







### 2.3 Gittertypen

Nach erfolgter Geometriaufnahme erfolgt die räumliche Diskretisierung durch Erstellung eines Berechnungsgitters. Heutige CFD-Solver sind in der Lage eine Vielzahl von Elementtypen zu verarbeiten. Dies sind im Einzelnen Hexaeder, Tetraeder, Prismen, Pyramiden und seit neuestem Polyeder. Hexaedergitter haben den Vorteil hoher numerischen Genauigkeit bei geringerer Zahl der Kontrollvolumina. Das gilt insbesondere dann, wenn strukturierte Hexaedergitter verwendet werden. Dem steht ein hoher Vernetzungsaufwand gegenüber, der eine Berechnung wesentlich verteuern kann. Im Gegensatz dazu lassen sich mit Tetraedern mit wenig Mannzeit komplexe Geometrien vernetzen. Die so erhaltenen Gitter sind immer unstrukturiert. Der Preis ist hierfür eine große Zellanzahl sowie eine verminderte numerische Genauigkeit speziell in Grenzschichten. Deshalb ist es wirtschaftlich sinnvoll, strukturierte und unstrukturierte Gitterbereiche zu kombinieren. Prismen- und Pyramidenelemente kommen in den Übergangsbereichen zum Einsatz. Die Verwendung von Polyedern auf Basis von Tetraedernetzen ist in den neuesten Versionen der CFD-Solver möglich. Diese „moderne“ Form der Diskretisierung vereint die Vorteile von Hexaedern und Tetraedern, führt aber zu deutlich erhöhtem Speicherplatzbedarf und ist deshalb nicht immer einsetzbar. Ähnlich wie bei der Geometriaufbereitung ist hier die Anwendererfahrung für den weiteren Erfolg eines Berechnungsprojektes entscheidend (s. Abbildungen 3 und 4).

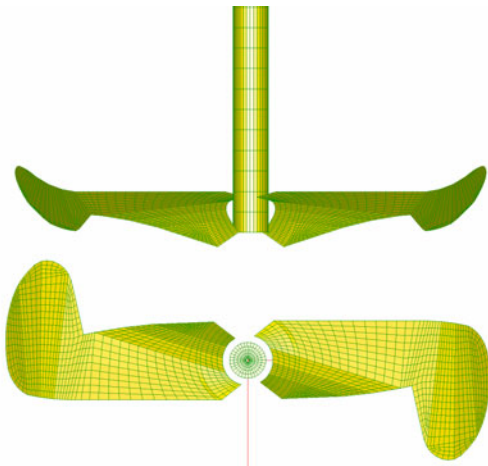


Abbildung 3:  
Strukturierte Oberflächenvernetzung am Beispiel des EKATO ISOJET

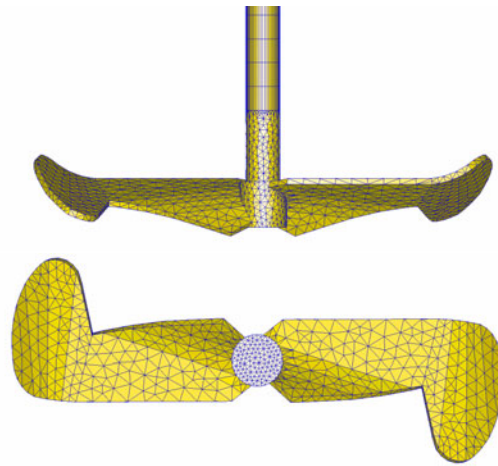


Abbildung 4:  
Unstrukturierte Oberflächenvernetzung am Beispiel des EKATO ISOJET

Sollten Vorgänge in der Grenzschicht einen wesentlichen Einfluss auf das Geschehen im Rührbehälter ausüben, so ist bei der Modellierung besondere Sorgfalt und Erfahrung nötig. Richtige Vernetzung vorausgesetzt, lassen sich heute Schubspannungen und Wärmeübergänge sehr genau berechnen.

### 2.4 Numerische Methoden

Ähnlich wie bei der Geometriaufbereitung und bei der Vernetzung stehen bei der numerischen Behandlung von rotierenden Bauteilen verschiedene Methoden zur Verfügung, die sich hinsichtlich Genauigkeit und Rechenzeitbedarf stark unterscheiden. Bei den meisten Berechnungen von Rührapparaten sind rotierende und stationäre Bauteile gleichermaßen von Einfluss. Das Volumengitter wird in diesen Fällen in einen oder mehrere rotierende Bereiche und einen stillstehenden Bereich unterteilt. Jedem dieser Bereiche ist für die Berechnung ein ei-

genes Koordinatensystem zugeordnet. An den Übergangflächen finden Transformationen und Interpolationen vom bewegten ins nicht-bewegte System statt, die zu Genauigkeitsverlusten führen. Die Lage dieser Übergangflächen muss daher vom Anwender sinnvoll gewählt werden und sollte nicht in Gebiete mit großen Gradienten fallen. Solche Berechnungen werden als sogenannte „Multiple Frame of References“ (MFR) Simulationen bezeichnet. Hierbei sind alle Freiheitsgrade möglich, von gegeneinander drehenden Rührorganen über unterschiedliche Drehzahlen bis hin zu beliebigen Drehachsen von beliebig vielen Rührern. Bei MFR-Simulationen sind verschiedene Modellierungstiefen möglich, die von Brucato et al. verglichen werden [ 11]:

Bei der sogenannten „Frozen-Rotor“ Betrachtung wird nur eine Stellung des Rotors zum Stator betrachtet. Dies ist zulässig, wenn die gegenseitige Beeinflussung der Bereiche gering ist. Der Vorteil dieser Vereinfachung liegt in der stark reduzierten Rechenzeit, da eine stationäre Simulation möglich ist, Rotor-Stator-Wechselwirkungen werden jedoch nicht korrekt erfasst. Dieser Ansatz wird wegen seiner großen Effizienz häufig für erste Tests, aber auch durchgehend bei industriellen Anwendungen genutzt.

Die sogenannte „Stage“-Methode unterscheidet sich von der Frozen-Rotor Betrachtung durch eine spezielle Transformation an den Übergangflächen, die eine Umfangsmittelung beinhaltet. In manchen Fällen wird hiermit die Rotor-Stator Interaktion besser erfasst.

Der Königsweg ist jedoch nach wie vor die „Sliding-Mesh“ Modellierung. Dafür ist stets eine instationäre Berechnung notwendig. Es drehen sich hierbei die rotierenden Teile im Gitter, bei geeigneter Wahl der Zeitschrittweite und genügender Konvergenz wird die Rotor-Stator Interaktion vollständig und korrekt beschrieben. Der Nachteil dieser Methode besteht in der stark erhöhten Rechenzeit, die ein Vielfaches einer entsprechenden Frozen-Rotor Simulation betragen kann. Rechenzeiten von mehreren Tagen bis zu Wochen sind hierbei die Regel. Der Aufwand für das Post-Processing einer solchen Simulation erhöht sich gegenüber den stationären Verfahren signifikant. Insbesondere im akademischen Bereich wird dieses Verfahren aber inzwischen standardmäßig verwendet [ 21], [ 37], [ 53].

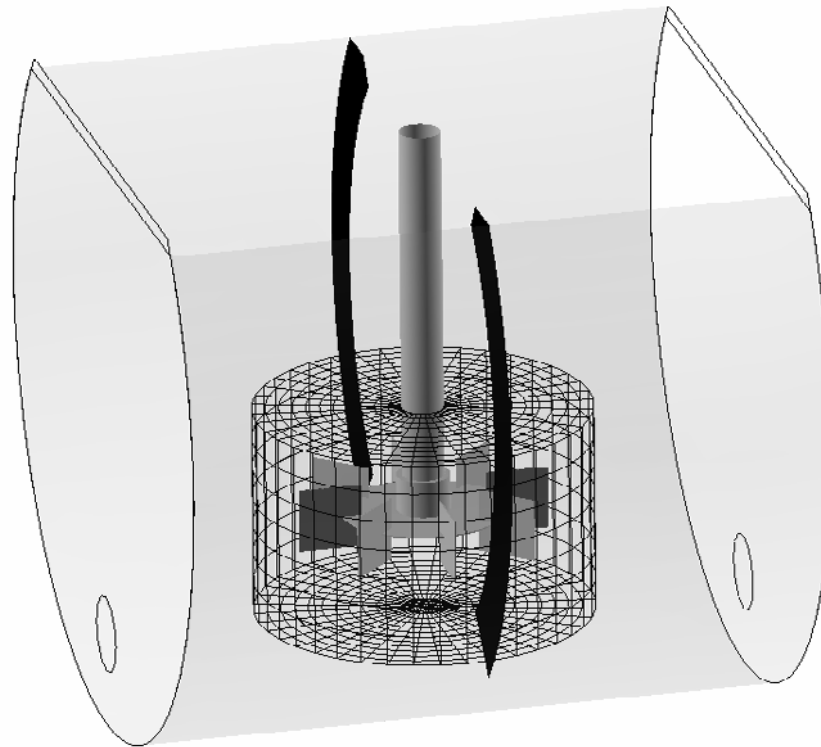


Abbildung 5:  
Sliding Mesh Technik am Beispiel eines Autoklaven-Kompartments  
hellgrau Behälter (stationärer Bereich)  
schwarz Stromstörer  
grau Scheibenrührer (rotierender Bereich)  
Gitter Sliding-Mesh Übergang

### 3 Turbulenz

#### 3.1 Eigenschaften turbulenter Strömungen

Die Strömung in Rührkesseln kann laminarer oder turbulenter Natur sein. Laminare Zustände liegen bei langsam drehenden Rührorganen und hochviskosen Medien vor und bedürfen keiner gesonderten numerischen Behandlung, da sie durch die Navier-Stokes-Gleichungen direkt zu beschreiben sind. Der Großteil der in der Industrie verwendeten Apparate wird jedoch im turbulenten Bereich betrieben. Turbulenz wird durch hohen Leistungseintrag induziert, entstehende große Wirbel werden kaskadiert und zerfallen dabei in immer kleinere Einheiten. Dieser Vorgang ist stochastisch. Die Energie der kleinsten dabei auftretenden Wirbel wird letztendlich in Wärme dissipiert und die Wirbel verschwinden. Die räumlichen und zeitlichen Skalen dieses Vorganges sind extrem klein. Beobachtet man die Strömung an einem diskreten Ort, so stellt man fest, dass die Strömungsgrößen (Druck und Geschwindigkeit) zeitlich um einen Mittelwert schwanken. In der Numerik ist man mit dem Problem konfrontiert, dass extrem feine Berechnungsgitter und kleine Zeitschrittweiten notwendig sind, um diese Strömungscharakteristik zu diskretisieren. Man bezeichnet diese Vorgehensweise als „Direct Numerical Simulation“ (DNS). Die erforderliche Stützstellenzahl kann gemäß  $N=5^3 Re^{9/4}$  abgeschätzt werden. Dies ist für Rührkessel bis heute auch auf den leistungsfähigsten Rechnern kaum möglich. Andererseits übt die oben beschriebene Energiekaskade einen nicht zu ver-

nachlässigenden Einfluss auf das mittlere Strömungsfeld aus. Ob dieser Einfluss pauschal abgeschätzt werden kann oder ob Wirbelstrukturen bis zu einer vorgegebenen Größe simuliert werden müssen, hängt von der konkreten Fragestellung ab. Dabei ist vor allem von Bedeutung, welche Rolle Mischeffekte und Schereinflüsse auf den verschiedenen Skalen für den Prozess spielen.

