



Dipl.-Ing. Enes Aksamija

**Der Taylor-Couette Disc Contactor (TCDC);  
ein vereinfachtes und optimiertes Design  
von Drehscheibenextraktoren**

**Dissertation**

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der technischen Wissenschaften

eingereicht an der

**Technischen Universität Graz**

Betreuer

Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Matthäus Siebenhofer

Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik

Graz, Oktober 2014

# Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen/Hilfsmittel nicht benutzt, und die den benutzten Quellen wörtlich und inhaltlich entnommene Stellen als solche kenntlich gemacht habe. Das in TUGRAZonline hochgeladene Textdokument ist mit der vorliegenden Dissertation identisch.

Graz am 20.10.2014

Enes Aksamija

# Vorwort & Danksagung

Diese Dissertation ist im Rahmen meiner Tätigkeit als Universitätsassistent am Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik an der TU Graz entstanden. In dieser Zeit hatte ich das Glück, von vielen tollen Menschen unterstützt worden zu sein. An erster Stelle möchte ich mich bei Prof. Matthäus Siebenhofer für die einzigartige Betreuung bedanken. Das in mich gesetzte Vertrauen, seine bedingungslose Hilfsbereitschaft in allen Belangen und seine Offenheit für „wissenschaftliche Spinnereien“ haben die verblüffenden Ergebnisse dieser Arbeit erst ermöglicht.

Prof. Hans-Jörg Bart vom Lehrstuhl für thermische Verfahrenstechnik der TU Kaiserslautern danke ich für die Zweitbegutachtung der Arbeit und Prof. Wolfgang Bauer für den Vorsitz des Prüfungssenates.

Großer Dank gebührt Rainer Pfeffer, Rene Prieler, Kathrin Zörweg, Christoph Weinländer, Robert Sarzio und Annika Graftschatter, die im Rahmen ihrer Diplomarbeiten wesentliche Bausteine der Arbeit geliefert haben. Ebenso möchte ich allen Kollegen des Institutes für die Hilfsbereitschaft und den stets freundschaftlichen Umgang danken.

Besonderer Dank gilt auch den Kollegen vom Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft, DI Wolfgang Richter und Wolfgang Rois für die Bereitstellung der PIV-Ausrüstung und die Unterstützung bei der Messung.

Abschließend bedanke ich mich bei Eltern Ibrahim und Munira, meinen Schwestern Azra und Nadja und meiner Partnerin Angelika. Ohne deren liebevollen Rückhalt in allen Lebenssituationen wäre die Erstellung dieser Arbeit nicht möglich gewesen.

Graz, Oktober 2014

Enes Aksamija

# Abstract

In the present work the design of the RDC extractor, a well-established apparatus in solvent extraction, has been fundamentally simplified and optimized in terms of separation efficiency, load capacity and applicability for extraction of bio-based raw materials. Based on the Rotating Disc Contactor (RDC), a novel design of internals was discovered in the interaction of CFD simulation with Ansys Fluent and experimental validation (Particle Image Velocimetry, DSD measurements, sedimentation, tracer, load and mass transfer experiments). Being a hydrodynamic hybrid of a RDC and a Taylor-Couette reactor, the novel apparatus, therefore named TCDC, promises a wide range of applicability apart from solvent extraction.

Experimentally validated simulation series show optimized hydrodynamic operating parameters (axial mixing, drop size distribution, vorticity, etc.) when the stator rings are abandoned and their function is adopted by rotor disks with increased diameter. Mass transfer experiments showed improved separation efficiency over the RDC, the HTU-value was decreased by ~ 35% while the operating/flooding limits were simultaneously increased. The elimination of the stator rings simplifies manufacturing and operation as well as cleaning and maintenance. Empirical design rules from literature, still state-of-the-art for the geometric design of RDCs, have been updated, simplified and theoretically consolidated.

# Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde der RDC, ein seit Jahrzehnten industriell etablierter Apparat für die flüssig/flüssig-Extraktion, hinsichtlich Trenneffizienz, Belastbarkeit und Eignung für die Extraktion biobasierter Rohstoffe optimiert und gleichzeitig die Auslegung fundamental vereinfacht. Ausgehend vom *Rotating Disc Contactor* (RDC) wurde im Wechselspiel zwischen CFD-Simulation mit *Ansys Fluent* und experimenteller Validierung (*Particle Image Velocimetry*, TGV-Messungen, Sedimentations-, Tracer-, Belastungs- und Stoffaustauschversuche) ein neues Design entdeckt, das hydrodynamisch einen Hybrid aus dem RDC und einem *Taylor-Couette*-Reaktor darstellt und damit auch neben der flüssig/flüssig-Extraktion ein breites Anwendungsgebiet verspricht. Der Apparat hat daher auch die Bezeichnung TCDC erhalten. Experimentell validierte Simulationsreihen zeigten, dass die hydrodynamischen Betriebsparameter eines RDC (axiale Vermischung, Tropfengrößenverteilung, Wirbelstärke, etc.) optimiert werden können, wenn auf die Statorscheiben verzichtet wird und deren Funktion von Rotorscheiben mit größerem Durchmesser übernommen wird. Stoffaustauschversuche belegten, dass die hydrodynamischen Optimierung auch zu einer erhöhten Trennleistung führt, der HTU-Wert konnte bei gleichzeitiger Erweiterung der Betriebsgrenzen um ~35% gesenkt werden. Die empirischen Designregeln, die immer noch als Basis für die geometrische Auslegung von Drehscheibenextraktoren dienen, konnten in dieser Arbeit aktualisiert, vereinfacht und theoretisch fundiert werden.

# Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung .....	10
1.1	Die flüssig/flüssig-Extraktion.....	10
1.2	Rotating Disc Contactor.....	11
1.3	Stand des Wissens.....	13
1.4	Motivation und Zielsetzung.....	14
1.5	Theoretischer Hintergrund.....	16
1.5.1	Taylor-Couette-Reaktoren .....	16
1.5.2	Toruswirbel in gerührten Extraktionskolonnen .....	19
1.5.3	Strömungsverhalten realer Kolonnen .....	21
1.5.3.1	Dispersionsmodell.....	22
1.5.3.2	HTU/HDU-NTU Konzept.....	24
2	Experimentelles.....	26
2.1	Kolonnenaufbau .....	27
2.2	Sedimentationsversuche mit Einzeltropfen .....	29
2.2.1	Aufbau.....	29
2.2.2	Auswertung .....	31
2.3	Particle Image Velocimetry .....	32
2.3.1	Versuchsaufbau – PIV.....	34
2.3.2	Auswertung – PIV.....	36
2.3.3	Ergebnisse für $H_0/D_T = 0,34$ .....	37
2.3.4	Ergebnisse für $H_0/D_T = 0,18$ .....	37
2.4	Messung der Verweilzeitverteilung .....	40
2.4.1	Tracerversuche – Aufbau & Auswertung .....	40
2.4.2	Tracerversuche – Ergebnisse.....	42
2.4.2.1	Ergebnisse im einphasigen Betrieb .....	42
2.4.2.2	Ergebnisse im zweiphasigen Betrieb .....	43
2.5	Stoffaustauschversuche .....	46
2.5.1	Stoffsystem & Versuchsdurchführung.....	46

2.5.2	Stoffaustausch; Ergebnisse, Einfluss der Compartmenthöhe .....	48
2.6	Diskussion der experimentellen Ergebnisse und Schlussfolgerungen .....	50
3	Numerische Simulation.....	51
3.1	Simulation der Einphasenströmung.....	52
3.1.1	Modellierung.....	52
3.1.1.1	Rechengitter, Numerik & Randbedingungen .....	53
3.1.1.2	Turbulenzmodellierung.....	55
3.1.1.3	Modellierung der axialen Dispersion ( <i>stochastic tracking</i> ) .....	56
3.1.2	Experimentelle Validierung.....	57
3.1.3	Designoptimierung für Einphasenbetrieb.....	61
3.1.3.1	Einfluss der Compartmenthöhe (I).....	61
3.1.3.2	Einfluss des Wellendurchmessers.....	62
3.1.3.3	Einfluss der Spaltposition .....	63
3.2	Simulation der Zweiphasenströmung.....	65
3.2.1	Euler-Euler Simulation.....	66
3.2.1.1	Modellierung.....	66
3.2.1.1.1	Rechengitter & Diskretisierung .....	68
3.2.1.1.2	Tropfenpopulationsbilanzen .....	69
3.2.1.1.3	Lösen der Tropfenpopulationsbilanzen.....	72
3.2.1.2	Validierung .....	72
3.2.1.2.1	Homogene Klassenmethode .....	74
3.2.1.2.2	Inhomogene Klassenmethode.....	78
3.2.1.3	Überprüfung der Einphasenströmungsoptima .....	81
3.2.2	Euler-Lagrange Simulationen .....	86
3.2.2.1	Modellierung.....	86
3.2.2.2	Optimierung: Einfluss der Compartmenthöhe (II).....	87
3.2.2.3	Gekoppelte Variation von Compartmenthöhe und Wellendurchmesser ....	94
3.2.2.4	Maßstabsvergrößerung mittels CFD.....	96
4	Optimiertes Design: Der Taylor-Couette Disc Contactor (TCDC).....	99
4.1	Betriebscharakteristik .....	99

4.2	Designregeln für den TCDC .....	101
4.3	Experimenteller Vergleich.....	103
4.3.1	Vergleich der Betriebsgrenzen .....	103
4.3.1.1	Untere Betriebsgrenze .....	103
4.3.1.2	Obere Betriebsgrenze (Flutpunkt) .....	108
4.3.2	Vergleich der Tropfengrößenverteilung (TGV).....	112
4.3.3	Vergleich der Trenneffizienz.....	117
5	Zusammenfassung.....	119
6	Symbolverzeichnis .....	121
6.1	Griechische Symbole und Sonderzeichen .....	122
6.2	Abkürzungen .....	123
7	Literaturverzeichnis .....	124
8	Anhang.....	133
8.1	Experimentelle Daten .....	133
8.1.1	Technische Daten – Sedimentationsexperimente.....	133
8.1.2	Technische Daten PIV.....	133
8.1.3	Gemessene Vektorfelder.....	135
8.1.3.1	H/D=0,34.....	135
8.1.3.2	H/D=0,18.....	142
8.2	Ergebnisse Tracerversuche.....	146
8.2.1	Axiale Vermischung bei $H_C/D_T = 0,34$ .....	146
8.2.2	Axiale Vermischung bei $H_C/D_T = 0,18$ .....	149
8.2.3	Empirische Korrelationen .....	150
8.3	Ergebnisse – experimenteller Vergleich RDC vs. TCDC.....	151
8.3.1	Flutgrenzen .....	151
8.3.2	Tropfengrößenverteilungen .....	152
8.4	Simulationsdaten.....	157
8.4.1	Vergleich: <i>Standard Wall functions</i> vs. <i>Enhanced Wall Treatment</i> .....	157
8.4.2	Ergebnisse - Euler-Lagrange Simulation .....	160
8.4.2.1	Ergebnisse – Optimierung der axialen Rückvermischung $D_{ax,c}$ .....	160

8.4.2.1.1	Ergebnisse – Optimierung der Compartmenthöhe (I) .....	160
8.4.2.1.2	Ergebnisse – Optimierung des Wellendurchmessers .....	160
8.4.2.1.3	Ergebnisse – Optimierung der radialen Spaltposition .....	161
8.4.2.2	Ergebnisse – Optimierung der Compartmenthöhe (II) .....	162
8.4.2.2.1	Flächennutzung und Wirbelstärke .....	162
8.4.2.2.2	Ergebnisse – Sedimentationsgeschwindigkeit und $D_{ax,einzel\text{tropfen}}$ .....	164
8.4.2.3	Ergebnisse – Gekoppelte Optimierung von Compartmenthöhe und Wellendurchmesser für die statorlose Geometrie .....	166
9	Veröffentlichungen .....	168

# 1 Einleitung

## 1.1 Die flüssig/flüssig-Extraktion

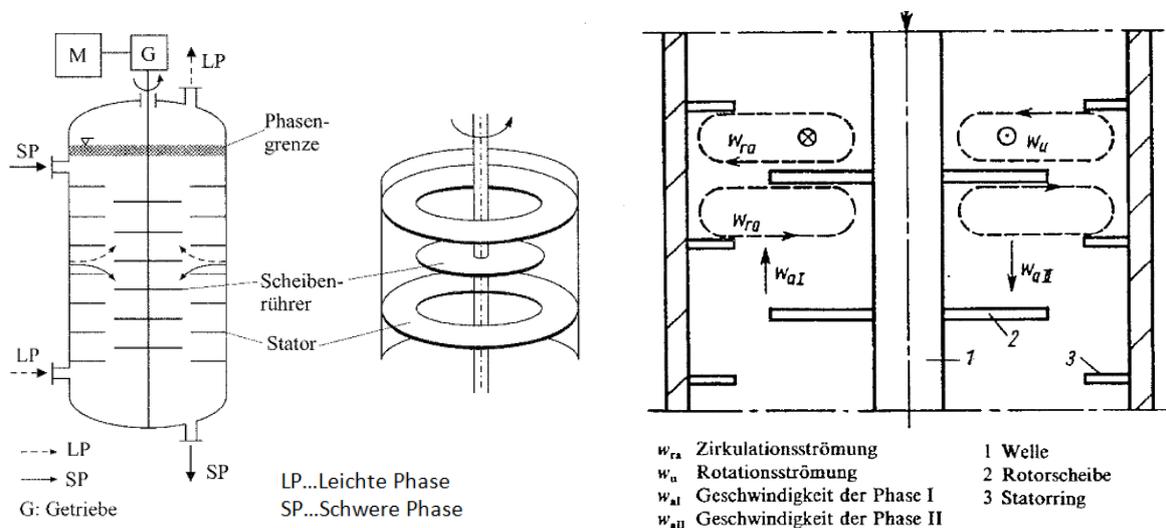
Flüssig/flüssig-Extraktion bezeichnet ein Thermisches Trennverfahren, bei dem ein Wertstoff aus einem flüssigen Gemisch mit Hilfe eines Lösungsmittels herausgelöst wird. Der Wertstoff geht beim Kontakt beider Phasen ohne zusätzlichen Eintrag von thermischer Energie sondern nur aufgrund der besseren Löslichkeit in das Lösungsmittel über. Die Extraktion ist kein eigenständiges Trennverfahren, es werden nachgeschaltete Prozesse (Rektifikation, Fällung, etc.) benötigt, um den reinen Wertstoff zu erhalten. Bei der Wahl des geeigneten Lösungsmittels ist daher immer der Gesamtprozess zu betrachten. Ferner müssen Aufnehmer- und Abgeberphase idealerweise ineinander unlöslich sein und eine Mischungslücke bilden, hohe Dichteunterschiede sind für die Phasentrennung gewünscht. Durch Dispergierung einer Phase wird die Stoffaustauschfläche maximiert, dies kann durch Pulsation oder Rühren bewerkstelligt werden. Statische bzw. gepulste Kolonnen werden eingesetzt, wenn die Grenzflächenspannung niedrig ist und das Stoffsystem somit zu Emulsionsbildung neigt oder wenn geringe Trennleistung gefordert ist. Hohe Trennleistungen können in gerührten Kolonnen (*RDC*, *Kühni*, *QVF-RZE*) erzielt werden. Durch Rührorgane induzierte Toruswirbel sorgen für radiale Vermischung und verlängern durch Mitreißen von Tropfen deren Verweilzeit im Apparat. Durch die eingebrachte turbulente Energie werden zudem Tropfen gespalten und die spezifische Oberfläche vergrößert, die mittlere Tropfengröße kann über Variation der Drehzahl reguliert werden.

Verglichen mit anderen thermischen Trennverfahren ist die axiale Vermischung bei der flüssig/flüssig-Extraktion besonders ausgeprägt. Die idealen Konzentrationsprofile werden zueinander verschoben und das treibende Gefälle für den Stoffübergang wird verringert. Diese Abweichung von der idealen Propfenströmung ist eines der zentralen Probleme für die Trenneffizienz von gerührten Kolonnen, insbesondere beim Scale up. Das Scale up soll in Kapitel 1.5.2 detaillierter eingeführt werden, da es eines der wesentlichen Optimierungsziele dieser Arbeit darstellt.

Aufgrund der Vielzahl verschränkter physikalischer Effekte ist die Wahl des geeigneten Extraktionsapparates für eine gegebene Extraktionsaufgabe keineswegs trivial oder eindeutig, es muss noch immer auf Expertenerfahrung oder heuristische Auswahlverfahren (BRANDT ET AL. [1]) zurückgegriffen werden. Die Untersuchungen dieser Arbeit beschränken sich auf die Hydrodynamik des RDC, die Erkenntnisse aus der numerischen Simulation bzw. der Einbautendimensionierung können aber auf hydrodynamisch verwandte Apparate übertragen werden. Für eine vertiefende Einführung zur flüssig/flüssig-Extraktion sei auf die Fachliteratur verwiesen (SATTLER [2], MERSMANN ET AL. [3], LO, BAIRD & HANSEN [4]).

## 1.2 Rotating Disc Contactor

Der Drehscheibenextraktor (Rotating Disc Contactor, RDC) ist die erste und einfachste Ausführung von gerührten Extraktionskolonnen und geht auf ein US-Patent von REMAN [5] im Jahr 1952 zurück. Rotorscheiben sind auf einer gemeinsamen zentralen Welle angebracht, über welche Dispersionsenergie in das System eingebracht wird. Höhenversetzt zu den Rotorscheiben sind an der Kolonnenwand Statorscheiben angebracht, welche die axiale Rückvermischung minimieren und die Kolonne in Compartments unterteilen sollen (Abbildung 1-1, links). Jedes Compartment arbeitet idealerweise als kontinuierlicher Rührkessel, die Kolonne kann als Kaskadenschaltung von kontinuierlichen Rührkesseln betrachtet werden.



**Abbildung 1-1: Schematische Darstellung des Rotating Disc Contactors [2] (links); Ausbildung zweier toroidaler Wirbel im Compartment [6] (rechts).**

Die spezifisch schwerere Phase wird am Kolonnenkopf zugeführt und strömt im Gegenstromprinzip der spezifisch leichteren Phase entgegen, welche am Kolonnenboden zugeführt wird. Die kontinuierliche Phase wird von den Rotorscheiben radial nach außen beschleunigt. Zwei Toruswirbel werden pro Compartment gebildet (Abbildung 1-1, rechts), welche die dispersen Tropfen mitreißen sollen, um deren Verweilzeit (Zeit für Stoffaustausch) im Apparat zu erhöhen. Zudem erzeugen die Rührerscheiben Turbulenz, die für Tropfenbruch und Koaleszenz verantwortlich ist und den Stoffübergang begünstigt. Vorteile des Rührens gegenüber der Pulsation als Energieeintrag ergeben sich, wenn sich die Dispergierung einer Phase z. B. wegen ihrer hohen Viskosität oder Grenzflächenspannung schwierig gestaltet. Auch die große Variationsbreite des Energieeintrages bei Rotation kann vorteilhaft genutzt werden. Durch Erhöhung der Drehzahl ist eine Verringerung der Tropfengröße und damit eine Steuerung der Stoffaustauschfläche möglich. Dieser Effekt wird durch eine Verringerung der möglichen Durchsätze beider Phasen erkauft.

Aufgrund seiner robusten Eigenschaften hat sich der RDC schnell industriell verbreitet. Die einfache und offene Einbautengeometrie erlaubt hohe Durchsätze, Anpassungsfähigkeit und Verlässlichkeit. Die Scheibengeometrie der Rührorgane erlaubt die Verarbeitung hochviskoser Rohstoffe sowie mechanisch empfindlicher Komponenten. Die Trennleistung des RDC ist im Vergleich mit späteren Entwicklungen komplexerer Einbautengeometrien (*Scheibel, Kühni, QVF-RZE*) geringer. Für die optimalen geometrischen Verhältnisse der charakteristischen Abmessungen existieren bisweilen nur empirische Designempfehlungen, KOSTERS [7] gibt folgende Korrelationen an:

$$\text{Rotordurchmesser:} \quad D_R = 0,6 \cdot D_{\text{Kolonne}} \quad (1-1)$$

$$\text{Statordurchmesser:} \quad D_S = 0,7 \cdot D_{\text{Kolonne}} \quad (1-2)$$

$$\text{Compartmenthöhe:} \quad H_C = (0,08 \dots 0,15) \cdot D_{\text{Kolonne}} \quad (1-3)$$

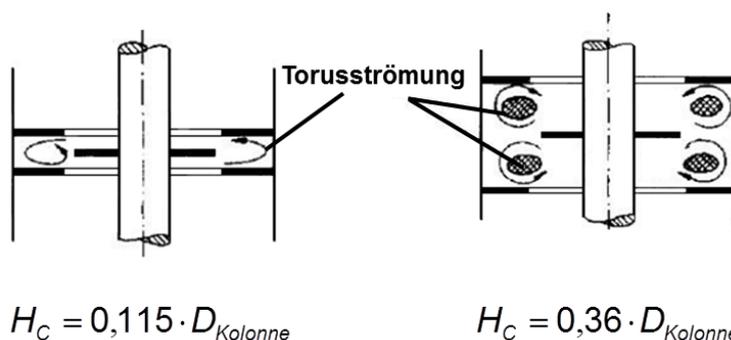
MISEK [8] gibt für die obigen Verhältnisse folgende Bereiche an:

$$\text{Rotordurchmesser:} \quad D_R = (0,45 \dots 0,65) \cdot D_{\text{Kolonne}} \quad (1-4)$$

$$\text{Statordurchmesser:} \quad D_S = (0,6 \dots 0,8) \cdot D_{\text{Kolonne}} \quad (1-5)$$

$$\text{Compartmenthöhe:} \quad H_C = (0,11 \dots 0,16) \cdot D_{\text{Kolonne}} \quad (1-6)$$

Für die reibungslose Montage und Wartung ist der Statordurchmesser größer zu wählen als der Rotorscheibendurchmesser. Bezüglich der Compartmenthöhe wird von KOSTERS [7] ein Bereich angegeben, der vom Kolonnendurchmesser abhängt. Die Compartmenthöhe ist mit steigendem Kolonnendurchmesser zu reduzieren. HUSUNG [9] hat gezeigt, dass die Compartmenthöhe fundamentale Auswirkungen auf die Wirbelstruktur hat (Abbildung 1-2). Bei ausreichender Compartmenthöhe werden zwei entgegengesetzt drehende Wirbel zwischen den Statorscheiben gebildet. Bei Reduktion der Compartmenthöhe wird nur ein Wirbel zwischen den Statorscheiben gebildet, hydrodynamisch handelt es sich dabei um zwei völlig unterschiedliche Apparate.



**Abbildung 1-2: Struktur der Toruswirbel in Abhängigkeit von der Compartmenthöhe [9].**

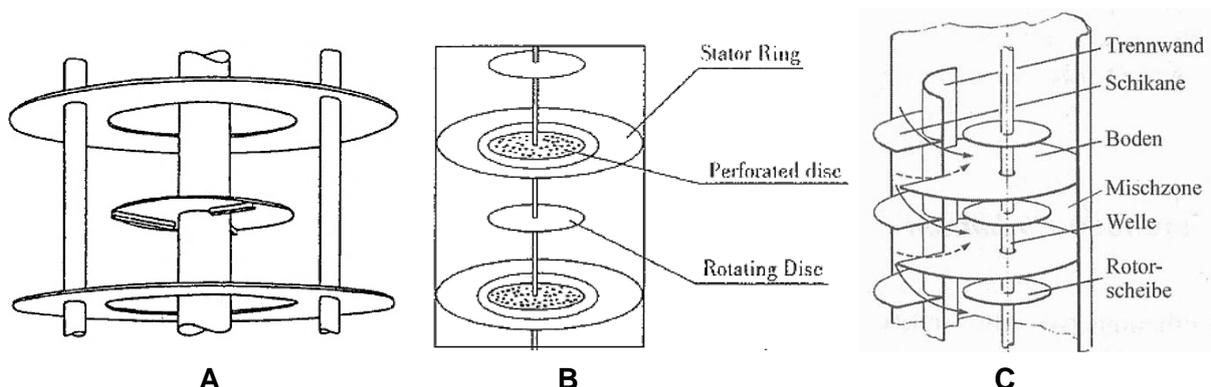
Für die Vermeidung von hydrodynamischen Totgebieten muss auch der Wellendurchmesser optimal gewählt werden. Eine Korrelation zur Ermittlung dieser wichtigen Abmessung wird in der Literatur nicht angegeben und ist daher u.a. Gegenstand dieser Arbeit.

