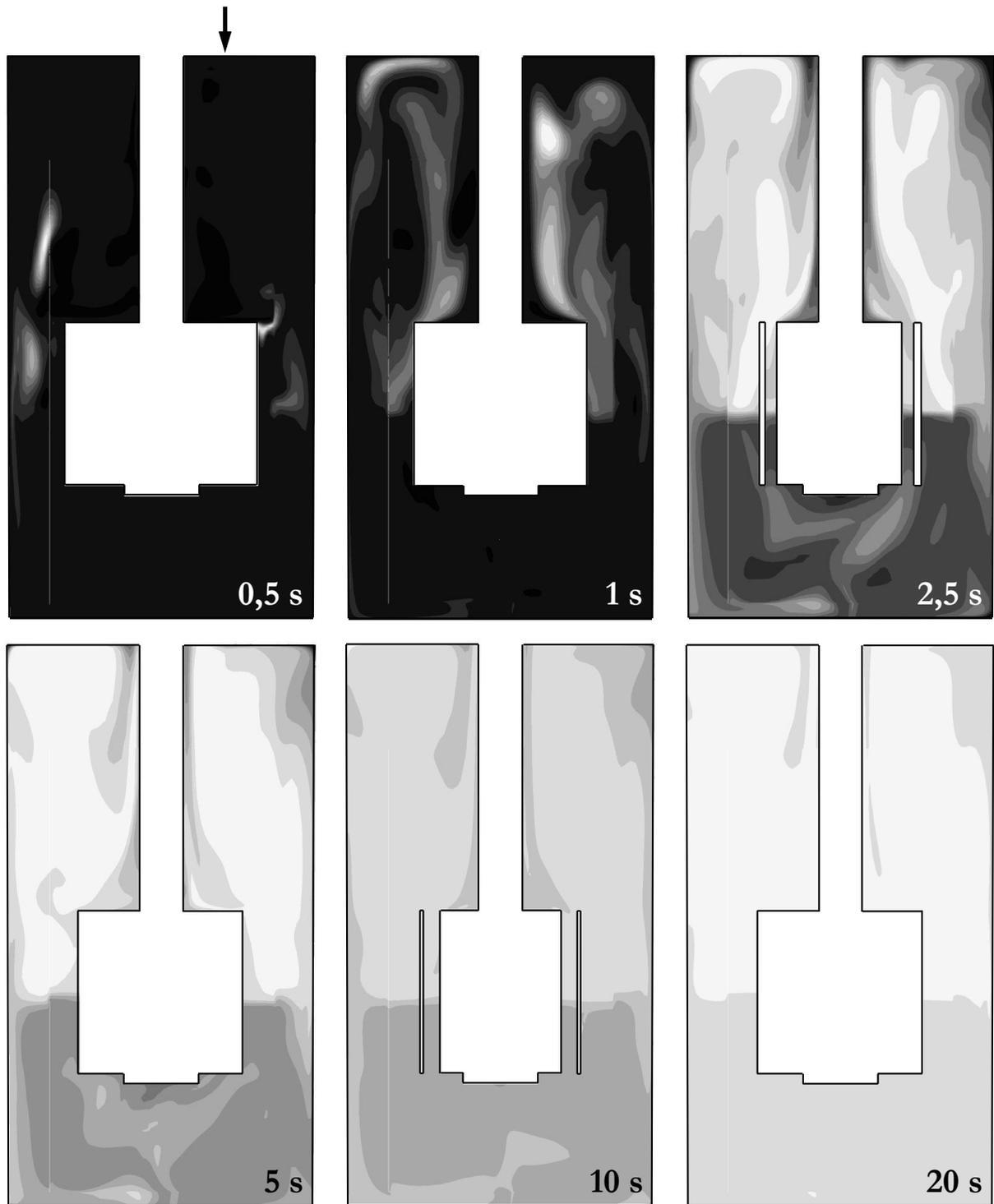


Abbildung 9-6: Verteilung der Markierungssubstanz in der vertikalen Mittelebene des unbewehrten Reaktors mit dem S-Rührer zu den angegebenen Zeitpunkten nach der Zugabe bei Verwendung von Glycerin mit 14 mPa s bei einer Rührerdrehzahl von 500 min^{-1} auf dem Netz mit mittlerer Elementezahl. Dunkelgrau steht für niedrige Konzentrationen, hellgrau für hohe. Der Pfeil verdeutlicht den Punkt, an dem die Markierungssubstanz zugegeben wurde. Der Zugabepunkt liegt 5 mm hinter der gezeigten Ebene.

Abbildung 9-6 zeigt die Verteilung der Markierungssubstanz in der Mittelebene eines Reaktors ohne Stromstörer für Glycerin mit 14 mPa s und eine Rührerdrehzahl von 500 min^{-1} . Dunkles Grau steht für niedrige und helles für hohe Konzentrationen der Markierungssubstanz.

Bei der Betrachtung ist zu beachten, dass derselbe Grauton bei jedem abgebildeten Zeitpunkt für eine andere Konzentration steht. Es wäre also für jeden Zeitpunkt eine eigene Legende nötig. Da es aber nicht um die genaue quantitative Verteilung des Stoffes sondern um das generelle Vermischungsverhalten des Rührers geht, wurde auf die Darstellung der Legenden verzichtet. Da bei instationären Simulationen der Netzteil, der den Rührer enthält, entsprechend der Rührerdrehzahl und des Zeitschritts bewegt wird, wäre zu jedem dargestellten Zeitpunkt in Abbildung 9-6 ein anderer Teil der Einzelbilder verdeckt. Aus diesem Grund sind weder die Achse noch der Rührer in den Einzelbildern gezeigt. Die tatsächliche Drehung des Gitterbereiches, der den Rührer enthält, während der Simulation erklärt auch den wechselnden Ausschnitt in der dargestellten vertikalen Ebene, obwohl sich die Lage der letzteren nicht verändert. Über der Darstellung für den Zeitpunkt von $0,5 \text{ s}$ befindet sich ein Pfeil. Er verdeutlicht die Zugabestelle der Markierungssubstanz, die tatsächlich 5 mm im rechten Winkel hinter der gezeigten Ebene liegt.

Kurz nach der Zugabe der Markierungssubstanz bei $0,5 \text{ s}$ ist die Konzentration derselben noch an den meisten Stellen im Reaktor niedrig. Nach 1 s zeigt sich hauptsächlich in der oberen Hälfte des Reaktors ein Ansteigen des Gehalts der Markierungssubstanz. Hier lassen sich auch die Wirbel, die durch die Rührerfortsätze im Fluid hervorgerufen werden, wieder erkennen, denn entlang dieser Strukturen wird auch die Markierungssubstanz bewegt. Mit zunehmender Dauer verteilt sich der Stoff immer gleichmäßiger im Rührbehälter, so dass nach 20 s die Substanz zu $99,6 \%$ homogenisiert wurde. 97% der vollständigen Durchmischung sind nach etwa 12 s erreicht.

Abbildung 9-7 zeigt die Auswertungen der Mischzeitsimulationen nach Gleichung (3-7), nämlich die rechnerisch und experimentell bestimmten Mischzeiten bis zu 97% der vollständigen Durchmischung bzw. die daraus ermittelten Mischzeitkennzahlen für den S-Rührer im unbewehrten Behälter.

Die Übereinstimmungen zwischen Simulation und Experiment sind nur für wenige Datenpunkte zufriedenstellend. Außerdem ist zu sehen, dass Θ_N mit steigender Viskosität ebenfalls größer wird. Zusätzlich zeigen die Ergebnisse aus Modellierung und Versuch nur für die mittlere Viskosität von 34 mPa s ähnliche Abhängigkeiten und Tendenzen bezüglich der Reynoldszahl.

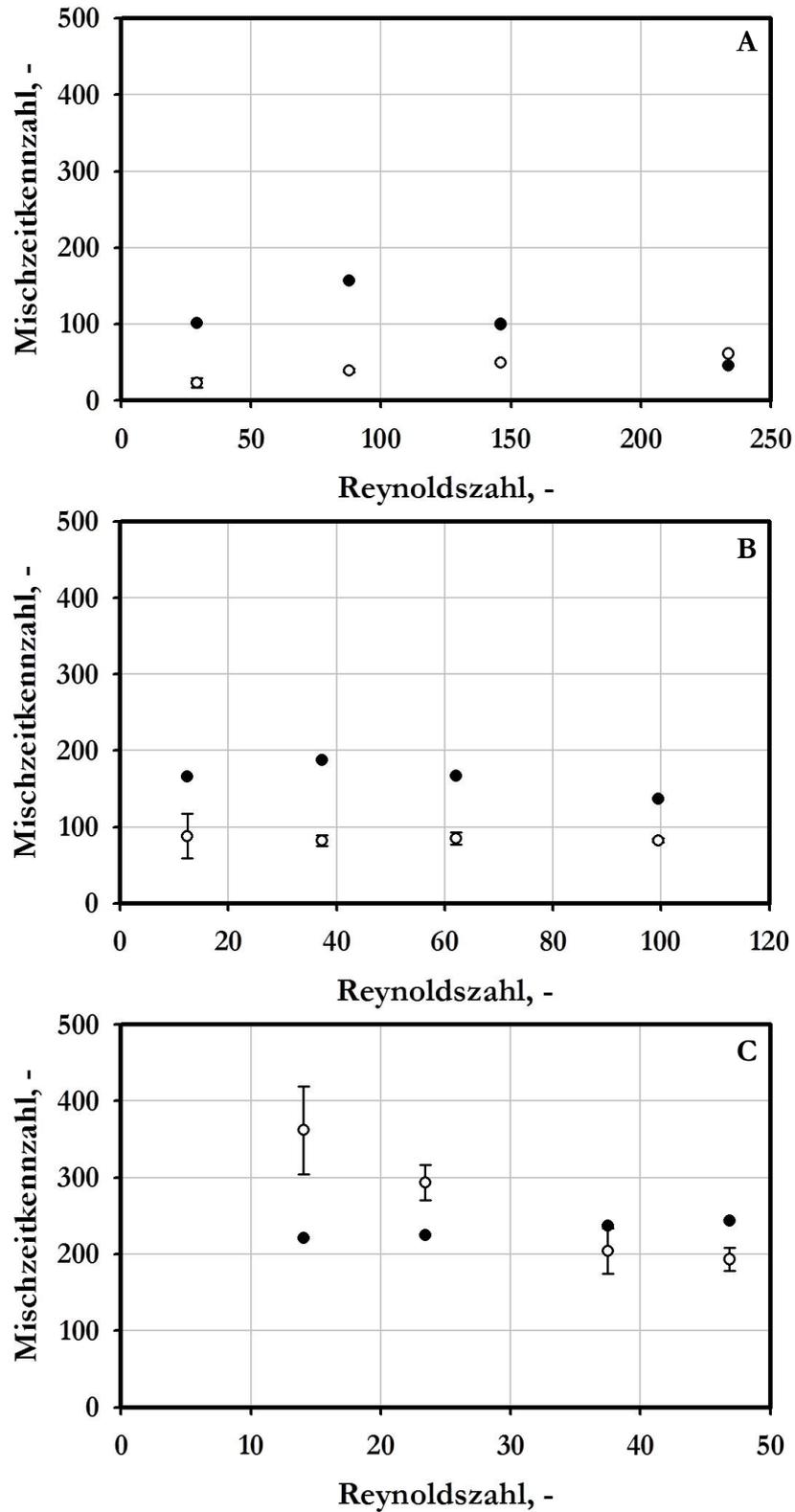


Abbildung 9-7: Vergleich von simulierten (●) und experimentellen (○) Mischzeitkennzahlen für verschiedene Rührerdrehzahlen und Glycerinviskositäten (A: 14 mPa s. B: 34 mPa s. C: 91 mPa s.) im unbewehrten Reaktor mit dem S-Rührer. Die Simulationen wurden auf dem Netz mit mittlerer Anzahl finiter Volumina und bei einer Courant-Zahl von CFL = 10 durchgeführt.

Für eine Glycerinviskosität von 14 mPa s erhöht sich die Mischzeitkennzahl in den Simulationen zunächst, um danach mit weiter steigender Reynoldszahl abzusinken. Die Versuchsdaten werden im betrachteten Bereich mit der Reynoldszahl stetig größer. Die Abweichungen zwischen Experiment und Simulation liegen im Bereich zwischen 33 % und 77 %.

Bei der zweiten simulierten Viskosität von 34 mPa s bleiben die Ergebnisse der Experimente konstant bei etwa $\Theta_N \approx 85$. Die simulierten Daten ändern sich ebenfalls nicht sehr stark und liegen bei ca. $\Theta_N \approx 160$. Hier betragen die Unterschiede zwischen den Versuchsergebnissen und denen der Simulationen etwa 40 % bis 56 %.

Im Falle der höchsten betrachteten Viskosität von 91 mPa s sind die unterschiedlichen Verläufe der experimentellen und modellierten Ergebnisse am deutlichsten. Während die Versuchsdaten mit steigender Reynoldszahl sinken, zeigen die simulierten Mischzeitkennzahlen ein proportionales Verhalten bezüglich der Reynoldszahl. Die Abweichungen machen für die Glycerinviskosität von 91 mPa s zwischen 14 % und 64 % aus.

Die Mischzeitcharakteristik für den S-Rührer im bewehrten Reaktor wurde schon in Abbildung 9-5 B für eine Glycerinviskosität von 34 mPa s gezeigt. Die Übereinstimmung zwischen experimentellen und modellierten Werten dort ist gut. Für die meisten dargestellten Datenpaare liegen die Simulationen innerhalb der Messgenauigkeit. Bis auf kleinere Schwankungen sind sowohl die modellierten als auch die experimentellen Mischzeitkennzahlen konstant. Die Abweichungen liegen zwischen 10 % und 56 %.

Dass in den hier gezeigten Diagrammen die Mischzeitkennzahl teilweise mit der Reynoldszahl ansteigt, heißt nicht zwingend, dass die Zeit, die zum Erreichen einer 97 %igen Homogenität erforderlich ist, mit zunehmender Rührerdrehzahl ebenfalls größer wird. Das Gegenteil ist hier der Fall. Für alle untersuchten Viskositäten sinken die absoluten Mischzeiten sowohl für die Experimente als auch für die Simulationen mit größer werdender Drehzahl ab. Lediglich das Produkt von Mischzeit und Drehzahl – also die Anzahl der für die Vermischung nötigen Rührerumdrehungen – kann steigen.

Diskussion

Abbildung 9-6 zeigt die vollständige Verteilung der Markierungssubstanz im unbewehrten Reaktor für den Fall von Glycerin mit einer Viskosität von 14 mPa s. Am langsamsten läuft die Durchmischung in den Randbereichen des Reaktors ab, wie sich in den Ecken der in Abbildung 9-6 dargestellten Ebene erkennen lässt. Dies ist in Übereinstimmung mit den Erwartungen (vgl.

Kapitel 3.1.2). Da keine Messdaten zu Stoffverteilungen im untersuchten Rührkessel vorliegen, können die Simulationen nicht validiert werden.