### 3.2 Turbulenzmodellierung

Da es in industriellen CFD-Anwendungen nicht möglich ist, Turbulenzstrukturen vollständig zu diskretisieren, muss deren Einfluss auf die Hauptströmung modelliert werden. Die Entwicklung von Turbulenzmodellen ist seit mehreren Jahrzehnten ein Forschungsschwerpunkt der numerischen Strömungsmechanik. Dementsprechend sind viele Modelle heute in kommerziellen CFD Programmen verfügbar. Es gibt jedoch nicht das „beste“ Turbulenzmodell. Es hängt vielmehr von der Problemstellung ab, ob ein Turbulenzmodell zu brauchbaren Ergebnissen führt. Generell gibt es zwei Möglichkeiten der Modellierung:

#### *Räumliche Mittelung*

Die zugrundeliegenden Navier-Stokes-Gleichungen werden räumlich gemittelt. Die größeren Wirbel der Turbulenzstrukturen müssen hierbei mit dem Gitter aufgelöst werden. Die Auswirkung der kleineren Wirbel auf die Strömung wird modelliert. Auf Grund dieses Umstandes wird die räumliche Mittelung als Large Eddy Simulation (LES) bezeichnet. Da die großen Wirbel instationär sind, muss auch eine Modellierung dieser Art stets instationär sein. Hierfür ist es notwendig, hinreichend kleine Zeitschritte zu verwenden, die die zeitlichen Fluktuationen dieser Wirbel auflösen. Analog gilt das für die Gitterfeinheit. Dabei besteht eine Kopplung zwischen den Zeitskalen und der räumlichen Auflösung. Je feiner das Gitter und je geringer damit der Grad räumlicher Modellierung ist, desto kleiner müssen auch die Zeitschritte gewählt werden. Die Modellierung führt nur dann zu sinnvollen Ergebnissen, wenn ein signifikanter Größenbereich der Wirbel direkt beschrieben wird. Insbesondere sollten dazu die anisotropen Strukturen gehören. Dadurch ist insgesamt ein relativ hoher Rechenaufwand notwendig, der stark mit dem Turbulenzgrad anwächst.

LES wurde für Rührapparate bisher vor allem im akademischen Bereich angewendet. Eine Reihe von Simulationen wurden z.B. von Derksen [ 17], [ 18] für ein- und zweiphasige Systeme durchgeführt. Er benutzt dafür die Lattice-Boltzmann-Methode (LBM), die bei feinen Gittern im Vergleich zu klassischen Finite-Volumen- oder Finite-Elemente-Verfahren deutlich effektiver arbeitet. Auch mit diesen Methoden wurden aber LES durchgeführt. Bakker und Oshinowo untersuchten nichtperiodische Strukturen, was die bessere räumliche Auflösung nötig macht [ 4]. Ertem-Müller analysierte vor allem numerische Methoden, mit deren Hilfe der Aufwand von LES auf ein praktikables Maß gebracht werden kann [ 19]. Die LES ist jedoch einer kommerziellen Nutzung noch kaum zugänglich. Daher hat sie sich für Rührapparate bisher kaum in der außerakademischen Anwendung durchgesetzt. Mit den im nächsten Abschnitt beschriebenen Methoden lassen sich für viele Anwendungen mit wesentlich weniger Aufwand Ergebnisse mit hinreichender Genauigkeit erzielen.

#### *Zeitliche Mittelung*

Hierbei werden die Navier-Stokes-Gleichungen zeitlich gemittelt, man erhält die sogenannten Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (RANS). Anstelle der örtlichen Geschwindigkeitskomponenten stehen als Unbekannte die mittleren Geschwindigkeitsgrößen und zusätzlich die Komponenten des Reynolds-Spannungstensors im Gleichungssystem. Die Unbekannten des Gleichungssystems müssen also mit dem Turbulenzmodell geschlossen werden.

Für diese zusätzlichen Unbekannten gibt es zunächst keine Gleichungen. Hierfür stehen im wesentlichen zwei Modellierungsansätze zur Verfügung:

1. Für die Reynolds-Spannungen werden sechs zusätzliche Transportgleichungen eingeführt. Diese Art der Turbulenzmodellierung wird je nach Formulierung „Reynolds-stress“ bzw. „Reynolds-flux“ genannt. Durch die große Anzahl der zu lösenden Gleichungen vervielfachen sich die Anforderungen an die Hardware-Ressourcen. Daneben steigen die Anforderungen an die Gitterqualität. Der Vorteil dieser Klasse von Turbulenzmodellen besteht darin, dass auch anisotrope Turbulenz korrekt modelliert wird. Da diese Form von Turbulenz in Rührwerken nur eine untergeordnete Rolle spielt, kommt dieser Ansatz in der Regel nur in akademischen Rührwerksberechnungen zum Einsatz (z.B. [30]??? Problem automat. Verweis).
2. Die sogenannten „Wirbelviskositätsmodelle“ berücksichtigen den Einfluss der Turbulenz durch eine Erhöhung der Viskosität in Zonen mit hohem Turbulenzgrad. Hier steht eine Vielzahl verschiedener Ansätze zur Verfügung. Am weitesten verbreitet sind heutzutage die Zwei-Gleichungsmodelle, die für die turbulente kinetische Energie und die Dissipation der Turbulenz zusätzliche Transportgleichungen einführen. Diese Modelle bieten bei vertretbarem zusätzlichem numerischem Aufwand eine gute Beschreibung des mittleren Geschwindigkeitsfeldes und sind unempfindlich gegen schlechte Qualität der Gitterzellen. Im Gegensatz zu den Reynolds-Spannungsmodellen können mit Wirbelviskositätsansätzen jedoch nur isotrope Turbulenzstrukturen korrekt beschrieben werden. In Rührwerksanwendungen wird im industriellen Einsatz meist mit dem  $k-\epsilon$  bzw. dem  $k-\omega$  Modell gearbeitet. Aber auch im akademischen Bereich werden diese Formulierungen weiterhin verwendet [3], [51]. Die Grenzen der Einsatzfähigkeit des Ansatzes wurden von Bartels et al. durch Vergleich mit DNS [7] und von Yeoh et al. durch Vergleich mit LES [53] aufgezeigt.

In der Nähe von festen Wänden (an Rührorganen oder Behälterwänden) bildet sich eine laminare Unterschicht aus, die mit zunehmendem Wandabstand turbulenten Charakter gewinnt. Von der Dicke der Untergrenzschicht hängen die Schubspannungen an der Wand und damit die in das Fluid eingetragenen Kräfte ab. Die Unterschicht kann mit sehr feinen Gittern direkt aufgelöst werden. Dies führt jedoch bei komplexen Rührwerksmodellierungen zu sehr großen Modellen (Verfeinerungen in der Nähe von Wänden, Stromstörern, Rührorganen), deren Gittergenerierung und Berechnung viel Zeit beansprucht. Daher wird in der Regel auf die Modellierung der Grenzschicht mit sogenannten Wandfunktionen zurückgegriffen. Dabei wird der Verlauf des Geschwindigkeitsgradienten an der Wand nicht mit dem Gitter aufgelöst, sondern durch empirisch ermittelte Funktionen approximiert.

### 3.3 Mikromischung

Viele Rührapparate werden als Reaktoren eingesetzt. Handelt es sich bei den chemischen Umsetzungen um Prozesse, die schneller sind als die Mischvorgänge auf molekularer Ebene, bestimmen diese die effektive Reaktionsgeschwindigkeit. Man spricht von Mischungsmaskierten Reaktionen. Da sowohl LES als auch RANS-Simulationen eine Mittelung vornehmen und daher diese Maskierung nicht auflösen können, werden Mikromischungsmodelle verwendet, wenn eine genaue Bestimmung der Reaktionsgeschwindigkeit erforderlich ist. Am weitesten verbreitet sind das Engulfment-Modell von Baldyga und Bourne [6] und das Wahrscheinlichkeitsdichtemodell (Probability Density Function – PDF) [5], [34].

Das Engulfment-Modell geht davon aus, dass ein zugegebenes kleines Fluidelement, dessen Zusammensetzung sich von der seiner Umgebung unterscheidet, zunehmend Umgebungsfluid in sich aufnimmt, dadurch größer wird und seine Zusammensetzung ändert. Die Volumen-



zunahme wird durch Längsstreckung ausgeglichen, so dass der Durchmesser der Kolmogorov-Skala entspricht und ein diffusiver Konzentrationsausgleich innerhalb des Elements erfolgt.