### 1.3 Stand des Wissens

In der Literatur finden sich nur wenige dokumentierte Optimierungen des Rotating Disc Contactors. Der Begriff „Optimierung“ ist dehnbar, Kolonnengeometrien wie *Kühni* oder *Scheibel* können als eigene Kolonnentypen oder als auf Trennleistung „optimierte“ RDCs verstanden werden. Unter „Optimierung“ sollen im Folgenden Modifikationen verstanden werden, welche die Scheibengeometrie beibehalten haben und die Betriebscharakteristik des RDC<sup>1</sup> weitestgehend gewährleisten.

KRISHNAIAH ET AL. [12] verwendeten als erste perforierte Rotorscheiben und berichteten über erhöhte Trennleistung. JIA-WEN ET AL. [13] modifizierten die Rotorscheiben mit Leitblechen um eine Turbinenwirkung der Rotorscheiben zu erzielen (Abbildung 1-3A). Beim Vergleich mit dem klassischen RDC berichten die Autoren von signifikant höheren volumetrischen Stoffübergangskoeffizienten und ähnlicher Rückvermischung trotz erhöhter Rührintensität. WANG ET AL. [14] fügten auf Höhe der Statorscheiben zusätzliche rotierende perforierte Scheiben bzw. Turbinenrührer ein (Abbildung 1-3B). Der Hold-Up und die Trennleistung konnten erhöht werden, die Belastungsgrenzen waren aber wegen des erhöhten axialen Widerstandes und der verengten Querschnittsfläche geringer als beim klassischen RDC.

Die industriell am weitesten verbreitete Modifikation ist der *Asymmetric Rotating Disc Contactor* (ARD, Abbildung 1-3C) von MISEK & MAREK [15]. Der asymmetrische Statorteil unterscheidet sich durch die eingebauten vertikalen Schikanen vom klassischen RDC, das Compartment wird in Misch- und Absetzbereiche geteilt. Der ARD weist wie die übrigen Modifikationen erhöhte Trennleistung bei niedrigeren Belastungsgrenzen auf.



**Abbildung 1-3: Modifizierte Bauformen des Rotating Disc Contactors (RDC):**  
**A: Open Turbine Rotating Disc Contactor (OTRDC) [13];**  
**B: Modified Rotating Disc Contactor (MRDC) [14];**  
**C: Asymmetric Rotating Disc Contactor (ARD) [15],**

<sup>1</sup> schonender Energieeintrag, Eignung für hochviskose Systeme, einfache Konstruktion, etc.

Die oben genannten Optimierungsvorschläge sowie die späteren Kolonnentypen *Scheibel*, *QVF-RZE* und *Kühni* weisen im Vergleich zum RDC allesamt höhere Trennleistungen auf, die aufgrund der erhöhten Komplexität mit höheren Anschaffungskosten und niedrigeren Durchsätzen erkaufte wurden. Durch die meist komplexeren Einbauten kann Wirbelbildung und Dispergierung zwar intensiviert werden, die Betriebscharakteristik wird aber durch den Einbau von senkrecht zur Strömung bewegten Flächen (Paddelflächen, Innenmäntel der Löcher bei perforierten Platten, etc.) grundlegend verändert. Die wesentlichen Betriebsmerkmale des RDC, schonende Energieeintrag und hohe Belastungsgrenzen, gehen verloren.

## 1.4 Motivation und Zielsetzung

Seit der Jahrtausendwende ist ein jährlicher Anstieg des Erdölpreises um jährlich etwa 12% zu beobachten [10]. Trotz moderner Fördertechniken und der Entdeckung neuer Vorräte ist eine weitere Verknappung der fossilen Ressourcen absehbar. Ein globaler Rohstoffwandel hin zu biobasierten Rohstoffen ist in den kommenden Jahrzehnten unausweichlich, die chemische Verfahrenstechnik steht damit vor fundamentalen Veränderungen. Produkte, Prozesse und Apparate müssen optimiert, ersetzt und an die neuen Rohstoffe angepasst werden. Biobasierte Rohstoffe enthalten typischerweise wesentlich mehr Sauerstoff als fossile Rohstoffe. Die resultierenden Wasserstoffbrückenbindungen bewirken stärkere Anziehungskräfte zwischen den Molekülen. Rektifikation, das vorherrschende Trennverfahren der chemischen Industrie, bei der die molekularen Wechselwirkungskräfte durch thermischen Energieeintrag überwunden werden müssen, wird damit zunehmend unwirtschaftlich [11]. Zudem enthalten biogene Rohstoffe häufig thermisch empfindliche bzw. instabile Komponenten. Trennverfahren ohne thermischen Energieeintrag wie die flüssig/flüssig-Extraktion gewinnen zunehmend an Bedeutung.

Neben dem höheren Sauerstoffanteil weisen biobasierte Rohstoffe aber auch häufig Eigenschaften auf, die für den industriellen Betrieb von Extraktionskolonnen problematisch sind:

- Hoher Anteil an Feststoffpartikeln, die an der Phasengrenze oder an den stationären Einbauten akkumulieren. Ausbildung einer dritten Phase (Mulm) kann häufig beobachtet werden. Die Phasentrennung wird behindert und/oder das effektive Apparatevolumen wird durch Ablagerungen verringert.
- Mechanische Empfindlichkeit von biogenen Komponenten, der mechanische Energieeintrag muss schonend erfolgen.
- Hohe Viskosität einer bzw. beider Phasen.

Hinsichtlich des Energieeintrages scheint der *Rotating Disc Contactor* (RDC) am besten für die Verarbeitung viskoser biogener Rohstoffe geeignet. Der Energieeintrag durch Scheiben ist gleichförmig und beliebig justierbar, das Fehlen von Rührpaddeln verhindert Prallbeanspruchung empfindlicher Komponenten. Dagegen sind die relativ geringe Trennleistung, hervorgerufen durch die besonders stark ausgeprägte axiale Vermischung, und das *fouling* der stationären Einbauten Ansporn für die Optimierung.

Die physikalischen Phänomene, die in einem flüssig/flüssig-Extraktor auftreten, sind derart komplex mit einander verflochten, dass sie bis heute keine theoretisch fundierte Auslegung von Extraktionskolonnen mit rotierenden Einbauten erlauben. Das Design der ersten und einfachsten Ausführung von gerührten Kolonnen (RDC) basiert immer noch auf starren empirischen Designregeln [7], [8], die keine Angabe zum optimalen Wellendurchmesser machen und daher die Compartmentgeometrie unvollständig beschreiben. Alle geometrischen Verhältnisse der Einbauten haben fundamentale Auswirkungen auf die Hydrodynamik und damit auf die Trennleistung. Das komplexe Verhalten der Toruswirbel ist auch Grund für Probleme, die sich beim Scale up von gerührten Kolonnen ergeben. Die Wirbelstruktur von Laborkolonnen lässt sich nicht beliebig auf industriellen Maßstab übertragen, auch wenn geometrische Ähnlichkeit gegeben ist. In den nicht von den Toruswirbeln erfassten Bereichen bilden sich Totzonen aus, welche die Verweilzeitverteilung beider Phasen verbreitern und damit Trenneffizienz drastisch reduzieren.

Der Einsatz von *Computational Fluid Dynamics* (CFD) ist aufgrund der stetig wachsenden Rechenkapazitäten der letzten Jahrzehnte ein zukunftsträchtiges Werkzeug für Design und Scale up von gerührten Extraktionskolonnen. Mit der systematischen Abfolge von virtuellen Experimenten sind Einsichten in das Strömungsverhalten möglich, die im Technikumsmaßstab bisweilen nur unter sehr hohem experimentellen Aufwand und im industriellen Maßstab praktisch nicht zugänglich waren. Die optimale Geometrie kann unabhängig von der Apparategröße auf der Basis von Erhaltungsgleichungen und theoretisch fundierten Modellen untersucht werden.

In der vorliegenden Arbeit soll der *Rotating Disc Contactor*, als vielversprechender Apparat für die Verarbeitung biobasierter Rohstoffe, hinsichtlich der Trennleistung optimiert werden. Die konstruktive Komplexität des Apparates (Investitionskosten) soll nicht erhöht werden, ebenso soll die Betriebscharakteristik des RDC (offene, einfache Bauweise mit Energieeintrag durch Rotorscheiben) weitestgehend bewahrt bleiben. Das Wechselspiel aus Experiment und CFD-Simulation soll das primäre Werkzeug, mit dem die empirischen Designregeln von MISEK [8] und KOSTERS [7] validiert, aktualisiert und vervollständigt werden sollen, sein. Gegebenenfalls sollen neue auf experimentell validierten Simulationen basierende Designempfehlungen erarbeitet werden, welche die komplexe Hydrodynamik der Toruswirbel berücksichtigen und somit für alle Apparategrößen Gültigkeit besitzen.

## 1.5 Theoretischer Hintergrund

### 1.5.1 Taylor-Couette-Reaktoren

*Taylor-Couette*-Strömung bezeichnet toroidale Wirbel, die im Spalt zwischen zwei konzentrischen und relativ zueinander rotierenden Zylindern auftreten können. Erste systematische Untersuchungen hierzu wurden von TAYLOR [16] durchgeführt. Nach dem Überschreiten einer kritischen relativen Rotationsgeschwindigkeit der Zylinder schlägt die *Couette*-Strömung (zweidimensionale Spaltströmung) in die *Taylor-Couette*-Strömung um, axialsymmetrische Toruswirbel mit alternierender Drehrichtung werden gebildet. In der Praxis hat sich die Konstruktion, bei der der äußere Zylinder ruht und der innere rotiert (Abbildung 1-4), durchgesetzt.

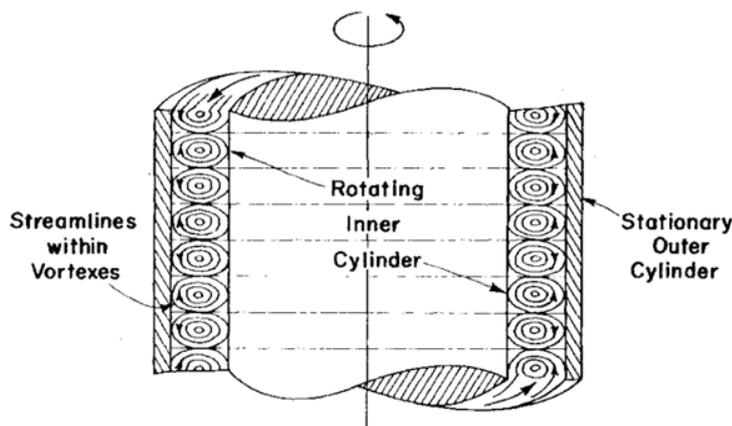


Abbildung 1-4: Taylor-Couette Wirbel, [17].

Neben der laminaren *Taylor-Couette*-Strömung gibt es bei weiterer Erhöhung der relativen Rotationsgeschwindigkeit eine Vielzahl von weiteren Strömungsformen, die im Wesentlichen von überlagerten Wellenbewegungen der Wirbel geprägt sind. Bis zu 74 stabile Strömungszustände werden in der Literatur genannt [18].

Die Grenzen der einzelnen Strömungsregime wurden von ANDERHECK ET. AL. [19] in Abhängigkeit der beiden Rotationsgeschwindigkeiten systematisch untersucht und dargestellt. Im für praktische Anwendungen relevanten Fall,  $Re_o = 0$  (ruhender Außenzylinder), können in Abhängigkeit von  $Re_i$  fünf Strömungsregime beobachtet werden:

- laminare *Couette*-Strömung (Ringspaltströmung ohne Wirbel)
- laminare *Taylor-Couette*-Strömung
- wellige Wirbelströmung
- frequenzmodulierte wellige Wirbelströmung
- turbulente *Taylor-Couette*-Strömung

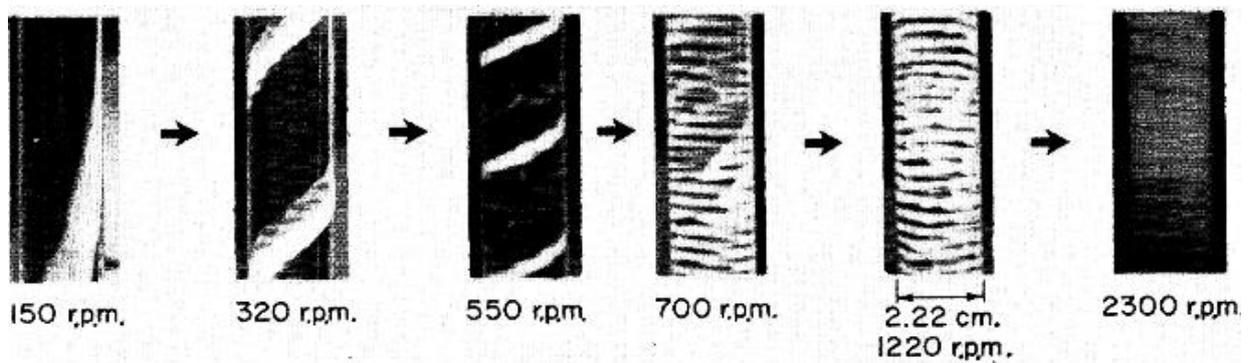
Für die Charakterisierung der jeweiligen Umschlagspunkte wird die Taylorzahl  $Ta$ , eine mit geometrischen Verhältnissen modifizierte Reynoldszahl, herangezogen. In der Fachliteratur existiert eine Vielzahl an Definition der Taylorzahl, die im Wesentlichen das Verhältnis zwischen viskosen und zentrifugalen Kräften repräsentieren, die häufigste Form lautet [20]:

$$Ta = \sqrt{\frac{d}{R_i} \frac{R_i \Omega d}{\nu}} \quad (1-7)$$

Die gleichmäßige Verteilung der Mischintensität und der Energiedissipation machen die *Taylor-Couette*-Strömung für verschiedene verfahrenstechnische Prozesse interessant. Bei Fällungsreaktionen können beispielsweise enge Partikelgrößenverteilungen erzielt werden [21]. Der mechanisch schonende Mischvorgang ohne scharfe Kanten und Rührorgane findet in der Zucht von empfindlichen Zellkulturen Anwendung [22].

Eine Vielzahl von Autoren hat das Mischverhalten und die verfahrenstechnische Umsetzung von *Taylor-Couette*-Apparaten untersucht, die Erkenntnisse sind wegen der hydrodynamischen Ähnlichkeit auch für das Strömungsverhalten von RDC-Kolonnen relevant. GREBE [23] beschäftigte sich mit der CFD-Simulation und der mathematischen Modellierung des Mischverhaltens. Starke Anisotropie der Mischgeschwindigkeit (schnelle radiale Durchmischung, mäßige tangentielle Durchmischung und geringe axiale Vermischung) wurden in numerischen Simulationen gezeigt. RACINA [24] kommt mittels PIV-Messungen auf übereinstimmende Ergebnisse und gibt Korrelationen für die axialen Dispersionskoeffizienten in Abhängigkeit von der axialen und tangentialen Reynoldszahl an. MOORE & COONEY [25] führten Tracerexperimente durch und stellten fest, dass die Rührintensität (tangentielle Reynoldszahl) einen weit höheren Einfluss auf die axiale Vermischung hat als der axiale Volumenstrom (axiale Reynoldszahl). LUEPTOW ET. AL. [26] zeigten die Entstehung weiterer Strömungsregime bei der Überlagerung mit axialer Strömung, die für die Realisierung kontinuierlich betriebener Apparate notwendig ist. Durch Erhöhung der axialen Strömungsgeschwindigkeit kann es zur Ausbildung einer Drallströmung kommen, bei der die Wirbel nicht mehr in einzelnen Tori vorliegen sondern durch einen gemeinsamen spiralförmigen Wirbelkern verbunden sind. Die Strömung wird durch die axiale Überlagerung stabilisiert, die Übergänge zwischen Strömungsregimen ereignen sich bei höheren Reynoldszahlen als im Vergleichsfall ohne axial überlagerter Strömung. Der Steigungswinkel der Wirbelspirale hängt vom Verhältnis der axialen zur tangentialen Reynoldszahl ab. RESENDE ET. AL. [27] fanden Anwendung in der heterogenen Katalyse. Katalysatorpartikel können in den Wirbelzentren festgehalten werden und weisen höhere mittlere Verweilzeiten auf als die umströmende kontinuierliche Phase. Die volumetrische Konzentration der fluidisierten Partikel innerhalb der Wirbelkerne ist dabei unabhängig von der axialen bzw. tangentialen Reynoldszahl, vorausgesetzt, die kritische

Taylorzahl wird überschritten und *Taylor-Couette*-Wirbel werden ausgebildet. RICHTER ET. AL. [28] zeigten, dass mit Hilfe von modifizierten Rotorgeometrien das Mischverhalten der *Taylor-Couette*-Wirbel beeinflusst werden kann. Bei Versuchen mit geripptem Innenzylinder stellten die Autoren eine Immobilisierung und Stabilisierung der Wirbel fest. Die radiale Vermischung konnte durch Manipulation der Rotorgeometrie intensiviert werden bei gleichzeitiger Reduktion der unerwünschten axialen Vermischung. DAVIS & WEBER [17] untersuchten die *Taylor-Couette*-Strömung in Kombination mit der flüssig/flüssig-Extraktion und zeigten, dass sich die disperse Phase erst ab einer kritischen Drehzahldifferenz bzw. Taylorzahl in die Wirbel mischt (Abbildung 1-5). Unterhalb der kritischen Taylorzahl steigt die disperse Phase entlang einer spiralförmigen Bahn auf, die sich aus der Kräftebilanz von Zentrifugalkraft und Auftriebskraft ergibt. Die Schleppkraft der Wirbel ist erst ab einer kritischen Taylorzahl groß genug, um die Auftriebskraft der Tropfen zu überwinden.



**Abbildung 1-5: Die disperse Phase mischt sich in die Taylor-Couette-Wirbel nach überschreiten der kritischen Taylorzahl, [17]**

Obiger Mechanismus kann dazu verwendet werden, um Partikel in einer Suspension zu klassieren. OHMURA ET. AL. [29] zeigten, dass die Überlagerung der *Taylor-Couette*-Strömung mit axialer Strömung dazu führt, dass kleine Partikel in den Wirbelzentren akkumulieren, während große Partikel nicht in die Wirbel eindringen und somit ausgetragen werden. Die Autoren demonstrierten experimentell und numerisch, dass Partikel von einigen  $\mu\text{m}$  bis zu einigen mm auch bei geringen Dichteunterschieden ( $\rho_d / \rho_c \sim 1,04$ ) axial klassiert werden können. BAIER [30] nutzte die Bildung von *Taylor-Couette*-Wirbeln für die flüssig/flüssig-Extraktion in einem Zentrifugalextraktor. Durch die Bildung einer zur Rotationsachse konzentrischen zylindrischen Phasengrenzfläche wurde ein untypischer Ansatz gewählt. Die in beiden Phasen auftretenden *Taylor-Couette*-Wirbel intensivieren den Stofftransport an die Grenzfläche hin, bzw. von der Grenzfläche weg, ohne eine Phase in der anderen zu dispergieren. Gleichgültig ob in der heterogenen Katalyse, der Züchtung von Zellkulturen, der Fällung oder der flüssig/flüssig-Extraktion ergeben sich bei der industriellen Umsetzung der *Taylor-Couette*-Strömung die gleichen Probleme:

- Die *Taylor-Couette*-Strömung ist ein Phänomen, das im Ringspalt auftritt. Das effektive Reaktorvolumen ist gering im Verhältnis zur Apparategröße. Nach JONES [31] [32] existieren die axialsymmetrischen Toruswirbel stabil in einem Bereich zwischen  $R_i/R_o = 0,75$  und  $R_i/R_o = 0,8$ .
- Die Instabilitäten der *Taylor-Couette*-Wirbel und die Vielzahl an möglichen Strömungsregimen erschweren die Prozessregelung. Die Forderung nach konstanter Produktqualität ist bei Lastwechsel oder Störungen der Betriebsbedingungen schwer zu realisieren.

## 1.5.2 Toruswirbel in gerührten Extraktionskolonnen

Die radiale Beschleunigung der kontinuierlichen Phase mit Rührorganen bewirkt das Entstehen von toroidalen Wirbeln (Abbildung 1-2). Angestrebt werden stabile stationäre Wirbel, deren Schleppkraft die freie Tropfensedimentation verlangsamt um damit die mittlere Tropfenverweilzeit (Zeit für Stoffaustausch) erhöht. Die Wirbel sollen außerdem das im Compartment verfügbare Volumen möglichst vollständig ausfüllen. GODFREY ET AL. [33] berichten von Totvolumina eines RDC150 von bis zu 10%, in denen die Verweilzeit des injizierten Tracers mehr als das Doppelte der Verweilzeit der kontinuierlichen Phase beträgt. Totvolumina sind mögliche Hauptverursacher für axiale Dispersion und für den Abfall der Trennleistung beim Scale up von gerührten Extraktionskolonnen verantwortlich.