Für den Vergleich von experimentellen mit modellierten Mischzeitkennzahlen im Behälter ohne Stromstörer zeigen sich zum Teil große Abweichungen. Für $Re \leq 50$ wurde nach den Resultaten der Leistungscharakteristiken aus dem Abschnitt 6.3 auf die Benutzung eines Turbulenzmodells verzichtet, obwohl die Annahme laminarer Strömung in diesem Bereich nicht vollständig zutrifft, was die Abweichungen zum Teil erklärt. Es ist bekannt, dass die Größe der Wirbel, die in der Strömung vorherrschen – also in gewisser Weise der Grad der Turbulenz –, einen Einfluss auf die Durchmischung des Inhalts eines Rührkessels hat (KRAUME, 2003; HENZLER, 1973). Genauso wurde schon in der Literatur darüber berichtet, dass Turbulenzmodelle das Transitionsregime der Strömung nicht korrekt wiedergeben können (MURTHY SHEKHAR und JAYANTI, 2002; MOILANEN et al., 2007). Dass hier aber für alle betrachteten Fälle die Strömung im Übergangsbereich liegt, trägt deshalb dazu bei, dass sich die beobachteten Abweichungen ergeben. Wegen des Einflusses der Turbulenz auf die Durchmischung hat auch die Wahl des Turbulenzmodells größere Auswirkungen auf die Simulation der Mischzeit als die des Leistungseintrags (MURTHY SHEKHAR und JAYANTI, 2002; JAWORSKI et al., 2000). Dies erklärt die bessere Übereinstimmung der simulierten und experimentellen Leistungseinträge bei den höheren betrachteten Reynoldszahlen (siehe Abschnitt 6.4) im Gegensatz zu den Mischzeiten.

Außerdem handelt es sich um eine Strömung in einem Behälter ohne Stromstörer. In einem solchen Fall kommt es im Reaktor zu einer Festkörperrotation, die die zügige Durchmischung des Reaktorinhalts behindert, da vergleichsweise wenig Bewegung innerhalb des Fluids selbst herrscht. Die Strömung wird von der durch den Rührer erzeugten Rotation bestimmt. Da im unbewehrten Reaktor die Turbulenz sehr anisotrop verteilt ist, gilt die Annahme der isotropen Turbulenz, die für die Wirbelviskositätsmodelle getroffen wird, nicht mehr uneingeschränkt. In Behältern mit Stromstörern liegt Anisotropie der Turbulenz hauptsächlich in der direkten Rührerströmung vor, während der restliche Bereich des Rührkessels als isotrop angesehen werden kann (HAQUE et al., 2006). Außerdem ist bekannt, dass Wirbelviskositätsturbulenzmodelle eine starke Krümmung der Stromlinien – wie im vorliegenden Fall – nur schlecht abbilden können, so dass es dann zu fehlerhaften Ergebnissen kommen kann (AUBIN et al., 2004; GENTRIC et al., 2005; HAQUE et al., 2006; NIENOW, 2010). Dies und die auch sonst homogenere Strömung im bewehrten Behälter, dadurch hervorgerufen, dass keine Festkörperrotation mehr auftritt, erklären die bessere Übereinstimmung von Simulations- und Versuchsdaten in Abbildung 9-5 B.

Die experimentellen Verläufe der Mischzeitkennzahl für Glycerin mit 14 mPa s und 34 mPa s zeigen nahezu konstante bzw. konstante Werte. Da aus der Betrachtung der Leistungscharakteristiken in Kapitel 6.4 hervorgeht, dass sich die Strömung für diese Viskositäten bei den untersuchten Reynoldszahlen im Übergangsbereich befindet, kann die Konstanz der Mischzeitkennzahl hier nicht auf Turbulenz hindeuten, obwohl auch für diesen Fall Θ_N konstant ist. Deshalb zeigt dieses Verhalten Zwangsförderung an (KRAUME, 2003). Da es sich hier um eine Strömung in einem gerührten Behälter ohne Stromstörer handelt, wird die Strömung von der Drehbewegung des Rührers beherrscht, so dass eine Erhöhung der Rührerdrehzahl kaum Einfluss auf die Durchmischung im Inneren des Rührerwirbels hat. Im Englischen wird in diesem Zusammenhang auch von *forced vortex* gesprochen (HAQUE et al., 2006).

9.3 Simulation von Strömung und Mischverhalten mit strukturviskosen Fluiden

Neben den Simulationen mit newtonschen Glycerin-Wasser-Mischungen bei verschiedenen Viskositäten wurden außerdem Simulationen mit einem nicht-newtonschen Fluid durchgeführt, um zu überprüfen, ob Rechnungen auch dieses Fluidverhalten abbilden können. Es wurde eine strukturviskose Flüssigkeit gewählt, weil die Suspensionen mit den organischen Feststoffen, die in einem Rührbehälter mit dem S-Rührer enzymatisch abgebaut werden sollen, während der Hydrolyse ebenfalls strukturviskoses Verhalten zeigen. Also wurden Simulationen mit einer strukturviskosen, 0,5 %igen Xanthan-Lösung als Modellfluid durchgeführt.

Die Geschwindigkeitsverteilung im Rührbehälter mit dem S-Rührer bei einer Rührerdrehzahl von 800 min^{-1} ist in Abbildung 9-8 A dargestellt. Die Geschwindigkeiten oberhalb des Rührers sind niedrig. Nah am Rührer treten die höchsten Geschwindigkeiten auf. Wo die Fortsätze des Rührers die Flüssigkeit durchstreichen, sind die Geschwindigkeiten höher als im umgebenden Fluid. Die Vektordarstellung der Geschwindigkeit in Abbildung 9-8 B bestätigt, dass die Fluidgeschwindigkeit nur in dem Bereich deutlich von null verschieden ist, durch den sich der Rührer bewegt. Neben den Fortsätzen ober- und unterhalb des Rührers sind Wirbel zu erkennen.

Da es sich bei einer Xanthan-Lösung um eine strukturviskose Flüssigkeit handelt, ändert sich die Viskosität in Abhängigkeit von der Scherrate und deshalb auch lokal im Reaktor. Dies ist in Abbildung 9-9 A dargestellt.

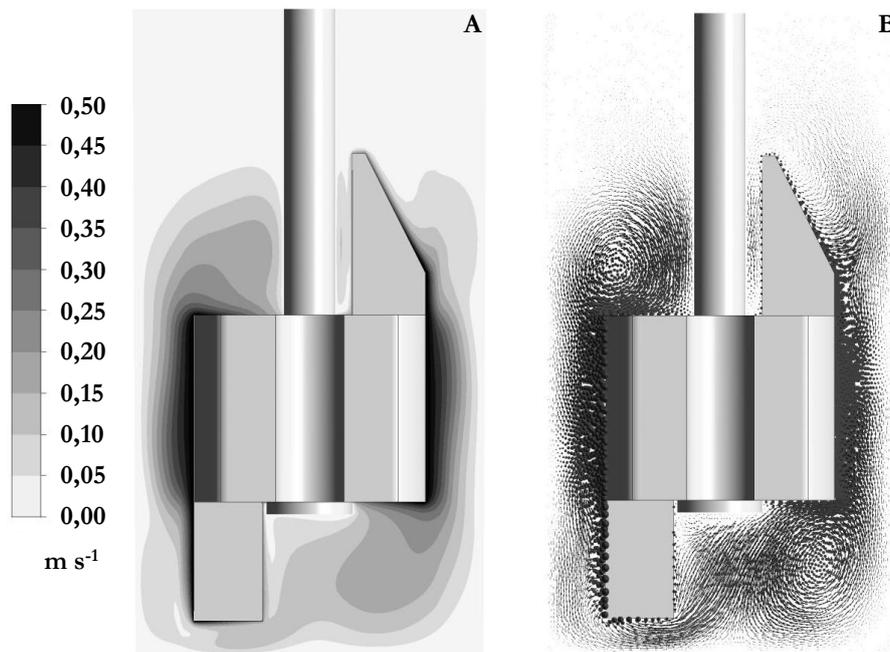


Abbildung 9-8: Geschwindigkeitsverteilung (A) und Vektordarstellung der Geschwindigkeit (B) in der vertikalen Mittelebene des unbewehrten Reaktors mit dem S-Rührer bei Verwendung einer 0,5 %igen Xanthan-Lösung und bei einer Rührerdrehzahl von 800 min^{-1} auf dem Netz mit mittlerer Anzahl finiter Volumina.

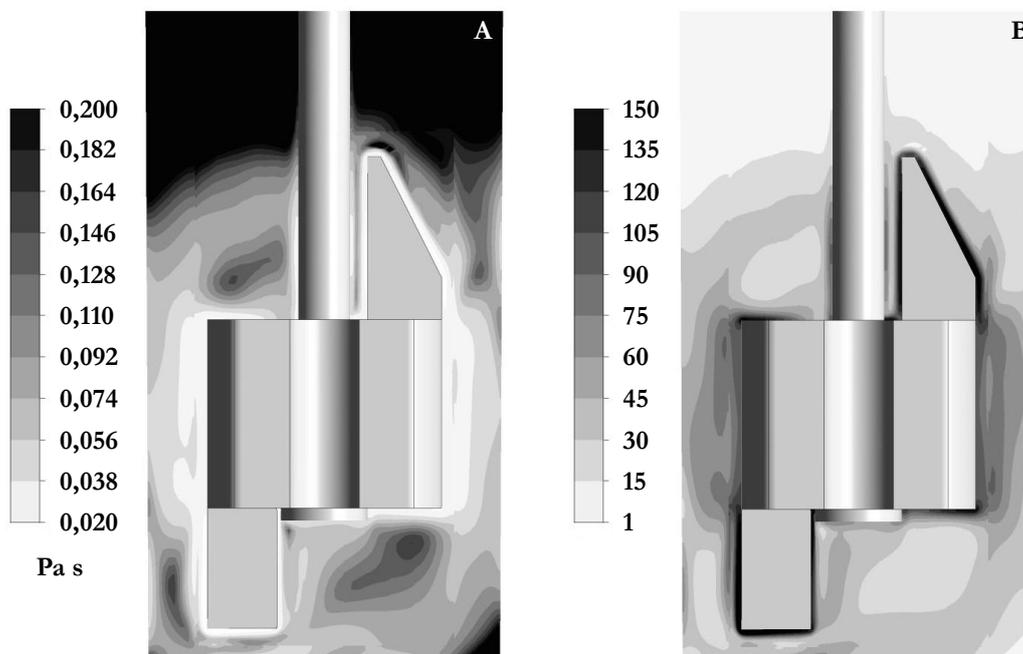


Abbildung 9-9: Verteilung der dynamischen Viskosität (A) und der Reynoldszahl (B) in der vertikalen Mittelebene des unbewehrten Reaktors mit dem S-Rührer bei Verwendung einer 0,5 %igen Xanthan-Lösung und bei einer Rührerdrehzahl von 800 min^{-1} auf dem Netz mit mittlerer Anzahl finiter Volumina.

Xanthan-Lösung und bei einer Rührerdrehzahl von 800 min^{-1} auf dem Netz mit mittlerer Anzahl finiter Volumina.

Die Viskosität ist direkt am Rührer am niedrigsten, während sie im oberen Bereich des Behälters am höchsten ist. In dem Gebiet, durch das sich die Fortsätze des Rührers bewegen, liegt die Viskosität im mittleren Bereich. Der Mittelwert der dynamischen Viskosität im Reaktor ist $0,172 \text{ Pa s}$. Aus den simulierten Viskositäten können Reynoldszahlen berechnet werden. Diese sind in Abbildung 9-9 B gezeigt. Die Verteilung der Reynoldszahlen über die dargestellte Ebene im Reaktor entspricht der der Viskositäten. Oberhalb des Rührers sind die Reynoldszahlen niedrig und in direkter Umgebung des Rührorgans und in dem Bereich, der von den Fortsätzen durchstrichen wird, höher. Die größten Reynoldszahlen treten unmittelbar am Rührer auf. Die mittlere Reynoldszahl im Rührkessel beträgt 38.

Mit der Xanthan-Lösung wurden ebenfalls Mischzeitkennzahlen bei zwei Drehzahlen simuliert. Sie sind in Abbildung 9-10 jeweils über der mittleren Reynoldszahl im Reaktor aufgetragen. Die Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation ist gut. Die Abweichung liegt fast im Bereich der Messgenauigkeit. Sowohl die simulierten als auch die experimentellen Mischzeitkennzahlen sinken mit steigender Reynoldszahl.

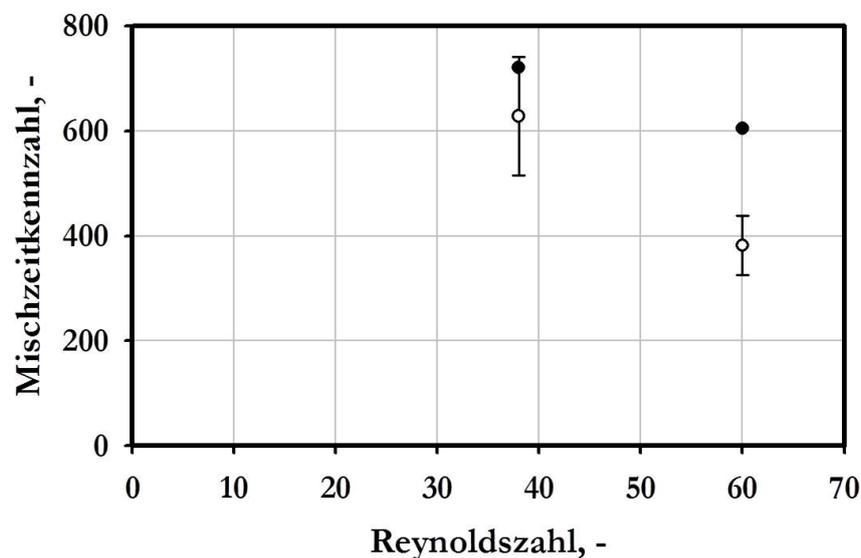


Abbildung 9-10: Vergleich von simulierten (●) und experimentellen (○) Mischzeitkennzahlen für 0,5 %ige Xanthan-Lösung bei verschiedenen Reynoldszahlen im unbewehrten Reaktor mit dem S-Rührer. Die Simulationen wurden auf dem Netz mit mittlerer Anzahl finiter Volumina und bei einer Courant-Zahl von $CFL = 10$ durchgeführt.

Diskussion

In Abbildung 9-8 A ist deutlich zu erkennen, dass in dem Bereich im Reaktor, wo die Scherbeanspruchung niedrig ist, weil der Rührer nicht dorthin reicht, die Geschwindigkeiten ebenfalls sehr klein sind. Im Strömungsbild in Abbildung 9-8 B sind keine deutlichen Unterschiede zu den Vektordarstellungen der Geschwindigkeit mit einer newtonschen Glycerin-Wasser-Mischung zu sehen (vgl. Abschnitt 9.1). Die Wirbel neben den Fortsätzen ober- und unterhalb des Rührers entstehen durch die Drehung des Rührorgans.