Beim PDF-Modell wird die Wahrscheinlichkeit des Auftretens der möglichen Mischzustände durch eine Funktion wiedergegeben, deren Transport im Rahmen der Simulation beschrieben wird. Dafür wird die Funktion entweder in wenige Modi diskretisiert oder durch einen Ansatz beschrieben, dessen Parameter orts- und zeitabhängig bestimmt werden. Eine besonders hohe Genauigkeit kann durch Momentenmethoden erreicht werden, wie sie kürzlich von Gavi et al. [ 22] auf PDF-Ansätze angewandt wurden. Allerdings erhöht die Verwendung von Mikromischungsansätzen den numerischen Aufwand der Simulationen deutlich und um so mehr, je detailliertere Ansätze verwendet werden. Während einfache PDF-Ansätze auch in kommerziellen CFD-Codes verfügbar sind, werden komplexere Verfahren eher akademisch verwendet.

Ein Beispiel für Anwendungen, bei denen ohne Mikromischungsmodelle keine befriedigenden Ergebnisse erzielt werden können, ist die Simulation von Partikelgrößenverteilungen in Fällungsreaktoren. Die stark konzentrationsabhängigen Partikelbildungs- und Partikelwachstumsgeschwindigkeiten können nur durch Berücksichtigung lokaler Mikromischungseinflüsse bestimmt werden. Validierte Anwendungen dazu sind in [ 23],[ 33], [ 52] zu finden.

## 4 Simulation von Substanzen unterschiedlichen Viskositätsverhaltens

### 4.1 Vorbemerkungen

Durch Rührer wird in erster Linie transportiert, was letztlich bedeutet, dass die Kenntnis des Strömungsprofils oder besser dessen gezielte Beeinflussung bzw. Erzeugung eine Hauptaufgabe ist. Die Auslegung von Rührmaschinen erfordert eine Reihe von Angaben. Insbesondere die durchzuführenden Rühraufgaben bestimmen die Rührerart sowie deren Einbau- und Betriebsbedingungen. Wesentlichen Einfluss haben aber auch die Stoffwerte, wie Dichte und Viskosität, wobei letztere die meisten Prozesse und Parameter beeinflusst.

Die Problematik besteht darin, dass diese Größe schwer zu erfassen ist. Bei Newtonschen Stoffen ist sie, außer vom Stoff selbst, nur von Druck und Temperatur abhängig. Wesentlich komplizierter sind die Verhältnisse bei Stoffgemischen. Da die Viskosität als innerer Widerstand, den das Fluid der Verformung entgegen setzt, definiert ist, d.h. eine Funktion der Wechselwirkungskräfte zwischen den Molekülen und Teilchen ist, wird sie durch die zweite Phase beeinflusst. Es gibt bis heute kaum vernünftige Korrelationen, die diesen Sachverhalt richtig beschreiben.

Zusätzlich erschwert wird diese Problematik durch turbulente Strömungen. Bekanntermaßen produziert die Turbulenz Effekte, die wie eine erhöhte Viskosität wirken. Durch das Wirbelviskositätsprinzip und der hieraus folgenden Nutzung von Turbulenzmodellen wird diesem Fakt Rechnung getragen.

Diese Sachverhalte gelten zunächst nur für Newtonsche Fluide. Bei den nicht-Newtonschen Fluiden erhöht sich die Zahl der Einflussgrößen auf die Viskosität noch. Dies sind die Beanspruchungsgradienten (Reformationsgradienten) und / oder die Zeit. Es seien zunächst in diesem Beitrag nur reine Stoffe und laminare Strömungsverhältnisse betrachtet. Hier gilt:

$$\eta = f \left( \underset{\text{Newton}}{\rho}, T, \underset{\text{nicht-Newton}}{\dot{\gamma}} t \right) \quad \left. \begin{array}{l} \dot{\gamma}: \text{ Schergradient, Scherrate,} \\ \text{Schubspannungsgeschwindigkeit} \\ t: \text{ Zeit} \end{array} \right\} \quad (1)$$

Zur praktischen Behandlung sind demnach Modelle - die Fließgesetze oder rheologische Zustandsgleichungen - notwendig, die den Einfluss der Beanspruchungsgradienten auf die Viskosität beschreiben.

Welche Rolle spielt die CFD? Eine große, denn zur Bestimmung des Deformationsgradienten  $\Delta$  werden die Geschwindigkeitsgradienten benötigt, die aus gemessenen oder berechneten Geschwindigkeitswerten ermittelt werden. Um diese Problematik sinnvoll bearbeiten zu können, ist die CFD eine Voraussetzung.

## 4.2 Theoretischer Hintergrund

Bei der Herleitung der Bewegungsgleichungen [ 40], [ 41] entstehen zunächst Gleichungen, in denen als Variable noch Spannungen auftreten.

$$\frac{\partial(\rho w_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho w_j w_i)}{\partial x_j} = - \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{i,j}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (2)$$

Änderungsrate
Transport durch Konvektion
Änderung durch Druckgradienten
Transport durch Reibung
Änderung durch Feldkräfte

Um diese Gleichung zur Berechnung der Geschwindigkeitsverteilung nutzen zu können, müssen die viskosen Spannungen noch durch deren Abhängigkeiten von Geschwindigkeitsgradienten und Stoffwerten ersetzt werden. Für Newtonsche Fluide sind dies die bekannten Ausdrücke für die Normal- und Tangentialspannungen. Als Ergebnis erhält man die Bewegungsgleichungen in der bekannten Form.

$$\frac{\partial(\rho w_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho w_j w_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial p}{\partial x_i} + k_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \eta \frac{\partial w_i}{\partial x_j} \right) \quad (3)$$

Änderungsrate
Transport durch Konvektion
Transport durch andere Kräfte
Transport durch Diffusion

Es stellt sich die Frage nach den Änderungen bei nicht-Newtonschen Fluiden. Die Gleichung (2) ist auch für nicht-Newtonsche Fluide gültig, es muss nur die Abhängigkeit der Viskosität von den auftretenden Geschwindigkeitsgradienten bzw. von den Spannungen (Normal- und Tangentialspannungen) berücksichtigt werden. Für Newtonsche Fluide gilt [ 2]:

$$\tau = -\eta \Delta \quad \text{mit dem symmetrischen Deformationstensor } \Delta \quad (4)$$

$$\Delta_{ij} = \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \left( \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$$

wobei die Viskosität  $\eta$  ein Stoffwert und damit nur vom Druck und von der Temperatur abhängig ist. Bei nicht-Newtonschen Fluiden ist die Viskosität noch zusätzlich abhängig von den Geschwindigkeitsgradienten (Deformationsgeschwindigkeiten, Deformationsraten, Deformationstensor), d.h. von  $\Delta$ . Die ebenfalls mögliche Abhängigkeit von der Zeit des Einwirkens von Deformationsgeschwindigkeiten soll unberücksichtigt bleiben. Formal kann für nicht-Newtonsche Fluide geschrieben werden:

$$\boldsymbol{\tau} = -\eta_{\text{nNF}} \boldsymbol{\Delta}. \quad (5)$$

Bei  $\eta_{\text{nNF}} = \eta_{\text{nNF}}(\boldsymbol{\Delta})$  handelt es sich um die so genannte „nicht-Newtonsche“ Viskosität, die eine Funktion der Geschwindigkeitsgradienten, d.h. eine skalare und vom Ort abhängige Größe ist. Sie ist kein Stoffwert mehr und exakterweise eine Funktion der drei Invarianten:

$$\begin{aligned} I_1 &= (\boldsymbol{\Delta} : \boldsymbol{\delta}) = \sum_i \Delta_{ii} = 2(\nabla \cdot \mathbf{w}) = 0 \text{ für inkompressible Fluide} \\ I_2 &= (\boldsymbol{\Delta} : \boldsymbol{\Delta}) = \sum_i \sum_j \Delta_{ij} \Delta_{ji} \\ I_3 &= \det \boldsymbol{\Delta} = \sum_i \sum_j \sum_k \epsilon_{i,j,k} \Delta_{ii} \Delta_{jj} \Delta_{kk}, \end{aligned}$$

wobei die erste für inkompressible Fluide Null ist und die dritte wegen ihres sehr geringen Einflusses in der Regel vernachlässigt werden kann [ 9]. Somit hängt die nicht-Newtonsche Viskosität nur von der zweiten Invarianten ab.

$$\begin{aligned} I_2 = (\boldsymbol{\Delta} : \boldsymbol{\Delta}) = \sum_i \sum_j \Delta_{ij} \Delta_{ji} &= \left[ \left( \frac{\partial w_x}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial w_y}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial w_z}{\partial z} \right)^2 + \right. \\ &\quad \left. + \left[ \frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial w_x}{\partial y} \right]^2 + \left[ \frac{\partial w_z}{\partial y} + \frac{\partial w_y}{\partial z} \right]^2 + \left[ \frac{\partial w_x}{\partial z} + \frac{\partial w_z}{\partial x} \right]^2 \right] \quad (6) \\ &\quad \text{Normalspannungen} \qquad \qquad \qquad \text{Tangentialspannungen} \end{aligned}$$

Die zweite Variante enthält damit alle möglichen Geschwindigkeitsgradienten. In die Bewegungsgleichungen muss dann eine effektive Viskosität  $\eta_{\text{eff}} = \eta_{\text{nNF}} = f(I_2)$ , berechnet aus den Geschwindigkeitsgradienten, eingesetzt werden. Die Problematik besteht nun darin, dass es hierfür keine allgemeingültigen Beziehungen gibt. Es müssen für die einzelnen Stoffklassen individuelle Modelle (Fließgesetze, rheologische Zustandsgleichungen) gefunden werden. Am meisten untersucht sind pseudoplastische (strukturviskose, beanspruchungsverdünnende) Fluide. Als Beispiel sei das in der Literatur am häufigsten verwendete Fließgesetz von Ostwald de Waele genannt:

$$\boldsymbol{\tau} = -k \left| \frac{1}{2} \boldsymbol{\Delta} : \boldsymbol{\Delta} \right|^{\frac{n-1}{2}} \boldsymbol{\Delta} = -k \cdot \bar{\gamma}_{k,j}^{n-1} \cdot \bar{\gamma}_{k,j} \quad \left. \begin{array}{l} k \left[ \text{Pas}^n \right] : \text{Konsistenzparameter} \\ n : \text{Fließindex} \\ \left[ \frac{1}{\text{s}} \right] : \text{lokale mittlere Deformationsrate} \end{array} \right. \quad (7)$$

d.h. es ist  $\eta_{\text{nNF}} = k \cdot \bar{\gamma}^{n-1}$

k steht für die Viskosität und n für die Abweichung vom Newtonschen Verhalten. Der Nachteil in der Anwendung dieses Fließgesetzes besteht darin, dass die Differenz zwischen der Null-Scherviskosität ( $\eta_0$ ) und der Grenzviskosität ( $\eta_\infty$ ), die bei hoher Beanspruchung auftritt, nicht zu groß sein darf.