Wirbel sind Phänomene der Strömungsmechanik, die zwar intuitiv gut erkennbar sind (Abbildung 1-6 links), für die aber objektive mathematische Kriterien schwierig zu formulieren sind. Aufgrund der Vielzahl von Erscheinungsformen auf einem breiten Spektrum von Raum- und Zeitskalen existiert bis heute keine allgemeingültige Definition, die allen Aspekten von wirbelbehafteten Strömungen gerecht wird [34]. In den letzten drei Jahrzehnten wurde eine Vielzahl von Identifizierungsmethoden, Definitionen und Visualisierungsmöglichkeiten von Wirbeln vorgestellt, eine Übersicht wird in KOLAR [34] und CHAKRABORTY [35] gegeben. Obwohl kein Konsens über die Wirbeldefinition herrscht, wird meist auf die physikalische Größe Vortizität  $\omega$  Bezug genommen:

$$\omega = \nabla \times \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial w/\partial y - \partial v/\partial z \\ \partial u/\partial z - \partial w/\partial x \\ \partial v/\partial x - \partial u/\partial y \end{pmatrix} \quad (1-8)$$

Der Vortizitätstensor  $\omega$  stellt die Eigenrotation bzw. den Spin eines Volumenelementes um seine drei möglichen Drehachsen dar. Vortizität allein ist kein ausreichendes Kriterium für das Vorhandensein von Wirbelstrukturen, reine Scherströmungen (*Couette*-Strömungen) beispielsweise induzieren Vortizität ohne Ausbildung von Wirbeln [36]. Andersrum können

Wirbelstrukturen vergleichsweise geringe Vortizität beinhalten. Abbildung 1-6 (Mitte) zeigt einen typischen Vortizitätsplot im RDC-Compartment. Dabei lassen sich die Wirbelgebiete erahnen, gleichzeitig wird der höhere Vortizitätseintrag durch die Scherbewegung des Rotors deutlich<sup>2</sup>. Integration der Vortizität über eine endliche Fläche  $A$ , eingeschlossen von der Kontur  $C$ , ergibt die integrale Größe Zirkulation  $\Gamma$ :

$$\Gamma = \int_A \omega \, dA = \oint_C u \, dx \quad (1-9)$$

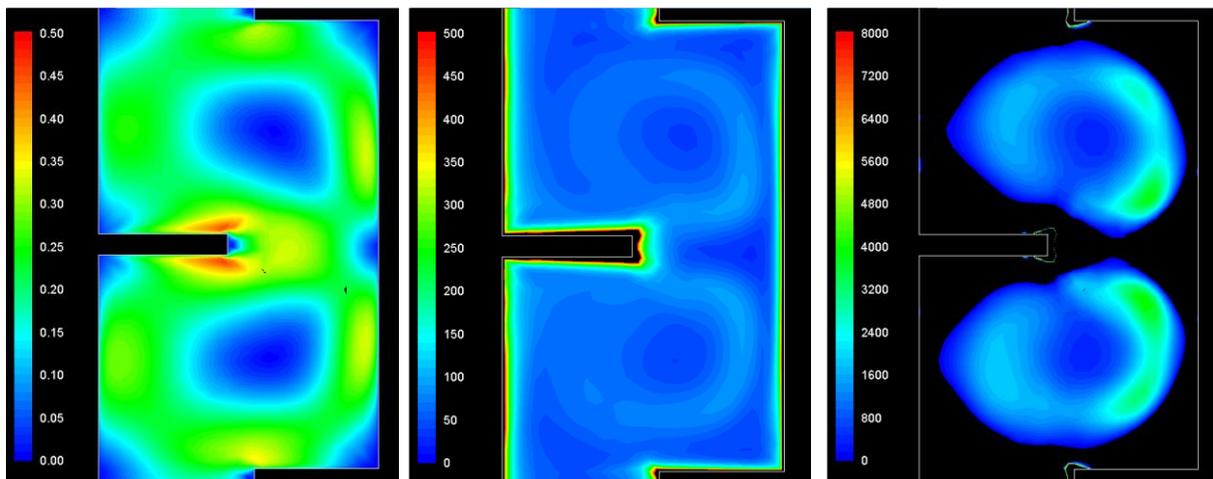
Die Zirkulation beschreibt die in einem definierten Bereich auftretende Drehung und kann als Maß für die Wirbelstärke interpretiert werden, sofern die Konturen des Wirbels bzw. die Wirbelfläche bekannt sind. Die Identifikation jener Konturen bzw. Flächen ist ein herausforderndes und aktives Forschungsfeld der Fluidmechanik, zahlreiche Methoden wurden vorgestellt ( $Q$ -Kriterium [37], *Komplexe-Eigenwerte-Verfahren* bzw.  $\Delta$ -Kriterium [38],  $\lambda_2$ -Kriterium [39],  $\lambda_{ci}$ -Kriterium [40]), die meist auf der Analyse des Geschwindigkeitsgradienten-vektors  $\nabla u = S + \Omega$  beruhen und je nach Strömungsregime Gültigkeit besitzen. Die Wirbelauswertung der vorliegenden Arbeit wurde wegen der einfachen Implementierung in CFD mit dem  $Q$ -Kriterium durchgeführt, für alternative Methoden sei auf die Literatur verwiesen. HUNT ET AL. [37] definieren die Bereiche eines inkompressiblen Strömungsfeldes dann als Teil des Wirbels, wenn die zweite Invariante des Geschwindigkeitsgradientenvektors  $\nabla u$  positiv ist. Dies sind Bereiche, in denen die Vortizität  $\omega$  über die Scherrate  $S$  dominiert:

$$Q = \frac{1}{2} \left( \|\omega\|^2 - \|S\|^2 \right) > 0 \quad (1-10)$$

Abbildung 1-6 (rechts) zeigt einen typischen  $Q$ -Konturplot für  $Q > 0$ . Die Bereiche hoher Vortizität im Bulk des Compartments bleiben erhalten, während die wandnahen Bereiche hoher Schervortizität gefiltert werden<sup>3</sup>.  $Q$  bezeichnet ein lokales Maß für die überschüssige Drehung relativ zur Scherrate. Die resultierende Fläche liefert die Integrationsgrenzen für die Berechnung der Zirkulation  $\Gamma$  (Gleichung (1-9)).

<sup>2</sup> Die Vortizität der wandnahen Bereiche liegt mehrere Größenordnungen außerhalb des in Abbildung 1-6 dargestellten Intervalls.

<sup>3</sup> An den Spitzen der Rotor- und Statorscheiben befinden sich Bereiche, die vom  $Q$ -Kriterium als Wirbelgebiete identifiziert werden. Da diese Gebiete nicht für die spätere Auswertung der Flächennutzung und Wirbelstärke (Kapitel 3.2.2.2) relevant sind, wurden sie durch die Wahl geeigneter Grenzen der  $Q$ -Werte gefiltert. Die  $Q$ -Werte an den Rotor- und Statorspitzen sind um mehrere Größenordnungen höher als die maximalen  $Q$ -Werte im Toruswirbel.



**Abbildung 1-6: Beispiele für Konturplots eines RDC100 ( $H_C/D_K = 0.44$ ,  $650[1/\text{min}]$ ,  $45[l/h]$ )**  
 links: Betrag der Geschwindigkeit in der Ebene in  $[m/s]$ ;  
 mitte: Konturplot der Vortizität in  $[1/s]$ ;  
 rechts: Konturplot von  $Q > 0$  in  $[1/s^2]$

### 1.5.3 Strömungsverhalten realer Kolonnen

Als „ideale Reaktoren“ bezeichnet man zwei mögliche theoretische Grenzfälle, die für die Herleitung von Designgleichungen herangezogen werden. Im idealen Rohrreaktor (*plug flow reactor*, PFR) wird die Geschwindigkeitsverteilung quer zur Strömungsrichtung konstant angenommen. Die ideale Kolben- bzw. Propfenströmung weist nur axiale Gradienten auf, in radialer Richtung wird der Reaktor als ideal durchmischt betrachtet.

Beim idealen kontinuierlichen Rührkessel (*continuous stirred tank reactor*, CSTR) wird die Konzentration im Reaktor konstant angenommen, der eintretende Strom wird in der Modellvorstellung instantan mit dem gesamten Reaktorvolumen vermischt. Im Reaktor treten keine räumlichen Gradienten auf.

Die Strömungsverhältnisse in realen Apparaten sind zwischen den oben genannten idealisierten Grenzfällen einzuordnen. Umgelegt auf eine Extraktionskolonne verursachen folgende reale Strömungsbedingungen Abweichungen von der idealen Propfenströmung:

- Turbulente Schwankungsbewegungen verursachen Rück- und Vorvermischung beider Phasen. Die Turbulenz bzw. die turbulente Energiedissipation  $\varepsilon$  ist außerdem die bestimmende Größe für Tropfenbruch und Tropfenzerfall und damit für die Tropfengrößenverteilung. Je enger die Tropfengrößenverteilung ist, desto einheitlicher ist die Sedimentationsgeschwindigkeit der dispersen Phase und desto geringer ist die Abweichung von der Propfenströmung.
- Einbauten, die für die Strömungsführung oder den Energieeintrag notwendig sind, erzeugen Kurzschlussströmungen und Totgebiete im Strömungsfeld. Beide sind gleichermaßen für die Verbreiterung der Verweilzeitverteilung beider Phasen verantwortlich.

- Durch den Gegenstrom zweier flüssiger Phasen entstehen ebenfalls Effekte, die die axiale Vermischung beider Phasen verstärken. Im Sog der sedimentierenden Tropfen wird je nach Tropfengröße und Turbulenzintensität kontinuierliche Phase mittransportiert (*wake entrainment*). Andersrum können kleine Tropfen aufgrund der geringen Auftriebskraft nicht schnell genug sedimentieren und werden von der kontinuierlichen Phase gegen die freie Sedimentationsrichtung rückvermischt und im Extremfall mit der kontinuierlichen Phase ausgetragen.

Das Zusammenwirken obiger Effekte wird als „axiale Dispersion“ zusammengefasst und mit dem axialen Dispersionskoeffizienten  $D_{ax}$  [m<sup>2</sup>/s] quantifiziert. Die axiale Dispersion hat formal die gleiche Einheit wie die molekulare Diffusion, welche typischerweise um mehrere Größenordnungen kleiner ist und nur unwesentlich zur Abweichung von der Propfenströmung beiträgt. Die zwei wesentlichen Modelle zur Beschreibung der axialen Dispersion in turbulenten Systemen sind das Kaskadenmodell (*tank in series model*) und das Dispersionsmodell, welches in dieser Arbeit angewandt wurde. Für laminare Strömungen, in denen die axiale Dispersion zum größten Teil durch das parabolische Geschwindigkeitsprofil hervorgerufen wird, sei auf das *pure convection model* in [41] verwiesen, das aber nicht näher behandelt werden soll.

### 1.5.3.1 Dispersionsmodell

Das Dispersionsmodell geht von der Überlagerung des konvektiven Transportes mit dem dispersiven Transport aus (Abbildung 1-7).

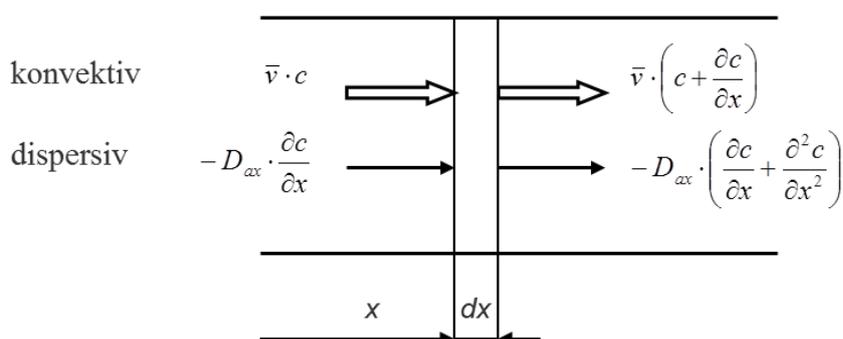


Abbildung 1-7: Überlagerung von konvektivem und dispersivem Transport.

Nach Normierung der axialen Koordinate  $x$  auf die Reaktorlänge  $L$ :

$$z = \frac{x}{L} \tag{1-11}$$

und Einführung der auf die mittlere Verweilzeit  $\tau$  normierten dimensionslosen Zeitvariable

$$\Theta = \frac{t}{\tau} = \frac{t \cdot \bar{v}}{L} \quad (1-12)$$

führt die Überlagerung der Transportterme zu einer partiellen Differenzialgleichung, die als Dispersionsmodell bezeichnet wird:

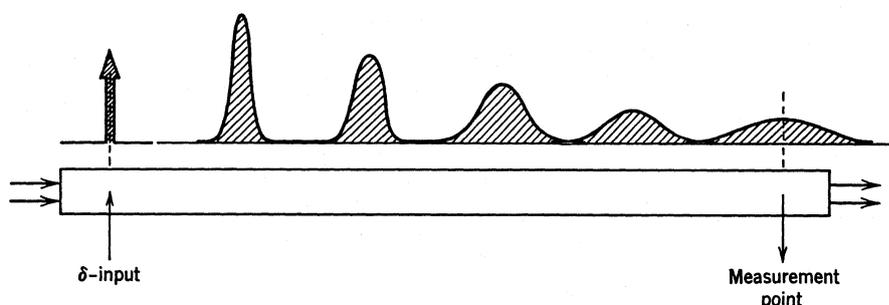
$$\frac{\partial c}{\partial \Theta} = \frac{1}{Bo} \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \frac{\partial c}{\partial z} \quad (1-13)$$

mit der dimensionslosen Kennzahl

$$Bo = \frac{v \cdot L}{D_{ax}} \quad (1-14)$$

Die Bodensteinzahl  $Bo$  stellt das Verhältnis von konvektivem zu dispersivem Transport dar.  $Bo = \infty$  bedeutet Propfenströmung (idealer Rohrreaktor),  $Bo = 0$  bedeutet völlige axiale Durchmischung (idealer Rührkessel). Die Bodensteinzahl ist gleichbedeutend mit der axialen Pecletzahl  $Pe_{ax}$ , in der englischsprachigen Literatur ist der Kehrwert, die *vessel dispersion number*, üblich.

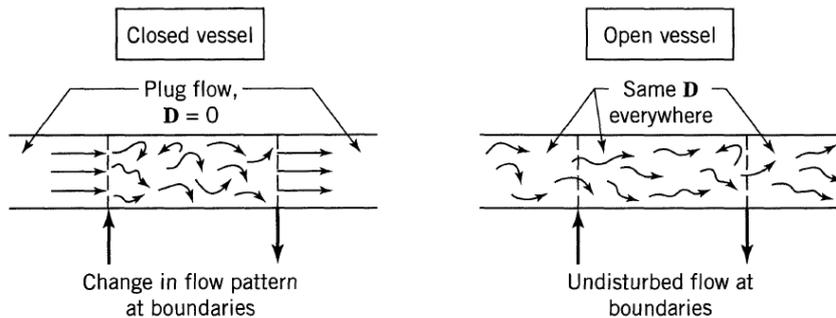
Für die experimentelle Bestimmung der Verweilzeitverteilung bzw. der Bodensteinzahl und damit des axialen Dispersionskoeffizienten  $D_{ax}$ , werden typischerweise Tracerversuche durchgeführt. Es wird ein Störsignal (Dirac- $\Delta$ -Funktion oder Sprungfunktion) am Reaktoreintritt aufgebracht und das Antwortsignal am Reaktorausritt gemessen. In der vorliegenden Arbeit wurde ausschließlich mit Stoßsignalen gearbeitet, weshalb nur diese Form der Auswertung näher beschrieben wird. Injiziert man an einer Stelle im Apparat eine Stoßfunktion, so wird dieses Signal (z.B. Konzentration eines Tracer-Stoffes) beim Durchströmen des Apparates aufgrund der axialen Dispersion verbreitert.



**Abbildung 1-8: Signalaufweitung durch axiale Dispersion.**

Die Antwortkurven des Reaktors hängen wesentlich von Randbedingungen am Injektionspunkt und am Detektionspunkt ab. LEVENSPIEL [41] unterscheidet zwischen der

*closed vessel*- und der *open vessel*-Randbedingung (Abbildung 1-9). Erstere geht von idealer Propfenströmung außerhalb der Messstrecke aus, es gibt keine Vermischung über die Injektions- oder Detektionsstelle. Bei der *open vessel* Randbedingung wird die Vermischung über die Injektions- und Detektionsstellen berücksichtigt. Dies entspricht dem Versuchsaufbau dieser Arbeit, bei dem nicht an den Reaktorenden, sondern im aktiven Teil injiziert und detektiert wird.



**Abbildung 1-9: Randbedingungen an Injektions- und Detektionsstellen [35].**

Die Verteilungskurven an einer Stelle stromabwärts im Apparat wurde für einen Dirac- $\Delta$ -Stoß von LEVENSPIEL [41] analytisch hergeleitet (*Open-vessel*-Randbedingungen für Injektion und Detektion, große Rückvermischung  $Bo < 100$ ):

$$C = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\frac{\tau \cdot Bo}{\pi \cdot t}} \cdot \exp \left[ \frac{-\tau \cdot Bo \cdot \left(1 - \frac{t}{\tau}\right)^2}{4 \cdot t} \right] \quad (1-15)$$

Durch nichtlineare Regression von Gleichung (1-15) an die erhaltenen Verweilzeitkurven werden die Parameter mittlere Verweilzeit  $\tau$  und Bodensteinzahl  $Bo$  erhalten (Kapitel 2.4.1 & 3.1.2.). Bei bekannter Phasengeschwindigkeit und bekanntem Abstand zwischen Injektion und Detektion kann der axiale Dispersionskoeffizient  $D_{ax}$  berechnet werden. Für eine detailliertere Abhandlung sei auf die Fachliteratur verwiesen [41].

### 1.5.3.2 HTU/HDU-NTU Konzept

Die Höhe bzw. Länge von Stoffaustauschapparaten mit kontinuierlichem Phasenkontakt wird über das klassische HTU-NTU Konzept berechnet:

$$H_{Kolonne} = HTU \cdot NTU = \frac{\dot{V}_c}{A_{Quer} \cdot k_c \cdot a} \cdot \int_{X_o}^{X_a} \frac{dX}{X - X^*} \quad (1-16)$$

Dabei wird die Höhe einer theoretischen Trennstufe (HTU) mit der Anzahl der theoretischen Trennstufen (NTU) multipliziert. Im Gegensatz zu gas/flüssig-Stoffaustauschapparaten in der Absorption oder Rektifikation ist die Auslegung von flüssig/flüssig-Stoffaustauschapparaten aufgrund der geringeren Dichteunterschiede und der damit verbundenen stärker ausgeprägten axialen Dispersion beider Phasen mit dem klassischen HTU-NTU Konzept nicht ausreichend genau. Durch den unerwünschten axialen Transport von Volumenelementen hoher Wertstoffkonzentration in Bereiche niedriger Konzentration und vice versa, wird das treibende Gefälle (Konzentrationsdifferenz zwischen den Phasen) für den Stoffaustausch reduziert. Besonders an den Phaseneinlässen kommt es zu sprunghaften Konzentrationsänderungen (Abbildung 1-10). Axiale Dispersion gilt als eines der größten Probleme bei der Auslegung und dem Scale up von gerührten Extraktionskolonnen. In der industriellen Praxis wurde das modifizierte HTU/HDU-NTU Konzept eingeführt. Typischerweise wird der HTU modifiziert um axiale Vermischungseffekte zu berücksichtigen:

$$H_{\text{Kolonne}} = \overline{HTU} \cdot NTU \quad (1-17)$$

mit

$$\overline{HTU} = HTU + HDU \quad (1-18)$$

Der HDU-Wert stellt die „Höhe einer Dispersionseinheit“ dar. Es ist die Höhe, um die jede theoretische Trennstufe vergrößert werden muss, um die axiale Vermischung auszugleichen. Für den industriell typischen Fall von  $\varepsilon = 1$  setzt sich der HDU-Wert aus den axialen Dispersionskoeffizienten sowie den mittleren Geschwindigkeiten der einzelnen Phasen zusammen [2]:

$$HDU = \frac{D_{ax,c}}{\bar{v}_c} + \frac{D_{ax,d}}{\bar{v}_d} \quad (1-19)$$

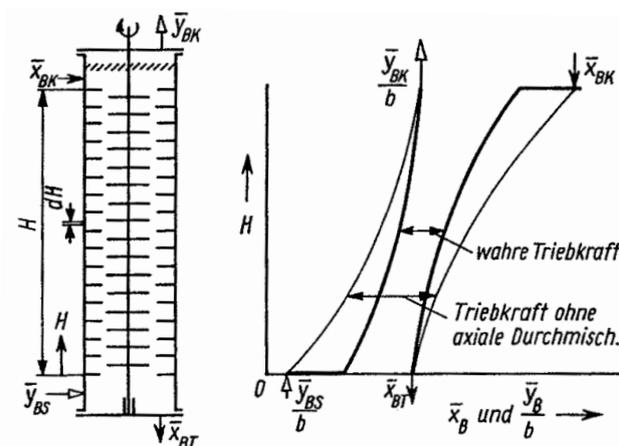


Abbildung 1-10: Verringerung der Konzentrationsdifferenz durch axiale Dispersion [6]

## 2 Experimentelles

Insgesamt standen drei RDC-Kolonnen im Technikums- bzw. Labormaßstab für die experimentelle Datenerfassung zur Verfügung (Tabelle 2.1): Zwei Kolonnen (RDC150 & RDC100) mit je 3 [m] aktiver Höhe sowie ein RDC100 mit 1 m aktiver Höhe (Abbildung 2-2). Der RDC150 wurde im Rahmen der Dissertation GURKER [40] aufgebaut. Die vorangegangene Diplomarbeit [41] sowie Teile der numerischen Optimierung dieser Arbeit beziehen sich auf die Geometrie des RDC150.

Für die experimentelle Validierung der Ergebnisse der numerischen Modellierung wurde in dieser Arbeit ein RDC100 mit 3 [m] aktiver Höhe neu geplant und aufgebaut. Für zwei Konfigurationen der Compartmenthöhe ( $H_C/D_T = 0,34$  und  $H_C/D_T = 0,18$ ) wurden an dieser Kolonne im Rahmen der Diplomarbeiten PRIELER [42] und ZÖRWEG [43] *Particle Image Velocimetry*, Tracerversuche sowie Stoffaustauschversuche durchgeführt. Diese sollen in den folgenden Kapiteln näher behandelt werden.

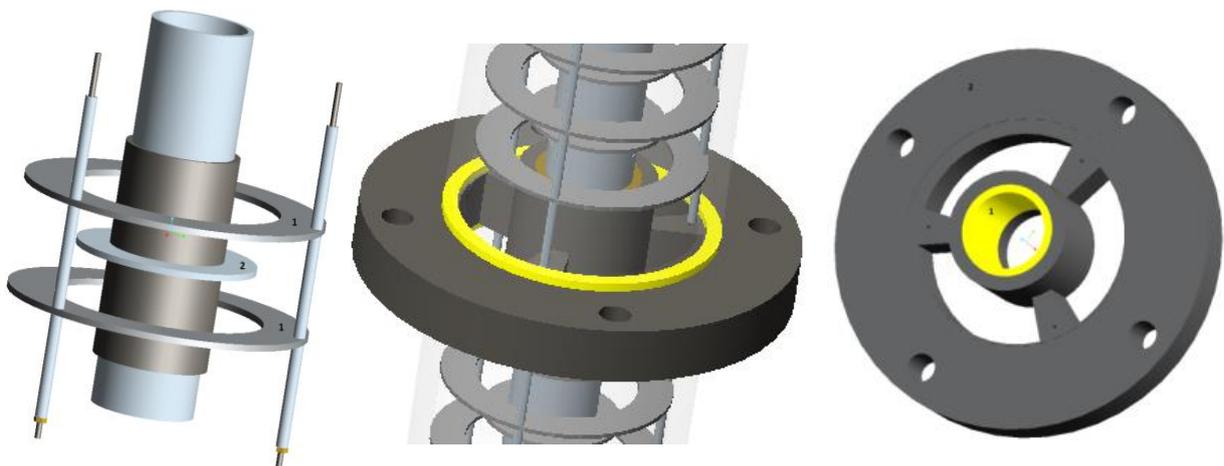
Aus Gründen der einfacheren Handhabbarkeit bei der Umgestaltung von Kolonneneinbauten wurde eine weitere mobile Laborkolonne mit 1 [m] aktiver Höhe im Rahmen der Diplomarbeit WEINLÄNDER [46] neu geplant und aufgebaut. Für das aus der CFD-Sensitivitätsanalyse (Kapitel 3.1.3 & 3.2.2.2) resultierende optimierte Compartmentdesign (Kapitel 4) wurde an dieser Kolonne die Trennleistung überprüft. Die Ergebnisse der Stoffaustauschversuche werden in Kapitel 4.3.2, präsentiert. Neben der Trennleistung wurden an der Laborkolonne auch die Betriebsbereiche verglichen. Die unteren Betriebsgrenzen wurden in Sedimentationsversuchen am Einzeltropfen in der Diplomarbeit SARZIO [47] untersucht. Die Ergebnisse werden zusammen mit den Flutgrenzen in Kapitel 4.3.1 vorgestellt.