Die niedrigen Geschwindigkeiten fern vom Rührer können durch die Abhängigkeit der Viskosität von der Scherrate, wie sie für strukturviskose Fluide vorkommt, erklärt werden. Die Viskosität wird – wenn sie nicht über numerische Strömungssimulation bestimmt wird – in der Regel mit Heuristiken über die Rührerdrehzahl oder den Leistungseintrag (vgl. Kapitel 3.1.2 z.B. Gleichung (3-8)) abgeleitet, da die Scherrate selbst in komplizierten Geometrien nur schwer experimentell zu bestimmen ist. Die Meinung zur Anwendbarkeit dieser Heuristiken in der Literatur geht auseinander. Dennoch werden sie verwendet (MONTANTE et al., 2005; HENZLER, 2007; KELLY und GIGAS, 2003; CALDERBANK und MOO-YOUNG, 1959; WU und CHEN, 2008; MURTHY SHEKHAR und JAYANTI, 2003). Dass die Anpassungsparameter der Heuristiken aufwendig bestimmt werden müssen, ist ein Nachteil dieser Methode, die Viskosität zu bestimmen. Mithilfe von numerischer Strömungssimulation ergibt sich die Scherrate einfach aus den gelösten Gleichungen. Die Bestimmung der Viskosität erfolgt dann über einen funktionalen Zusammenhang, wie z.B. das Ostwald-de Waele-Gesetz (Gleichung (3-3)). Die Viskosität im Reaktor für den vorliegenden Fall erstreckt sich über vier Größenordnungen. Dabei liegen die niedrigsten Werte nur in der direkten Umgebung des Rührers auf einem sehr kleinen Bereich vor. Dieses Verhalten war zu erwarten, da der Rührer nur einen relativ kleinen Teil der Flüssigkeit unmittelbar hohen Scherkräften aussetzt, so dass nur dort die Viskosität sinkt.

Dies zeigt sich auch in den Reynoldszahlen, die auf der Basis der simulierten Scherraten bzw. Viskositäten berechnet wurden. So ist die mittlere Reynoldszahl im Reaktor 38, was für eine Strömung im beginnenden Übergangsbereich spricht.

Da keine Messungen für Geschwindigkeitsverteilungen oder Viskositäten im Reaktor während des Betriebs vorliegen, können diese Simulationen nicht validiert werden.

Die Simulation der Vermischung im Rührbehälter mit der strukturviskosen Flüssigkeit ergibt eine gute Übereinstimmung der Simulationen mit den Messdaten. Die Tendenzen werden korrekt wiedergegeben, und die simulierten Werte liegen fast innerhalb der Messgenauigkeit. Dass die

Mischzeitkennzahl mit steigender Reynoldszahl sinkt, deutet auf eine Strömung im laminaren oder Transitionsregime hin. Die Simulation bei 1000 min^{-1} ($Re = 60$) wurde mit Turbulenzmodell durchgeführt. Die größere Abweichung zwischen den Datenpunkten aus Messung und Rechnung wird auf Unregelmäßigkeiten bei der Turbulenzmodellierung zurückzuführen sein. Dieses Verhalten wurde auch schon früher – z.B. in den Kapiteln 6.4 oder 9.2 – beobachtet, wo die auftretenden Energien und die Turbulenz im Übergangsbereich auch mit einem Turbulenzmodell unterschätzt wurden.

9.4 Zusammenfassung

Der Auslegungsprozess des S-Rührers wurde durch die Simulation von einzelnen Geometrieelementen unterstützt. Auf der Basis dieser Simulationen wurde der erste Prototyp entwickelt. Die numerische Strömungssimulation wurde weiterhin für die Optimierung der Rührergeometrie verwendet. Der S-Rührer wurde schließlich gefertigt. Seine modifizierte Geometrie führt zu einer Verstärkung der axialen Bewegung im Reaktor und erhöht so den Austausch im Behälter zwischen den Bereichen ober- und unterhalb des Rührers.

Beim Vergleich von experimentellen und simulierten Mischzeiten für den S-Rührer zeigen sich im unbewehrten Behälter Abweichungen. Die Differenzen sind auf Schwierigkeiten mit der Turbulenzmodellierung zurückzuführen. Dass die Turbulenzmodellierung im vorliegenden Fall eine solche Herausforderung ist, liegt daran, dass sich zum einen die Strömung im Übergangsbereich befindet, das von Turbulenzmodellen nicht korrekt abgebildet werden kann (NIENOW, 2010). Zum anderen liegt bei gerührten Behältern eine starke Krümmung der Stromlinien vor, die ebenfalls zu Problemen führt. Im Fall des Reaktors ohne Strombrecher kommt es zusätzlich zu einer starken Anisotropie der Turbulenz im gesamten Reaktor, die dort die Turbulenzmodellierung weiter erschwert (HAQUE et al., 2006). Für den Reaktor mit Stromstörern ist die Übereinstimmung zwischen modellierten und gemessenen Werten gut, da die Bewehrung die Festkörperrotation im Behälter verhindert und zu einer homogeneren Strömung führt.

Mithilfe der Simulationen ist es möglich, Viskositäten im Rührbehälter auch für nicht-newtonsche Fluide lokal aufgelöst zu bestimmen. Die modellierten Mischzeitkennzahlen stimmen hier gut mit den Messergebnissen überein. Die Unterschiede sind – wie bei den newtonschen Glycerin-Lösungen – auf Schwierigkeiten bei der Turbulenzmodellierung zurückzuführen.

10 Zusammenfassung

Numerische Strömungssimulation wird in den letzten Jahren vermehrt auch zur Analyse und Entwicklung verfahrenstechnischer Apparate und Prozesse verwendet. Dabei bietet sie – neben dem Gewinn an Zeit und Ressourcen – den großen Vorteil, auch schlecht zugängliche Apparate und nur schwer messbare Prozessvariablen abbilden zu können.

Am Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik der Technischen Universität München wurde ein paralleles Bioreaktor-System im Millilitermaßstab entwickelt (WEUSTER-BOTZ et al., 2005). Mit diesem System können Bioprozessentwicklungen und –optimierungen mit vergleichsweise wenig Aufwand und geringeren Kosten erfolgen als in herkömmlichen Bioreaktoren im Labormaßstab, da sich viele Experimente gleichzeitig in einem kleinen Maßstab durchführen lassen. Ein weiterer Vorteil des parallelen Bioreaktor-Systems ist, dass eine Übertragung in einen größeren Maßstab durch die Überwachung und Messung zentraler Prozessgrößen – wie der Sauerstoffsättigung des Mediums – vereinfacht wird. Aber obwohl einige wichtige Größen gemessen werden können, ist das nicht für alle für die Maßstabsübertragung relevanten Prozessvariablen möglich. Da die einzelnen Bioreaktoren von Wärmetauschern und den magnetisch-induktiven Rührerantrieben umschlossen werden, sind sie nicht von außen einsehbar. Dieser Umstand und die kleinen Abmessungen der Einzelreaktoren verhindern bzw. erschweren die Benutzung der meisten Messverfahren erheblich, so dass sie nicht herangezogen werden können, um die fehlenden Prozessgrößen für die Maßstabsübertragung zu ermitteln.

Zur Lösung dieses Problems wurde im Rahmen dieser Arbeit numerische Strömungssimulation eingesetzt. Durch ihren Einsatz konnten für die Skalierung von Bioprozessen wichtige Größen, die im untersuchten Bioreaktor-System im Millilitermaßstab messtechnisch nicht zugänglich waren, numerisch ermittelt werden.

Die erste Größe, die numerisch bestimmt wurde, war die Energiedissipation im Reaktor. Die Simulationen wurden für die in Abbildung 10-1 dargestellten Rührer durchgeführt. Die drei in dieser Arbeit untersuchten Rührer unterscheiden sich stark in ihrer Anwendung und deshalb auch in den verwendeten Fluiden bzw. vorliegenden Strömungsbereichen.

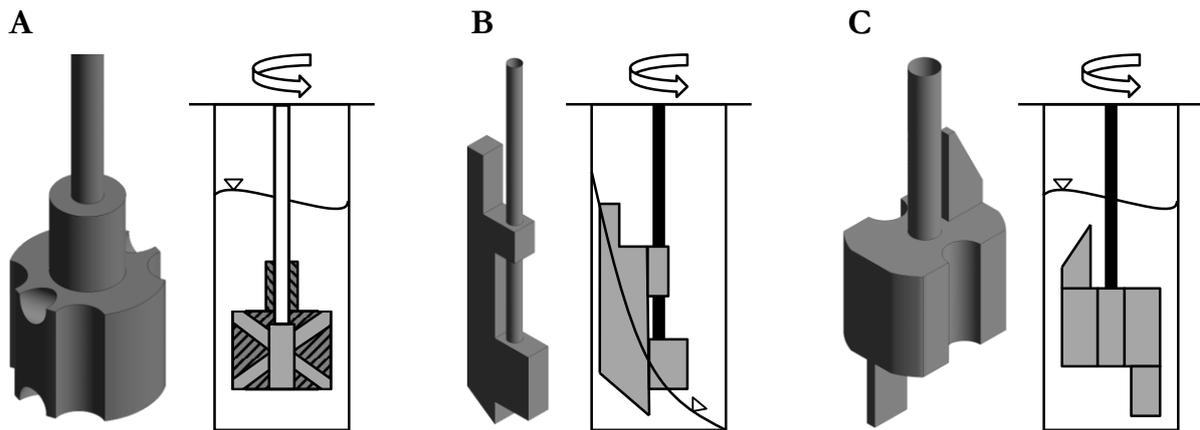


Abbildung 10-1: In dieser Arbeit betrachtete Rührer jeweils in isometrischer und schematische Darstellung: Gasinduzierender Rührer (A), Paddelrührer (B) und S-Rührer (C).

Der gasinduzierende Rührer (Abbildung 10-1 A) wurde einphasig mit einem niedrigviskosen Fluid (Wasser) bei hohen Drehzahlen simuliert. Dort liegt für die untersuchten Rührerdrehzahlen im Reaktor eine turbulente Strömung bzw. eine Strömung im späten Transitionsregime vor. Beim Paddelrührer (Abbildung 10-1 B) handelt es sich um eine zweiphasige Strömung mit komplexer Phasengrenzfläche. Wie beim gasinduzierenden Rührer wurde in den Simulationen eine Flüssigkeit mit geringer Viskosität (Wasser) betrachtet. Deshalb ist auch dort die Strömung turbulent. Der S-Rührer (Abbildung 10-1 C) wurde einphasig gerechnet. Allerdings wurden dort viskose Fluide untersucht, deren Viskosität etwa das 15- bis 90-fache der Viskosität von Wasser betrug. Die Strömungen lagen dort für die betrachteten Rührerdrehzahlen hauptsächlich im Übergangsbereich.

Die Energiedissipation wird in der numerischen Strömungssimulation nur für turbulente Strömungen berechnet. Deshalb wurde sie nur für den gasinduzierenden Rührer und den Paddelrührer bestimmt. Es zeigte sich, dass die Simulationen den qualitativen Verlauf der maximalen Energiedissipation im Reaktor entsprechend der erwarteten Abhängigkeiten (LIEPE et al., 1988) sehr gut wiedergeben. Aus den simulierten Energiedissipationen wurden volumenbezogene Leistungseinträge berechnet und diese dann mit Messdaten verglichen. In den Messungen wurde der Leistungseintrag jedoch über das Rührerdrehmoment bestimmt. Die experimentell ermittelten Werte waren bis zu fünfmal so hoch wie die simulierten. Der Grund für die Abweichung liegt darin, dass bei der Ermittlung des Leistungseintrags über die turbulente Energiedissipation der molekulare Anteil der Viskosität nicht berücksichtigt wird, dieser aber in den vorliegenden Strömungen dennoch einen nicht zu vernachlässigenden Anteil beisteuert.

Außerdem lässt sich der Leistungseintrag auch über die Integration der Kräfte, die auf den Rührer wirken, berechnen. Auf diese Art wurden für alle in dieser Arbeit betrachteten Rührer

zusätzlich – unabhängig vom jeweiligen Strömungsregime – volumenbezogene Leistungseinträge und Leistungscharakteristiken bestimmt. Für auf diese Art ermittelte Größen ist die Vorhersagbarkeit über numerische Strömungssimulation gut. Im Besonderen trifft das für turbulente, einphasige Strömungen zu, wo die Unterschiede zu Messungen maximal 4 % betragen. Aber auch Simulationen von Strömungen viskoser Fluide im Transitionsregime ergeben im Vergleich mit Messdaten gute Übereinstimmungen, selbst wenn sich die Deckung der Werte mit steigender Viskosität der Flüssigkeit verbessert und außerdem von Einbauten im Reaktor – wie z. B. Strombrechern – abhängt. Für die zweiphasige Strömung des Paddelrührers ergaben sich – wie es zu erwarten war – die deutlichsten Abweichungen von Simulations- und Messdaten. Der Hauptgrund dafür wird in der Modellierung der zweiphasigen Strömung gesehen, da die richtige Ermittlung der Lage der Phasengrenzfläche ausschlaggebend für die korrekte Bestimmung des Leistungseintrags ist.

Weiterhin war der Gasvolumenstrom, der durch den gasinduzierenden Rührer in den Bioreaktor im Millilitermaßstab eingetragen wird, nicht experimentell messbar. Auch er sollte über numerische Strömungssimulation bestimmt werden. Allerdings kam es bei den zweiphasigen, instationären Simulationen zu Abstürzen des Löser. Dieses Verhalten ließ sich auch durch die Änderung der benutzten Modelle, Rand- und Anfangsbedingungen nicht verhindern, weshalb keine Endergebnisse erhalten werden konnten. Vermutlich gehen diese Probleme auf die Formulierung der Differentialgleichungen im benutzten Computerprogramm zurück (TABOR und RUSCHE, 1999). Außerdem wäre denkbar, dass das Gitter für das verwendete Euler-Euler-Modell zur Beschreibung der Mehrphasenströmung zu fein ist (MARSCHALL et al., 2011b). Allerdings kann das Gitter für die komplexe Geometrie des gasinduzierenden Rührers nicht gröber gestaltet werden, weil dann die Qualitätskriterien für das Netz nicht mehr eingehalten werden könnten. Für diesen Fall werden die derzeitigen Grenzen der numerischen Strömungssimulation erreicht.

Als Nächstes wurde die Phasengrenzfläche der Strömung betrachtet, die durch die Drehung des Paddelrührers entsteht. Auch sie kann nicht experimentell bestimmt werden. Die numerische Strömungssimulation ist in der Lage, die Trombe der Flüssigkeit abzubilden und so auch die Größe der Phasengrenzfläche zu ermitteln (vgl. Abbildung 10-2 A, B und C). Letztere wurde über Stofftransportkoeffizienten $k_L a$ validiert, die mithilfe einer k_L -Korrelation (LAMONT und SCOTT, 1970), der simulierten Phasengrenzfläche und des Füllvolumens berechnet wurden. Die Übereinstimmung zwischen gemessenen und modellierten Werten ist gut, wie das Diagramm in Abbildung 10-2 zeigt.