### 4.3 Praktische Vorgehensweise [ 49]

#### *Experimentelle Ermittlung des Leistungsbeitrages und der effektiven Viskosität*

Die Mischleistung wird gewöhnlich durch die Leistungsanforderungen beschrieben. Die experimentelle Bestimmung der Leistung erfolgt in der Regel durch Messung des Drehmomentes an der Rührerwelle.

Bei *Newtonschen Fluiden (NF)* wird das Drehmoment als Funktion der Drehfrequenz und in dimensionsloser Form als Newton-Zahl (Leistungszahl, power number) in Abhängigkeit von der Reynolds-Zahl dargestellt. Die beiden Kennzahlen sind wie folgt definiert:

*Newton-Zahl:*

$$Ne = N_p = \frac{P}{\rho \cdot N^3 \cdot d^5} = \frac{2 \cdot \pi \cdot N \cdot M_t}{\rho \cdot N^3 \cdot d^5} \quad \left| \begin{array}{l} Ne: \text{ Newton - Leistungszahl} \\ M_t: \text{ Gemessenes Drehmoment} \\ N: \text{ Drehfrequenz} \end{array} \right. \quad (8)$$

$$Reynolds-Zahl: \quad Re = \frac{\rho \cdot N \cdot d^2}{\eta} \quad \left| \eta \left[ \frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}} \right] : \text{ Dynamische Viskosität} \right. \quad (9)$$

Eine weitere wichtige Größe ist der so genannte *Formfaktor*, der wie folgt definiert ist:

$$K_p = Re \cdot Ne = \frac{P}{\mu \cdot N^2 \cdot d^3} \quad (10)$$

$K_p$  ist eine rührertypische Konstante. Die Formfaktorgleichung beschreibt die Leistungskurve des Rührers für den laminaren Strömungszustand.

Bei *nicht-Newtonschen Fluiden (nNF)* muss die Viskosität als Funktion der Deformationsgeschwindigkeiten beschrieben werden. Metzner und Otto [ 35] schlugen hierfür eine sehr einfache und attraktive Methode vor. Sie definierten eine effektive Scherrate (Beanspruchungsrate)  $\dot{\gamma}_e$ , die, zumindest im laminaren Bereich, eine lineare Funktion der Drehfrequenz ist. Bei der Abschätzung bzw. bei der formelmäßigen Gestaltung gingen sie davon aus, dass bei gleichen Mischbedingungen die resultierenden Leistungskurven beider Fluidtypen (Newtonsch und nicht-Newtonsch) übereinstimmen müssen. Deshalb würde  $\dot{\gamma}_e$  einen Wert entsprechend

$$Ne = K_p \cdot \left( \frac{\rho \cdot N \cdot d^2}{\eta_e} \right)^{-1} = K_p \cdot \left( \frac{\rho \cdot N \cdot d^2}{k \cdot \dot{\gamma}_e^{n-1}} \right)^{-1} \quad \left| \begin{array}{l} \text{Bei Gültigkeit des} \\ \text{Ostwald de Waeleschen} \\ \text{Potenzgesetzes} \end{array} \right. \quad (11)$$

besitzen, wobei die effektive Scherrate durch folgenden Ausdruck wiedergegeben wird:

$$\dot{\gamma}_e = \left( \frac{P}{k \cdot K_p \cdot N^2 \cdot d^3} \right)^{\frac{1}{n-1}} \quad (12)$$

Sie muss experimentell bestimmt werden. Nach Metzner-Otto [ 35] gilt:

$$\dot{\gamma}_e = K_s \cdot N \quad (\text{Wert für den gesamten Behälter}). \quad (13)$$

Somit kann aus diesem Wert eine effektive, d.h. nicht-Newtonsche Viskosität für den gesamten Rührkessel in der Form:

$$\eta_{e,nNF} = k \cdot \bar{\gamma}_e^{n-1} \quad (14)$$

abgeleitet werden (Potenzgesetz von Ostwald de Waele vorausgesetzt).

$K_S$  und  $K_P$  können als experimentell determinierte Konstanten eines Mischsystems betrachtet werden. Insbesondere die  $K_S$ -Werte charakterisieren die Rührer.

*Beispiele:*

Rührer	$K_S$
Propellerrührer	8,9
Scheibenrührer	10,7
Blattrührer	12,3
Flachscheibe	15,2

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass zur Berechnung des Leistungseintrages die Definition einer effektiven Deformationsrate notwendig ist. Nach Metzner-Otto kann sie aus der Drehfrequenz berechnet werden.

#### 4.3.2 Numerische Ermittlung des Leistungseintrages

Das Problem besteht hier darin, dass pro Volumenelement 9 Geschwindigkeitsgradienten zur Verfügung stehen. Wegen  $\gamma_{i,j} = \gamma_{j,i}$  bleiben 6 voneinander unabhängige Geschwindigkeitsgradienten übrig.

$$\gamma_{i,j} = \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad \Leftrightarrow 6 \text{ Werte pro Kontrollvolumen} \quad (15)$$

Aus diesen wird ein lokaler *Mittelwert*  $\bar{\gamma}$  gebildet, was durch folgende Berechnungsvorschrift möglich ist:

$$\bar{\gamma}_{nNF} = \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \text{trace}(\gamma_{i,j}^2)} \quad \wedge \quad \bar{\gamma}_{\text{lokal}} \quad (16)$$

Dabei ist  $\bar{\gamma}^2 = \Phi$  die lokale Dissipationsfunktion.

Für strukturviskose Substanzen, die mit dem Ostwald de Waeleschen Potenzgesetz beschrieben werden können, gilt für die scheinbare Viskosität:

$$\eta_{nNF} = k \cdot \bar{\gamma}^{n-1} \quad \wedge \quad \eta_{nNF,\text{lokal}}$$

Es liegt de facto in jedem Kontrollvolumen (KV) eine andere lokale Deformationsrate und damit eine andere Viskosität vor. Es stellt sich die Frage nach einer sinnvollen Zusammenfassung, wofür es bis heute noch keine Vorschrift gibt.

Der lokale mittlere Leistungseintrag  $\varepsilon$  pro KV ist:

$$\varepsilon = \eta \cdot \Phi = \mu \cdot (\dot{\gamma})^2 \Rightarrow \text{Newton} \quad (17)$$

$$\varepsilon = \eta_{\text{nNF}} \cdot \Phi_{\text{nNF}} = \eta_{\text{nNF}} \cdot (\dot{\gamma}_{\text{nNF}})^2 \Rightarrow \text{nicht - Newton}$$

Den Gesamtleistungseintrag erhält man dann wie folgt:

$$P = \sum_{\text{Gebiet}} (\varepsilon \cdot \Phi) = \sum_{\text{Gebiet}} (\varepsilon \cdot \dot{\gamma}^2) \quad (18)$$

#### 4.4 Numerische Ergebnisse

Zur Illustration sollen einige Ergebnisse, die für einen Standardrührbehälter (zylindrisches Gefäß, Klöpperboden,  $H/D=1$ , Propellerrührer  $d/D = 0,35$ , vier Stromstörer) mit dem Programmpaket ANSYS CFX erzielt worden sind, vorgestellt werden. Untersucht wurden die Auswirkungen der rheologischen Funktion bei ansonsten gleichen Randbedingungen: Drehzahl  $N = 1 \text{ s}^{-1}$ , Einbauhöhe  $h_B/H = 0,2$

##### Numerische Daten

Es wurde mit folgender Konfiguration gearbeitet:

- 360°-Gitter
- Multiple Frame of Reference-Verfahren „Frozen-Rotor“
- 1,67 Mio. Zellen

In der Literatur sind in der Regel Ergebnisse radial- und tangentialfördernder Rührer dargestellt [ 26], [ 27], [ 14], [ 47], [ 48], [ 49], [ 50], [ 20], [ 10], [ 8], [ 1]. Insbesondere bei ersteren erhält man im Bereich des Rührers sehr starke Veränderungen für die Scherraten und auch für die Viskosität. D.h., dass bei strukturviskosen Substanzen in diesem Bereich große Schergradienten und damit niedrige Viskositäten auftreten.

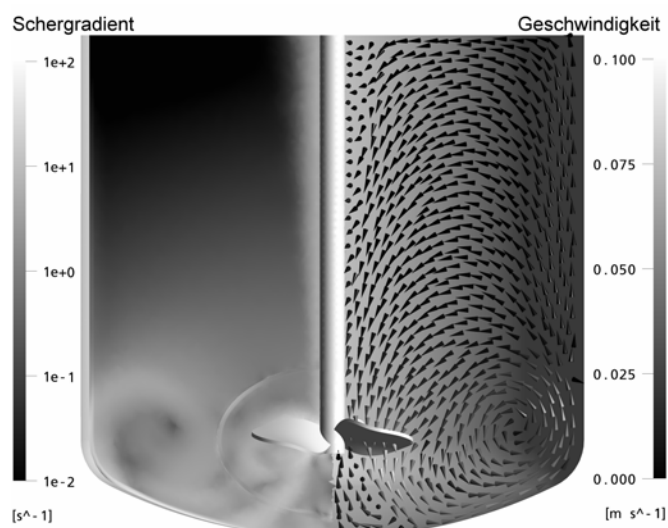


Abb. 6: Vektorplot und Verteilung des Deformationsgradienten in einem turbulenten Strömungsfeld;  $\eta = 10^{-3} \text{ Pa s}$ ;  $Re = 6174$