**Tabelle 2.1: Übersicht über die experimentell untersuchten Konfigurationen des RDC.**

Kolonne	$H_{\text{Aktiv}}$ [m]	$D_R$ [mm]	$D_S$ [mm]	$D_W$ [mm]	$H_C/D_T$ [-]	$H_C/B_C$ [-]
<b>Technikumsmaßstab:</b>						
RDC150	3	90	105	54	0,186	0,6
RDC100	3	60	70	38	0,34	1,1
RDC100	3	60	70	38	0,18	0,6
<b>Labormaßstab:</b>						
RDC100 (klassisch)	1	72,5	77,5	48,5	0,34	1,3
RDC100 (optimiert)	1	86	-	48,5	0,34	1,3

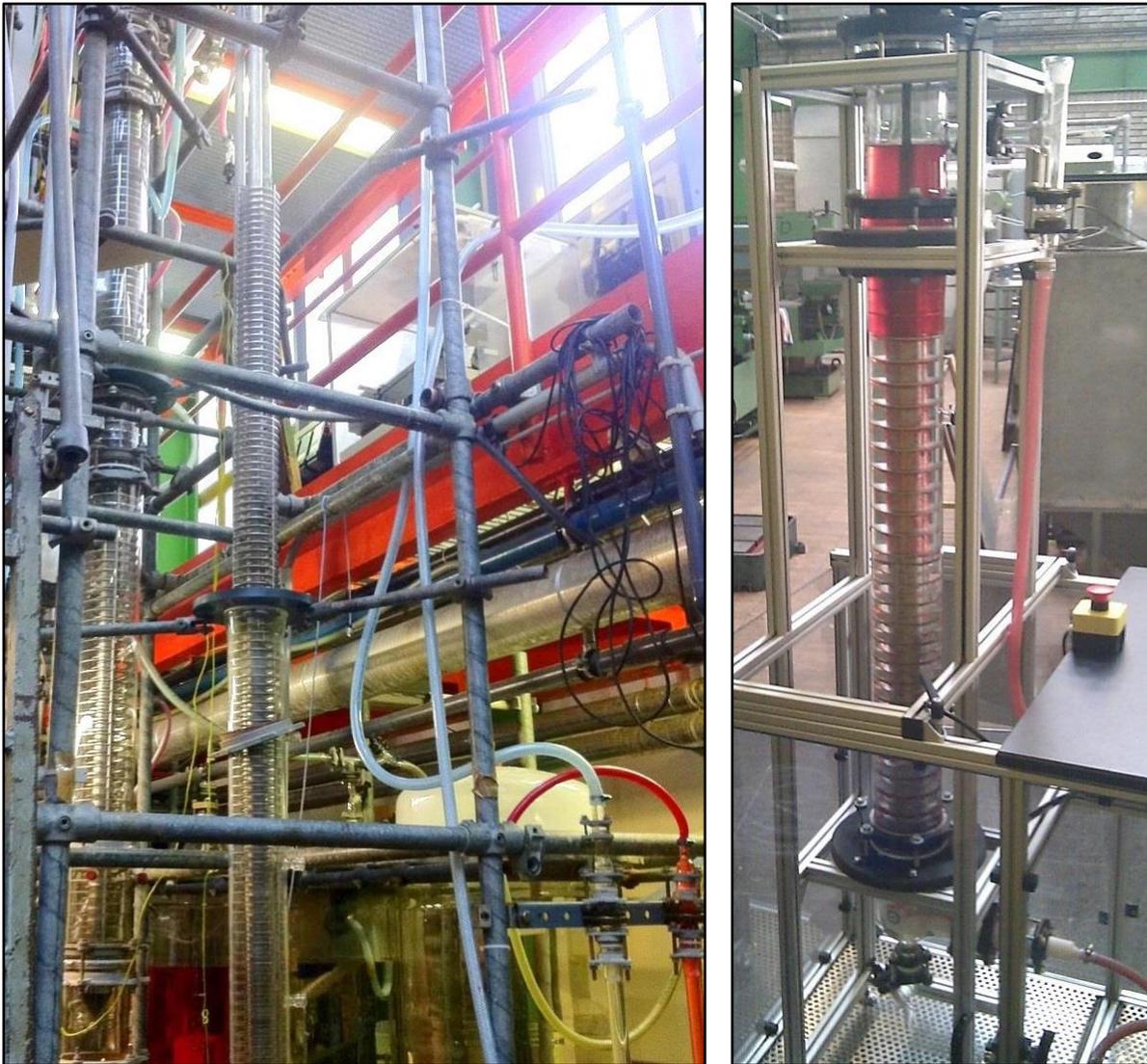
## 2.1 Kolonnenaufbau

Der aktive Teil der Technikumskolonne wurde aus drei DN100 Glasschüssen der Firma QVF aufgebaut. Alle Einbauten wurden mit einem *Lasercut*-Verfahren aus Edelstahl (1.4301 IIC/2B kaltgewalzt, 2 [mm] Wandstärke) mit geringen Toleranzen ( $\pm 0,1$  [mm/m]) von der Firma *Kovac Stahl KG* gefertigt. Die Konstruktion des Rotors erfolgte über alternierend gesteckte Distanzhülsen und Rotorscheiben auf einer Hohlwelle. Möglicher Schlupf zwischen Hohlwelle und den darauf gesteckten Teilen wurde durch Spannen an den Enden der Welle verhindert. Analog wurde der Stator aus drei<sup>4</sup> M2-Gewindestangen, Statorscheiben und Distanzhülsen gesteckt (Abbildung 2-1, links). Pro Glasschuss wurde ein Statorkäfig mit 1m Höhe gefertigt, der an den Enden der Gewindestangen mit Muttern festgezogen wurde. Verglichen mit geschweißten Ausführungen, ermöglicht der demontierbare Aufbau vergleichsweise einfache künftige Modifikationen der Einbautengeometrie durch Wechsel der Distanzhülsen bzw. Scheiben. Am Kolonnenkopf wurde die Rotorwelle über einen Hartgummischlauch an den Drehstromgetriebemotor gekuppelt. Die Drehzahl wurde über einen Frequenzumformer gesteuert und mit einem optischen Sensor gemessen. Aufgrund der Länge der nicht gewuchteten Hohlwelle ( $\sim 5$  [m]), kam es im Betrieb zu radialen Oszillationen. Die Rotorwelle musste zwischen den Glasschüssen mit Kunststoff/PTFE-Gleitlagern zweifach zwischengelagert werden. Die Lager dienten zudem als Auflagefläche für den Statorkäfig. Abbildung 2-1 (Mitte) zeigt das Lager in eingebautem Zustand, gelb dargestellt sind der Dichtring aus PTFE und das eingepresste PTFE-Gleitlager (rechts).



**Abbildung 2-1:** links: gesteckter Aufbau des RDC-Compartments  
 mitte: Wellenlagerung zwischen Glasschüssen  
 rechts: eingepresstes Gleitlager aus PTFE

<sup>4</sup> Im Gegensatz zur häufigen vierfachen Aufhängung der Statorscheiben wurden nur drei Gewindestangen verwendet. Einerseits ist das System mit drei Trägern statisch bestimmt, andererseits werden die Stauzonen hinter den Statorhülsen, die eine beobachtbare Verbreiterung der Verweilzeitverteilung der dispersen Phase bewirken, minimiert.



**Abbildung 2-2: Konstruktion des RDC100 mit dem RDC150 im Hintergrund (links);  
RDC100 im Labormaßstab für erleichterten Wechsel von Einbauten (rechts)**

Das schematische Fließbild der Extraktionsanlage ist in Abbildung 2-3 dargestellt. Zwei Glaskanks mit einem Fassungsvermögen von jeweils 100 [l] wurden als Vorratsgefäße für beiden Phasen verwendet. Ein weiterer 100l-Tank diente als Zwischentank bzw. Sammeltank für die austretende organische Phase. Ventil 1 wurde bei Stoffaustauschmessungen geschlossen um die Feedzusammensetzung nicht zu verfälschen, bei den Tracerversuchen ohne Stoffübergang wurde Ventil 1 offen gehalten und die organische Phase wurde im Kreis geführt. Beide Phasen wurden über Kreiselpumpen in die Kolonne befördert, die Volumenströme wurden über kalibrierte Rotameter eingestellt. Die Probenahmestellen der Glasschüsse (3 pro Schuss) wurden neben den Probenahmen der Stoffaustauschversuche für die Messfühler der elektrischen Leitfähigkeit (MS01 bis MS04) als auch für die Injektion des NaCl-Tracers genutzt. Die Position der Phasengrenzfläche wurde über die axiale Position des Hosenrohres geregelt und in den Stoffaustauschversuchen auf konstanter Höhe gehalten.

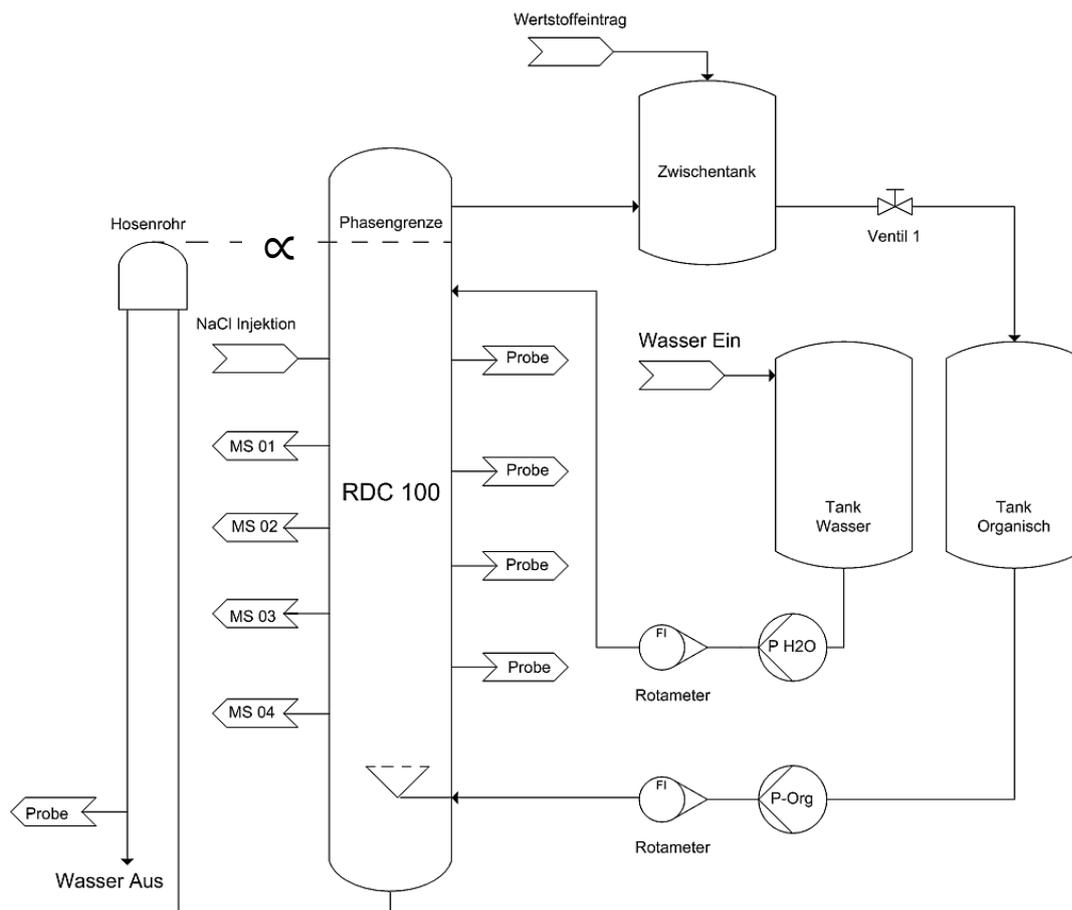


Abbildung 2-3: Schema der Versuchsanlage

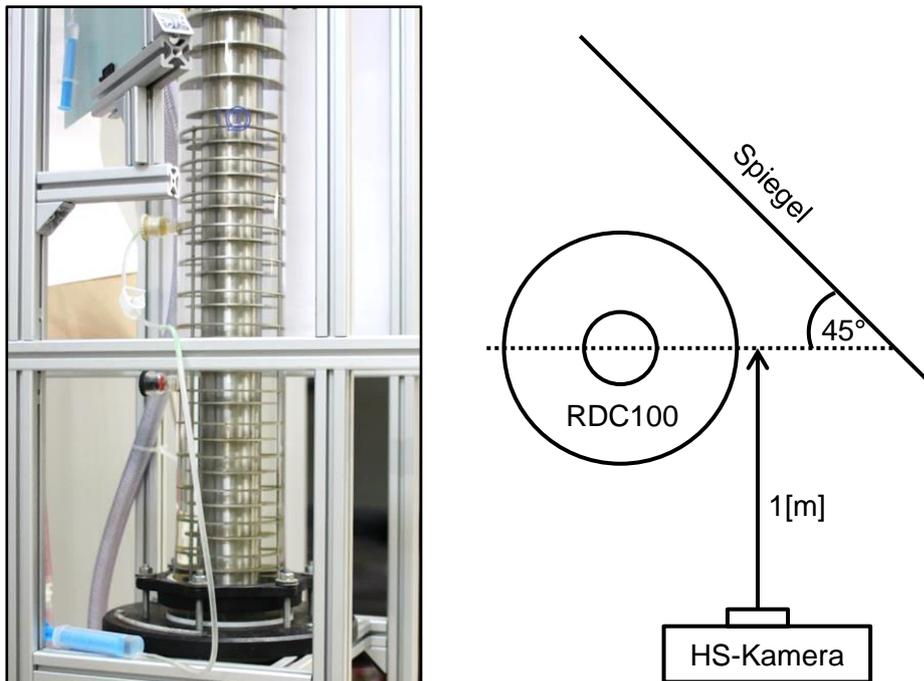
## 2.2 Sedimentationsversuche mit Einzeltropfen

Für die Validierung der CFD-Simulation mittels Euler-Lagrange und die Untersuchungen des unteren Betriebsbereiches wurden Sedimentationsversuche mit starren Kugeln aus Polypropylen mit 2 [mm] und 2,5 [mm] Durchmesser durchgeführt. Damit konnten einerseits Tropfenbruch und andererseits die Beweglichkeit der Tropfenphasengrenze eliminiert werden. Dies ermöglicht eine isolierte Betrachtung des Einflusses der Wirbelschleppkraft auf die disperse Phase. Die Ergebnisse werden in Kapitel 4.3.1.1 präsentiert. Für detailliertere Ergebnisse der Sedimentationsversuche und der Validierung von Euler-Lagrange Simulationen sei auf die Diplomarbeit von SARZIO [47] verwiesen.

### 2.2.1 Aufbau

Die photographische Erfassung der mittleren axialen Geschwindigkeitskomponente erfolgte im Gegensatz zur planaren Geschwindigkeitsmessung mit PIV (Kapitel 2.3.1) direkt durch die gläserne Kolonnenaußenwand. Es ist kein Schauglas notwendig, da der Glasschuss keine vertikale Verzerrung verursacht. Um auch den von der Welle verdeckten Bereich in einem Bild erfassen zu können, wurde ein vertikaler Spiegel im Winkel von 45° zur Aufnahmeebene

hinter der Kolonne montiert. Für ausreichende Ausleuchtung sorgte eine um  $30^\circ$  versetzte Lichtquelle. Der Versuchsaufbau ist in Abbildung 2-4 dargestellt.



**Abbildung 2-4: Versuchsaufbau mit Injektion der Kunststoffkugeln und Spiegelhalterung (links) Schematischer Grundriss der Sedimentationsmessung (rechts).**

Deionisiertes Wasser wurde als kontinuierliche Phase verwendet. Für die möglichst isolierte Untersuchung der Schleppwirkung auf den Einzeltropfen wurden die Versuche bei stehender Wassersäule,  $0 \text{ [m}^3\text{/(m}^2\text{h)]}$ , durchgeführt. Die Drehzahl wurde in Schritten von  $50 \text{ [1/min]}$ , bis  $250 \text{ [1/min]}$  variiert. Pro Betriebspunkt wurden je 3 Versuchsserien mit mindestens 50 Kugelinjektionen durchgeführt.

Wegen der breiten Dichtestreuung der kommerziell erhältlichen PP-Kugeln wurde für die Auswertung nur eine Fraktion des ursprünglich verfügbaren Kugelkollektives verwendet. Durch schrittweises Erhöhen der Dichte einer Methanol/Wasser-Mischung bei Zugabe von Wasser konnten Dichtefraktionen der aufschwimmenden Kugeln gebildet werden. Anschließende gravimetrische Selektion ergab jeweils eine handhabbare Fraktion von 60 der ursprünglichen 300 Kugeln. Tabelle 2.2 gibt den Dichte- und Durchmesserbereich der zwei verwendeten Kugelfraktionen an.

**Tabelle 2.2: Übersicht der verwendeten Kugelfraktionen**

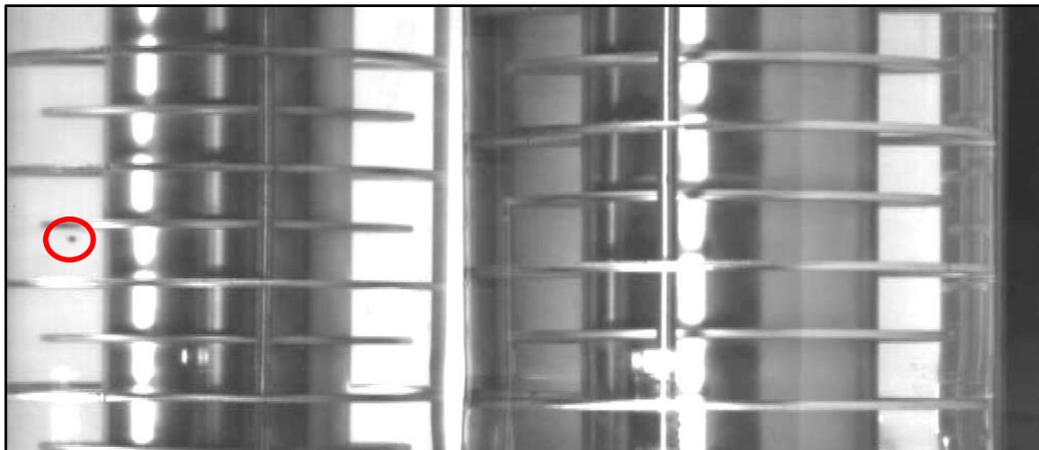
Nenndurchmesser [mm]	Gemessene Dichte [kg/m <sup>3</sup> ]	Masse [mg]	tatsächlicher Durchmesser [mm]
2	903-909	3,6-3,7	1,96-1,98
2,5	872-902	6,5-7,2	2,4-2,5

Die Injektion der PP-Kugeln erfolgte manuell mit einer handelsüblichen Spritze, einem Silikon-Schlauch<sup>5</sup> und zwei Schlauchklemmen (Abbildung 2-4, rechts). Um die Kugeln im gefüllten Schlauch vor der ersten Schlauchklemme aufzureihen, wurde die Spritze, eingetaucht in einer gefüllten Wanne, an den Schlauch gesteckt. Mit dieser Versuchsanordnung konnte die Einbringung von Luftbläschen, deren Anhaften an PP-Kugeln die Auftriebskraft massiv erhöhen würde, unterbunden werden.

Durch manuelles Öffnen der ersten Schlauchklemme konnten die Kugeln einzeln injiziert werden. Die Injektionsstelle befand sich mindestens 3 Compartments unter dem untersuchten Bereich, damit konnte der Impulseintrag durch die Injektion vernachlässigt werden. Ebenso konnte der Einfluss der tangentialen Eintrittsposition ins Compartment eliminiert werden, im ersten untersuchen Compartment konnte eine zufällige tangentiale Eintrittsposition gewährleistet werden.

## 2.2.2 Auswertung

Die mittlere Sedimentationsgeschwindigkeit der PP-Kugeln wurde innerhalb einer definierten Strecke von 3 aufeinanderfolgenden Compartments ausgewertet (Abbildung 2-5). Die Beobachtung erfolgte mit einer Hochgeschwindigkeitskamera (Tabelle 8.1) mit einer Aufnahme Frequenz von 70 Bildern je Sekunde



**Abbildung 2-5: Auswertung in 3 aufeinanderfolgenden Compartments mit Spiegelbild.**

Das Experiment mit starren Einzelkugeln unterscheidet sich vom realen Strömungsregime eines Tropfenschwarmes dadurch, dass nicht vermeidbare geometriebedingte Totzonen in Ecken der Einbauten sowie konstruktive Engstellen im Außenspalt des Statorkäfiges zu stationärem Verharren bzw. Verkeilen der Kugeln führen können. Im realen Betrieb mit verformbaren fluiden Tropfen kann ein langfristiges Verkeilen am Statorkäfig nicht beobachtet werden, in Totzonen verharrende Tropfen werden zudem vom nachkommenden Tropfenschwarm mitgerissen oder verdrängt. Da die Verweilzeit verharrender PP-Kugeln

<sup>5</sup> Durchmesser = 3mm, Länge ~0,5m

gegen unendlich geht und die Messergebnisse damit massiv verfälscht, sollen Ausreisser nicht miteinbezogen werden.

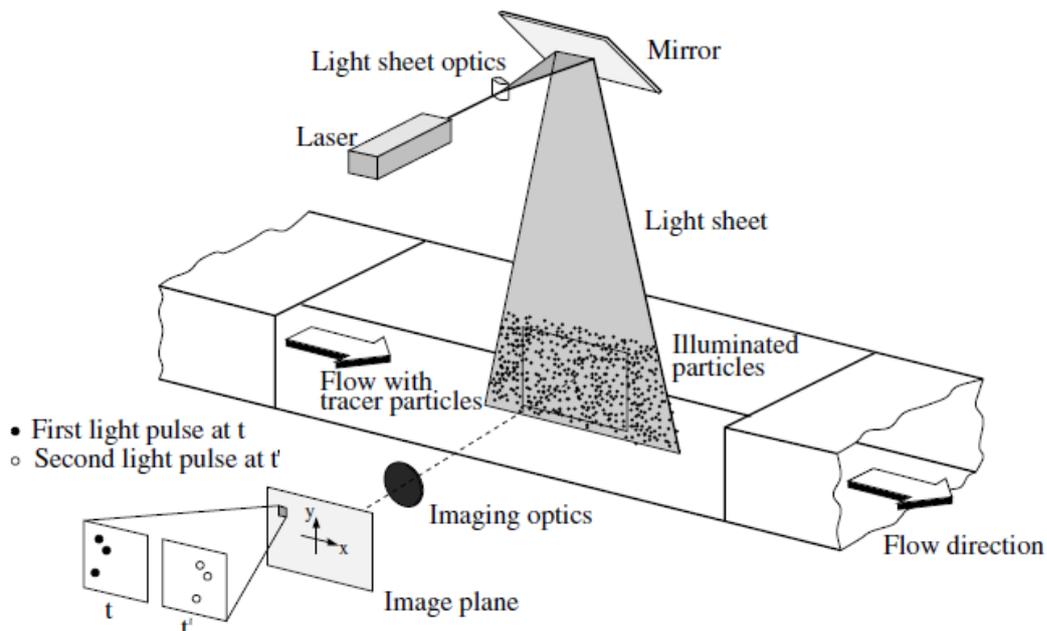
Bei der Erfassung des Verweilzeitverhaltens wurden die 3 Compartments einzeln ausgewertet, die Rotor- bzw. Statorscheiben fungierten in der Videoauswertung dabei als Detektionsebenen definierten Abstandes. Die Zeitpunkte beim Durchkreuzen dieser Ebenen wurden protokolliert.

Diese Versuchsreihe wurde in der finalen Phase dieser Arbeit durchgeführt, mit der Intention, die unteren Betriebsbereiche der neu gefundenen Apparategeometrie mit der klassischen Ausführung zu vergleichen. Die Ergebnisse sollen daher an passender Stelle im späteren Kapitel 4.3.1.1 präsentiert werden.