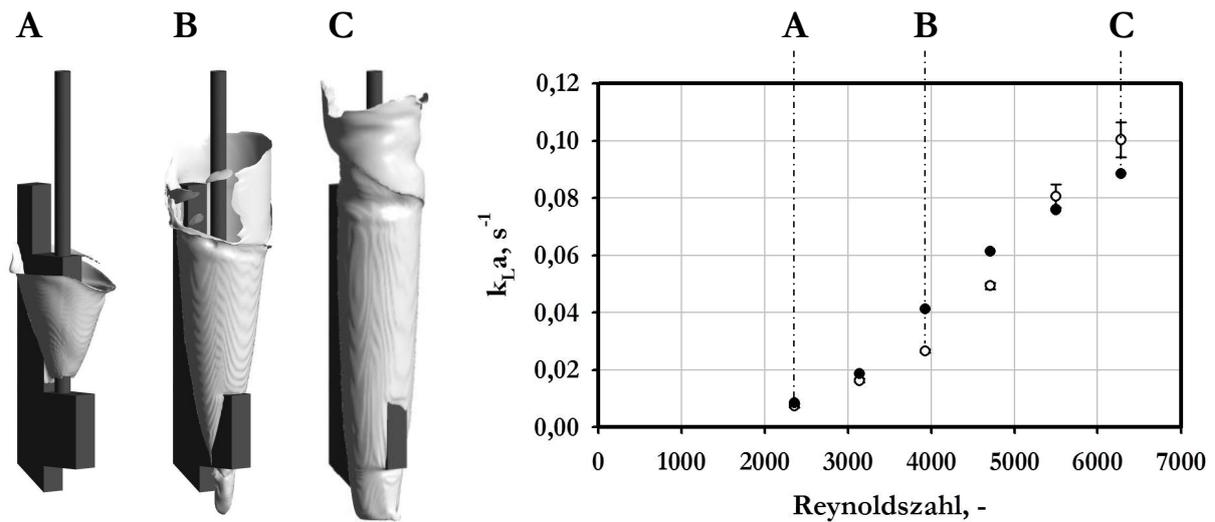


Abbildung 10-2: Simulierte Phasengrenzfläche des Paddelrührers bei drei Rührerdrehzahlen (A: 600 min^{-1} , $\text{Re} = 2356$. B: 1000 min^{-1} , $\text{Re} = 3926$. C: 1600 min^{-1} , $\text{Re} = 6281$.) und Vergleich von modellierten (\bullet) und experimentellen (\circ) $k_{L,a}$.

Darüber hinaus ist die Entwicklung neuer Bauteile für das Bioreaktor-System mit der Fertigung zahlreicher Prototypen und vielen, aufwendigen Experimenten verbunden. Dies ist langwierig und teuer, da die Geometrien vieler Prototypen wieder verändert oder verworfen werden müssen. Deshalb wurde in dieser Arbeit numerische Strömungssimulation auch eingesetzt, um den Auslegungsprozess des S-Rührers für das Bioreaktor-System im Millilitermaßstab zu verkürzen und Kosten einzusparen.

Zunächst wurden einzelne Geometrielemente – wie beispielsweise Nuten im Rührerkörper – simuliert und auf der Basis der Simulationsergebnisse ein erster Prototyp entwickelt, der auch experimentell untersucht wurde. Bei den Simulationen der einzelnen Geometrielemente hatte sich bereits gezeigt, dass die axiale Durchmischung im Rührbehälter nur wenig ausgeprägt war. Die schrägen Nuten im Rührerkörper – das Geometrielement, mit dem die größte axiale Geschwindigkeitskomponente in den Simulationen beobachtet wurde – konnten aber nicht in Verbindung mit anderen Geometrieteilen gefertigt werden. Deshalb wurde im ersten Prototyp ein abgeflachter Rührerkörper mit geraden Nuten und vier Fortsätzen umgesetzt. Der axiale Transport im Reaktor war – wie erwartet – weiterhin gering, so dass die Geometrie nochmals modifiziert wurde. Das Ergebnis ist der S-Rührer, der in Abbildung 10-1 C zu sehen ist. Seine asymmetrische Geometrie führt zu einer Verstärkung der axialen Bewegung im Reaktor und erhöht so den Austausch im Behälter zwischen den Bereichen ober- und unterhalb des Rührers.

11 Ausblick

Im Rahmen dieser Forschungsarbeit konnte gezeigt werden, dass numerische Strömungsmechanik ein nützliches und vielseitiges Werkzeug für die Auslegung, Charakterisierung und Untersuchung verfahrenstechnischer Prozesse ist. Dennoch traten bei einigen Fragestellungen Probleme auf, die es in der Zukunft zu lösen gilt.

Dazu gehört die Integration einer verlässlichen Fehlerabschätzung direkt in das Simulationsprogramm. Dann wäre es möglich, auf eine nachträgliche Fehlerabschätzung zu verzichten, die sicherlich ungenauere Ergebnisse liefert als eine, die unmittelbar auf Daten der Rechnung zugreifen kann (PELLETIER et al., 2003). Da die Fehlerbetrachtung essentiell für die Beurteilung der Simulationsergebnisse ist, stellt dieser Punkt eine der wichtigsten zukünftigen Maßnahmen dar.

Eine weitere zu lösende Aufgabe besteht in der Verbesserung der Turbulenzmodellierung im Übergangsbereich der Strömung. Zwar gibt es so genannte *low-Re*-Turbulenzmodelle, aber diese Bezeichnung ist irreführend. Denn sie gelten nicht allgemein für Strömungen mit niedrigen Reynoldszahlen, sondern wurden für geringe turbulente Reynoldszahlen im Wandbereich aufgestellt und lösen die viskose Unterschicht der Strömung auf. Eine treffendere Bezeichnung wäre deshalb „Turbulenzmodell zur Beschreibung der viskosen Unterschicht“ (MENTER, 2009). Es fehlen daher Turbulenzmodelle, die in der Lage sind, Fluidbewegungen mit Reynoldszahlen, die eine Strömung im Übergangsbereich anzeigen, wiederzugeben.

Außerdem wäre eine Verbesserung der Modellierung von Mehrphasenströmungen und deren Algorithmen wünschenswert. Da die Anfänge der numerischen Strömungsmechanik in der Aerodynamik – also einphasigen Strömungen – liegen, ist die Beschreibung mehrphasiger Strömungen noch nicht so weit fortgeschritten wie für einphasige Fluidbewegungen. Viele Anwendungen der numerischen Strömungsmechanik in der Verfahrenstechnik beziehen sich aber auf Strömungen mit mehreren Fluiden. Außerdem fehlt für Mehrphasenströmungen eine durchgängig verwendbare und leistungsfähige Turbulenzmodellierung. Oft wird nur ein Turbulenzmodell für die kontinuierliche Phase eingesetzt und um einen Term zur Berücksichtigung der dispersen Phase erweitert (MARSCHALL et al., 2011a).

Zuletzt könnten formalkinetische Modelle zur Beschreibung des Wachstums von Mikroorganismen in die Simulationsprogramme implementiert werden, was sich gerade für die Bioverfahrenstechnik anböte. Gegenwärtig sind hauptsächlich Modelle verfügbar, die Verbrennungen oder chemische Reaktionen abbilden (ANSYS INC., 2010e). Für die Bioverfahrenstechnik wäre aber beispielsweise eine Verbindung von numerischer Strömungssimulation mit der Betrachtung des Stofftransports und –verbrauchs im Bioreaktor – für Sauerstoff oder Medienbestandteile – und des Wachstums der Mikroorganismen lohnend, um die Maßstabsvergrößerung zu vereinfachen. Zusätzlich wäre auch die Veränderung der Eigenschaften des Mediums während des Prozesses von Interesse. Diese Punkte sind momentan auch Gegenstand der Forschung (z.B. TALVY et al., 2011; DEVARAPALLI et al., 2009).

12 Literaturverzeichnis

AHRENDTS, J: Technische Thermodynamik. In: CZICHOS, H (Hg.): *Hütte. Die Grundlagen der Ingenieurwissenschaften*. 31. Aufl. Berlin: Springer, 2000.

ALVES, S S; MAIA, C I; VASCONCELOS, J M; SERRALHEIRO, A J, 2002: Bubble size in aerated stirred tanks. *Chemical Engineering Journal* **89**, 109–177.

ALVES, S S; MAIA, C I; VASCONCELOS, J M, 2004: Gas-liquid mass transfer coefficient in stirred tanks interpreted through bubble contamination kinetics. *Chemical Engineering and Processing* **43**, 7, 823–830.

ANDERSON, J D, Jr. *Computational Fluid Dynamics. The Basics with Applications*. New York: McGraw-Hill, 1998.

ANDRUSSOW, L; SCHRAMM, B: Eigenschaften der Materie in ihren Aggregatzuständen. 5. Teil. Bandteil a. Transportphänomene I (Viskosität und Diffusion). In: BORCHERS, H; HAUSEN, H; HELLWEGE, K H; SCHÄFER, K; SCHMIDT, E (Hg.): *Landolt-Börnstein. Zahlenwerte und Funktionen aus Physik, Chemie, Astronomie, Geophysik und Technik*. Bd. 2. S. 371 ff. Berlin: Springer, 1969.

ANSYS INC., 2010a: ANSYS CFD-Post User's Guide. *ANSYS CFX Release 13.0*. Online verfügbar unter https://www1.ansys.com/customer/content/documentation/130/cfd_post.pdf, zuletzt geprüft am 08.09.2011.

ANSYS INC., 2010b: ANSYS CFX-Pre User's Guide. *ANSYS CFX Release 13.0*. Online verfügbar unter https://www1.ansys.com/customer/content/documentation/130/cfx_pre.pdf, zuletzt geprüft am 08.09.2011.

ANSYS INC., 2010c: ANSYS CFX Reference Guide. *ANSYS CFX Release 13.0*. Online verfügbar unter https://www1.ansys.com/customer/content/documentation/130/cfx_ref.pdf, zuletzt geprüft am 08.09.2011.

ANSYS INC., 2010d: ANSYS CFX-Solver Manager User's Guide. *ANSYS CFX Release 13.0*. Online verfügbar unter https://www1.ansys.com/customer/content/documentation/130/cfx_solv.pdf, zuletzt geprüft am 08.09.2011.

ANSYS INC., 2010e: ANSYS CFX-Solver Modeling Guide. *ANSYS CFX Release 13.0*. Online verfügbar unter https://www1.ansys.com/customer/content/documentation/130/cfx_mod.pdf, zuletzt geprüft am 08.09.2011.

ANSYS INC., 2010f: ANSYS CFX-Solver Theory Guide. *ANSYS CFX Release 13.0*. Online verfügbar unter https://www1.ansys.com/customer/content/documentation/130/cfx_thry.pdf, zuletzt geprüft am 08.09.2011.

ANSYS INC., 2010g: ANSYS ICEM CFD Help Manual. *ANSYS ICEM CFD Release 13.0*. Online verfügbar unter <https://www1.ansys.com/customer/content/documentation/130/icemcf/icmhelp.pdf>, zuletzt geprüft am 09.11.2011.

ANSYS INC., 2010h: ANSYS ICEM CFD User Manual. *ANSYS ICEM CFD Release 13.0*. Online verfügbar unter <https://www1.ansys.com/customer/content/documentation/130/icemcf/icmuser.pdf>, zuletzt geprüft am 09.11.2011.

AUBIN, J; XUERE, C, 2006: Design of multiple impeller stirred tanks for the mixing of highly viscous fluids using CFD. *Chemical Engineering Science* **61**. 9, 2913–2920.

AUBIN, J; FLETCHER, D F; XUERE, C, 2004: Modeling turbulent flow in stirred tanks with CFD: the influence of the modeling approach, turbulence model and numerical scheme. *Experimental Thermal and Fluid Science* **28**. 5, 431–445.

BADINO, A C; FACCIOTTI, M C R; SCHMIDELL, W, 2001: Volumetric oxygen transfer coefficients ($k_L a$) in batch cultivations involving non-Newtonian broths. *Biochemical Engineering Journal* **8**. 2, 111–119.

BATHE, K J. *Finite-Elemente-Methoden*. Berlin: Springer, 1986.

BIEDERMANN, A; HENZLER, H J, 1994: Stress on Particles in Stirred-Tank Reactors. *Chemie Ingenieur Technik* **66**. 2, 209–211.

BIRD, R B; STEWART, W E; LIGHTFOOT, E N. *Transport Phenomena*. 2. Aufl. New York: Wiley, 2002.

- BIRTIGH, A; LAUSCHKE, G; SCHIERHOLZ, W F; BECK, D; MAUL, C; GILBERT, N et al., 2000: CFD in chemical engineering from an industrial standpoint. *Chemie Ingenieur Technik* **72**, 3, 175-193.
- BOGER, D V; YEOW, Y L: Fluid Mechanics. In: *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Weinheim: WILEY-VCH, 2005.
- BOWEN, R L, 1986: Unraveling the mysteries of shear-sensitive mixing systems. *Chemical Engineering* **93**, 11, 55–63.
- BRIMBLECOMBE, P. *Air. Composition & Chemistry*. Cambridge: Cambridge University Press, 1986.
- BUJALSKI, W; JAWORSKI, Z; NIENOW, A W, 2002: CFD Study of Homogenization with Dual Rushton Turbines - Comparison with Experimental Results: Part II: The Multiple Reference Frame. *Chemical Engineering Research and Design* **80**, 1, 97–104.
- BURNETT, D S. *Finite Element Analysis*. Reading: Addison-Wesley Publishing Company, 1987.
- CALDERBANK, P H; MOO-YOUNG, M B, 1959: The Prediction of Power Consumption in the Agitation of Non-Newtonian Fluids. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* **37**, 26–33.
- CALDERBANK, P H; MOO-YOUNG, M B, 1961: The Power Characteristics of Agitators for the Mixing of Newtonian and Non-Newtonian Fluids. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* **39**, 337–347.
- CASEY, M; WINTERGERSTE, T (Hg.), 2000: *ERCOFTAC Best Practice Guidelines. Industrial Computational Fluid Dynamics of Single-Phase Flows*. European Research Community on Flow, Turbulence and Combustion.
- CELIK, I B; KARATEKIN, O, 1997: Numerical experiments on application of Richardson extrapolation with non-uniform grids. *Journal of Fluids Engineering - Transactions of the ASME* **119**, 3, 584–590.
- CHMIEL, H (Hg.). *Bioprozesstechnik. Einführung in die Bioverfahrenstechnik*. 2. Aufl. München: Elsevier Spektrum Akademischer Verlag, 2006.
- CHMIEL, H (Hg.). *Bioprozesstechnik*. 3. Aufl. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 2011.

CLIFT, R; GRACE, J R; WEBER, M E. *Bubbles, Drops, and Particles*. New York: Academic Press, 1978.

COCKX, A; DO-QUANG, Z; AUDIC, J M; LINE, A; ROUSTAN, M, 2001: Global and local mass transfer coefficients in waste water treatment process by computational fluid dynamics. *Chemical Engineering and Processing* **40**. 2, 187–194.