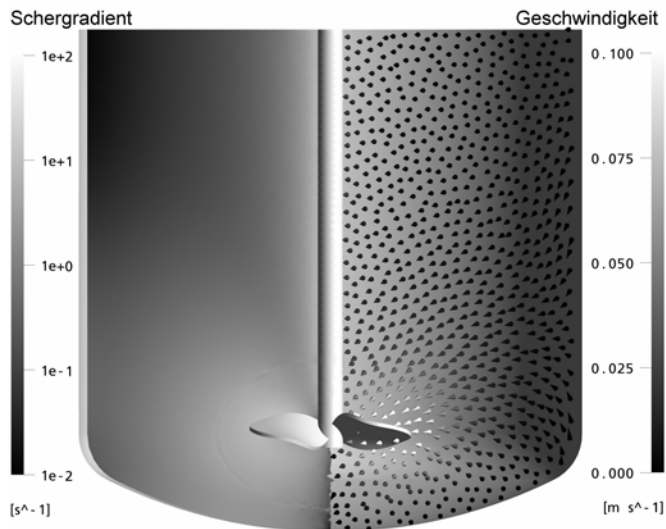


Abb. 7: Vektorplot und Verteilung des Deformationsgradienten in einem laminaren Strömungsfeld;  $\eta = 10 \text{ Pa s}$ ;  $Re = 0,62$

In unserem Fall sind die Ergebnisse für einen Propellerrührer, d.h. einem als axialfördernden zu bezeichnenden Rührer, dargestellt. In den Abbildungen 6 und 7 sind die Geschwindigkeitsprofile und deren Gradienten dargestellt. In Abbildung 6 erkennt man das typische Strömungsprofil eines axialfördernden Rührers. Bei der Betrachtung der Gradienten kann die bekannte Tatsache festgestellt werden, dass die Werte im Rührerbereich am größten sind. Im laminaren Fall sieht das Geschwindigkeitsbild anders aus, hier überwiegen die tangentialen Geschwindigkeiten. Dennoch haben die Werte für die Gradienten etwa die gleiche Größenordnung und auch etwa die gleiche Verteilung.

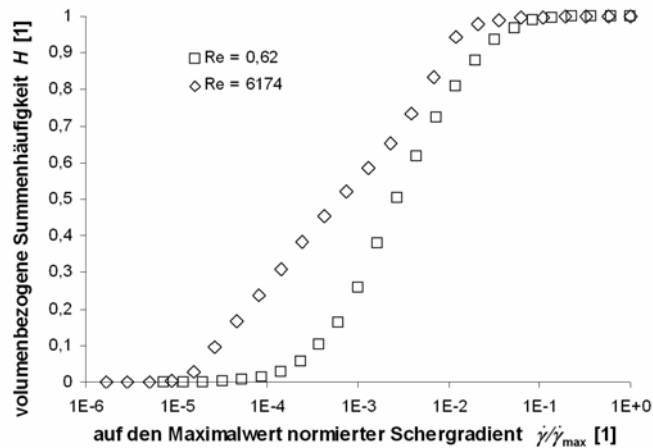


Abb. 8: Volumenbezogene Summenverteilung des auf das Maximum normierten Schergradienten für  $d = 0,07\text{m}$ ;  $n = 1 \text{ s}^{-1}$ ;  $\eta = \{0,001; 1\} \text{ Pa s}$

In Abbildung 8 ist die Summenverteilung der Geschwindigkeitsgradienten dargestellt. Zu erkennen sind wesentliche Unterschiede zwischen den beiden Viskositäten und damit Reynolds-Zahlen. Bei den höheren  $Re$  ist der Anteil der höheren Werte größer.



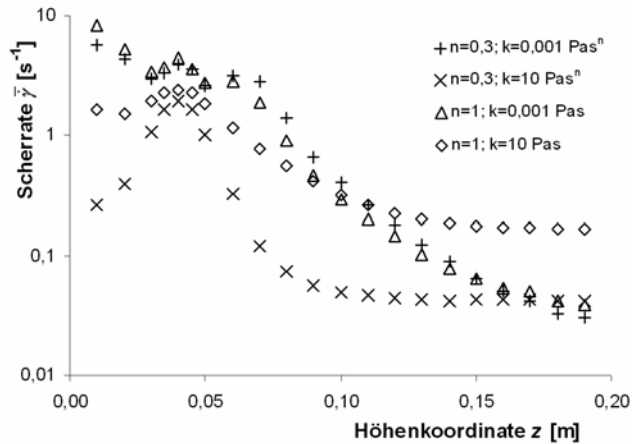


Abb. 9: Mittelwerte des lokalen Deformationsgradienten innerhalb einer horizontalen Ebene in Abhängigkeit von der Höhe für verschiedene rheologische Funktionen

In Abbildung 9 ist die Abhängigkeit der Deformationsgeschwindigkeiten über die Höhe und in Abbildung 10 in Abhängigkeit vom Radius dargestellt. Man erkennt aus beiden Abbildungen die hohen Werte in Rührernähe und den starken Abfall nach oben und außen.

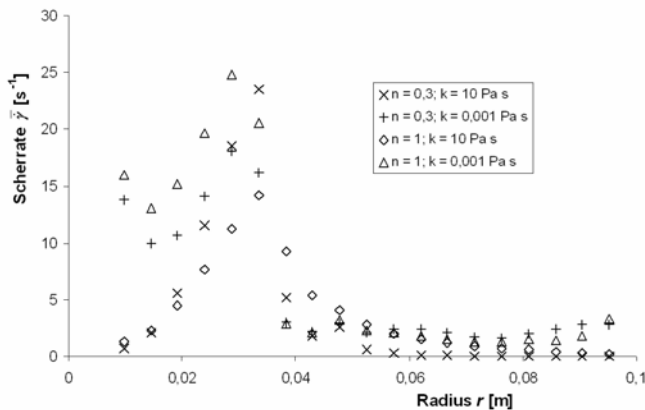


Abb. 10: Über den jeweiligen Umfang gemittelte Mittelwerte des lokalen Deformationsgradienten in Abhängigkeit vom Radius in der Rührerebene für verschiedene rheologische Funktionen

Die effektiven Viskositäten sind in der Abbildung 11 dargestellt. Auch hier sind die Werte über den Radius und den Umfang gemittelt. Im unteren Teil (runde Punkte) ist bei einem relativ niedrigen Konsistenzparameter die Abhängigkeit vom Fließindex dargestellt. Logischer Weise ist die Viskosität für  $n = 1$  konstant, während bei den nicht-Newtonschen Fluiden die Werte mit der Höhe und damit kleiner werdenden Deformationsgeschwindigkeiten zunehmen, selbstverständlich für  $n = 0,3$  stärker als für  $n = 0,7$ . Ähnlich ist das Verhalten bei den großen Konsistenzparametern, wobei die Unterschiede zwischen  $n = 0,3$  und  $0,7$  sich vergrößert haben. Auf Grund der Mittelung in radialer und in Umfangsrichtung erfolgt eine Glättung der Werteverteilung.

Betrachtet man die lokale dynamische Viskosität z.B. wie in Abbildung 12 nur in einer räumlich eindimensionalen Verteilung, kann die Auswirkung des Rührorgans wesentlich besser



gezeigt werden. In Rührernähe finden sich die maximalen Geschwindigkeitsgradienten und somit die geringsten lokalen dynamischen Viskositäten. In den gering durchströmten oberen Zonen des Rührbehälters hingegen liegen sehr niedrige Geschwindigkeitsgradienten und damit sehr hohe lokale Viskositäten vor.

Es kann festgestellt werden, dass die Berechnung von Rührwerksströmungen nicht-Newtonscher Medien mit Hilfe der CFD möglich ist. Sie ist von der Sache her eigentlich kaum komplizierter als die „Newtonschen“ Rechnungen. Wie bei der „normalen“ Behandlung sind dazu die das nicht-Newtonsche Verhalten beschreibenden Fließgesetze notwendig. Aufgrund der Tatsache, dass die CFD lokale Daten bereitstellt, erhält man wesentlich detailliertere Informationen über die Geschwindigkeitsverteilung, deren Gradienten und auch über die Viskosität. Da diese Angaben unbedingt zur Auslegung von Rührmaschinen gebraucht werden, gibt es zur Nutzung der CFD auch für nicht-Newtonsche Fluide keine Alternative. Die CFD stellt sehr viele Daten zur Verfügung, die ingenieurtechnische Nutzung lässt allerdings in der Praxis noch zu wünschen übrig. Ein Knackpunkt ist die Angabe einer den ganzen Bereich beschreibenden effektiven Viskosität, die zum Vergleich mit konservativen Daten und zur strömungstechnischen Bewertung (laminar, turbulent) notwendig ist. Mögliche Ansatzpunkte werden in der Analyse der Verteilungen der Schergradienten bzw. lokalen Viskositäten gesucht [ 15].

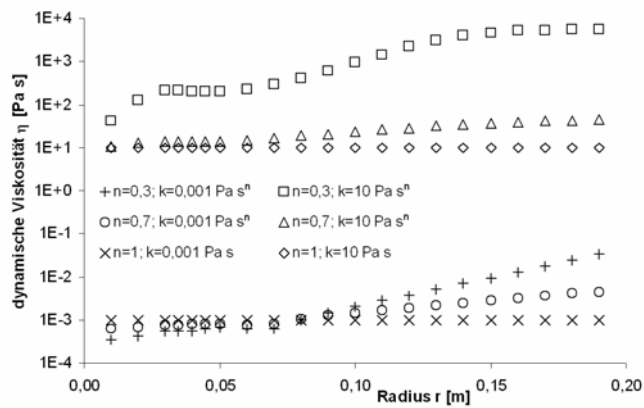


Abb. 11: Mittelwerte der lokalen dynamischen Viskosität innerhalb einer horizontalen Ebene in Abhängigkeit von der Höhe für verschiedene rheologische Funktionen

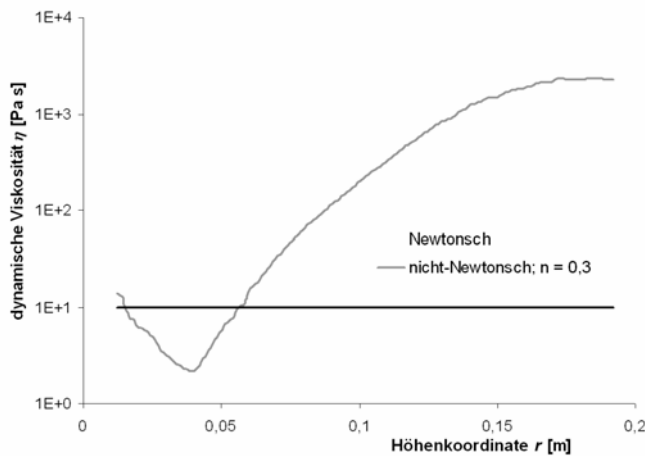


Abb. 12: Vertikale Verteilung der lokalen dynamischen Viskosität entlang einer Tangente an der Rührerspitze, jeweils bei einem Konsistenzfaktor von  $10 \text{ Pas}^n$

## 5 Mehrphasige Systeme

Eine Vielzahl technisch relevanter Systeme ist aus mehreren Phasen zusammengesetzt. Dabei können in der kontinuierlichen flüssigen Phase Gasblasen, feste Partikeln oder Tropfen einer nicht mischbaren Flüssigkeit dispergiert sein. Eine Schichtung mehrerer nicht mischbarer Fluide kann bei Anfahr- oder Absetzprozessen auftreten. Mögliche Strukturen mehrphasiger Systeme sind in Abb. 13 dargestellt.