## 2.3 Particle Image Velocimetry

*Particle-Image-Velocimetry* (PIV) wurde bereits von anderen Autoren für die experimentelle Erfassung von Extraktionskolonnen eingesetzt. BUJALSKI ET AL. [48] untersuchten eine gepulste Kolonne (DN100), bestätigten die PIV-Daten mit zeitaufwändigeren LDV-Messungen (Laser-Doppler-Velocimetry) und verglichen diese mit CFD-Simulationen. KOLB [49] untersuchte den Einfluss von Rührerdrehzahl und Belastung auf die Strömungsverhältnisse in einer Kühni-150 Kolonne. HLAWITSCHKA & BART [50] kombinierten PIV mit laserinduzierter Fluoreszenz (LIF) um Information über den Hold-Up zu erhalten. GURKER [42] und AKSAMIJA [43] evaluierten Turbulenzmodelle mit PIV-Daten einer RDC150 Kolonne. DRUMM & BART [51] untersuchten eine RDC150 [52] sowie eine RDC450 [53] Kolonne im einphasigen und im zweiphasigen Betrieb. In der vorliegenden Arbeit wurde der Einfluss der Compartmentgeometrie (Compartmenthöhe  $H_C$ ) in einer RDC100 Kolonne im einphasigen Betriebszustand bei variierender Drehzahl und Kolonnenbelastung untersucht. Die Hard- und Software wurde vom Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft an der TU Graz zur Verfügung gestellt.

*Particle-Image-Velocimetry* stellt ein nicht-invasives optisches Messverfahren dar, das zum Unterschied von punktuell messenden Verfahren (Hitzdrahtanemometrie, LDA, etc.) in der Lage ist, Geschwindigkeitsinformation einer ganzen Messebene gleichzeitig zu erfassen (Abbildung 2-6). Wie bei den meisten optischen Verfahren werden Tracerpartikel in der Strömung homogen verteilt und in der gewünschten Messebene belichtet. Typischerweise werden dafür planar gestreute Laser verwendet. Mit gekoppelten Hochgeschwindigkeitskameras werden mindestens zwei Bilder der Messebene aufgenommen. Aus der Versetzung der Tracerpartikel und dem bekannten Zeitintervall eines Bilderpaares können Geschwindigkeitsvektorfelder errechnet werden. PIV erlaubt trotz des hohen Rechenaufwandes Echtzeitmessungen mittels hochauflösender CCD-Kameras und moderner Software.



**Abbildung 2-6: Schema der Particle Image Velocimetry [53].**

Die Wahl geeigneter Tracerpartikel muss in Abstimmung von Ausrüstung, Anforderungen und Stoffsystem erfolgen. Die Dichte der Partikel soll möglichst exakt der Dichte des zu untersuchenden Mediums (deionisiertes Wasser) entsprechen, um Auftriebskräfte zu minimieren. Die mittlere Größe der Partikel ist ebenfalls von zentraler Bedeutung, nur wenn die Partikel klein bzw. leicht genug sind, können sie dem Strömungsverlauf folgen ohne aufgrund von Trägheitskräften aus der Strömung gerissen zu werden. Der dritte Faktor ist die Lichtreflexion der Partikel. Je stärker die Lichtreflexion, desto kleiner dürfen die Partikel sein. Es ist selbsterklärend, dass die Partikel chemisch inert sein sollen. Die für Anwendungen mit Wasser bewährten Polyamid12-Partikel mit einem Sauterdurchmesser von  $d_{32} = 50 \text{ } [\mu\text{m}]$ , (Tabelle 8.2) wurden für alle Messungen dieser Arbeit verwendet.

Die operativen Parameter einer PIV-Messung sind einerseits die Belichtungszeit und andererseits das Zeitintervall zwischen den Lichtimpulsen bzw. Aufnahmen. Die Belichtungszeit muss kurz gewählt sein, damit sich keine Strahlen bilden. Das Zeitintervall ist primär von der vorherrschenden Strömungsgeschwindigkeit abhängig. Es muss lang genug sein um die räumliche Versetzung der Teilchen wahrnehmen zu können und kurz genug sein, um Partikel zu erfassen, bevor sie die Messebene in der dritten Raumrichtung verlassen.

Die PIV-Technologie wurde stetig verbessert und erweitert. Neben der Standardvariante, die nur zwei Geschwindigkeitskomponenten einer Ebene darstellt (2C-2D), ist es durch stereoskopische Aufnahmen möglich, alle drei Geschwindigkeitskomponenten einer Ebene darzustellen (3C-2D). Moderne holografische Methoden liefern sogar alle drei Geschwindigkeitskomponenten eines Messvolumens (3C-3D). Hierfür sei auf vertiefende Literatur verwiesen [50].

### 2.3.1 Versuchsaufbau – PIV

Die Anwendung von optischen Messverfahren bei durchströmten zylindrischen Apparaten ist aufgrund unterschiedlicher Brechungsindices der gekrümmten optischen Grenzflächen problematisch (Glas-Wasser an der Kolonneninnenseite, Glass-Luft an der Außenseite). Aus diesem Grund wurde ein Schauglas an die Außenwand geklebt und mit deionisiertem Wasser gefüllt (Abbildung 2-7). Durch die neue ebene Außenwand wurden Verzerrungen aus orthogonaler Blickrichtung verhindert. Wie in Abbildung 2-7 ersichtlich ist, wurde die tangentielle Position der Lichtebene so gewählt, dass der Einfluss der Statorhülse minimiert wird. Bezogen auf die Drehrichtung der Welle (Uhrzeigersinn), entstehen hinter den Statorhülsen Verwirbelungen und Totgebiete.



**Abbildung 2-7: Versuchsaufbau Particle Image Velocimetry.**

Die Ergebnisse einer möglichst störungsfreien Messebene sind besser mit 2D-Simulationen vergleichbar, bei denen die Statorhülsen vernachlässigt werden und ideale Rotations-symmetrie angenommen wird (*2D axissymmetric swirl*). Nachteilig an der Wahl der Position ist die stärkere Lichtreflexion der direkt dahinter liegenden Abstandshülse. Diese kann bei großer Streuung der Belichtung die Tracerpartikel überstrahlen und zu lokalem Informationsverlust führen [43].

Die Tracerpartikel wurden in einem Becherglas in Wasser dispergiert und mit einer handelsüblichen Spritze in den Wasser-Tank der Kolonne injiziert. Der Volumenstrom der kontinuierlichen Phase wurde im Kreis geführt, die Tracerpartikel verteilten sich nach kurzer Zeit auf den gesamten Wasserkreislauf der Kolonne. Es zeigte sich, dass die Partikelkonzentration in der beleuchteten Bildebene aufgrund von schwachen Absetzeffekten kontinuierlich absinkt. Zwischen den Aufnahmen mussten Partikel nachinjiziert werden, um

eine konstante Partikelkonzentration zu gewährleisten. Die Bilderpaare wurden bei unterschiedlicher Rotordrehzahl und Kolonnenbelastung für zwei Compartmentgeometrien durchgeführt. Pro Betriebspunkt wurden 25000 Bilder bei einer Frequenz von 1000 [Hz] aufgenommen, was insgesamt 25 Sekunden entspricht. Um mögliche niederfrequente Schwankungen auszugleichen, wurden die 25 Sekunden Versuchszeit nicht am Stück, sondern im stationären Betrieb in 5 stichprobenartigen Serien zu je 5000 Bildern aufgenommen.

Nach Änderung der Kolonnenbelastung bzw. der Rotordrehzahl wurde der stationäre Strömungszustand abgewartet und die oben beschriebene Prozedur wurde wiederholt bis alle Betriebseinstellungen aufgezeichnet waren.

**Tabelle 2.3: PIV Versuchsmatrix für RDC100,  $H_C/D_T = 0,34$ .**

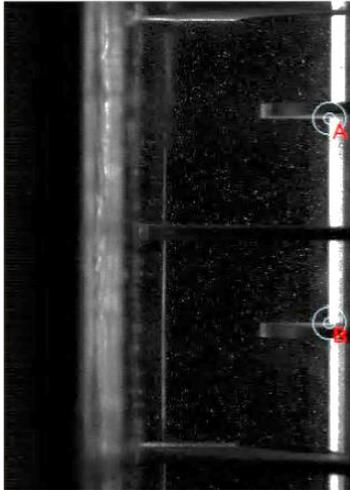
	<b>0 [rpm]</b>	<b>400 [rpm]</b>	<b>600 [rpm]</b>	<b>800 [rpm]</b>
<b>0 [l/h]</b>	-	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder
<b>30 [l/h]</b>	-	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder
<b>50 [l/h]</b>	-	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder
<b>75 [l/h]</b>	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder
<b>100 [l/h]</b>	-	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder
<b>130 [l/h]</b>	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder

**Tabelle 2.4: PIV Versuchsmatrix für RDC100,  $H_C/D_T = 0,18$ .**

	<b>400 [rpm]</b>	<b>600 [rpm]</b>	<b>800 [rpm]</b>
<b>0 [l/h]</b>	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder
<b>50 [l/h]</b>	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder
<b>75 [l/h]</b>	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder
<b>100 [l/h]</b>	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder	5x5000 Bilder

### 2.3.2 Auswertung – PIV

Die Auswertung des Bildmaterials wurde mit der kommerziellen Software *Dantec Dynamic Studio V2.3* durchgeführt. Für die Berechnung der Beträge der Strömungsvektoren aus der Versetzung der Bildpunkte müssen die Bilder mit bekannten realen Abmessungen kalibriert werden. Die axiale Distanz zwischen zwei Rotorscheiben (Abbildung 2-8, A und B) wurde gewählt.



**Abbildung 2-8: Kalibrierung über markante Punkte bekannten Abstandes.**

Für jede Betriebseinstellung wurde aus dem gesamten Bilderpaket ein bezüglich der Graustufe gemittelt Bild (*Image Mean*) erstellt. Von jedem Bild wurde das gemittelte Bild abgezogen und ein gefiltertes Differenzbild (*Image arithmetic*) für die Auswertung erhalten. Abbildung 2-9 zeigt beispielhaft das Herausfiltern eines Pixelfehlers. Der Auswertungsbereich wurde auf zwei Compartments bei  $H_C/D_T = 0,34$  bzw. auf drei Compartments bei  $H_C/D_T = 0,18$  begrenzt. Die aus den 25.000 gefilterten Differenzbilderpaaren berechneten Vektorkomponenten wurden für jeden Betriebszustand gemittelt. Die resultierenden Vektorplots werden in den folgenden Kapiteln diskutiert und im Anhang (Kapitel 8.1.3) vollständig dargestellt. Die weiteren Parameter des Auswertungsalgorithmus (*adaptive Correlation*) sind im Anhang in Tabelle 8.5 zusammengefasst.



**Abbildung 2-9: Einzelbild (links); *Image mean* (mitte); *Image arithmetic* (rechts)**

### 2.3.3 Ergebnisse für $H_C/D_T = 0,34$

Compartments mit ausreichender Höhe  $H_c$  erlauben die Ausbildung von zwei Toruswirbeln zwischen benachbarten Statorscheiben. Die Betriebsparameter Rührerdrehzahl und Kolonnenbelastung zeigen gegensätzlichen Einfluss auf Position, Form und Symmetrie der Wirbel. Zur Rotorscheibenebene symmetrische Wirbelstrukturen können bei stehender gerührter Wassersäule beobachtet werden (Abbildung 2-10, links). Durch Erhöhung des Volumenstromes der kontinuierlichen Phase werden die Wirbelzentren axial verschoben und die Symmetrie gebrochen (Abbildung 2-10, Mitte). Erhöhung der Drehzahl wirkt der Wirbelverschiebung entgegen. Das qualitative Wirbelbild hängt stark vom Verhältnis Impulseintrag des Rührers zu Impulseintrag durch den Volumenstrom ab. Die vollständigen Vektorfelder aller untersuchten Betriebszustände sind im Anhang angefügt (Kapitel 8.1.3.1).

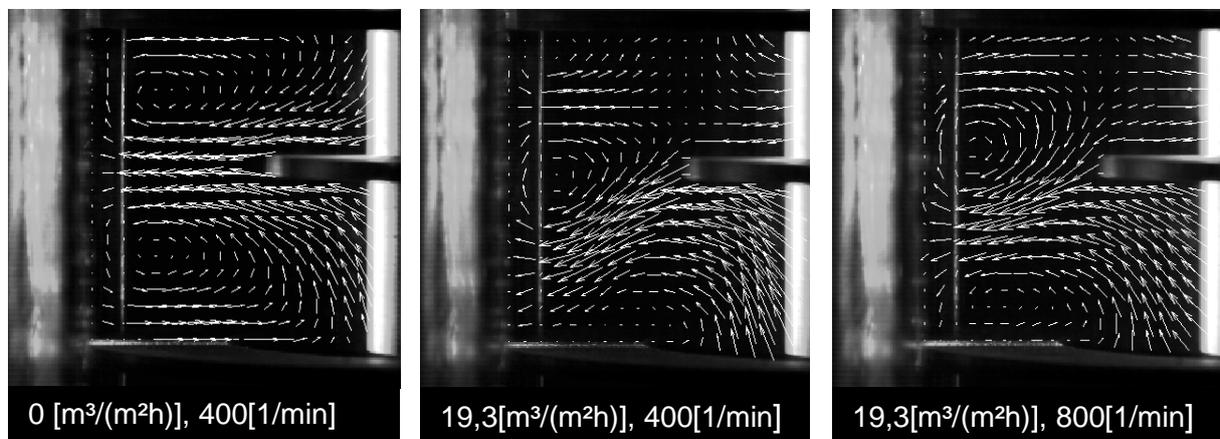
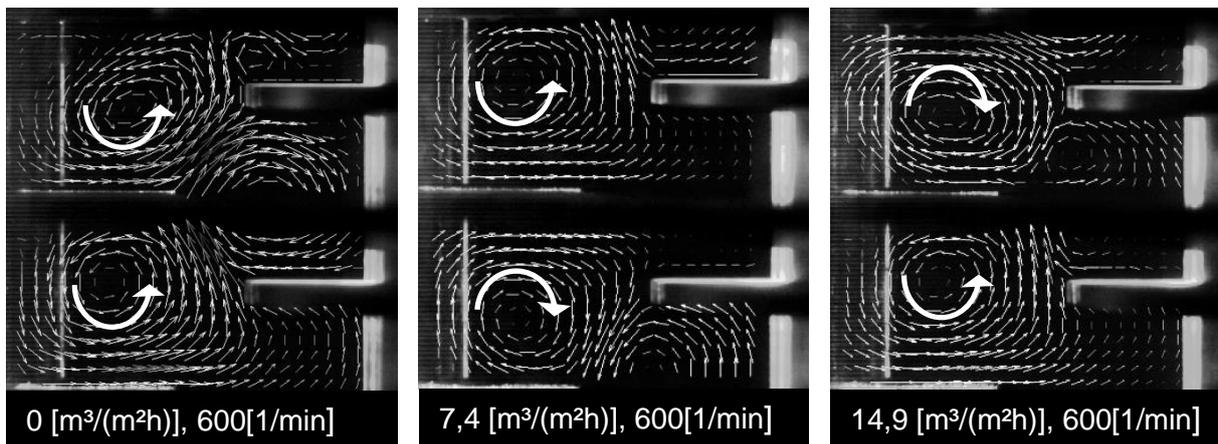


Abbildung 2-10: Gemessene mittlere Geschwindigkeitsvektorfelder in der Ebene bei verschiedenen Betriebszuständen,  $H_C/D_K = 0,34$ .

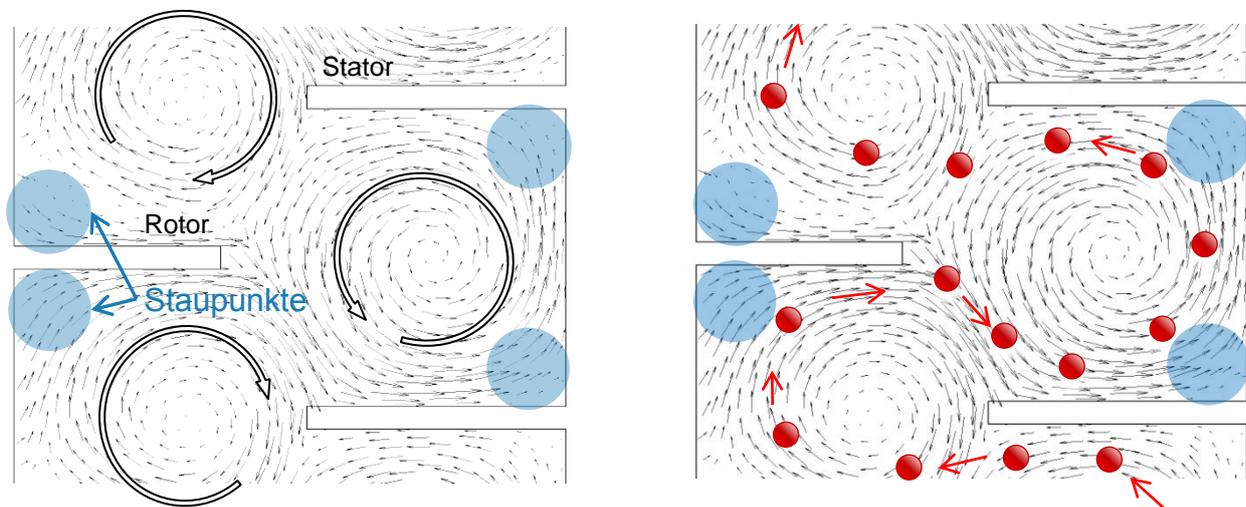
### 2.3.4 Ergebnisse für $H_C/D_T = 0,18$

Nach Unterschreiten einer kritischen Compartmenthöhe wird nur noch ein Toruswirbel zwischen zwei benachbarten Statorscheiben ausgebildet, der entgegengesetzt drehende Wirbel wird zwischen die Rotorscheiben gedrängt. Während bei  $H_C/D_T = 0,34$  sowohl Drehzahl als auch Volumenstrom Einfluss auf das qualitative Strömungsbild haben, hat die Drehzahl keine beobachtbare Auswirkung bei geringer Compartmenthöhe ( $H_C/D_T = 0,18$ ). Die Änderung der Drehzahl bewirkt zwar höhere Absolutwerte der Geschwindigkeitsvektoren, die Form und Position der Toruswirbel bleibt aber unverändert (Abbildung 8-8 bis Abbildung 8-11). Im Gegensatz zum Strömungsverhalten bei  $H_C/D_T = 0,34$  kann bei geringer Compartmenthöhe die Variation der Kolonnenbelastung zu einer Umkehr der Wirbeldrehrichtung führen (Abbildung 2-11), die Form und Position der äußeren Toruswirbel bleibt aber ebenfalls unverändert. Einerseits ist die Wirbelform durch die engere Begrenzung der Einbauten weit weniger sensibel auf Änderungen der Betriebsparameter, andererseits wechselt die Wirbeldrehrichtungen zufällig zwischen zwei stabilen Konfigurationen.



**Abbildung 2-11: Umkehr der Wirbeldrehrichtung bei Variation der Volumenströme,  $H_c/D_k = 0,18$ .**

Die örtlich und zeitlich zufällig auftretende Wirbelumkehr hat fundamentale Auswirkung auf die Hold-Up Verteilung und die Betriebsstabilität des Apparates. Betrachtet man die rotationssymmetrische Messebene eines RDC-Compartments, so ergeben sich vier mögliche Stauzonen in den Ecken eines Compartments (Abbildung 2-12, links). Drehen sich die zwischen den Statoren befindlichen Wirbel gegen den Uhrzeigersinn, haben aufsteigende Tropfen keine Tendenz in den Staupunkten zu akkumulieren. Die Kombination der Auftriebskraft der Tropfen und der Schleppkraft (*drag force*) der kontinuierlichen Toruswirbel verhindert Ansammlungen disperser Phase in den Staupunkten, wie am schematischen Weg eines Einzeltropfens in Abbildung 2-12 rechts, gezeigt wird.

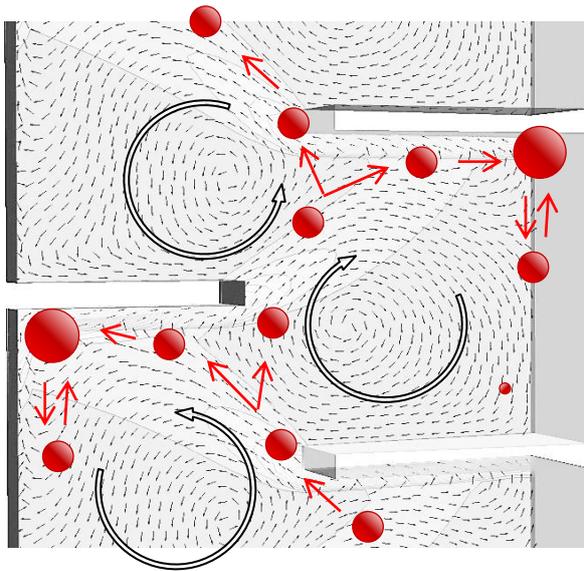


**Abbildung 2-12: Einphasige Wirbelstruktur (links); schematischer Weg eines Einzeltropfens bei geringer Dispersphasenbelastung (rechts)<sup>6</sup>**

Drehen sich die zwischen den Statoren befindlichen Wirbel im Uhrzeigersinn, so ist ein gegenteiliger Effekt zu beobachten. Die Tropfen werden durch das Zusammenspiel von Auftriebskraft und Schleppkraft der kontinuierlichen Wirbel in die Staupunkte gedrängt

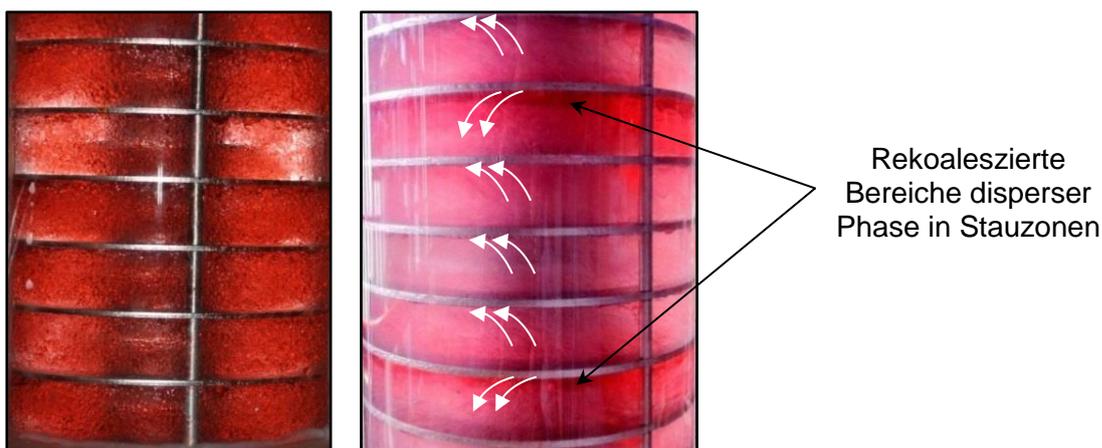
<sup>6</sup> Die beispielhaft hinterlegten Geschwindigkeitsvektoren der kontinuierlichen Phase stammen aus einphasigen Simulationen, wie in Kapitel 3.1.1 beschrieben.

(Abbildung 2-13). Es entstehen rekoaleszierte Bereiche der dispersen Phase in den Staupunkten unter den Rotor- und Statorscheiben.