COOPER, C M; FERNSTROM, G A; MILLER, S A, 1944: Performance of Agitated Gas-Liquid Contactors. *Industrial and Engineering Chemistry* **36**. 6, 504–509.

COURANT, R; FRIEDRICHS, K; LEWY, H, 1928: Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik. *Mathematische Annalen* **100**. 1, 32–74.

DANCKWERTS, P V, 1951: Significance of Liquid-Film Coefficients in Gas Absorption. *Industrial and Engineering Chemistry* **43**. 6, 1460–1467.

D'ANS, J; LAX, E. *Taschenbuch für Chemiker und Physiker. Makroskopische physikalisch-chemische Eigenschaften*. Bd. 1. 3. völlig neu bearbeitete Auflage. Berlin: Springer, 1967.

DEEN, W M. *Analysis of Transport Phenomena*. New York: Oxford University Press, 1998.

DEVARAPALLI, M; LAWRENCE, B J; MADIHALLY, S V, 2009: Modeling Nutrient Consumptions in Large Flow-Through Bioreactors for Tissue Engineering. *Biotechnology and Bioengineering* **103**. 5, 1003–1015.

ESCH, T; MENTER, F R: Heat Transfer Predictions Based on Two-Equation Turbulence Models with Advanced Wall Treatment. In: HANJALIC, K; NAGANO, Y; TUMMERS, M (Hg.): *Turbulence, Heat and Mass Transfer 4. Proceedings of the Fourth International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer*. New York: Begell House, 2003, 633–640.

FERZIGER, J H; PERIĆ, M, 1996: Further discussion of numerical errors in CFD. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **23**. 12, 1263–1274.

FERZIGER, J H; PERIĆ, M. *Numerische Strömungsmechanik*. Berlin: Springer, 2008.

FREITAS, C J; CELIK, I B 2004: *Journal of Fluids Engineering Editorial Policy. Statement on the Control of Numerical Accuracy*. Online verfügbar unter <http://journaltool.asme.org/Templates/JFENumAccuracy.pdf>, zuletzt geprüft am 21.03.2011.

FRIMMEL, F H (Hg.). *Wasser und Gewässer. Ein Handbuch*. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 1999.

GARCIA-OCHOA, F; GOMEZ, E, 2004: Theoretical prediction of gas-liquid mass transfer coefficient, specific area and hold-up in sparged stirred tanks. *Chemical Engineering Science* **59**. 12, 2489–2501.

GEBHARDT, G, 2010: *Reaktionstechnische Untersuchungen von rekombinanten Saccharomyces cerevisiae zur Bernsteinsäureherstellung*. Dissertation. Betreut von Dirk Weuster-Botz. München. Technische Universität München, Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik. Online verfügbar unter <http://mediatum.ub.tum.de/doc/981880/981880.pdf>, zuletzt geprüft am 07.11.2011.

GENTRIC, C; MIGNON, D; BOUSQUET, J; TANGUY, P A, 2005: Comparison of mixing in two industrial gas-liquid reactors using CFD simulations. *Chemical Engineering Science* **60**. 8-9, 2253-2272.

GOBBY, D, 2008: *Experimental validation of a bubble column reactor. ANSYS CFX Validation Report. CFX-VAL08/0404*.

HALL, J F; BARIGOU, M; SIMMONS, M J H; STITT, E H, 2004: Mixing in unbaffled high-throughput experimentation reactors. *Industrial and Engineering Chemistry Research* **43**. 15, 4149-4158.

HAQUE, J N; MAHMUD, T; ROBERTS, K J; RHODES, D, 2006: Modeling turbulent flows with free-surface in unbaffled agitated vessels. *Industrial and Engineering Chemistry Research* **45**. 8, 2881–2891.

HENNIG, T; GRÄN-HEEDFELD, J; DEERBERG, G, 2007: Simulation der Strömung in Fermentern von Biogasanlagen. *Chemie Ingenieur Technik* **79**. 5, 643–650.

HENZLER, H J, 2007: Auslegung von Rührfermentern - Berücksichtigung der nicht-Newton'schen Eigenschaften von Fermentationslösungen. *Chemie Ingenieur Technik* **79**. 7, 951–965.

HENZLER, H J, 1988: Rheological Properties - Explanation, Measurement, Determination, and Significance. *Chemie Ingenieur Technik* **60**. 1, 1–8.

HENZLER, H J, 1973: Homogenizing Newtonian Liquids in Laminar and in Transitional Range. *Chemische Technik* **25**. 5, 277–279.

- HENZLER, H J; BIEDERMANN, A, 1996: Model studies on particle stress in reactors. *Chemie Ingenieur Technik* **68**. 12, 1546–1561.
- HENZLER, H J; KAULING, J: Scale-up of mass transfer in highly viscous liquids. In: *Fifth European Conference on Mixing*, 1985, 303–312.
- HERWIG, H. *Strömungsmechanik. Eine Einführung in die Physik und die mathematische Modellierung von Strömungen*. 2. Aufl. Heidelberg: Springer, 2006.
- HERWIG, H; KAUTZ, C H. *Technische Thermodynamik*. München: Pearson Studium, 2007.
- HIGBIE, R, 1935: The rate of absorption of a pure gas into a still liquid during short periods of exposure. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* **31**, 365–389.
- HIMMLER, K; SCHIERHOLZ, W F, 2004: Mischvorgänge: Klassische Methoden und Computational Fluid Dynamics in der industriellen Praxis. *Chemie Ingenieur Technik* **76**. 3, 212–219.
- HIRT, C W; NICHOLS, B D, 1981: Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries. *Journal of Computational Physics* **39**, 201–225.
- HORTSCH, R, 2011: *Miniaturisierte Rührreaktoren zur Kultivierung morphologisch veränderlicher Mikroorganismen*. Dissertation. Betreut von Dirk Weuster-Botz. München. Technische Universität München, Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik. Online verfügbar unter <http://mediatum.ub.tum.de/doc/1006980/1006980.pdf>, zuletzt geprüft am 24.05.2011.
- HORTSCH, R; WEUSTER-BOTZ, D, 2010a: Power Consumption and Maximum Energy Dissipation in a Milliliter-Scale Bioreactor. *Biotechnology Progress* **26**. 2, 595–599.
- HORTSCH, R; WEUSTER-BOTZ, D: Milliliter-Scale Stirred Tank Reactors for the Cultivation of Microorganisms. In: LASKIN, A I.; SARIASLANI, S; GADD, G M (Hg.): *Advances in Applied Microbiology*. Vol. 73. Burlington: Academic Press, 2010b, 61–82.
- HORTSCH, R; STRATMANN, A; WEUSTER-BOTZ, D, 2010: New Milliliter-Scale Stirred Tank Bioreactors for the Cultivation of Mycelium Forming Microorganisms. *Biotechnology and Bioengineering* **106**. 3, 443–451.
- ISHII, M; ZUBER, N, 1979: Drag Coefficient and Relative Velocity in Bubbly, Droplet or Particulate Flows. *AIChE Journal* **25**. 5, 834–855.

- JAWORSKI, Z; BUJALSKI, W; OTOMO, N; NIENOW, A W, 2000: CFD Study of Homogenization with Dual Rushton Turbines--Comparison with Experimental Results: Part I: Initial Studies. *Chemical Engineering Research and Design* **78**. 3, 327–333.
- KAWASE, Y; MOO-YOUNG, M B, 1988: Volumetric Mass Transfer Coefficients in Aerated Stirred Tank Reactors with Newtonian and Non-Newtonian Media. *Chemical Engineering Research and Design* **66**. 3, 284–288.
- KAWASE, Y; HALARD, B; MOO-YOUNG, M B, 1992: Liquid-phase mass transfer coefficients in bioreactors. *Biotechnology and Bioengineering* **39**, 1133–1140.
- KELLY, W J; GIGAS, B, 2003: Using CFD to predict the behavior of power law fluids near axial-flow impellers operating in the transitional flow regime. *Chemical Engineering Science* **58**. 10, 2141-2152.
- KERDOUSS, F; BANNARI, A; PROULX, P, 2006: CFD modeling of gas dispersion and bubble size in a double turbine stirred tank. *Chemical Engineering Science* **61**. 10, 3313–3322.
- KLEPPMANN, W. *Taschenbuch Versuchsplanung. Produkte und Prozesse optimieren*. 4. Aufl. München: Hanser, 2006.
- KOCK, F, 2003: *Bestimmung der lokalen Entropieproduktion in turbulenten Strömungen und deren Nutzung zur Bewertung konvektiver Transportprozesse*. Dissertation. Betreut von Heinz Herwig. Hamburg-Harburg. Technische Universität Hamburg-Harburg, Arbeitsbereich Technische Thermodynamik.
- KOLMOGOROV, A N: Die lokale Struktur der Turbulenz in einer inkompressiblen zähen Flüssigkeit bei sehr großen Reynoldsschen Zahlen. In: GOERING, H (Hg.): *Sammelband zur statistischen Theorie der Turbulenz*. Berlin: Akademie-Verlag, 1958, 71–76.
- KRAUME, M (Hg.). *Mischen und Rühren. Grundlagen und moderne Verfahren*. Weinheim: WILEY-VCH, 2003.
- KUMARESAN, T; NERE, N K; JOSHI, J B, 2005: Effect of internals on the flow pattern and mixing in stirred tanks. *Industrial and Engineering Chemistry Research* **44**. 26, 9951–9961.

- LAAKKONEN, M; MOILANEN, P; ALOPAEUS, V; AITTAMAA, J, 2007: Modelling local gas-liquid mass transfer in agitated vessels. *Chemical Engineering Research and Design* **85**. A5, 665–675.
- LAAKKONEN, M; ALOPAEUS, V; AITTAMAA, J, 2006: Validation of bubble breakage, coalescence and mass transfer models for gas-liquid dispersion in agitated vessels. *Chemical Engineering Science* **61**, 218–228.
- LAMONT, J C; SCOTT, D S, 1970: An Eddy Cell Model of Mass Transfer into the Surface of a Turbulent Liquid. *AICbE Journal* **16**. 4, 513–519.
- LEWIS, W K; WHITMAN, W G, 1924: Principles of Gas Absorption. *Industrial and Engineering Chemistry* **16**. 12, 1215–1220.
- LIEPE, F, 1973: Combination of Materials in Liquid-Phase .1. Introduction and Theoretical Bases of Homogenizing. *Chemische Technik* **25**. 12, 724–726.
- LIEPE, F; MEUSEL, W; MÖCKEL, H-O; PLATZER, B; WEIßGÄRBER, H: Stoffvereinigen in fluiden Phasen. *Ausrüstungen und ihre Berechnung*. In: WEIß, S; BERGHOFF, W; GRAHN, E; GRUHN, G; GÜSEWELL, M; PLÖTNER, W; ROBEL, H; SCHUBERT, M (Hg.): *Verfahrenstechnische Berechnungsmethoden(4)*. Weinheim: VCH Verlagsgesellschaft mbH, 1988.
- LO, S M, 1996: *Application of the MUSIG Model to Bubbly Flows*. Technical Report AEAT-1096. AEA Technology.
- LODGE, A S. *Elastic Liquids. An Introductory Vector Treatment of Finite-strain Polymer Rheology*. London: Academic Press, 1964.
- MARQUES, M P; CABRAL, J M; FERNANDES, P, 2010: Bioprocess scale-up: quest for the parameters to be used as criterion to move from microreactors to lab-scale. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology* **85**. 9, 1184–1198.
- MARSCHALL, H; MORNHINWEG, R; KOSSMANN, A; OBERHAUSER, S; LANGBEIN, K; HINRICHSEN, O, 2011a: Numerical Simulation of Dispersed Gas/Liquid Flows in Bubble Columns at High Phase Fractions using OpenFOAM (R) Part I - Modeling Basics. *Chemical Engineering and Technology* **34**. 8, 1311–1320.
- MARSCHALL, H; MORNHINWEG, R; KOSSMANN, A; OBERHAUSER, S; LANGBEIN, K; HINRICHSEN, O, 2011b: Numerical Simulation of Dispersed Gas/Liquid Flows in Bubble

Columns at High Phase Fractions using OpenFOAM (R) Part II - Numerical Simulations and Results. *Chemical Engineering and Technology* **34**. 8, 1321–1327.

MENTER, F R, 1994: Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications. *ALAA Journal* **32**. 8, 1598–1605.

MENTER, F R, 2009: Review of the shear-stress transport turbulence model experience from an industrial perspective. *International Journal of Computational Fluid Dynamics* **23**. 4, 305–316.

MENTER, F R; CARREGAL FERREIRA, J; ESCH, T; KONNO, B: The SST Turbulence Model with Improved Wall Treatment for Heat Transfer Predictions in Gas Turbines. In: WATANABE, T (Hg.): *Proceedings of the International Gas Turbine Congress*. Tokio: Nissei Eblo, 2003.

MEHTA, U B, 1998: Credible computational fluid dynamics simulations. *ALAA Journal* **36**. 5, 665-667.

METZNER, A B; OTTO, R E, 1957: Agitation of Non-Newtonian Fluids. *AICbE Journal* **3**. 1, 3-10.

METZNER, A B; FEEHS, R H; RAMOS, H L; OTTO, R E; TUTHILL, J D, 1961: Agitation of Viscous Newtonian and Non-Newtonian Fluids. *AICbE Journal* **7**. 1, 3–9.

MIDDLETON, J C: Gas–liquid dispersion and mixing. In: HARNBY, N; EDWARDS, M F; NIENOW, A W (Hg.): *Mixing in the process industry*. London: Butterworth & Co, 1985, 322–355.

MOILANEN, P; LAAKKONEN, M; VISURI, O; AITTAMAA, J, 2007: Modeling local gas-liquid mass transfer in agitated viscous shear-thinning dispersions with CFD. *Industrial and Engineering Chemistry Research* **46**. 22, 7289–7299.

MONTANTE, G; MOSTEK, M; JAHODA, M; MAGELLI, F, 2005: CFD simulations and experimental validation of homogenisation curves and mixing time in stirred Newtonian and pseudoplastic liquids. *Chemical Engineering Science* **60**. 8-9, 2427–2437.

MONTGOMERY, D C. *Design and Analysis of Experiments*. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2009.

MORAVEJI, M K; SAJJADI, B; JAFARKHANI, M; DAVARNEJAD, R, 2011: Experimental investigation and CFD simulation of turbulence effect on hydrodynamic and mass transfer in a

packed bed airlift internal loop reactor. *International Communications in Heat and Mass Transfer* **38**. 4, 518–524.

MOUCHA, T; LINEK, V; PROKOPOVA, E, 2003: Gas hold-up, mixing time and gas-liquid volumetric mass transfer coefficient of various multiple-impeller configurations: Rushton turbine, pitched blade and techmix impeller and their combinations. *Chemical Engineering Science* **58**. 9, 1839–1846.

MUJUMDAR, A S; MASHELKAR, R A (Hg.). *Advances in Transport Processes. Bd. 2*. New Delhi: Wiley Eastern Ltd., 1982.