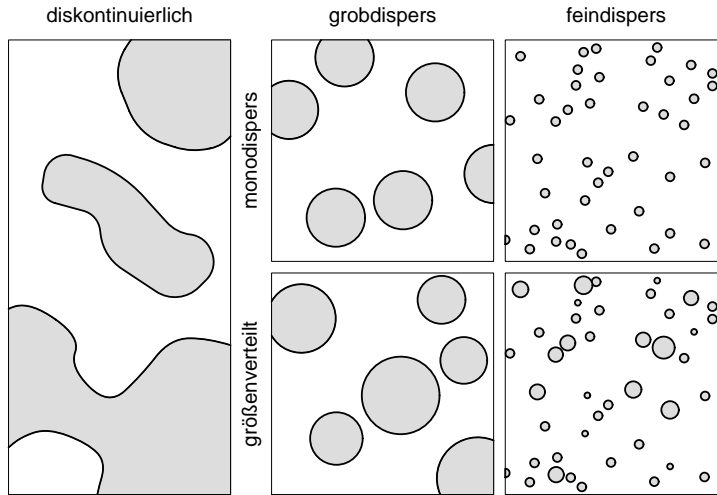


Abb.13: Geometrische Struktur von Phasen (nach Paschedag [ 40])

Hier sollen im Weiteren aber nur disperse Systeme betrachtet werden, d.h. solche, bei denen eine kontinuierliche Phase und eine oder mehrere disperse Phasen auftreten. Es wird davon ausgegangen, dass die Zahl der Partikeln so groß ist, dass ihre Eigenschaften (Geschwindigkeit, Temperatur etc.) statistisch durch ein kontinuierliches Feld beschrieben werden können und keine Betrachtung einzelner Partikeln erfolgen muss. Die Phasen sind stark aneinander gekoppelt, so dass in der mathematischen Modellierung die Transportgleichungen für Impuls, Masse und Energie für alle Fluide zwar separat formuliert, aber gekoppelt gelöst werden müssen. Die Wahl eines geeigneten Modellierungsansatzes richtet sich nach der Größe und ggf. Größenverteilung der dispersen Partikeln und dem Dispersphasenanteil. Die beiden gebräuchlichsten Ansätze, das Euler/Euler- und das Euler/Lagrange-Verfahren, werden im Folgenden vorgestellt.

Teilweise können aber auch mit einfachen Modellansätzen gute Ergebnisse erzielt werden. Für Partikeln im Nanometer- und unteren Millimeterbereich kann mit guter Näherung davon ausgegangen werden, dass es keinen Unterschied in den lokalen Geschwindigkeiten der beiden Phasen gibt. Diese Vereinfachung wird z.B. bei der Simulation von Fällungsprozessen angewandt [ 52] [ 32],

Einen Mittelweg stellt das Algebraic Slip Model (ASM) nach Manninen und Taivassalo [ 32] dar, bei dem aus alleiniger Berücksichtigung von Gravitation und Widerstandskraft die Schlupfgeschwindigkeit der Partikeln bestimmt wird. Die Impulsbilanz wird nur für die kontinuierliche Phase gelöst. Angst [ 3] erzielt damit für Partikeln von  $200 \mu\text{m}$  und  $500 \mu\text{m}$  gute Übereinstimmung mit orts aufgelösten Experimenten für Dispersphasenanteile bis 10% (s.

Abb. 14). Im Vergleich zum Euler/Euler-Ansatz wird dabei nur die halbe Rechenzeit benötigt.

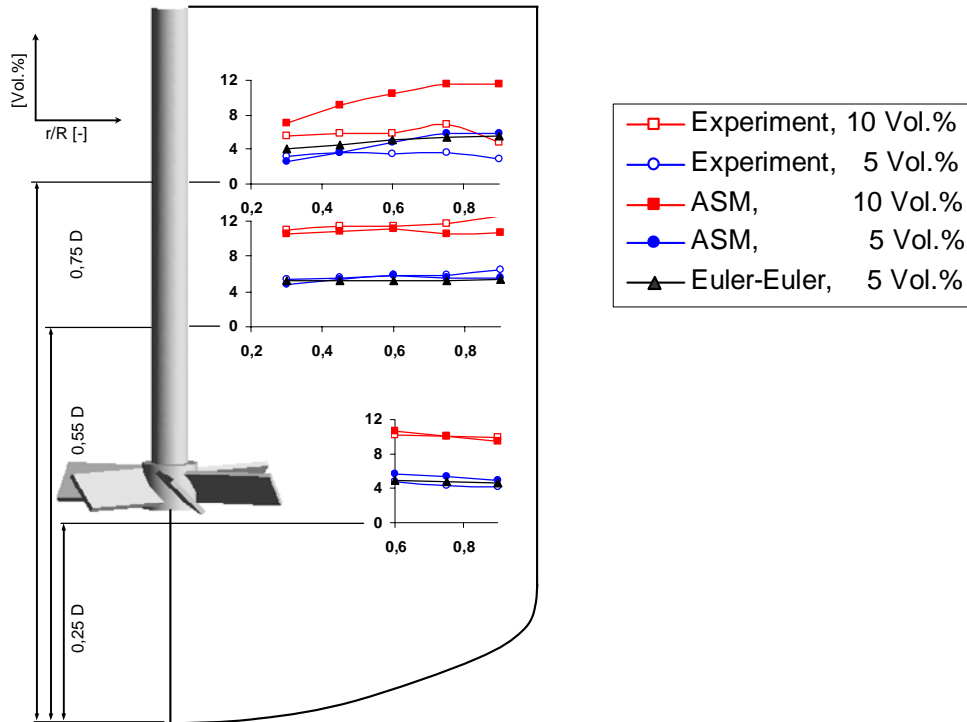


Abb. 14: Lokale Dispersphasenkonzentrationen, DN400; H/D = 1; 5 und 10 Vol.% jeweils für  $n_{H90}$ ; 200  $\mu\text{m}$  Partikeln; Simulationsergebnisse ASM und Euler-Euler jeweils gemittelt von Iteration 2000 bis 4100 (nach Angst [ 3])

## 5.1 Euler/Euler-Verfahren

Beim Euler/Euler-Verfahren (auch Multifluid-Verfahren genannt) werden beide Phasen als in Wechselwirkung stehende Kontinua betrachtet und gleichermaßen durch kontinuierliche Bilanzgleichungen beschrieben, die sich durch Modifikation der Bilanzen einphasiger Systeme ergeben. Die Modifikation erfolgt einerseits durch Wichtung der Transportterme mit dem Phasenanteil  $\alpha_i$  und durch Einbeziehung von Phasenwechselwirkungstermen. Durch die Bedingung

$$\alpha_i = V_i / V \quad (19)$$

und die Wechselwirkungsterme sind die Phasen gekoppelt. Im Fall der Impulsbilanz sind Wechselwirkungskräfte zu berücksichtigen, in Massen- und Energiebilanzen treten Massen- bzw. Wärmeströme auf. Durch die Art der Formulierung, bei welcher der Phasenanteil für jede Phase zwischen 0 und 1 variieren kann, gibt es keine grundsätzliche Einschränkung für die Zusammensetzung des Systems, die simuliert werden kann. Insbesondere kann mit dem Euler/Euler-Verfahren auch die Abscheidung der dispersen Phase beschrieben werden. Handelt es sich allerdings um eine feste Phase, gibt es keinen Automatismus zur Einhaltung der dichtesten Partikelpackung, hier müssen geeignete Wechselwirkungskräfte definiert werden (s. 5.3). Auch hinsichtlich auftretender Partikelgrößen gibt es keine absolute Grenze. Es muss jedoch berücksichtigt werden, dass die Kontinuumshypothese auch für die Dispersphase mit guter Näherung gelten muss.

Nachteilig ist bei diesem Verfahren, dass die Turbulenzbeeinflussung durch die Phasenwechselwirkung nicht gut beschrieben werden kann. Dadurch sind Abschätzungen des Leistungseintrags nicht zuverlässig möglich und auch die Berechnung der Geschwindigkeitsfelder turbulenter Strömungen ist beeinträchtigt. Eine weitere Beschränkung ergibt sich für die Simulation von Strömungen mit einer größenverteilten Dispersphase. Eine Fortschritt stellt dabei das Favre averaged drag model von Burns et al. [ 12] dar.

Da die Partikelgröße in die Formulierung der Wechselwirkungsterme eingeht, muss jede Größenklasse als Phase betrachtet werden, für die ein eigener Satz von Bilanzgleichungen zu lösen ist. Bei einem breit verteilten Größenspektrum führt das sehr schnell zur Explosion des erforderlichen numerischen Aufwands. Einen Kompromiss, bei dem zwar der Transport der Größenverteilung beschrieben wird, für die Phasenwechselwirkungen aber nur eine mittlere Partikelgröße verwendet wird, stellt das MUSIG-Modell von Lo dar [ 31], das teilweise auch in kommerzieller CFD-Software verfügbar ist.