**Abbildung 2-13: Schematischer Weg eines Einzeltropfens bei Wirbelumkehr im zweiphasigen Betrieb<sup>7</sup>**

Die koaleszierten Bereiche führen nicht nur zu einem großen Verlust der spezifischen Stoffaustauschfläche, sondern verbreitern auch die Verweilzeitverteilung bzw. die axiale Vermischung der dispersen Phase ( $D_{ax,d}$ ). Zudem entsteht eine über die Kolonnenhöhe inhomogene Hold-Up-Verteilung, wie in Abbildung 2-14 beispielhaft dargestellt ist. Die Position der invertierten Compartments variiert scheinbar zufällig mit der Versuchsdauer oder bei Wechsel der Betriebsparameter. Das Phänomen der inhomogenen Hold-Up-Verteilung konnte auch am RDC150 mit  $H_C/D_T = 0,186$  beobachtet werden (Abbildung 2-14, links). Für den industriellen Betrieb bedeutet dies erschwerte Gewährleistung konstanter Produktqualität sowie geringere Berechenbarkeit des Betriebsverhaltens des Apparates.



**Abbildung 2-14: Durch Wirbelumkehr hervorgerufene inhomogene Holdup-Verteilung; RDC150 mit  $H_C/D_T = 0,186$  (links) und RDC100 mit  $H_C/D_T = 0,18$  (rechts).**

<sup>7</sup> Die beispielhaft hinterlegten Geschwindigkeitsvektoren der kontinuierlichen Phase stammen aus zweiphasigen Simulationen wie in Kapitel 3.2.13.1.1 beschrieben.

## 2.4 Messung der Verweilzeitverteilung

Die Erfassung des axialen Dispersionskoeffizienten der kontinuierlichen Phase  $D_{ax,c}$  erfolgte nach dem Dispersionsmodell (Kapitel 1.5.3.1). Durch Injektion eines Tracers wurde ein Eingangssignal (Stoß- oder Sprungsignal) erzeugt und dessen Antwortsignale an definierten Positionen stromabwärts in der Kolonne aufgezeichnet, die instationäre Tracermethode nach WIDMER [51] wurde angewandt. Sie basiert auf der Erhöhung der elektrischen Leitfähigkeit eines nichtleitenden Mediums bei Zugabe von KCl- oder NaCl-Lösung. Die elektrische Leitfähigkeit der Mischung ist proportional zur Konzentration. Durch Parameteranpassung wurde Gleichung (1-15) in *LabVIEW* an die erhaltenen Messdaten des normierten Antwortsignals gefittet, um die mittlere Verweilzeit und die Bodensteinzahl zu erhalten (Abbildung 2-15).

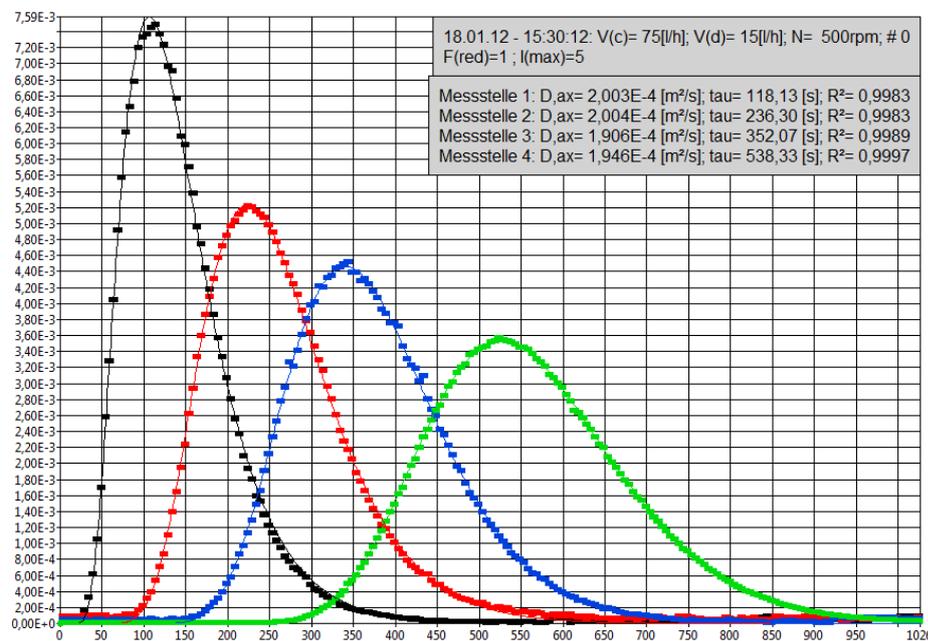


Abbildung 2-15: Beispielhafte Signalauswertung in *LabVIEW 2009*.

### 2.4.1 Tracerversuche – Aufbau & Auswertung

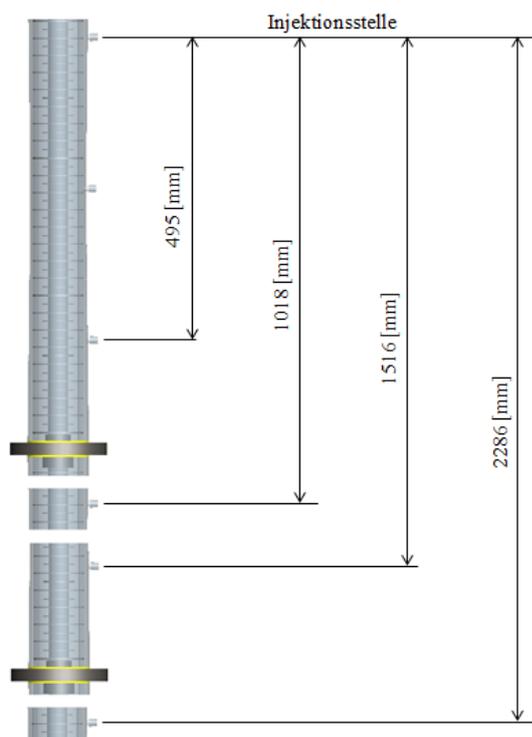
Für die spätere Evaluierung der CFD-Simulation war eine möglichst non-invasive Messung erforderlich. Der Einfluss auf die lokalen Strömungsverhältnisse um die Messstelle sollte minimiert werden. Kommerzielle Messsonden sind aufgrund ihrer typisch robusten Bauart meist zu groß und für die vorliegende Problemstellung ungeeignet. Eigens am Institut entwickelte und gefertigte Messelektroden [42] wurden verwendet (Abbildung 2-16). Im Gegensatz zu den meisten kommerziellen Messsonden ist durch die verwendete Elektrodenform keine Messung der absoluten Leitfähigkeit in  $[\mu\text{S}]$  möglich, für die Auswertung der Verweilzeitkurven aber auch nicht notwendig. Die Aufzeichnung des digitalen Ausgangssignals erfolgte mit Messdatenerfassungsgeräten von *National*

*Instruments*, für die das erforderliche Eingangssignal von -10 [V] und +10 [V] angepasst wurde. Die Auswertung erfolgte mit der in GURKER [42] erstellten Routine für *LabVIEW 2009*.



**Abbildung 2-16: Elektroden zur Messung der elektrischen Leitfähigkeit [42].**

Deionisiertes Wasser, gesättigt mit NaCl, wurde als Tracerlösung verwendet. Die Injektion erfolgte mit einer handelsüblichen Spritze direkt in den aktiven Teil am Kolonnenkopf, oberhalb der Injektionsstelle befanden sich 5 Compartments. An der Injektionsstelle konnte die Strömung als entwickelt betrachtet werden, was der *open-open*-Randbedingung nach LEVENSPIEL [41] entspricht. 1,5 ml Tracerlösung wurden pro Stoßsignal injiziert, die relative Leitfähigkeit an den vier axial versetzten Messstellen wurde mit der Frequenz von 1 [Hz] am Messcomputer erfasst. Die zwei in die Strömung eintauchenden Edelstahlspitzen hatten jeweils einen Durchmesser von 0,6 [mm], ihr Einfluss auf das Strömungsfeld wurde in der späteren Validierung der CFD-Simulationen vernachlässigt. In Abbildung 2-17 sind die axialen Abstände der Messstellen von der Injektionsstelle dargestellt. Der Volumenstrom der



kontinuierlichen Phase wurde in einem Bereich zwischen 7 und 20 [ $\text{m}^3/(\text{m}^2\text{h})$ ] variiert, (d.h.: 50, 75, 100 und 130 [l/h]); der Volumenstrom der dispersen Phase zwischen 2 und 15 [ $\text{m}^3/\text{m}^2\text{h}$ ], (d.h. 15, 20, 50, 75 und 100 [l/h]). Die Rührintensität wurde in Schritten von 100 [1/min] in einem Drehzahlbereich zwischen 500 [1/min] und 800 [1/min] variiert. Die Versuchsmatrix mit den vollständigen Ergebnissen ist in Kapitel 8.2 angehängt.

**Abbildung 2-17: Anordnung der Messstellen für die elektrische Leitfähigkeit.**

## 2.4.2 Tracerversuche – Ergebnisse

Im Folgenden sollen die Trends der axialen Vermischung der kontinuierlichen Phase in Abhängigkeit von den Betriebsparametern Drehzahl und Kolonnenbelastung im Vergleich zwischen den zwei Compartmenthöhen des RDC100,  $H_C/D_K = 0,18$  und  $H_C/D_K = 0,34$  diskutiert werden. Die erhaltenen  $D_{ax,c}$ -Werte der 4 Messsonden wurden gemittelt und doppelbestimmt. Vollständig tabellierte Ergebnisse sind im Anhang (Tabelle 8.6 bis Tabelle 8.9) zusammengefasst.

### 2.4.2.1 Ergebnisse im einphasigen Betrieb

Abbildung 2-18 zeigt die axialen Dispersionskoeffizienten in Abhängigkeit von Drehzahl und Kolonnenbelastung im einphasigen Betriebszustand. Es ist ersichtlich, dass die geringere Compartmenthöhe,  $H_C/D_K = 0,18$ , aufgrund der größeren Anzahl an axialen Strombrechern pro Meter Kolonnenhöhe, im gesamten untersuchten Bereich zu einer Verringerung der axialen Dispersion führt. Ebenfalls auffällig ist die geringere Abhängigkeit der axialen Vermischung von der Kolonnenbelastung. Wie bereits in Kapitel 2.3.3, Abbildung 2-10, gezeigt, bewirkt die Erhöhung der Kolonnenbelastung bei  $H_C/D_K = 0,34$  eine Verformung der Hauptwirbel sowie eine Verschiebung der Wirbelzentren in axialer Richtung, welche sich auch in der erhöhten axialen Dispersion widerspiegeln. Bei geringer Compartmenthöhe hingegen, bleibt die Wirbelform bei Variation der Belastung weitestgehend unverändert (Abbildung 2-11), die axiale Vermischung zeigt trotz des in Kapitel 2.3.4 besprochenen Phänomens der Wirbelumkehr keinen signifikanten Einfluss auf die axiale Dispersion der kontinuierlichen Phase.

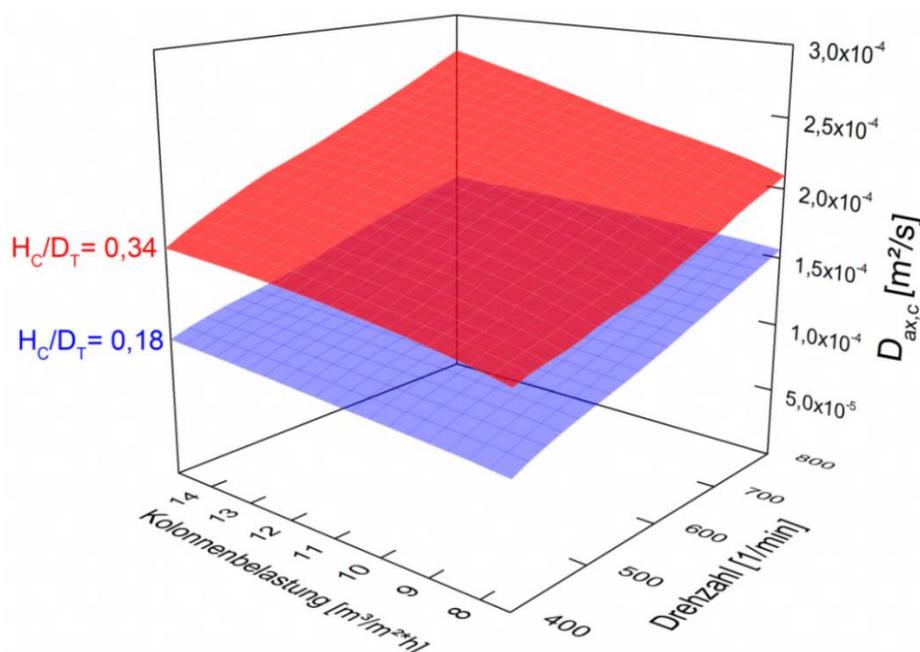
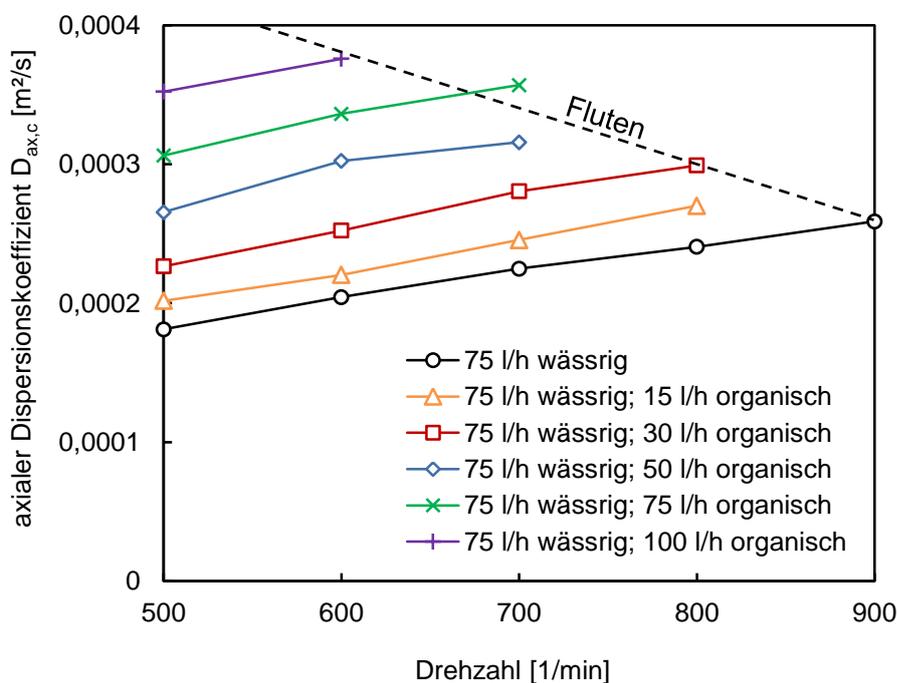


Abbildung 2-18: Vergleich der axialen Vermischung im einphasigen Betrieb in Abhängigkeit der Kolonnenbelastung und Drehzahl bei zwei Compartmenthöhen.

### 2.4.2.2 Ergebnisse im zweiphasigen Betrieb

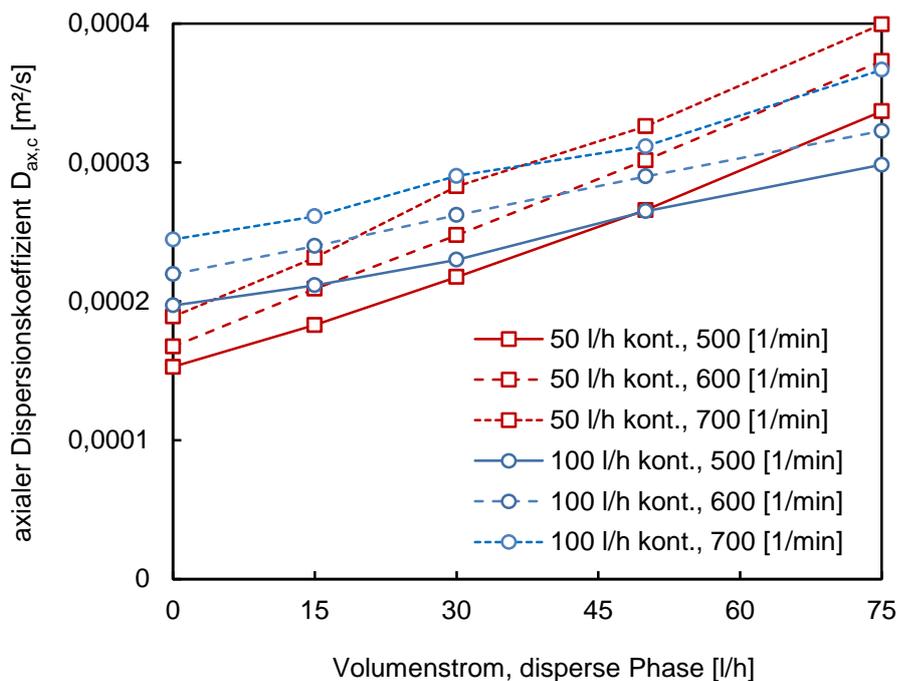
Im zweiphasigen Betriebszustand bewirkt der aufsteigende Tropfenschwarm einen Anstieg der axialen Dispersion der kontinuierlichen Phase. Diese wird im Sog eines aufsteigenden Tropfens mitgerissen. Die auf diese Weise erhöhte Rückvermischung spiegelt sich in den axialen Dispersionskoeffizienten (Abbildung 2-19) wider. Die Abhängigkeit der axialen Vermischung von der Rotordrehzahl ist auch im zweiphasigen Zustand linear, Erhöhung der Dispersphasenbelastung bewirkt eine Parallelverschiebung zu höheren  $D_{ax,c}$ -Werten. Bei steigender Dispersphasenbelastung konnte aufgrund von Fluten nicht der gesamte Drehzahlbereich untersucht werden, die Flutgrenzen sind in Abbildung 2-19 an den verkürzten Datensätzen ersichtlich.



**Abbildung 2-19: Gemessene  $D_{ax,c}$ -Werte in Abhängigkeit der Drehzahl und des Dispersphasen-Volumenstromes,  $V_{kont.}=const.=75[l/h]$ ,  $H_C/D_K = 0,34$**

Wie im einphasigen Betrieb ist der Einfluss der kontinuierlichen Belastung auch im zweiphasigen Fall unterschiedlich für die zwei Konfigurationen der Compartmenthöhe. Bei  $H_C/D_K = 0,34$  bewirkt die Erhöhung der kontinuierlichen Phasenbelastung eine Stabilisierung der Toruswirbel. In Abbildung 2-20 wird der Einfluss der Dispersphasenbelastung bei zwei kontinuierlichen Phasenbelastungen (50 [l/h] und 100 [l/h]) verglichen. In beiden Fällen wird ein linearer Zusammenhang zwischen  $D_{ax,c}$  und dem Dispersphasen-Volumenstrom beobachtet. Ist der Volumenstrom der kontinuierlichen Phase niedrig (50 [l/h], rote Kurven), ist die Steigung der Kurven signifikant höher als bei höheren Belastungen der kontinuierlichen Phase (100 [l/h], blaue Kurven). In den PIV-Aufnahmen bei einphasigem Betrieb (Abbildung 2-10) wurde gezeigt, dass das Wechselspiel aus Drehzahl und

Volumenstrom die Lage und Form der Toruswirbel bestimmt. Im Zweiphasenbetrieb wirkt sich der Volumenstrom der kontinuierlichen Phase stabilisierend auf die Wirbelstruktur aus, was sich in der geringeren Abhängigkeit des axialen Dispersionskoeffizienten von der dispersen Phase (geringere Steigung) verdeutlicht. Interessant ist die Erkenntnis, dass eine Variation der Drehzahl die Lage der Kurven vertikal verschiebt, während sich die Änderung der Phasenbelastung der kontinuierlichen Phase auf die Steigung der Kurven bzw. die Wirbelempfindlichkeit gegenüber der dispersen Phase auswirkt.

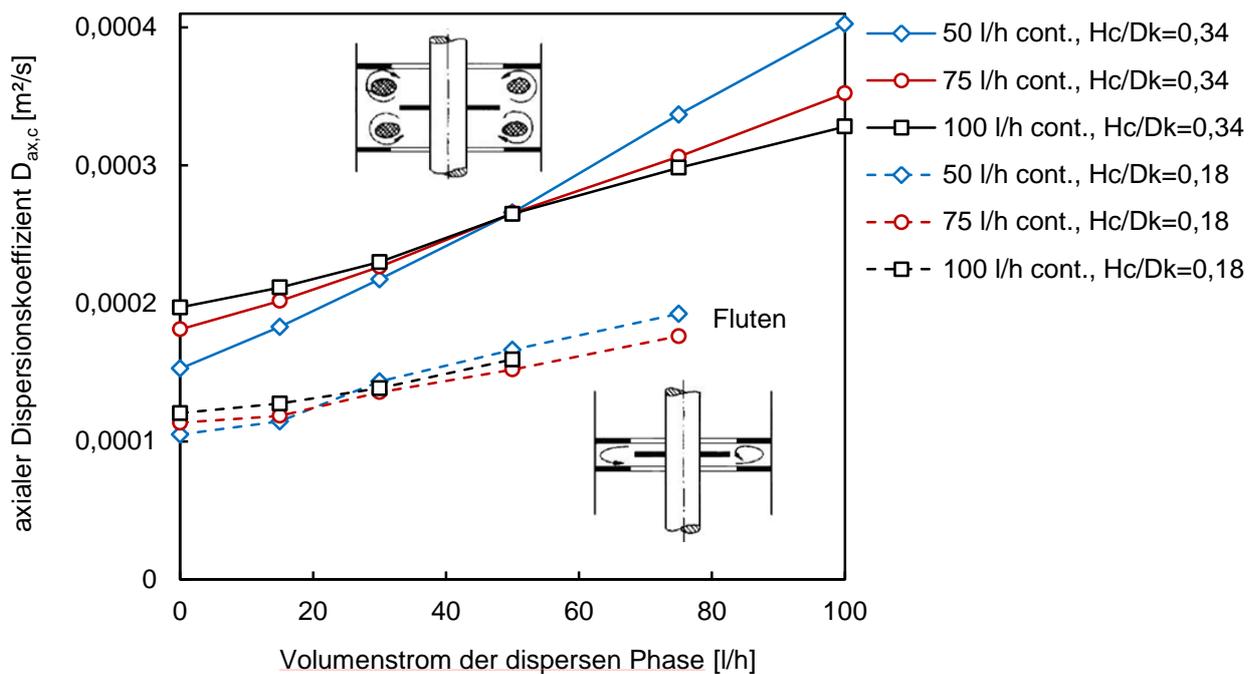


**Abbildung 2-20: Einfluss der Rührerdrehzahl und Volumenströme auf die axiale Vermischung bei  $H_C/D_K = 0,34$ .**

Obiges Verhalten konnte für die geringere Compartmenthöhe  $H_C/D_K = 0,18$  nicht bzw. nur sehr abgeschwächt beobachtet werden. Wie bereits in den PIV-Aufnahmen verdeutlicht ist (Abbildung 2-11), existiert bei dieser Konfiguration nur ein qualitatives Wirbelmuster der kontinuierlichen Phase. Abgesehen von der Drehrichtung sind Wirbelform und Position weitestgehend unabhängig von den Betriebsparametern Drehzahl und Belastung. Dies spiegelt sich auch im zweiphasigen Betriebszustand wieder, in Abbildung 2-21 sind die  $D_{ax,c}$ -Werte im zweiphasigen Betrieb bei beiden Konfigurationen in Abhängigkeit der Volumenströme gegenüber gestellt.