MURTHY SHEKHAR, S; JAYANTI, S, 2002: CFD study of power and mixing time for paddle mixing in unbaffled vessels. *Chemical Engineering Research and Design* **80**. A5, 482–498.

MURTHY SHEKHAR, S; JAYANTI, S, 2003: Mixing of Power-Law Fluids Using Anchors: Metzner-Otto Concept Revisited. *AIChE Journal* **49**. 1, 30–40.

MUZAFERIJA, S; PERIĆ, M: Computation of free surface flows using interface-tracking and interface-capturing methods. In: MAHREHOLTZ, O; MARKIEWICZ, M (Hg.): *Nonlinear Water Wave Interaction*. Southampton: WIT Press, 1999, 59–100.

NG, K; FENTIMAN, N J; LEE, K C; YIANNESKIS, M, 1998: Assessment of Sliding Mesh CFD Predictions and LDA Measurements of the Flow in a Tank Stirred by a Rushton Impeller. *Chemical Engineering Research and Design* **76**. 6, 737–747.

NIENOW, A W: Stirred Tank Reactors. In: *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Weinheim: WILEY-VCH, 2010.

PASCHEDAG, A R. *CFD in der Verfahrenstechnik. Allgemeine Grundlagen und mehrphasige Anwendungen*. Weinheim: WILEY-VCH, 2004.

PATANKAR, S V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. New York: Hemisphere Publishing, 1980.

PELLETIER, D, 2010: Verification, validation, and uncertainty in computational fluids dynamics. *Canadian Journal of Civil Engineering* **37**. 7, 1003–1013.

PELLETIER, D; TURGEON, E; LACASSE, D, 2003: Adaptivity, sensitivity, and uncertainty: Toward standards of good practice in computational fluid dynamics. *ALAA Journal* **41**. 10, 1925–1933.

- PUSKEILER, R, 2004: *Miniaturisierte Parallelreaktoren zur Hochdurchsatz-Bioprozessentwicklung*. Dissertation. Betreut von Dirk Weuster-Botz. München. Technische Universität München, Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik. Online verfügbar unter <http://tumb1.biblio.tu-muenchen.de/publ/diss/mw/2004/puskeiler.pdf>, zuletzt geprüft am 07.11.2011.
- RHIE, C M; CHOW, W L, 1983: Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Airfoil with Trailing Edge Separation. *ALAA Journal* **21**, 11, 1525–1532.
- RICHARDSON, L F, 1910: The Approximate Arithmetical Solution by Finite Differences of Physical Problems Involving Differential Equations with an Application to the Stresses in a Masonry Dam. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series A -Containing Papers of a Mathematical or Physical Character* **210**, 307–357.
- RICHARDSON, L F; GAUNT, J A, 1927: The deferred approach to the limit. Part I. Single lattice. Part II. Interpenetrating lattices. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series A -Containing Papers of a Mathematical or Physical Character* **226**, 299–361.
- RIEDLBERGER, P, 2012: *Miniaturisierte Rührreaktoren zur enzymatischen Hydrolyse von suspendierten Pflanzenmaterialien*. Dissertation. Betreut von Dirk Weuster-Botz. München. Technische Universität München, Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik.
- RIEDLBERGER, P; WEUSTER-BOTZ, D, 2010: Rührorgan für Flüssigkeiten. *German Patent Application DE 20 2010 011 902 U1*.
- RIEDLBERGER, P; BRÜNING, S; WEUSTER-BOTZ, D, 2012: Characterization of stirrers for screening studies of enzymatic biomass hydrolyses on a milliliter-scale. *Bioprocess and Biosystems Engineering*, im Erscheinen.
- ROACHE, P J. *Verification and Validation in Computational Science and Engineering*. Albuquerque: Hermosa Publishers, 1998.
- ROTH, W A; SCHEEL, K (Hg.). *Landolt-Börnstein. Physikalisch-chemische Tabellen. Bd. 1*. 5. Aufl. Berlin: Springer, 1923.
- RUGE, P; WERMUTH, M: Mathematik und Statistik. In: CZICHOS, H (Hg.): *Hütte. Die Grundlagen der Ingenieurwissenschaften*. 31. Aufl. Berlin: Springer, 2000, A1-A159.

- RYU, D Y; HUMPHREY, A E, 1972: Reassessment of Oxygen-Transfer Rates in Antibiotics Fermentations. *Journal of Fermentation Technology* **50**. 6, 424–&.
- SÁNCHEZ PÉREZ, J A; RODRÍGUEZ PORCEL, E M; CASAS LÓPEZ, J L; FERNÁNDEZ SEVILLA, J M; CHISTI, Y, 2006: Shear rate in stirred tank and bubble column bioreactors. *Chemical Engineering Journal* **124**. 1-3, 1–5.
- SCHWARZ, H R. *Numerische Mathematik*. Stuttgart: Teubner, 1993.
- SOKOLICHIN, A, 2004: *Mathematische Modellbildung und numerische Simulation von Gas-Flüssigkeits-Blasenströmungen*. Habilitationsschrift. Betreut von G. Eigenberger. Stuttgart. Universität Stuttgart, Institut für Chemische Verfahrenstechnik. Online verfügbar unter <http://elib.uni-stuttgart.de/opus/volltexte/2004/1612/>, zuletzt geprüft am 02.11.2011.
- SOMMERFELD, M. *Modellierung und numerische Berechnung von partikelbeladenen turbulenten Strömungen mit Hilfe des Euler/Lagrange Verfahrens*. Aachen: Shaker Verlag, 1996.
- SUCCI, S. *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford: Oxford University Press, 2001.
- TABOR, G; RUSCHE, H, 1999: *BRITE III Project Report. Algorithm Development - Multiphase Flow*.
- TALVY, S; COCKX, A; LINE, A, 2007: Modeling of oxygen mass transfer in a gas-liquid airlift reactor. *AIChE Journal* **53**. 2, 316–326.
- TALVY, S; DEBASTE, F; MARTINELLI, L; CHAUVEHEID, E; HAUT, B, 2011: Development of a tool, using CFD, for the assessment of the disinfection process by ozonation in industrial scale drinking water treatment plants. *Chemical Engineering Science* **66**. 14, 3185–3194.
- VAN'T RIET, K, 1979: Review of Measuring Methods and Results in Nonviscous Gas-Liquid Mass Transfer in Stirred Vessels. *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development* **18**. 3, 357–364.
- VERSTEEG, H K; MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics. The Finite Volume Method*. 2. Aufl. Harlow: Pearson Education Ltd., 2007.
- VESTER, A; HANS, M; HOHMANN, H P; WEUSTER-BOTZ, D, 2009: Discrimination of riboflavin producing *Bacillus subtilis* strains based on their fed-batch process performances on a millilitre scale. *Applied Microbiology and Biotechnology* **84**. 1, 71–76.

- WEUSTER-BOTZ, D, 2005: Parallel reactor systems for bioprocess development. *Advances in Biochemical Engineering / Biotechnology* **92**, 125–143.
- WEUSTER-BOTZ, D; PUSKEILER, R; KUSTERER, A; KAUFMANN, K; JOHN, G T; ARNOLD, M, 2005: Methods and milliliter scale devices for high-throughput bioprocess design. *Bioprocess and Biosystems Engineering* **28**. 2, 109–119.
- WILCOX, D C, 1988: Reassessment of the Scale-Determining Equation for Advanced Turbulence Models. *ALAA Journal* **26**. 11, 1299–1310.
- WOLF-GLADROW, D A, 2004: Lattice Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models. An Introduction. *Lecture Notes in Mathematics* **1725**.
- WU, B X; CHEN, S L, 2008: CFD simulation of non-Newtonian fluid flow in anaerobic digesters. *Biotechnology and Bioengineering* **99**. 3, 700–711.
- YEOH, S L; PAPADAKIS, G; YIANNESKIS, M, 2005: Determination of mixing time and degree of homogeneity in stirred vessels with large eddy simulation. *Chemical Engineering Science* **60**, 2293–2302.
- ZLOKARNIK, M, 1999: Rührtechnik am Ausklang des 20. Jahrhunderts. *Chemie Ingenieur Technik* **71**. 10, 1138–1142.
- ZLOKARNIK, M: Stirring. In: *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Weinheim: WILEY-VCH, 2005.

13 Anhang

13.1 Symbolverzeichnis

Lateinische Buchstaben

A	Fläche	m^2
A	Koeffizientenmatrix	variabel
a	spezifische Austauschfläche	m^{-1}
a	Koeffizienten in Gleichungen (3-58) und (3-59)	variabel
b	Vektor der rechten Seite des linearen Gleichungssystems	variabel
C_1	Konstante in Gleichung (3-26) und (3-27)	$\text{W}^{-\alpha_1} \text{m}^{3+\alpha_1} \text{m}^{-\beta_1} \text{s}^{\beta_1}$
C_D	Widerstandsbeiwert	-
C_t	Konstante in Gleichung (3-91) und (3-93)	-
c	Konzentration	g L^{-1}
D	Reaktordurchmesser	m
D	Diffusionskoeffizient	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
D	Dimensionalität in Gleichung (3-104)	-
d	Rührerdurchmesser	m
d_d	Durchmesser der Partikeln bzw. Blasen der dispersen Phase	m
e_{kin}	kinetische Energie der Strömung	$\text{m}^2 \text{s}^{-2}$
F_D	Widerstandskraft	N
F	Übergangsfunktion in Gleichung (3-95)	-
f	diskrete Lösung	variabel
f	Kraftvektor in intensiver Form	N m^{-3}
g	Erdbeschleunigung	m s^{-2}
g_i	Funktionen in Gleichung (3-102)	-
g	Vektor der Erdbeschleunigung	m s^{-2}

H	Henry-Konstante (Gleichung (3-21))	-
H	Terme höherer Ordnung in der Taylorreihe (Gleichung (3-66))	variabel
h	Höhe (z. B. des Rührerblatts)	m
h	repräsentativer Gitterabstand in Kapitel 3.4.4	m
I	Einheitstensor	-
K	Konsistenzindex	Pa s ⁿ
k _{HK}	Konstante der Leistungskonzept-Gleichung (3-12)	-
k _{MO}	Metzner-Otto Konstante (Gleichung (3-8))	-
k	Stoffübergangskoeffizient	m s ⁻¹
k	spez. kinetische Energie der turbulenten Schwankungsbewegung	m ² s ⁻²
l _K	Mikromaßstab der Turbulenz (Gleichung (3-13))	m
M	Drehmoment	N m
M _{glob}	globale Mischgüte	-
M _{lok}	lokale Mischgüte	-
\dot{m}	Massenstrom	kg s ⁻¹
N	Rührerdrehzahl	s ⁻¹
N	Elementeanzahl des Netzes in Gleichung (3-104)	-
n	Fließindex	-
n	Einheitsvektor senkrecht zu einer Fläche	-
P	Leistungseintrag	W
P _k	Turbulenzproduktionsterm	kg m ⁻¹ s ⁻³
p	Druck, Partialdruck	Pa
p	beobachtete Konvergenzordnung in den Kapiteln 3.4.4 und 4.7	-
Q _U	Konstante in Gleichung (3-62)	variabel
Q _P	Faktor in Gleichung (3-62)	variabel
q _φ	Quell- und Senkenterme einer beliebigen, skalaren Größe φ	variabel
q _φ	Quell- und Senkenterme einer beliebigen Größe φ	variabel

r	Verfeinerungsfaktor in den Kapiteln 3.4.4 und 4.7	-
\mathbf{r}_n	Vektor des Residuums nach dem n-ten Iterationsschritt	variabel
\mathbf{s}	Tensor der Verformungsrate	s^{-1}
T	Temperatur	K
\mathbf{T}	Spannungstensor	$N m^{-2}$
t	Zeit, Zeitkoordinate	s
u	Geschwindigkeit in x-Richtung	$m s^{-1}$
u_{tip}	Rührerumfangsgeschwindigkeit	$m s^{-1}$
V	Volumen	m^3
v	Geschwindigkeit in y-Richtung	$m s^{-1}$
v_G	Gaslerrohrgeschwindigkeit	$m s^{-1}$
\mathbf{v}	Geschwindigkeitsvektor	$m s^{-1}$
w	Geschwindigkeit in z-Richtung	$m s^{-1}$
W_w	Wellenarbeit	$kg m^2 s^{-2}$
x	kartesische Koordinate	m
y	kartesische Koordinate	m
z	kartesische Koordinate	m

Griechische Buchstaben

α	Phasenanteil	-
α	Konstante in Gleichung (3-95)	-
α_1	Exponent in Gleichung (3-26) und (3-27)	-
β	Wichtungsfaktor in Gleichung (3-70)	-
β_1	Exponent in Gleichung (3-26) und (3-27)	-
β_k	Konstante in Gleichung (3-94)	-
β_ω	Konstante in Gleichung (3-95)	-
Δt	Zeitschritt	s

Δx	Gitterabstand	m
δ_{ij}	Kronecker-Symbol	-
δ	Dicke der laminaren Grenzschicht	m
δx_i	Abstand zwischen zwei Stützstellen in der FVM	m
ε	Fehler	-
ε	spezifische (turbulente) Energiedissipation	$\text{m}^2 \text{s}^{-3}$
Φ	beliebige extensive Erhaltungsgröße	variabel
ϕ	beliebige intensive Erhaltungsgröße	variabel
φ_n	Lösungsvektor des linearen Gleichungssystems nach n Iterationen	variabel
Γ	Diffusionskoeffizient einer beliebigen skalaren Größe φ	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
Γ_k	Diffusivität der turbulenten kinetischen Energie	$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$
Γ_ω	Diffusivität der Turbulenzfrequenz	$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$
γ_1	Exponent in Gleichung (3-27)	
$\dot{\gamma}$	Scherrate	s^{-1}
η	dynamische Viskosität	mPa s
η_t	turbulente Wirbelviskosität	mPa s
φ	beliebige skalare Größe	variabel
Λ	Makromaßstab der Turbulenz	m
ν	kinematische Viskosität	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
ν_t	kinematische turbulente Wirbelviskosität	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
Θ	Mischzeit	s
ρ	Dichte der Flüssigkeit	kg m^{-3}
σ	Oberflächenspannung	N m^{-1}
σ_ω	Konstante in Gleichung (3-95)	-
τ	Schubspannung	N m^{-2}
τ_{ij}	viskoser Teil des Spannungstensors	N m^{-2}
τ_t	turbulenter Spannungstensor	N m^{-2}

ω Frequenz der turbulenten Schwankungsbewegung s^{-1}

Sonstige Symbole

∇ Nabla-Operator

Hochgestellte Indizes

* Gleichgewicht
 – Mittelwert
 ' Schwankungswert
 T transponiert

Tiefgestellte Indizes

ap scheinbar
 B Finite-Volumen-Nomenklatur (vgl. Abbildung 3-10)
 D Diskretisierung
 d disperse Phase
 E, EE, e, ee Finite-Volumen-Nomenklatur (vgl. Abbildung 3-10)
 eff effektiv
 ein einströmend
 exakt exakt
 F Fluid
 f kontinuierliche Phase
 fo freie Oberfläche
 G Gas
 i Laufindex für Koordinatenrichtungen
 i innen
 j Laufindex für Koordinatenrichtungen
 KM Kontrollmasse