Das Euler/Euler-Verfahren wurde mehrfach erfolgreich zur Simulation von Rührkesselströmungen angewandt [ 12], [ 25], [ 38], [ 28], [ 29].

## 5.2 Euler/Lagrange-Verfahren

Der Euler/Lagrange-Ansatz verwendet unterschiedliche Modellierungsansätze für beide Phasen. Die kontinuierliche Phase wird, wie beim Euler/Euler-Ansatz, durch kontinuierliche Bilanzgleichungen beschrieben, in denen Phasenwechselwirkungsterme auftreten. Die disperse Phase wird durch repräsentative Partikeln modelliert, von denen jedes als Punktmasse mit bestimmten Eigenschaften beschrieben wird. Für diese Partikeln, die teilweise zu Partikelpaketen zusammengefasst werden, werden Bewegungsgleichungen gelöst, mit derer Hilfe ihre Bahnen bestimmt werden. Die Berechnung der Partikelbahnen ist räumlich und zeitlich höher aufgelöst als die der kontinuierlichen Phase, da die erhaltenen Daten statistisch ausgewertet werden müssen. Aus dieser statistischen Auswertung können die Wechselwirkungsterme für die Gleichungen der kontinuierlichen Phase bestimmt werden. So werden iterativ die Gleichungen für beide Phasen gelöst. Eine ausführliche Beschreibung dieses Verfahrens findet sich bei Sommerfeld [ 46] .

Das Euler/Lagrange-Verfahren ist sehr gut geeignet, um Phasenwechselwirkungen genau zu beschreiben. Auch für die Turbulenzbeeinflussung durch die disperse Phase gibt es differenziertere Modelle als beim Euler/Euler-Verfahren. Größenverteilte Dispersphasen können relativ leicht dadurch simuliert werden, dass die Partikeln unterschiedliche Größen haben. Es gibt bei diesem Verfahren jedoch starke Einschränkungen bezüglich des maximal beschreibbaren Phasenanteils. Mittlere Dispersphasenanteile können bis etwa 5% beschrieben werden und auch lokale Werte, die wesentlich darüber liegen, bereiten bei der Simulation Schwierigkeiten. Die meisten validierten Simulationen behandeln allerdings deutlich geringere Dispersphasenanteile (z.B. Sommerfeld und Decker [ 44]). Darüber hinaus gibt es Probleme, wenn das Gesamtvolumen eines Partikelpakets größer wird als das Volumen der Zelle, in dem sich das Paket befindet. Daraus ergeben sich Einschränkungen für die Gitterverfeinerung, die besonders für Turbulenzsimulationen mit LES oder DNS kritisch sein können.

## 5.3 Phasenwechselwirkungen

Phasenwechselwirkungen müssen in allen Transportgleichungen (für Impuls, Masse und Energie) berücksichtigt werden. Hier soll das besondere Augenmerk aber auf die Kraftterme gelegt werden, die in der Impulsbilanz auftreten. Dazu gehört vor allem die Widerstandskraft, die durch den Widerstandsbeiwert bestimmt wird. Darüber hinaus gibt es eine Reihe von Kräften, die nur bei ausgewählten Strömungskonstellationen berücksichtigt werden müssen,

wie die virtuelle Massenkraft, die Magnus-Kraft oder die Basset-Kraft. Eine gute Übersicht, wann welche dieser Kräfte eine Rolle spielt, ist bei Sommerfeld [ 46] zu finden.

Auch Partikel-Partikel- und Partikel-Wand-Wechselwirkungen müssen in einigen Fällen berücksichtigt werden. Hier ist das Spektrum der verfügbaren Ansätze aber deutlich geringer, so dass es insbesondere in Systemen mit hohem Dispersphasenanteil zu Modellierungsungenauigkeiten kommt. Insbesondere betrifft das die Sedimentation fester Partikeln, bei der physikalisch die dichteste Partikelpackung nicht überschritten werden darf. Modellansätze, die dies verhindern, sind aber insbesondere für das Euler/Euler-Modell kaum verfügbar. Am weitesten verbreitet ist die Verwendung des Feststoffdruck-Modells, das eine abstoßende Kraft umgekehrt proportional zum mittleren Partikelabstand beschreibt. Die Parameter darin müssen aber empirisch angepasst werden und nehmen dabei teilweise Werte an, die mit der physikalischen Bedeutung, die ihnen im Modell zugeschrieben wird (z.B. Phasenanteil der dichtesten Packung), nicht korrespondieren (vgl. z.B. [ 36]).

## 6 Randbedingungen

Zur Lösung der Differentialgleichungen müssen auch bei Rührkesseln Randbedingungen definiert werden. Die Behälterberandung, Stromstörer und Rührorgane werden über feste oder bewegte Wände beschrieben, wobei der Bezug auf das lokal gültige Koordinatensystem zu wählen ist, wenn ein MFR-System verwendet wird (s. Kap. 2.4). Auch Zu- und Abläufe von kontinuierlich beschriebenen Reaktoren können mit den in den CFD üblichen Ansätzen modelliert werden. Eine besondere Betrachtung erfordern Zugabepunkte im Innern des Behälters. Da häufig das Zuleitungsrohr selbst nicht mit modelliert wird, da sonst die Gittergenerierung sehr kompliziert und die Symmetrieeigenschaften des Apparats gestört würden, stellt die Zugabe eine Massen- und Impulsquelle dar. Die entsprechenden Quellterme müssen auch bei kommerziellen Programmen selbst formuliert und programmiert werden [ 24]. Da in der Regel von einem festen Behältervolumen und inkompressiblen Medien ausgegangen wird, muss die Massenerhaltung durch einen entsprechenden Ablauf gesichert werden.

Die Oberfläche der Behälterfüllung ist in der Regel wellig, in einigen Fällen kommt es auch zur Trombenbildung. Damit kann sie bei der Gittergenerierung nicht a priori beschrieben werden. In den meisten Fällen wird bei der Simulation niedrigviskoser Fluide in Systemen mit Stromstörern eine ebene obere Begrenzung als gute Näherung angenommen [ 3], [ 17] J. Derksen, H.E.A. van den Akker, *AIChE J.*, **1999**, 45(2), 209-221.

[ 18]. Damit muss die Form der freien Oberfläche nicht als Teil der Lösung bestimmt werden und die Oberflächenmodellierung beeinflusst nicht die Symmetrieeigenschaften des Systems. Allerdings können experimentell beobachtete Makroinstabilitäten [ 21], [ 39] auf diese Art nicht berücksichtigt werden.

Bildet sich eine deutliche Trombe, ist diese Modellierung nicht zielführend, sondern es müssen Ansätze für freie Oberflächen verwendet werden. Eine Diskussion der dafür verfügbaren Modellansätze (Volume of Fluid, Level Set, Moving Mesh etc.) sprengt den Rahmen dieses Beitrags. Eine Übersicht ist z.B. bei Paschedag [ 40] zu finden. Eine weitere Möglichkeit besteht in der Verwendung des in Kap. 5.1 beschriebenen Euler/Euler-Verfahrens. Da es für die disperse Phase keine Beschränkung des Phasenanteils gibt, kann Luft als pseudo-disperse Phase in die Modellierung einbezogen werden. Die Verteilung der Phasenanteile zeigt dann, wo sich die Flüssigkeitsoberfläche befindet. Dieses Verfahren ist besonders dann naheliegend, wenn das System ohnehin eine disperse Gasphase enthält und mit dem Euler/Euler-Ansatz modelliert wird.

Um den Simulationsaufwand, insbesondere Speicherplatz und Rechenzeit, zu reduzieren, werden häufig die Symmetrieeigenschaften der Rührapparate genutzt. In der Regel findet man eine 180°-Rotationssymmetrie, teilweise kann auch mit 60°- oder 90°-Symmetrien gear-

beitet werden. Rotationssymmetrien werden durch periodische Randbedingungen an den Schnittstellen implementiert (s. z.B. Paschedag [ 40]). Es muss aber berücksichtigt werden, dass Apparatesymmetrien nicht zwingend zu Strömungssymmetrien führen. Dies ist bei turbulenten Strukturen (sowohl mit LES als auch mit DNS beschriebenen) und der räumlichen Verteilung von dispersen Phasen allgemein bekannt, aber auch im einphasigen Reynolds-gemittelten Strömungsfeld treten in realen Systemen Störungen der Symmetrie auf. Es muss daher je nach Fragestellung und betrachtetem System entschieden werden, ob diese Störungen so relevant sind, dass der Aufwand einer 360°-Simulation in Kauf genommen werden muss, oder ob die Annahme der Rotationssymmetrie zumindest eine vertretbare Näherung darstellt.

## 7 Zusammenfassung und Ausblick

Die Anwendung der numerischen Strömungsmechanik in der Rührtechnik ist seit mehreren Jahren nicht mehr auf den akademischen Bereich beschränkt. Bedingt durch die ständige Verbesserung der physikalischen Modelle, der mathematischen Beschreibungen und Lösungsmöglichkeiten und durch die rasant gewachsenen Berechnungskapazitäten bieten derartige Untersuchungen mittlerweile Einblicke in die Vorgänge in Rührreaktoren, die auf anderem Weg kaum zu gewinnen sind. Für viele Anwendungen sind dabei auch quantitativ belastbare Ergebnisse möglich. In Fällen, in denen nur qualitative Lösungen möglich sind, trägt die numerische Analyse zum Systemverständnis bei und liefert im akademischen und im kommerziellen Bereich einen wesentlichen Beitrag zur Weiterentwicklung von Apparaten, Prozessen und Stoffsystemen. Die numerische Strömungsmechanik unterliegt ihrerseits einer rasanten Weiterentwicklung, die derzeit vor allem auf die Verbesserung der Beschreibung der komplexen Physik mehrphasiger Systeme gerichtet ist. Vor allem bei der Verzahnung der Erforschung von Stoffsystemen mit der ingenieurtechnischen Entwicklung von Rührapparaten leistet die numerische Strömungsanalyse als Bindeglied einen wichtigen Beitrag.