Wie auch im einphasigen Fall (Abbildung 2-18), bewirkt die geringere Compartmenthöhe im gesamten untersuchten zweiphasigen Bereich schwächer ausgeprägte axiale Dispersion der kontinuierlichen Phase, das Phänomen der Wirbelumkehr, dass sich offensichtlich stark auf die Verweilzeitverteilung der dispersen Phase auswirkt (Abbildung 2-14), führt in der kontinuierlichen Phase auch im zweiphasigen Betrieb zu keiner signifikanten Änderung der Verweilzeitverhaltens. Die Kurven für  $H_C/D_K = 0,18$  sind in Abbildung 2-21 generell flacher als

für  $H_c/D_k = 0,34$ , d.h. der Einfluss der dispersen Phase ist generell geringer. Der stabilisierende Effekt durch Erhöhung der kontinuierlichen Phasenbelastung kann für die geringere Compartmenthöhe nur sehr abgeschwächt beobachtet werden. Durch den geringeren Abstand zwischen Rotor- und Statorscheiben wird neben der axialen Vermischung auch der maximale Durchsatz reduziert. Betriebsbelastungen über  $23 \text{ [m}^3\text{/(m}^2\text{h)]}$  konnten nicht erreicht werden, während bei  $H_c/D_k = 0,34$  Gesamtbelastungen von bis zu  $34 \text{ [m}^3\text{/(m}^2\text{h)]}$  stationär betrieben werden konnten.



**Abbildung 2-21: Vergleich der axialen Vermischung für zwei Compartmenthöhen bei konstanter Drehzahl, 500 [1/min]**

Der in den PIV-Aufnahmen beobachtete Effekt der Wirbelumkehr, der zu einer inhomogenen Hold-Up Verteilung und einer offensichtlichen Verbreiterung der Verweilzeitverteilung der Dispersphase führt, hat keinen negativen Einfluss auf des Verweilzeitverhalten der kontinuierlichen Phase. Der hydrodynamische Vergleich (PIV, Tracerversuche & Tropfenbild) der Compartmenthöhen lässt sich wie folgt resümieren:

- $H_c/D_k = 0,34$ : Die stabile Wirbeldrehrichtung bewirkt eine homogene Hold-Up-Verteilung; die längeren axialen Pfade bewirken höhere  $D_{ax,c}$ -Werte (Abbildung 2-21), Wirbelform und Wirbelposition sind von den Betriebsparametern Belastung und Drehzahl ausgeprägt abhängig (Abbildung 2-10), was sich auch in den steilen Verläufen in Abbildung 2-21 widerspiegelt.
- $H_c/D_k = 0,18$ : Die alternierende Wirbeldrehrichtung hat fundamentalen Einfluss auf die Tropfentrajektorien. Sie verursacht eine inhomogene Hold-Up-Verteilung entlang der Kolonnenhöhe und eine offensichtliche Vergrößerung des  $D_{ax,d}$ . Form und Position der

kontinuierlichen Toruswirbel sind dagegen weitestgehend unabhängig von den Betriebsparametern (Abbildung 2-11), was sich auch in den flacheren Verläufen und geringeren Werten von  $D_{ax,c}$  abzeichnet.

Eine Bewertung hinsichtlich der primären Optimierungsgröße eines Stoffaustauschapparates, der Trennleistung, ist mit hydrodynamischen Untersuchungen allein nicht möglich. Welcher der obigen gegensätzlichen Effekte (Hold-Up-Verteilung vs.  $D_{ax,c}$ ) den Stoffaustausch maßgeblich beeinflusst, soll in Extraktionsversuchen direkt untersucht werden.

## 2.5 Stoffaustauschversuche

Die Konfigurationen der Compartmenthöhe  $H_C/D_K = 0,34$  und  $H_C/D_K = 0,18$  wurden hinsichtlich Trennleistung verglichen. Das Stoffsystem, die Versuchsdurchführung sowie die Versuche zur Untersuchung der Compartmenthöhe werden in diesem Kapitel behandelt. Stoffaustauschversuche, welche für die Überprüfung des optimierten Kolonnendesign dieser Arbeit durchgeführt wurden, werden an passender Stelle im späteren Kapitel 4.3.2 präsentiert. Die Vorgangsweise, das Stoffsystem sowie das Equipment bleiben bis auf die reduzierte Kolonnenhöhe unverändert.

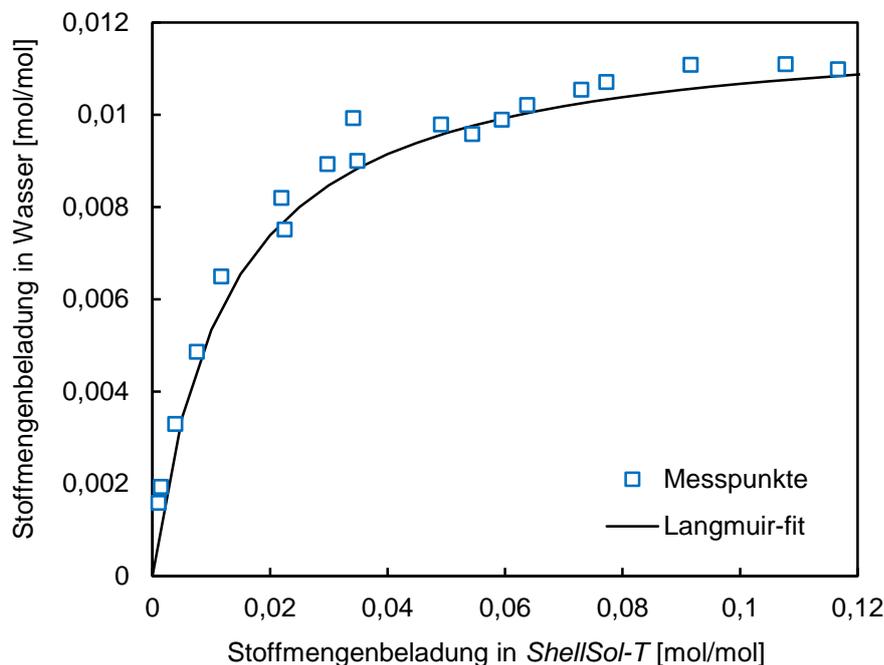
### 2.5.1 Stoffsystem & Versuchsdurchführung

Die Stoffaustauschversuche wurden mit dem Testsystem *ShellSol-T* – *n*-Butanol – Wasser durchgeführt. Das von der EFCE vorgeschlagene Testsystem Toluol-Aceton-Wasser wurde wegen der Bedenken bezüglich der Giftigkeit und der leichten Entzündlichkeit von Toluol sowie wegen der Verdampfungsverluste der Transferkomponente Aceton und der ungünstigen flüssig/flüssig-Verteilung von Aceton im Stoffsystem Toluol-Aceton-Wasser, nicht verwendet. *Shellsol-T*, ein aliphatisches Kohlenwasserstoffgemisch im Bereich  $C_{11}$  -  $C_{13}$ , wurde als disperse Phase verwendet. Es zeichnet sich durch geringen Dampfdruck, toxische Unbedenklichkeit und geringe Löslichkeit in Wasser aus. Entionisiertes Wasser wurde als kontinuierliche Phase verwendet, *n*-Butanol als Übergangskomponente. Die wichtigsten Stoffwerte des ternären Testsystems sind in Tabelle 2.5 zusammengefasst.

**Tabelle 2.5: ternäres Teststoffsystem**

	Phase	Dichte [kg/m <sup>3</sup> ]	kin. Viskosität [m <sup>2</sup> /s]	Dampfdruck (20°C) [hPa]
Wasser, entionisiert	kontinuierlich	998,1	$1,015 \cdot 10^{-6}$	23,4
<i>Shellsol-T</i>	dispers	756,8	$1,989 \cdot 10^{-6}$	1
<i>n</i> -Butanol	Transferkomp.	810	$3,638 \cdot 10^{-6}$	6,7

Wegen der vernachlässigbaren Löslichkeit von *ShellSol-T* in Wasser (<0,1[g/l] bei 20°C), konnte das Gleichgewicht in Form eines Beladungsdiagrammes in Laborversuchen aufgenommen werden (Abbildung 2-22).



**Abbildung 2-22: Gleichgewichtsdiagramm für ShellSol-T - n-Butanol - Wasser, T = 20 °C**

Für die spätere Auswertung mit dem HTU-NTU-Konzept wurden die experimentellen Datenpunkte über eine Kurve der Form einer Langmuir-Isotherme:

$$Y = K \frac{\alpha \cdot X}{(1 + \alpha \cdot X)} \quad (2-1)$$

mit den Konstanten  $K = 0,012$  und  $\alpha = 90$ , angepasst.

Die Transferkomponente *n*-Butanol wurde über den Zwischentank dem Lösungsmittelkreislauf zugegeben (2,5kg *n*-Butanol auf 60l *ShellSol-T*). Durch Umpumpen des so hergestellten Feed zwischen Vorlagetank und Zwischentank wurde die homogene Verteilung der Transferkomponente in der Feedphase sichergestellt. Während in hydrodynamischen Messungen die disperse Phase im Kreis geführt wurde, musste der Kreislauf in den Stoffaustauschmessungen über Schließen von Ventil 1 (Abbildung 2-3) unterbrochen werden. Die Versuchsdauer ist somit über das Fassungsvermögen der Vorlagebehälter (100l) beschränkt. Der Stoffdurchgang erfolgte von der Dispersphase zur kontinuierlichen Phase (Stoffaustauschrichtung  $d \rightarrow c$ ). Nach Erreichen des stationären Betriebszustandes<sup>8</sup> wurden an den Ein- und Auslässen von beiden Phasen Proben entnommen. Entlang der aktiven Höhe standen 5 Probenahmestellen für die kontinuierliche Phase zur Verfügung. Die

<sup>8</sup> In Vorversuchen wurde festgestellt, dass sich die Zusammensetzung der kontinuierlichen Phase entlang der Höhe nach ~60min nicht mehr messbar ändert. Die Dauer bis zur Probenahme wurde mit 70min festgelegt.

Analyse erfolgte am Gaschromatographen (Agilent 6890, Säule: Agilent VF-WAXms, Injektionstemperatur: 250° [C], FID-Detektion, Detektortemperatur: 300° [C], 35 [hPa]) nach Verdünnung mit Tetrahydrofuran (THF). Die Volumenströme wurden mit  $V_{\text{kont.}} = 45$  [l/h] und  $V_{\text{disp.}} = 40$  [l/h] konstant gehalten, was einer Gesamtkolonnenbelastung von 12,7 [m<sup>3</sup>/(m<sup>2</sup>h)] entspricht. Die Rotordrehzahl wurde zwischen 0 [1/min], 400 [1/min] und 600 [1/min] variiert.

## 2.5.2 Stoffaustausch; Ergebnisse, Einfluss der Compartmenthöhe

Die Zusammensetzung der dispersen Phase wurde am Ein- und Austritt analysiert. Einphasige Probenahme, welche für die Bestimmung der momentanen Zusammensetzung in der aktiven Höhe essentiell ist, konnte nur für die kontinuierliche Phase bewerkstelligt werden. Für diese können Beladungsprofile entlang der Kolonnenhöhe angegeben werden (Abbildung 2-25). Die Bilanzgeraden (Abbildung 2-23 und Abbildung 2-24) müssen idealisiert als Geraden zwischen den zwei Endpunkten des Apparates angenommen werden. Der reale Verlauf, wie in Abbildung 1-10 beschrieben, kann aufgrund der fehlenden Information über die disperse Phase im aktiven Teil nicht dargestellt werden.

Wie erwartet, bewirkt der steigende Energieeintrag durch den Rotor intensiveren Stoffaustausch. In Abbildung 2-23 sind die gemessenen Betriebsgeraden für  $H_C/D_K = 0,34$  bei Variation der Drehzahl dargestellt. Die parallele Verschiebung der Betriebslinien in Richtung Gleichgewicht bei steigender Rotordrehzahl bedeutet eine Erhöhung der Trennleistung, es können mehr Trennstufen zwischen Betriebsgerade und Gleichgewichtslinie konstruiert werden.

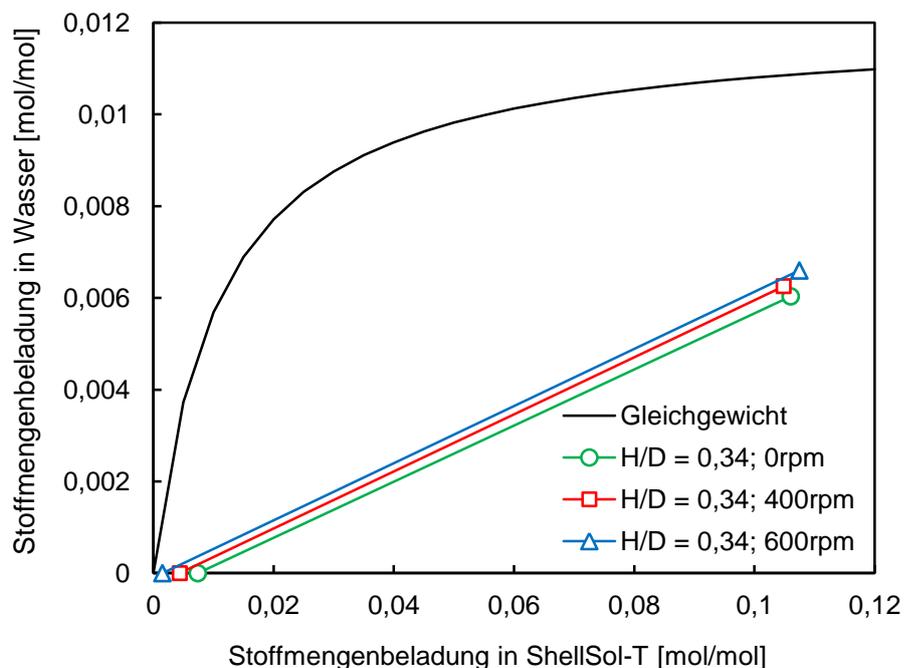
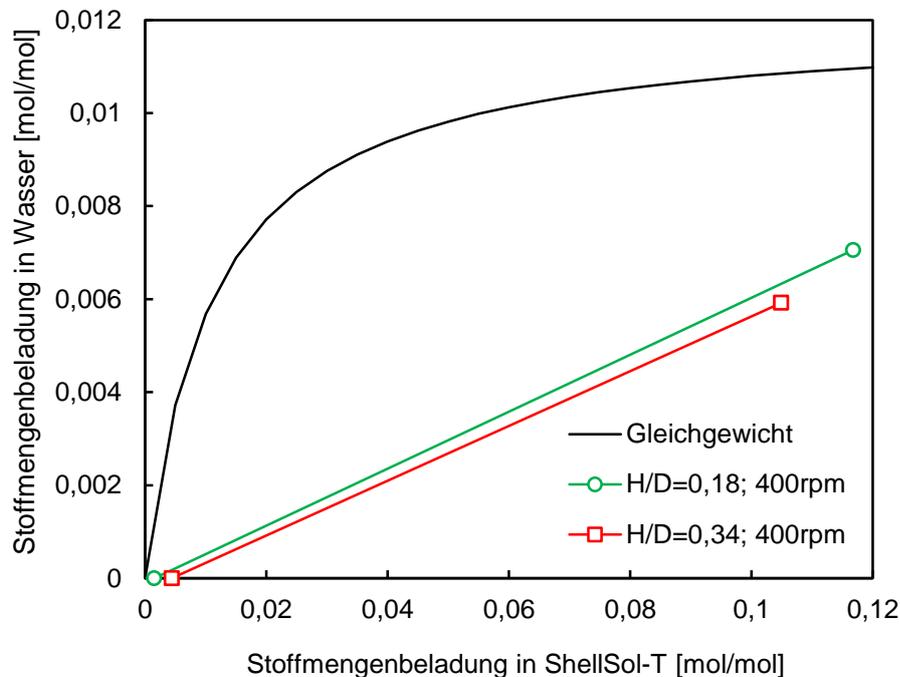


Abbildung 2-23: Vergleich der Betriebsgeraden bei Variation der Drehzahl für  $H_C/D_K = 0,34$ .

Interessanter scheint der Vergleich bei Variation der Compartmenthöhe. Wie in den vorangegangenen Kapiteln gezeigt (Abbildung 2-14, Abbildung 2-21) wurde, sind ein Strömungsregime mit homogenem Tropfenbild (geringerem  $D_{ax,d}$ ) und hohem  $D_{ax,c}$ , einem Strömungsregime mit inhomogener Hold-Up-Verteilung (höherem  $D_{ax,d}$ ) und geringem  $D_{ax,c}$  gegenüberzustellen. Die Betriebsgeraden für  $H_C/D_K = 0,34$  und  $H_C/D_K = 0,18$  nach Erreichen des stationären Betriebes sind in Abbildung 2-24 dargestellt.



**Abbildung 2-24: Vergleich der Betriebsgeraden bei Variation der Compartmenthöhe.**

Es ist ersichtlich, dass die reduzierte Compartmenthöhe  $H_C/D_K = 0,18$  eine erhöhte Trennleistung bewirkt, die Betriebslinie wird analog zur Erhöhung der Drehzahl zum Gleichgewicht hin verschoben. Die Reduzierung des  $D_{ax,c}$  durch die Verringerung der Compartmenthöhe überwiegt die durch Wirbelumkehr hervorgerufene Erhöhung des  $D_{ax,d}$  und resultiert in erhöhter Trenneffizienz des Apparates.

Abbildung 2-25 zeigt die Beladungsprofile der kontinuierlichen Phase über der Kolonnenhöhe bei Variation der Drehzahl. Aufgrund des experimentellen Fehlers bei der Herstellung konstanter Feedzusammensetzung wurde die Beladung auf den jeweiligen Maximalwert normiert. Die höhere Trennleistung der niedrigeren Compartmenthöhe ist an der Verzerrung der Beladungsprofile in Richtung Koordinatenursprung ersichtlich. Auffallend ist der große Einfluss der Compartmenthöhe verglichen mit dem Energieeintrag durch den Rotor. Trotz Verschlechterung des Tropfenbildes bewirkt die Reduktion der Compartmenthöhe auf  $H_C/D_K = 0,18$  eine deutlich höhere Steigerung der Trenneffizienz als die Erhöhung der Drehzahl um 200 [1/min], was im gegebenen Fall etwa ~40% des möglichen Drehzahlbereiches ausmacht. Diese Ergebnisse unterstreichen einerseits den dominierenden Einfluss von  $D_{ax,c}$  auf die Trennleistung und andererseits das Optimierungspotential durch die Compartmentgeometrie.

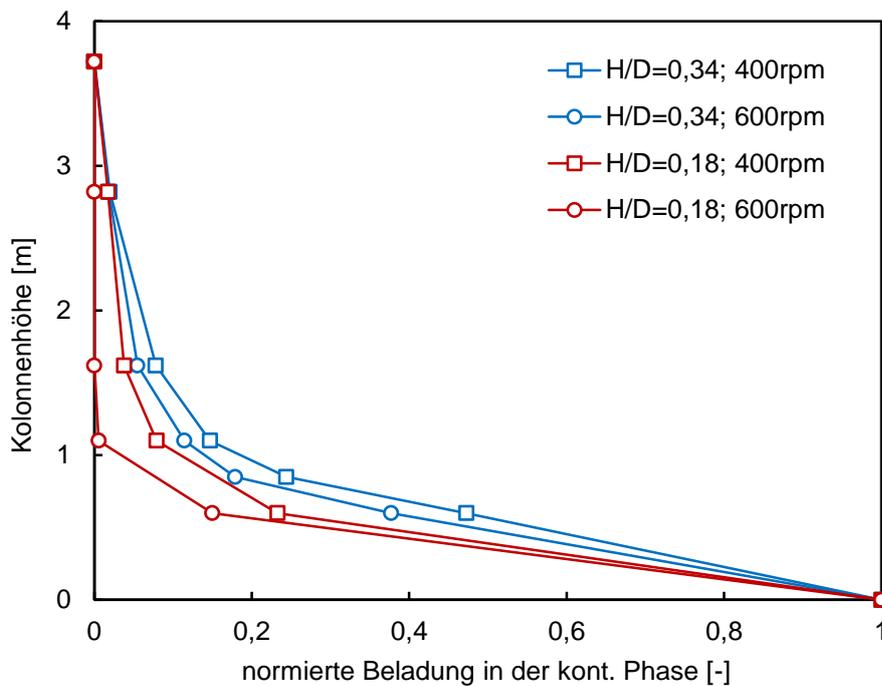


Abbildung 2-25: Vergleich der Beladungsprofile über die Kolonnenhöhe bei Variation der Compartmenthöhe und Drehzahl.

## 2.6 Diskussion der experimentellen Ergebnisse und Schlussfolgerungen

Die experimentellen Ergebnisse aus den bisher betrachteten Parametern sind bezüglich einer eindeutigen Designempfehlung unbefriedigend. Einerseits wird, wie bereits von KOSTERS [7] und MISEK [8] vorgeschlagen, in den Experimenten deutlich, dass eine möglichst niedrige Compartmenthöhe zu wählen ist, die axiale Rückvermischung der kontinuierlichen Phase wird verringert und die Trennleistung erhöht. Gleichzeitig ist bei geringer Compartmenthöhe eine deutliche Verschlechterung des Tropfenbildes zu beobachten. Alternierende Wirbeldrehrichtungen benachbarter Compartments verursachen rekoaleszierte Bereiche disperser Phase, reduzieren damit die spezifische Oberfläche, erhöhen  $D_{ax,d}$  und erschweren die Prozessführung.

Die Bestimmung der optimalen Compartmentausführung oder der kritischen Compartmenthöhe, ab welcher Wirbelumkehr auftritt, ist experimentell zu aufwändig. Im Folgenden sollen die experimentellen Daten dazu verwendet werden die CFD-Modellierung zu validieren. Mit experimentell validierten CFD-Simulationen soll anschließend eine Sensitivitätsanalyse der Einbautengeometrie vorgenommen werden.

Die aus der virtuellen Optimierung resultierende Geometrie soll in abschließenden Sedimentations-, Belastungs- und Stoffaustauschversuchen sowie TGV-Messungen überprüft und mit dem klassischen RDC-Design verglichen werden. Die Ergebnisse werden in Kapitel 4.2 vorgestellt.

### 3 Numerische Simulation

Die numerischen Simulationen in dieser Arbeit wurden mit dem kommerziellen Code *Ansys Fluent* (v12 bis v14) durchgeführt. Nach erfolgreicher Validierung mit experimentellen Daten, wurden in numerisch günstigen einphasigen Simulationen Sensitivitätsanalysen durchgeführt, um ein grundsätzliches Verständnis für den Einfluss einzelner geometrischer Kennzahlen auf das Wirbelverhalten der kontinuierlichen Phase zu gewinnen. Die aussichtsreichsten Geometrien wurden anschließend in der numerisch aufwändigeren Zweiphasensimulation überprüft. Durch Kombination des *Euler-Euler*-Mehrphasenmodells mit Tropfenpopulationsbilanzen (TPB) wurde der Einfluss der dispersen Phase, bei Berücksichtigung von Tropfenkoaleszenz und Tropfenspaltung, untersucht. In *Euler-Lagrange*-Simulationen wurde das Sedimentationsverhalten von starren Einzelkugeln in Abhängigkeit von der Kolonnengeometrie untersucht, Schwarmeinfluss oder Tropfenbruch und Koaleszenz wurden bei diesen Untersuchungen vernachlässigt. Die Optimierungsziele sind wie folgt zusammenzufassen:

#### **Optimierungsziele der Einphasensimulation:**

- Minimierung der axialen Dispersion  $D_{ax,c}$
- Maximierung der Wirbelstärke ( $\Gamma$ )
- Minimierung der Totgebiete bzw. Maximierung der Wirbelflächennutzung (Q-Kriterium)

#### **Optimierungsziele bei Zweiphasenbetrieb:**

- Minimierung der Tropfengröße  $d_{32}$  & Verengung der Tropfengrößenverteilung  $Q_3$
- Maximierung des Hold-Up  $\varepsilon$
- Minimierung des  $D_{ax, \text{Einzeltröpfchen}}$

Allgemein steigt mit der Anzahl der modellierten Phänomene<sup>9</sup> der numerische Aufwand, oftmals überproportional zum Erkenntnisgewinn. Gleichzeitig sinkt durch die komplexe Interaktion zusätzlicher Phänomene (z.B. Stoffaustauschrichtung auf Koaleszenzverhalten, stoffaustauschbedingte Marangonikonvektion, etc.) die Vorhersagekraft der Simulation. Modellparameter müssen an experimentelle Daten angepasst werden und können nur sehr begrenzt auf andere Betriebsbedingungen extrapoliert werden. Zudem macht der enorme Zuwachs an Rechenaufwand eine Sensitivitätsanalyse mit umfassenden Simulationsserien ohne die Kapazität von Rechenclustern unmöglich. Einphasige Problemstellungen dagegen sind mit CFD weitestgehend gut vorhersagbar. Die Modelle sind für viele Strömungsregime validiert, die Vorhersagekraft ist groß und wird beim industriellen Apparatedesign (z.B.: Turbinenschaufeln) direkt und quantitativ eingesetzt.