KV	Kontrollvolumen
k	Laufindex für mehrphasige Systeme
L	Flüssigkeit
Marker	Markierungssubstanz
N, NE, NN, NW	Finite-Volumen-Nomenklatur (vgl. Abbildung 3-10)
n, ne, nn, nw	Finite-Volumen-Nomenklatur (vgl. Abbildung 3-10)
nd	numerische Diffusion
O ₂	Sauerstoff
P	Finite-Volumen-Nomenklatur (vgl. Abbildung 3-10)
PWW	Phasenwechselwirkung
S, SE, SS, SW	Finite-Volumen-Nomenklatur (vgl. Abbildung 3-10)
s, se, ss, sw	Finite-Volumen-Nomenklatur (vgl. Abbildung 3-10)
T	Finite-Volumen-Nomenklatur (vgl. Abbildung 3-10)
t	turbulent
U	stromaufwärts
W, WW, w, ww	Finite-Volumen-Nomenklatur (vgl. Abbildung 3-10)

Dimensionslose Kennzahlen

CFL	$\frac{u \Delta t}{\Delta x}$	Courant-Zahl
Θ_N	$\Theta \cdot N$	Mischzeitkennzahl
Ne	$\frac{P}{\rho \cdot N^3 \cdot d^5}$	Newton-Zahl
Re	$\frac{\rho \cdot N \cdot d^2}{\eta}$	Rührer-Reynoldszahl

Abkürzungen

CAD	<i>computer aided design</i> , rechnerunterstützte Konstruktion
CFD	<i>computational fluid dynamics</i> , numerische Strömungssimulation

DNS	direkte numerische Simulation
FVM	Methode der Finiten Volumina
HRIC	<i>high resolution interface capturing</i> , hochauflösende Grenzflächenerfassung
KM	Kontrollmasse
KV	Kontrollvolumen
LUD	<i>linear upwind differencing</i> , lineare Aufwind-Approximation
MFR	<i>multiple frames of reference</i> , mehrere Bezugssysteme
MUSIG	<i>multiple size group</i> , Größenklassen-Modell
RANS	<i>Reynolds averaged Navier Stokes</i> , gemittelte Strömungsgleichungen
RSM	Reynolds-Spannungs-Modell (<i>Reynolds stress model</i>)
SST	Scherspannungstransport-Turbulenzmodell (<i>shear stress transport model</i>)
URANS	<i>Unsteady Reynolds averaged Navier Stokes</i> , instationäre gemittelte Strömungsgleichungen
VOF	<i>Volume of Fluid</i> -Methode, Fluidvolumen-Methode

13.2 Qualität der verwendeten Netze

Tabelle 13-1: Qualität des groben Rechengitters für den Paddelrührer und den gasinduzierenden Rührer. Aufgeführt werden drei Qualitätskriterien des Netzgenerators ANSYS ICEM CFD. Zusätzlich zum deutschen Namen wird die englische Bezeichnung des Kriteriums angegeben.

	Paddelrührer			gasinduzierender Rührer		
	minimaler Winkel	Volumenänderung	Schiefe	minimaler Winkel	Volumenänderung	Schiefe
	<i>min angle</i>	<i>volume change</i>	<i>equiangle skewness</i>	<i>min angle</i>	<i>volume change</i>	<i>equiangle skewness</i>
Minimalwert	24,36	0,908	0,271	12,34	0,943	0,088
Mittelwert	75,92	1,312	0,828	79,2	1,375	0,872
Maximalwert	90	3,17	1	90	3,676	1

Tabelle 13-2: Qualität des Rechengitters mit mittlerer Anzahl finiter Volumina für den Paddelrührer und den gasinduzierenden Rührer. Aufgeführt werden drei Qualitätskriterien des Netzgenerators ANSYS ICEM CFD. Zusätzlich zum deutschen Namen wird die englische Bezeichnung des Kriteriums angegeben.

	Paddelrührer			gasinduzierender Rührer		
	minimaler Winkel	Volumenänderung	Schiefe	minimaler Winkel	Volumenänderung	Schiefe
	<i>min angle</i>	<i>volume change</i>	<i>equiangle skewness</i>	<i>min angle</i>	<i>volume change</i>	<i>equiangle skewness</i>
Minimalwert	28,26	0,856	0,314	22,98	0,968	0,233
Mittelwert	78,49	1,165	0,862	78,66	1,202	0,869
Maximalwert	90	2,719	1	90	2,965	1

Tabelle 13-3: Qualität des feinen Rechengitters für den Paddelrührer und den gasinduzierenden Rührer. Aufgeführt werden drei Qualitätskriterien des Netzgenerators ANSYS ICEM CFD. Zusätzlich zum deutschen Namen wird die englische Bezeichnung des Kriteriums angegeben.

	Paddelrührer			gasinduzierender Rührer		
	minimaler Winkel	Volumenänderung	Schiefe	minimaler Winkel	Volumenänderung	Schiefe
	<i>min angle</i>	<i>volume change</i>	<i>equiangle skewness</i>	<i>min angle</i>	<i>volume change</i>	<i>equiangle skewness</i>
Minimalwert	35,76	0,939	0,372	22,98	0,97	0,233
Mittelwert	78,59	1,135	0,867	81,25	1,13	0,9
Maximalwert	90	2,026	1	90	2,97	1

Tabelle 13-4: Qualität des Rechengitters für den H-Rührer in einem Reaktor mit und ohne Stromstörer. Aufgeführt werden drei Qualitätskriterien des Netzgenerators ANSYS ICEM CFD. Zusätzlich zum deutschen Namen wird die englische Bezeichnung des Kriteriums angegeben.

	H-Rührer, Reaktor mit Stromstörern			H-Rührer, Reaktor ohne Stromstörer		
	minimaler Winkel	Volumenänderung	Schiefe	minimaler Winkel	Volumenänderung	Schiefe
	<i>min angle</i>	<i>volume change</i>	<i>equiangle skewness</i>	<i>min angle</i>	<i>volume change</i>	<i>equiangle skewness</i>
Minimalwert	25,36	0,953	0,282	24,75	0,957	0,275
Mittelwert	80,59	1,243	0,892	80,36	1,237	0,89
Maximalwert	90	7,682	1	90	6,816	1

Tabelle 13-5: Qualität des groben Rechengitters für den S-Rührer in einem Reaktor mit und ohne Stromstörer. Aufgeführt werden drei Qualitätskriterien des Netzgenerators ANSYS ICEM CFD. Zusätzlich zum deutschen Namen wird die englische Bezeichnung des Kriteriums angegeben.

	S-Rührer, Reaktor mit Stromstörern			S-Rührer, Reaktor ohne Stromstörer		
	minimaler Winkel	Volumenänderung	Schiefe	minimaler Winkel	Volumenänderung	Schiefe
	<i>min angle</i>	<i>volume change</i>	<i>equiangle skewness</i>	<i>min angle</i>	<i>volume change</i>	<i>equiangle skewness</i>
Minimalwert	26,33	0,96	0,293	25,29	0,94	0,281
Mittelwert	80,72	1,375	0,888	82,37	1,369	0,908
Maximalwert	90	6,111	1	90	5,884	1

Tabelle 13-6: Qualität des Rechengitters mit mittlerer Anzahl finiter Volumina für den S-Rührer in einem Reaktor mit und ohne Stromstörer. Aufgeführt werden drei Qualitätskriterien des Netzgenerators ANSYS ICEM CFD. Zusätzlich zum deutschen Namen wird die englische Bezeichnung des Kriteriums angegeben.

	S-Rührer, Reaktor mit Stromstörern			S-Rührer, Reaktor ohne Stromstörer		
	minimaler Winkel	Volumenänderung	Schiefe	minimaler Winkel	Volumenänderung	Schiefe
	<i>min angle</i>	<i>volume change</i>	<i>equiangle skewness</i>	<i>min angle</i>	<i>volume change</i>	<i>equiangle skewness</i>
Minimalwert	25,29	0,97	0,281	25,29	0,97	0,281
Mittelwert	82,7	1,29	0,915	82,65	1,294	0,915
Maximalwert	90	6,17	1	90	6,169	1

Tabelle 13-7: Qualität des feinen Rechengitters für den S-Rührer in einem Reaktor mit und ohne Stromstörer. Aufgeführt werden drei Qualitätskriterien des Netzgenerators ANSYS ICEM CFD. Zusätzlich zum deutschen Namen wird die englische Bezeichnung des Kriteriums angegeben.

	S-Rührer, Reaktor mit Stromstörern			S-Rührer, Reaktor ohne Stromstörer		
	minimaler Winkel	Volumenänderung	Schiefe	minimaler Winkel	Volumenänderung	Schiefe
	<i>min angle</i>	<i>volume change</i>	<i>equiangle skewness</i>	<i>min angle</i>	<i>volume change</i>	<i>equiangle skewness</i>
Minimalwert	26,57	0,97	0,295	26,72	0,986	0,297
Mittelwert	81,85	1,12	0,907	82,08	1,118	0,91
Maximalwert	90	7,677	1	90	6,643	1

Tabelle 13-8: Qualität der verwendeten Rechengitter für alle simulierten Rührer. Aufgeführt werden drei Qualitätskriterien des Löser ANSYS CFX-Solver. Es ist jeweils der schlechteste Wert des Netzes dargestellt. Zusätzlich zum deutschen Namen wird die englische Bezeichnung des Kriteriums angegeben.

		Orthogonalitäts- winkel <i>orthogonality angle</i>	Ausdehnungs- faktor <i>mesh expansion factor</i>	Seitenlängen- verhältnis <i>aspect ratio</i>
H-Rührer, Reaktor mit Stromstörern	feines Netz	34,6	14	87
H-Rührer, Reaktor ohne Stromstörer	feines Netz	29,5	12	67
S-Rührer, Reaktor mit Stromstörern	grobes Netz	40,2	16	16
	mittleres Netz	33,3	11	27
	feines Netz	35,2	11	14
S-Rührer, Reaktor ohne Stromstörer	grobes Netz	44	9	15
	mittleres Netz	33,3	11	27
	feines Netz	34	10	27
Paddelrührer	grobes Netz	36,8	6	25
	mittleres Netz	37,1	4	19
	feines Netz	40,5	3	41
gasinduzierender Rührer	grobes Netz	23	7	129
	mittleres Netz	21,7	4	229
	feines Netz	21,7	4	229

13.3 Verwendete Einstellungen und Modelle der Simulationen

13.3.1 Simulationen des gasinduzierenden Rührers

Tabelle 13-9: Verwendete Modelle der stationären, einphasigen Simulationen des gasinduzierenden Rührers in ANSYS CFX. Es werden bewusst die englischen Begriffe aus ANSYS CFX verwendet, um dem Leser die Implementierung im Programm zu erleichtern. Die genaue Bedeutung kann jeweils in den Handbüchern ANSYS INC. (2010a) bis (2010f) nachgelesen werden. Deutsche Bezeichnungen enthalten Anmerkungen, selbstdefinierte Größen oder solche, die sich von Simulation zu Simulation ändern können, wie z.B. die Rührerdrehzahl oder das Fluid.

		gasinduzierender Rührer stationäre, einphasige Simulation des Leistungseintrags		
Analysis Type		Steady State		
Domain Models "außen"	Domain Type	Fluid		
	Buoyancy Model	Non Buoyant		
	Domain Motion	Stationary		
	Reference Pressure	1 atm		
	Fluid Definition	Material	Wasser	
		Morphology	Continuous Fluid	
	Heat Transfer Model	Isothermal		
	Turbulence Model	SST		
Turbulent Wall Functions		Automatic		
Domain Models "innen"	Domain Motion	Rotating		
<i>(alle anderen Einstellungen wie oben)</i>		Angular Velocity	Rührerdrehzahl (<i>wechselnd</i>)	
		Rotation Axis	Coordinate Axis Z	
Boundary Conditions	Flüssigkeitsoberfläche	Mass and Momentum	Free Slip Wall	
		Frame Type	Stationary	
	Reaktorwände, Rührerachse	Mass and Momentum	No Slip Wall	
		Wall Roughness	Smooth Wall	
	Rührer	Frame Type	Stationary	
		Mass and Momentum	No Slip Wall	
		Wall Roughness	Smooth Wall	
		Frame Type	Rotating	
Domain Interface Models <i>(Schnittstelle zwischen den Netzteilen)</i>	Interface Type	Fluid Fluid		
	Interface Models	General Connection		
	Frame Change	Frozen Rotor		
	Mass and Momentum	Conservative Interface Flux		
	Turbulence	Conservative Interface Flux		
	Pitch Change	None		
Mesh Connection		GGI		
Initialisation	Frame Type	Stationary		
	Initial Conditions	Velocity	Automatic	
		Static Pressure	Automatic	
			Turbulence	Medium Intensity and Eddy Viscosity Ratio
Solver Control	Turbulence Numerics	First Order		
	Advection Scheme	High Resolution		
	Timescale Control	Physical Timescale		
	Convergence Criteria	Conservation Target	0,001	
		Residual Type	MAX	
Residual Target		0,000003		
Simulation Control	Execution Control	Executable Selection	Double Precision	

Tabelle 13-10: Verwendete Modelle der instationären, zweiphasigen Simulationen des gasinduzierenden Rührers in ANSYS CFX. Es werden bewusst die englischen Begriffe aus ANSYS CFX verwendet, um dem Leser die Implementierung im Programm zu erleichtern. Die genaue Bedeutung kann jeweils in den Handbüchern ANSYS INC. (2010a) bis (2010f) nachgelesen werden. Deutsche Bezeichnungen enthalten Anmerkungen, selbstdefinierte Größen oder solche, die sich von Simulation zu Simulation ändern können, wie z.B. die Rührerdrehzahl oder das Fluid.