### Symbolverzeichnis

a, b, c		Konstanten
D	[m]	Behälterdurchmesser
d	[m]	Rührerdurchmesser
k	[Pa s <sup>n</sup> ]	Konsistenzparameter
K <sub>p</sub> =Ne Re		Formfaktor
K <sub>S</sub>		Metzner-Otto-Konstante
N	[1/s]	Drehfrequenz
n		Fließindex
Ne		Newton-Zahl
N <sub>p</sub> =Ne		Power- = Leistungszahl
M <sub>t</sub>	[Nm]	Moment
p	[Pa]	Druck
P	[W]	Leistung
Re		Reynolds-Zahl
T	[K]	Temperatur
t	[s]	Zeit
w	[m/s]	Geschwindigkeit
w'	[m/s]	Fluktuationsgeschwindigkeit
g	[m/s <sup>2</sup> ]	Erdbeschleunigung



$x, y, z$ [	[m]	unabhängig Variable
$I$	[1/s <sup>2</sup> ]	Invariante
$V$	[m <sup>3</sup> ]	Gesamtvolumen
$V_i$	[m <sup>3</sup> ]	Volumen der Phase $i$

### Griechische Buchstaben

$\alpha_i$	[-]	Phasenanteil der Phase $i$
$\dot{\gamma}$	[1/s]	Deformationsgeschwindigkeit
$\bar{\dot{\gamma}}$	[1/s]	mittlere örtliche Deformationsgeschwindigkeit
$\varepsilon$	[m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]	Dissipationsrate, spezifischer Leistungseintrag
$\eta$	[Pa s]	dynamische Viskosität
$\rho$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Dichte
$\tau$	[Pa]	Schubspannung
$\Delta$	[1/s]	Operator
$\Phi$	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]	Dissipationsfunktion

### Indices

eff, e	effektiv
NF	Newtonsches Fluid
nNF	nicht-Newtonsches Fluid
$i, j, k$	Laufvariablen

### Literatur

- [ 1 ] J. Aubin, I. Naude, J. Bertrand, C. Xureb, *Trans. IChemE*, **2000**, 78, 1105–1114.
- [ 2 ] Autorenkollektiv, *Technische Strömungsmechanik, I*, Lehrbuchreihe Verfahrenstechnik, VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie Leipzig, **1975**.
- [ 3 ] R. Angst, *Dispersphasenverteilung und Fluidodynamik in Suspensionsrührbehältern*, Diss. TU Berlin, Fortschritt-Berichte VDI, VDI-Verlag Düsseldorf, **2006**.
- [ 4 ] A. Bakker, L.M. Oshinowo, *Chem. Eng. Res. Design*, **2004**, 82(A9), 1169-1178.
- [ 5 ] J. Baldyga, *Chem. Eng. Sci.*, **1994**, 49, 1985-2003.
- [ 6 ] J. Baldyga, J.R. Bourne, *Turbulent Mixing and Chemical Reactions*, John Wiley & Sons Ltd., Chinchester, **1999**.
- [ 7 ] C. Bartels, M. Breuer, F. Durst, *10th European Conference on Mixing*, Deft, **2000**
- [ 8 ] J. Bertrand, J.P. Couderc, *Chem. Eng. Res. Des.*, **1995**, 63, 259 – 266.
- [ 9 ] R.B. Bird, W.E. Stewart, *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, New York, **1976**.
- [ 10 ] E. Brito-De La Fuente, L. Chopin, P.A. Tanguy, *Trans IChemE*, **1997**, 75, 45–52.
- [ 11 ] A. Brucato, M. Ciofalo, F. Grisafi, G. Micale, *Chem. Eng. Sci.*, **1998**, 53(21), 3653-3684.
- [ 12 ] A.D. Burns, T. Frank, I. Hamill, J.-M. Shi, *5th International Conference on Multiphase Flow*, ICMF 04, Yokohama, **2004**.
- [ 13 ] P.J. Carreau, J. Paris, P. Guerin, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, **1992**, 70, 1071–1082.
- [ 14 ] J. Cheng, P.J. Carreau, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, **1994**, 72, 418–430.

- [ 15] G. Delaplace, C. Torrez, J.C. Leuliett, N. Belaubre, C. Andre, *Trans. IChemE*, **2001**, 79, 927–937.
- [ 16] G. Delaplace, C. Torrez, M. Gradec, J.C. Leuliet, C. Andre, *10<sup>th</sup> European Conference on Mixing* **2000**.
- [ 17] J. Derksen, H.E.A. van den Akker, *AIChE J.*, **1999**, 45(2), 209-221.
- [ 18] J.J. Derksen, *AIChE J.*, **2003**, 49(11), 2700-2714.
- [ 19] S. Ertem-Müller, *Numerical efficiency of implicit and explicit methods with multigrid for large eddy simulation in complex geometries*, Diss. TU Darmstadt, **2003**.
- [ 20] S. Foucault, G. Ascanio, P.A. Tanguy, *11<sup>th</sup> European Conference on Mixing*, Bamberg **2003**.
- [ 21] Z. Gao, J. Min, J.M. Smith, R.B. Thorpe, *12th European Conference on Mixing*, Bologna, **2006**.
- [ 22] E. Gavi, L. Rivautella, D. Marchisio, M. Vanni, A. Barresi, G. Baldi, submitted to *Chem. Eng. Res. Design*, **2006**.
- [ 23] D. Guha, M.P. Dudukovic, P.A. Ramachandran, S. Metha, J. Alvare, *AIChE J.*, **2006**, 52(5), 1836-1846.
- [ 24] M. Heiser, *Experimentelle und Numerische Untersuchung von Koaxialrührwerken für Homogenisierungsversuche höherviskoser und/oder nicht Newtonscher Fluide (in Vorbereitung)*, Diss. TU Berlin, **2007**.
- [ 25] M. Jahoda, M. Mostek, A. Kartushinsky, V. Machon, *12th European Conference on Mixing*, Bologna, **2006**.
- [ 26] M. Kaminoyama, F. Saito, M. Kamiwano, *International Chemical Engineering of Japan*, **1994**, 27, 17–24.
- [ 27] M. Kaminoyama, K. Arai, M. Kamiwano, *International J. of Chemical Engineering*, **1990**, 30, 720–728.
- [ 28] N.C.S. Kee, R.B.H. Tan, *Can. J. of Chem. Eng.*, **2002**, 80, 721-726.
- [ 29] Ch. Kohen, M. Bohnet, *Chem. Eng. Technol.*, **2001**, 24(6), 639-643.
- [ 30] Ch. Kohen, *Experimentelle und numerische Untersuchung der Fluidströmung gerührter Suspensionen*, Diss. TU Braunschweig, **2000**.
- [ 31] S.M. Lo, *AEAT-1096*, AEA Technology, **1996**.
- [ 32] M. Manninen, V. Taivassalo, *VTT Publications*, Espoo, **1996**.
- [ 33] D.L. Marchisio, L. Rivautella, A.A. Barresi, *AIChE J.*, **2006**, 52, 877-1887.
- [ 34] D.L. Marchisio, *Precipitation in Turbulent Fluids*, Diss. Politecnico di Torino, **2002**.
- [ 35] A.B. Metzner, R.E. Otto, *AIChE J.*, **1957**, 3, 3–10.
- [ 36] P. Mier, *Experimentelle Untersuchung und numerische Simulation der Flüssig-Feststoff-Strömung im Srahlschlaufenapparat*, Diss. TU Berlin, **2006**.
- [ 37] G. Micale, F. Grisafi, L. Rizzuti, A. Brucato, *Trans IChemE*, **2004**, 82(9A), 1204-1213.
- [ 38] G. Montante, D. Pinelli, F. Magelli, *Can. J. Chem. Eng.*, **2002**, 80, 665-673.
- [ 39] L. Nikiforaki, G. Montante, K.C. Lee, M. Yianneskis, *Chem. Eng. Sci.*, **2003**, 58, 2937-2949.
- [ 40] A.R. Paschedag, *CFD in der Verfahrenstechnik*, Wiley-VCH, **2004**.
- [ 41] S.V. Pantankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Mc Graw-Hill, New York, **1980**.
- [ 42] F. Rieger, V. Novak, *Trans. Inst. Chem. Engs.*, **1973**, 51, 105–111.
- [ 43] J. P. Smith, *Vortrag auf Weiterbildungskurs "Stirring and Mixing" in Erlangen (25. – 28.10.1999)*, **1999**.
- [ 44] M. Sommerfeld, K. Decker, *Chem. Eng. Technol.*, **2004**, 27/3, 215–224.
- [ 45] M. Sommerfeld, *Numerische Strömungsberechnungen* in Kraume, M. (Editor) *Mischen und Rühren: Grundlagen und moderne Verfahren*



- Wiley.VCH, **2002**.
- [ 46] M. Sommerfeld, *Modellierung und numerische Berechnung von partikelbeladenen turbulenten Strömungen mit Hilfe des Euler/Lagrange-Verfahrens*, Shaker Verlag, Aachen, **1996**.
  - [ 47] P.A. Tanguy, F. Bertrand, R. Labrie, E. Brito-De La Fluente, *Trans. IChemE*, **1996**, 74, 499–504.
  - [ 48] P.A. Tanguy, F. Thibault, E. Brito-De La Fuente, T. Espinosa-Solares, A. Tecante, *Chemical Engineering Science*, **1997**, 52, 1733– 741.
  - [ 49] C. Torrez, Ch. Andre, *Chem. Eng. Technol.*, **1998**, 21, 599–604.
  - [ 50] C. Torrez, Ch. Andre, *Chem. Eng. Technol.*, **1999**, 22, 701–706.
  - [ 51] F. Wang, W. Wang, Y. Wang, Z.-S. Mao, *Proceedings of 3rd International Conference on CFD in the minerals and process industries CSIRO*, Melbourne, S. 287-292, **2003**.
  - [ 52] L. Wang, R.O. Fox, *AIChE J.*, **2004**, 50, 2217-2232.
  - [ 53] S.L. Yeoh, G. Papadakis, M. Yianneskis, *Chem. Ing. Res. Design*, **2004**, 82(A7), 834-848.
  - [ 54] M. Zlorkarnik, *Rührtechnik, Theorie und Praxis*, Springer Verlag **1999**.