		gasinduzierender Rührer instationäre, zweiphasige Simulation der Phasengrenzfläche	
Analysis Type			Transient
	Initial Time	Automatic with Value	0 s
	Time Duration	Total Time	Zeit für 150 Rührerumdrehungen (<i>wechselnd</i>)
	Time Steps	Timesteps	Zeitschritt (<i>wechselnd</i>)
Domain Models "außen"	Domain Type		Fluid
	Buoyancy Model		Buoyant
		Reference Density	Dichte der Luft
		Gravity X Component	0
		Gravity Y Component	0
		Gravity Z Component	-g
	Domain Motion		Stationary
	Reference Pressure		1 atm
	Fluid Definition	Material	Wasser / Luft
		Morphology	Continuous / Dispersed Fluid
		Mean Diameter (Dispersed Fluid)	Blasendurchmesser (<i>wechselnd</i>)
	Fluid Buoyancy Model	Wasser / Luft	Density Difference
	Heat Transfer Model		Isothermal
	Turbulence Model		SST
		Homogeneous Model	Fluid Dependent
		Buoyancy Turbulence	None
	Turbulent Wall Functions		Automatic
	Fluid Pair Wasser / Luft	Surface Tension Coefficient	Oberflächenspannung Wasser / Luft
		Interphase Transfer Model	Particle Model
		Mass Transfer	None
		Momentum Transfer	Drag Force - Schiller Naumann
		Turbulence Transfer	None
	Multiphase Models	Homogeneous Model	Off
		Free Surface Model	None
Domain Models "innen" (alle anderen Einstellungen wie oben)	Domain Motion		Rotating
		Angular Velocity	Rührerdrehzahl (<i>wechselnd</i>)
		Rotation Axis	Coordinate Axis Z
Boundary Conditions	Flüssigkeitsoberfläche	Mass and Momentum	Outlet - Degassing Condition
		Frame Type	Stationary
	Reaktorwände, Rührerachse	Mass and Momentum	No Slip Wall
		Wall Roughness	Smooth Wall
		Wall Contact Model	Use Volume Fraction
		Frame Type	Stationary
	Querschnitt der Hohlachse	Mass and Momentum	Inlet
		Normal Speed	Eintrittsgeschwindigkeit des Gases (<i>wechselnd</i>)
		Turbulence	Medium Intensity and Eddy Viscosity Ratio
		Frame Type	Stationary
		Fluid Luft Volume Fraction	1
		Fluid Wasser Volume Fraction	0
	Rührer	Mass and Momentum	No Slip Wall
		Wall Roughness	Smooth Wall
		Wall Contact Model	Use Volume Fraction
		Frame Type	Rotating

Tabelle 13-10 (Fortsetzung): Verwendete Modelle der instationären, zweiphasigen Simulationen des gasinduzierenden Rührers in ANSYS CFX. Es werden bewusst die englischen Begriffe aus ANSYS CFX verwendet, um dem Leser die Implementierung im Programm zu erleichtern. Die genaue Bedeutung kann jeweils in den Handbüchern ANSYS INC. (2010a) bis (2010f) nachgelesen werden. Deutsche Bezeichnungen enthalten Anmerkungen, selbstdefinierte Größen oder solche, die sich von Simulation zu Simulation ändern können, wie z.B. die Rührerdrehzahl oder das Fluid.

		gasinduzierender Rührer instationäre, zweiphasige Simulation der Phasengrenzfläche		
Domain Interface Models <i>(Schnittstelle zwischen den Netzteilen)</i>	Interface Type		Fluid Fluid	
	Interface Models		General Connection	
	Frame Change		Transient Rotor Stator	
	Mass and Momentum		Conservative Interface Flux	
	Turbulence		Conservative Interface Flux	
	Pitch Change		None	
	Mesh Connection		GGI	
Initialisation	Frame Type		Stationary	
	Initial Conditions Luft	Velocity Axial Component	Eintrittsgeschwindigkeit des Gases (<i>wechselnd</i>)	
		Velocity Theta Component	0	
		Velocity r Component	0	
		Axis Definition	Coordinate Axis Z	
	Initial Conditions Wasser	Volume Fraction	0	
		Velocity Axial Component	0	
		Velocity Theta Component	Rührerumfangsgeschwindigkeit Gl. (4-3)	
		Velocity r Component	0	
		Axis Definition	Coordinate Axis Z	
	Initial Conditions	Volume Fraction	1	
		Static Pressure	Automatic	
		Turbulence	Medium Intensity and Eddy Viscosity Ratio	
Solver Control	Turbulence Numerics		First Order	
	Advection Scheme		High Resolution	
	Transient Scheme		Second Order Backward Euler	
	Convergence Criteria	Conservation Target		0,001
		Residual Type		MAX
		Residual Target		0,000003
	Multiphase Control	Volume Fraction Coupling		Coupled
Velocity Pressure Coupling	Rhie Chow Option		High Resolution	
Simulation Control	Execution Control	Executable Selection	Double Precision	

13.3.2 Simulationen des Paddelrührers

Tabelle 13-11: Verwendete Modelle der Simulation des Paddelrührers in ANSYS CFX. Es werden bewusst die englischen Begriffe aus ANSYS CFX verwendet, um dem Leser die Implementierung im Programm zu erleichtern. Die genaue Bedeutung kann jeweils in den Handbüchern ANSYS INC. (2010a) bis (2010f) nachgelesen werden. Deutsche Bezeichnungen enthalten Anmerkungen, selbstdefinierte Größen oder solche, die sich von Simulation zu Simulation ändern können, wie z.B. die Rührerdrehzahl oder das Fluid.

		Paddelrührer instationäre Simulation der Phasengrenzfläche	
Analysis Type		Automatic with Value	Transient
	Initial Time	Total Time	0 s
	Time Duration	Timesteps	Zeit für 150 Rührerumdrehungen (<i>wechselnd</i>)
	Time Steps		Zeitschritt (<i>wechselnd</i>)
Domain Models	Domain Type		Fluid
	Buoyancy Model		Buoyant
		Reference Density	Dichte der Luft
		Gravity X Component	0
		Gravity Y Component	0
		Gravity Z Component	-g
	Domain Motion		Rotating
		Angular Velocity	Rührerdrehzahl (<i>wechselnd</i>)
		Rotation Axis	Coordinate Axis Z
	Reference Pressure		1 atm
	Fluid Definition	Material	Luft, Wasser
		Morphology	Continuous Fluid
	Fluid Buoyancy Model	Wasser / Luft	Density Difference
	Heat Transfer Model		Isothermal
	Turbulence Model		SST
		Homogeneous Model	On
		Buoyancy Turbulence	None
	Turbulent Wall Functions		Automatic
	Fluid Pair Wasser / Luft	Surface Tension Coefficient	Oberflächenspannung Wasser / Luft
		Interphase Transfer Model	Free Surface
		Mass Transfer	None
		Momentum Transfer	Drag Coefficient = 0,44
		Surface Tension Model	None
	Multiphase Models	Homogeneous Model	Off
		Free Surface Model	Standard
Boundary Conditions	obere Begrenzung des Netzes	Mass and Momentum	Free Slip Wall
		Wall Contact Model	Use Volume Fraction
		Frame Type	Rotating
	Reaktorwände, Rührerachse	Mass and Momentum	No Slip Wall
		Wall Velocity	Counter Rotating Wall
		Wall Roughness	Smooth Wall
		Wall Contact Model	Use Volume Fraction
		Frame Type	Rotating
	Rührer	Mass and Momentum	No Slip Wall
		Wall Roughness	Smooth Wall
		Wall Contact Model	Use Volume Fraction
		Frame Type	Rotating

Tabelle 13-11 (Fortsetzung): Verwendete Modelle der Simulation des Paddelrührers in ANSYS CFX. Es werden bewusst die englischen Begriffe aus ANSYS CFX verwendet, um dem Leser die Implementierung im Programm zu erleichtern. Die genaue Bedeutung kann jeweils in den Handbüchern ANSYS INC. (2010a) bis (2010f) nachgelesen werden. Deutsche Bezeichnungen enthalten Anmerkungen, selbstdefinierte Größen oder solche, die sich von Simulation zu Simulation ändern können, wie z.B. die Rührerdrehzahl oder das Fluid.

			Paddelrührer instationäre Simulation der Phasengrenzfläche
Initialisation	Frame Type		Stationary
	Initial Conditions Luft	Velocity Axial Component	0
		Velocity Theta Component	0
		Velocity r Component	0
		Axis Definition	Coordinate Axis Z
	Volume Fraction	über Gleichung (4-2)	
Initialisation	Initial Conditions Wasser	Velocity Axial Component	0
		Velocity Theta Component	Rührerumfangsgeschwindigkeit Gleichung (4-3)
		Velocity r Component	0
		Axis Definition	Coordinate Axis Z
		Volume Fraction	über Gleichung (4-2)
	Initial Conditions	Relative Pressure	Automatic
		Turbulence	Medium Intensity and Eddy Viscosity Ratio
Solver Control	Turbulence Numerics		First Order
	Advection Scheme		High Resolution
	Transient Scheme		Second Order Backward Euler
	Convergence Criteria	Conservation Target	0,0001
		Residual Type	MAX
		Residual Target	0,000001
	Multiphase Control	Volume Fraction Coupling	Coupled
Velocity Pressure Coupling	Rhie Chow Option	High Resolution	
Simulation Control	Execution Control	Executable Selection	Double Precision

13.3.3 Simulationen des H- und S-Rührers

Tabelle 13-12: Verwendete Modelle der stationären Simulationen des H- und S-Rührers in ANSYS CFX. Es werden bewusst die englischen Begriffe aus ANSYS CFX verwendet, um dem Leser die Implementierung im Programm zu erleichtern. Die genaue Bedeutung kann jeweils in den Handbüchern ANSYS INC. (2010a) bis (2010f) nachgelesen werden. Deutsche Bezeichnungen enthalten Anmerkungen, selbstdefinierte Größen oder solche, die sich von Simulation zu Simulation ändern können, wie z.B. die Rührerdrehzahl oder das Fluid.

Analysis Type		H- und S-Rührer stationäre Simulation des Geschwindigkeitsfelds		
		Steady State		
Domain Models "außen"	Domain Type	Fluid		
	Buoyancy Model	Non Buoyant		
	Domain Motion	Stationary		
	Reference Pressure	1 atm		
	Fluid Definition	Material	Glycerin 14 mPa s, Glycerin 34 mPa s, Glycerin 91 mPa s, Xanthan 0,5 % w/w (<i>wechselnd</i>)	
		Morphology	Continuous Fluid	
	Heat Transfer Model	Isothermal		
	Turbulence Model	SST / laminar (je nach Re)		
	Turbulent Wall Functions	Automatic		
	Domain Models "innen" <i>(alle anderen Einstellungen wie oben)</i>	Domain Motion	Rotating	
	Angular Velocity	Rührerdrehzahl (<i>wechselnd</i>)		
	Rotation Axis	Coordinate Axis Z		
Boundary Conditions	Flüssigkeitsoberfläche	Mass and Momentum	Free Slip Wall	
		Frame Type	Stationary	
	Reaktorwände, Rührerachse	Mass and Momentum	No Slip Wall	
		Wall Roughness	Smooth Wall	
	Rührer	Frame Type	Stationary	
		Mass and Momentum	No Slip Wall	
	Wall Roughness	Smooth Wall		
	Frame Type	Rotating		
Domain Interface Models <i>(Schnittstelle zwischen den Netzteilen)</i>	Interface Type	Fluid Fluid		
	Interface Models	Frame Change	General Connection	
		Mass and Momentum	Frozen Rotor	
		Turbulence	Conservative Interface Flux	
		Pitch Change	Conservative Interface Flux	
	Mesh Connection	None		
		GGI		
Initialisation	Frame Type	Stationary		
	Initial Conditions	Velocity	Automatic	
		Static Pressure	Automatic	
		Turbulence	Medium Intensity and Eddy Viscosity Ratio	
Solver Control	Turbulence Numerics	First Order		
	Advection Scheme	High Resolution		
	Timescale Control	Physical Timescale		
	Convergence Criteria	Conservation Target	0,001	
		Residual Type	MAX	
		Residual Target	0,00001	
Simulation Control	Execution Control	Executable Selection	Double Precision	

Tabelle 13-13: Verwendete Modelle der instationären Simulationen des H- und S-Rührers in ANSYS CFX.
 Es werden bewusst die englischen Begriffe aus ANSYS CFX verwendet, um dem Leser die Implementierung im Programm zu erleichtern. Die genaue Bedeutung kann jeweils in den Handbüchern ANSYS INC. (2010a) bis (2010f) nachgelesen werden. Deutsche Bezeichnungen enthalten Anmerkungen, selbstdefinierte Größen oder solche, die sich von Simulation zu Simulation ändern können, wie z.B. die Rührerdrehzahl oder das Fluid.

H- und S-Rührer instationäre Simulation der Verteilung der Markierungssubstanz			
Analysis Type			Transient
	Initial Time	Automatic with Value	0 s
	Time Duration	Total Time	100 s
	Time Steps	Timesteps	Zeitschritt (<i>wechselnd</i>)
Additional Variable "Tracer"	Tensor Type		Scalar
	Units		kg kg ⁻¹
	Variable Type		Specific
Domain Models "außen"	Domain Type		Fluid
	Buoyancy Model		Non Buoyant
	Domain Motion		Stationary
	Reference Pressure		1 atm
	Fluid Definition	Material	Glycerin 14 mPa s, Glycerin 34 mPa s, Glycerin 91 mPa s, Xanthan 0,5 % w/w (<i>wechselnd</i>)
	Additional Variable	Morphology Kinematic Diffusivity Option	Continuous Fluid 10 ⁻⁹ m ² s ⁻¹ Transport Equation
	Heat Transfer Model		Isothermal
	Turbulence Model		SST / laminar (je nach <i>Re</i>)
	Turbulent Wall Functions		Automatic
Source Point	Equation Source		Additional Variable "Tracer"
	Option	Total Source	Gleichung (4-1)
Domain Models "innen" (<i>alle anderen Einstellungen wie oben</i>)	Domain Motion	Angular Velocity Rotation Axis	Rotating Rührerdrehzahl (<i>wechselnd</i>) Coordinate Axis Z
Boundary Conditions	Flüssigkeitsoberfläche	Mass and Momentum Frame Type Additional Variable	Free Slip Wall Stationary Zero Flux
	Reaktorwände, Rührerachse	Mass and Momentum Wall Roughness Frame Type Additional Variable	No Slip Wall Smooth Wall Stationary Zero Flux
	Rührer	Mass and Momentum Wall Roughness Frame Type Additional Variable	No Slip Wall Smooth Wall Rotating Zero Flux
Domain Interface Models (<i>Schnittstelle zwischen den Netzteilen</i>)	Interface Type Interface Models	Frame Change Mass and Momentum Turbulence Additional Variable Pitch Change	Fluid Fluid General Connection Transient Rotor Stator Conservative Interface Flux Conservative Interface Flux Conservative Interface Flux
	Mesh Connection		None GGI

Tabelle 13-13 (Fortsetzung): Verwendete Modelle der instationären Simulationen des H- und S-Rührers in ANSYS CFX. Es werden bewusst die englischen Begriffe aus ANSYS CFX verwendet, um dem Leser die Implementierung im Programm zu erleichtern. Die genaue Bedeutung kann jeweils in den Handbüchern ANSYS INC. (2010a) bis (2010f) nachgelesen werden. Deutsche Bezeichnungen enthalten Anmerkungen, selbstdefinierte Größen oder solche, die sich von Simulation zu Simulation ändern können, wie z.B. die Rührerdrehzahl oder das Fluid.

		H- und S-Rührer instationäre Simulation der Verteilung der Markierungssubstanz	
Initialisation		<i>Ergebnisdatei der stationären Rechnung wird als Anfangswerte vorgegeben</i>	
Solver Control	Turbulence Numerics	First Order	
	Advection Scheme	High Resolution	
	Transient Scheme	Second Order Backward Euler	
	Convergence Criteria	Conservation Target	0,001
		Residual Type	MAX
		Residual Target	0,00001
Expert Parameters	solve energy	false	
	solve fluids	false	
	solve turbulence	false	
	solve volfrc	false	
	solve wallscale	false	
Simulation Control	Execution Control	Executable Selection	Double Precision