---

<sup>9</sup> z.B.: Mehrphasigkeit, Stofftransport, Wärmetransport, chemische Reaktion, Bruch & Koaleszenz, etc.

## 3.1 Simulation der Einphasenströmung

Die Strömung der kontinuierlichen Phase von Stoffaustauschapparaten mit kontinuierlichem Phasenkontakt ist die phänomenologische Grundlage für alle darauf aufbauenden Phänomene der flüssig/flüssig-Extraktion. Das Ziel beim Design einer gerührten Kolonne sollte sein toroidale Wirbel zu erzeugen, die einen Tropfen seinem freien Sedimentationspfad entreißen, möglichst lange im Kreis transportieren und so dessen Zeit für Stoffaustausch erhöhen. Durch die Reibung (*drag force*) zwischen Tropfenschwarm und kontinuierlicher Phase wird Energie an die disperse Phase abgegeben, der Toruswirbel und somit die Kernfunktion des Apparates wird im ungünstigsten Fall verändert oder zerstört. Einphasenströmung stellt somit den idealen Betriebszustand dar, in dem die kontinuierliche Phase unbeeinflusst von der dispersen Phase bleibt. Ziel bei der Optimierung von Einbauten muss es daher sein, starke Wirbelstrukturen zu erzeugen, die möglichst resistent gegenüber Veränderungen durch die disperse Phase sind und den gesamten Kolonnenquerschnitt ohne Ausbildung von Totgebieten durchmischen.

### 3.1.1 Modellierung

Erhaltungsgleichungen sind die mathematische Grundlage bei der Modellierung von Transportprozessen. Sie basieren auf physikalischen Axiomen zur Erhaltung von Masse, Impuls und Energie. Die Massenerhaltung (Kontinuitätsgleichung) lautet:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (3-1)$$

Die Impulserhaltungsgleichung (*Navier-Stokes-Gleichung*) ist gegeben durch:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (3-2)$$

mit dem statischen Druck  $p$ , der Volumenkraft durch Gravitation  $\rho \vec{g}$  und den äußeren Volumenkräften  $\vec{F}$ . Der Schubspannungstensor  $\tau$  ist gegeben durch:

$$\tau = \mu \left[ (\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{u} \cdot \mathbf{I} \right] \quad (3-3)$$

mit dem Einheitstensor  $\mathbf{I}$  und der dynamischen Viskosität  $\mu$ .

Die Erhaltungsgleichung für den tangentialen Impulstransport (*swirl velocity*) lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w) + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial x} (r \rho u w) + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v w) = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ r \mu \frac{\partial w}{\partial x} \right] + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^3 \mu \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{w}{r} \right) \right] - \rho \frac{v w}{r} \quad (3-4)$$

Extraktionskolonnen werden in der Regel bei Umgebungsbedingungen betrieben, der Wärmeübergang (Energiegleichung) wird in der Simulation daher nicht berücksichtigt. Bei inkompressiblen Fluiden ist für die Schließung des Gleichungssystems ohnehin keine Energiegleichung nötig, und wird daher auch nicht näher behandelt. Für eine umfassende Einführung sei auf [55], [56], [57] und [58] verwiesen.

### 3.1.1.1 Rechengitter, Numerik & Randbedingungen

Eine analytische Lösung der *Navier-Stokes*-Gleichungen ist nur für wenige Spezialfälle verfügbar, das Gleichungssystem muss numerisch gelöst werden. Die partiellen Differentiale müssen in endliche Differenzen umgewandelt (diskretisiert) werden. Die so erhaltenen Differenzgleichungen können auf einem Rechengitter iterativ gelöst werden. In den kommerziellen CFD-Codes hat sich die *Finite-Volumen-Methode* durchgesetzt. Das Modellgebiet wird in Kontrollvolumina (Zellen) unterteilt, was die Überführung der partiellen Differentialgleichungen in algebraische Gleichungen ermöglicht. Für jede Zelle wird ein Satz der algebraischen Gleichungen iterativ gelöst. Durch die Diskretisierung des Modellgebietes wird ein numerischer Fehler eingeführt, der dann verschwindet wenn die Zellgröße gegen null geht. Mit der Feinheit der Rechenzellen steigt aber gleichzeitig die Rechenzeit, die Wahl der passenden Zellengröße ist einen Kompromiss aus Rechenaufwand und Genauigkeit. In der vorangegangenen Diplomarbeit [43] wurde die Zellengröße, bei deren weiterer Verfeinerung sich keine Änderung des Strömungsfeldes ergibt, mit  $\sim 1$  [mm] Seitenlänge bestimmt. Um auch in den Compartments am Ein- und Auslass einheitliche Lösungen zu erhalten, wurden Einlass und Auslass als translatorisch-periodische Ränder definiert. Der Massenstrom in axialer Richtung wurde vorgegeben, am periodischen Auslass wurden die Werte aller Transportvariablen zurück an den Einlass übergeben. Aus Vorarbeiten [43], [49], [54] ist bekannt, dass die Reduzierung des Simulationsgebietes auf ein axialsymmetrisches 2D-Problem ohne Informationsverlust möglich ist. Abbildung 3-1 zeigt die 22 simulierten Compartments, mit Injektions- und Detektionsebenen für die Simulation der Tracerversuche und den übrigen verwendeten Randbedingungen.

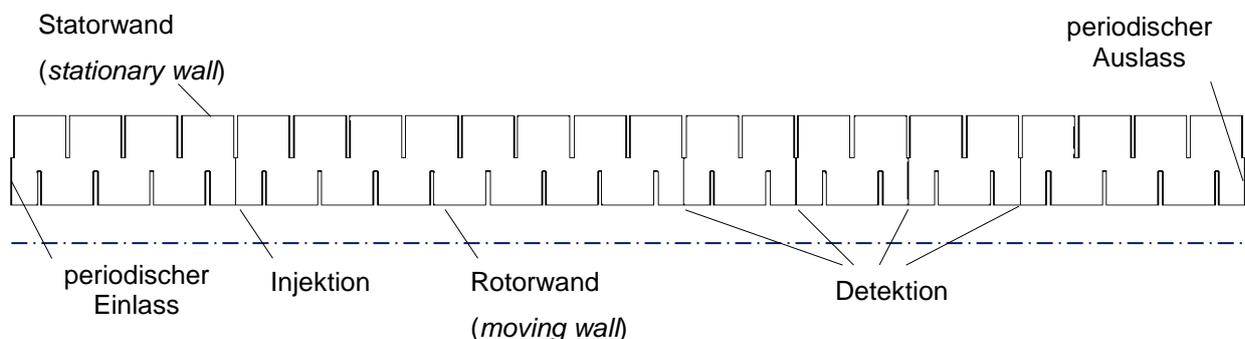
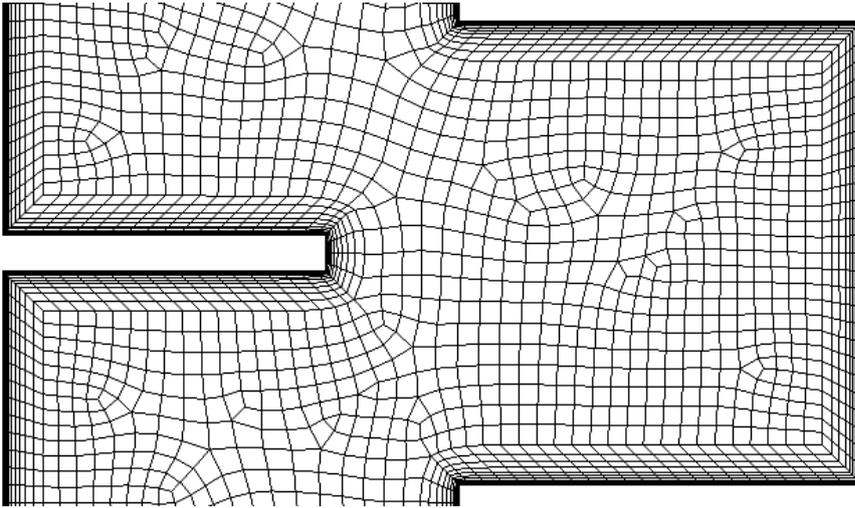


Abbildung 3-1: Axialsymmetrisches 2D-Simulationsgebiet.



**Abbildung 3-2: Beispielhaftes Rechengitter eines Compartments mit Zellenverdichtung in Wandnähe.**

In Vorarbeiten [42], [43], hat sich gezeigt, dass die Modellierung der Grenzschicht fundamentale Auswirkungen auf Simulationsergebnisse hat. Wandnahe Bereiche wurden mit Hilfe von *Inflation Layers* feiner aufgelöst (siehe Abbildung 3-2 und Tabelle 3.2), um eine Grenzschichtbehandlung mit *Enhanced Wall Treatment* zu ermöglichen. Die  $y^+$ -Werte aller einphasigen Simulationen lagen in der Größenordnung von 1, das heißt die Grenzschicht wurde bis zur viskosen Unterschicht aufgelöst. Ein Vergleich zwischen *Enhanced Wall Treatment* und der ökonomischeren Modellierung mit dem logarithmischen Wandgesetz (*standard wall functions*) ist im Anhang, Kapitel 8.4.1, gegeben.

**Tabelle 3.1: Algorithmen für die Simulation der Einphasenströmung.**

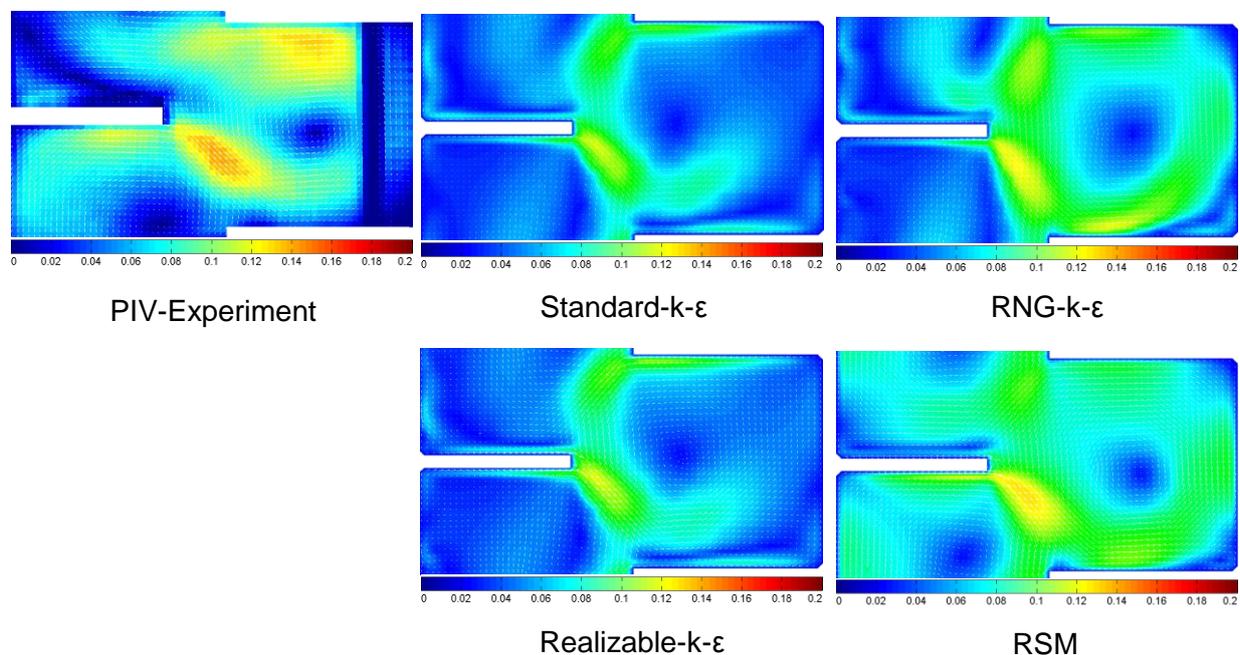
Druck	<i>PRESTO!</i>
Impuls	<i>QUICK</i>
Reynoldsspannungen, $\epsilon$	<i>QUICK</i>
Druck-Geschwindigkeitskoppelung	<i>SIMPLE</i>
Löser	Segregiert

**Tabelle 3.2: Rechengitter für die Simulation der Einphasenströmung.**

Zellenanzahl:	~100.000
Zellenelemente:	unstrukturierte Vierecke
Seitenlänge:	~1 [mm]
<b>Grenzschicht:</b>	
Wandnächste Zellenbreite:	0,04 [mm]
Wachstumsrate der Zellenbreite:	1,2 bis 1,3
Anzahl der Schichten	11 bis 13

### 3.1.1.2 Turbulenzmodellierung

Die Evaluierung der Turbulenzmodelle im einphasigen Strömungsfeld wurde in der vorangegangenen Diplomarbeit [43] durchgeführt. Die *Direct Numerical Simulation* (DNS) und die *Large Eddy Simulation* (LES) wurden wegen des um viele Größenordnungen höheren Rechenaufwandes vordergründig nicht berücksichtigt. Es konnte gezeigt werden, dass ausschließlich bei Anwendung des *Reynolds-Stress-Models* (RSM) in Kombination mit einer feinen Gitterauflösung der wandnahen Bereiche (*Enhanced Wall Treatment*) hervorragende Übereinstimmungen mit experimentell Daten möglich sind. Sowohl die radialen und axialen Geschwindigkeitskomponenten aus eigenen PIV-Messungen ([42], [43]) als auch die tangentialen Komponenten aus LDA-Messungen von WEISS [61] konnten ohne Anpassung freier Parameter mit hoher Genauigkeit abgebildet werden.



**Abbildung 3-3: Vergleich der simulierten Geschwindigkeitskonturen in der Ebene eines RDC150 mit dem PIV-Experiment bei verschiedenen Turbulenzmodellen.**

Die Turbulenzmodelle, die isotrope<sup>10</sup> Wirbelviskosität annehmen (*Standard-k-ε*, *RNG-k-ε*, *Realizable-k-ε*), konnten die stark verdrallte Wirbelströmung des RDC nicht abbilden. Die Energiedissipation  $\varepsilon$ , welche eine der bestimmenden Größen für Tropfenbruch und Zerfall ist, wurde zudem unphysikalisch abgebildet.

Das verwendete *Reynolds-Stress-Models* (RSM) beruht auf der Reynolds-Mittelung (*Reynolds Decomposition*), bei der die momentanen Bilanzgrößen  $\Phi$  in einen zeitlichen Mittelwert und eine Schwankungsgröße zerlegt werden:

<sup>10</sup> richtungsunabhängige

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (3-5)$$

Die Reynolds-Mittelung führt zu einer statistischen Beschreibung der Strömung, die sich aus gemittelten (*mean flow*) und aus turbulent schwankenden Anteilen zusammensetzt. Die Kombination von Gleichungen (3-2) und (3-5) liefert die gemittelten *RANS*-Gleichungen (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( -\overline{\rho u_i u_j} \right) \quad (3-6)$$

Die *RANS*-Gleichungen enthalten im Gegensatz zu den *Navier-Stokes*-Gleichungen den zusätzlichen Term  $(-\overline{\rho u_i u_j})$ . Er wird als *Reynolds-Spannungen* bezeichnet und charakterisiert den turbulenten Impulstransport. Der *Reynolds-Spannungstensor* besteht aus 9 Komponenten, von denen 3 symmetrisch sind, die übrigen 3 Normalspannungen und 3 Schubspannungen müssen mit zusätzlichen Transportgleichungen für jede Zelle berechnet werden. Das *Reynolds-Stress-Models* (RSM) berücksichtigt Effekte, die bei stark gekrümmten Stromlinien, bei Wirbelbildung und Rotation oder bei plötzlichen Änderungen der Scherrate auftreten, und es ist das genaueste und numerisch aufwändigste *RANS*-Turbulenzmodell.

### 3.1.1.3 Modellierung der axialen Dispersion (*stochastic tracking*)

Die axiale Dispersion der kontinuierlichen Phase  $D_{ax,c}$  wurde durch Adaption des *Euler-Lagrange*-Mehrphasenmodells (siehe Kapitel 3.2.2) modelliert, indem der Tracer als Schwarm masseloser Partikel betrachtet wurde. Beim *Discrete Random Walk Model* [57] werden die turbulenten Partikeltrajektorien durch Integration der Kräftebilanz (Gleichung (3-31)) um ein Partikel berechnet. Wird bei der Integration die momentane Fluidgeschwindigkeit  $u = \bar{u} + u'$  verwendet, so kann bei genügender Anzahl an Wiederholungen bzw. Partikeln der zufällige Einfluss der Turbulenz auf die Verweilzeit dargestellt werden. Die anisotrop fluktuierenden Anteile der Geschwindigkeit  $u'$ ,  $v'$  und  $w'$ , werden aus dem lokalen Turbulenzparameter  $k$  und einer Zufallszahl  $\zeta$  errechnet<sup>11</sup>:

$$u' = \zeta \sqrt{u'^2} = \zeta \sqrt{2k/3} \quad (3-7)$$

<sup>11</sup> Im Gegensatz zu isotropen Turbulenzmodellen ( $k$ - $\epsilon$ ) gilt  $u' \neq v' \neq w'$

Die fluktuierenden Anteile sind stückweise diskretisierte konstante Zeitfunktionen, deren Zahlenwert über die charakteristische Lebensdauer der Wirbel (*characteristic lifetime of eddies*,  $\tau_e$ ) konstant gehalten wird:

$$\tau_e = 2 \cdot T_L \quad (3-8)$$

Für masselose Tracerpartikel, die sich ohne Relativgeschwindigkeit zum Fluid bewegen, kann die Lagrang'sche Zeit  $T_L$ , bei Verwendung des *Reynolds Stress Models*, mit:

$$T_L \approx 0,3 \frac{k}{\varepsilon} \quad (3-9)$$

angenähert werden [58]. Die Partikelinjektion erfolgte auf Niveau des Stators mit mindestens vier Compartments Abstand zum Einlass. Die Detektion erfolgte an vier Detektionsebenen mit jeweils zwei Compartments Abstand (Abbildung 3-1). Die übrigen Parameter für die Berechnung der turbulenten Trajektorien sind in Tabelle 3.3 zusammengefasst. Die Auswertung erfolgte wie im Experiment mit dem Dispersionsmodell (Kapitel 1.5.3.1) und der in GURKER [42] erstellten Routine für *LabVIEW 2009*.

**Tabelle 3.3: Einstellungen für das *stochastic tracking* mit dem *Random Walk Model*.**

max. number of steps	1e+07-1e+09
length scale	~ 0,1[mm]
injection type	surface injection
particle type	massless
tracked particles	30.000 – 200.000

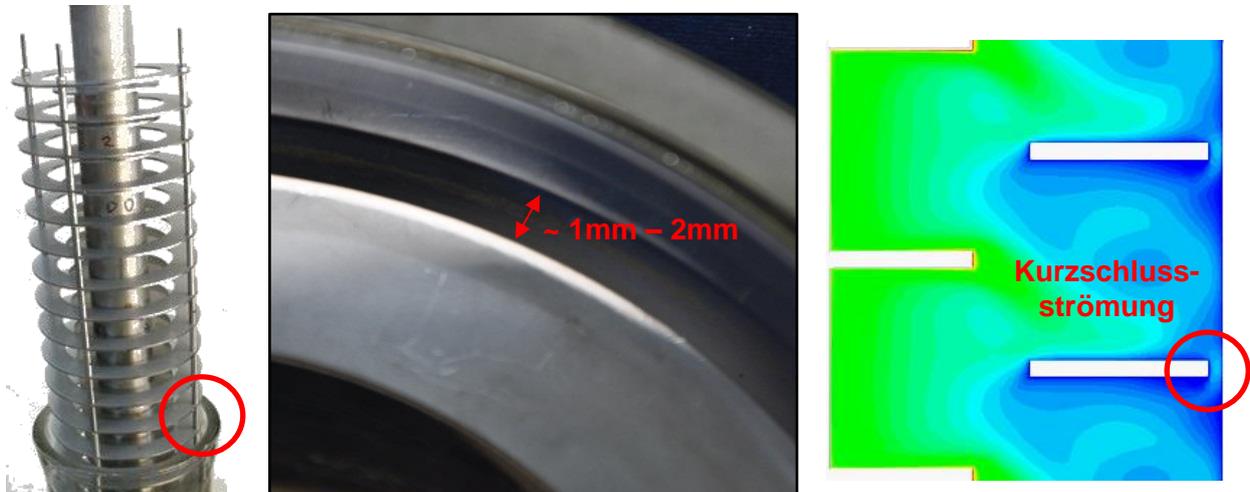
### 3.1.2 Experimentelle Validierung

Die experimentelle Validierung des einphasigen Strömungsfeldes wurde in der vorangegangenen Diplomarbeit [41] mit hoher Übereinstimmung durchgeführt und soll an dieser Stelle nicht weiter behandelt werden. Problematischer ist die numerische Vorhersage der axialen Rückvermischung, wie von HADERER [59] und GURKER [42] berichtet. Die Autoren konnten bei niedrigen Drehzahlen unterhalb des Betriebsbereiches befriedigende Übereinstimmung mit empirischen Korrelationen und eigenen Messdaten erzielen. Zudem konnte der qualitative Einfluss der Drehzahl mit CFD abgebildet werden, die Abweichung wuchs aber mit steigender Drehzahl linear an, sodass der  $D_{ax,c}$  bei intensiver Durchmischung um bis zu 300% zu gering vorhergesagt wurde. GURKER [53] konnte numerische Effekte als

Ursache für die systematische Abweichung weitestgehend ausschließen. In der vorliegenden Arbeit wurde die Simulation der axialen Vermischung mit dem *Random Walk Model* erneut validiert. Hierfür standen einerseits empirische Korrelationen (Tabelle 8-10) und andererseits eigene Messdaten (Kapitel 2.4.2) zur Verfügung.

Als Ursache für die zu gering berechnete axiale Vermischung, insbesondere bei höheren Drehzahlen, konnte in dieser Arbeit die vereinfachte geometrische Modellierung des Simulationsgebietes identifiziert werden. Die reale Apparategeometrie unterscheidet sich von der ideal simulierten 2D-Darstellung in zwei wesentlichen Punkten, die einen wesentlichen Beitrag zur Erhöhung der axialen Vermischung liefern:

- Die Statorscheiben werden von Distanzhülsen getragen, welche in einem azimuthalen Abstand von  $90^\circ$  zueinander angebracht sind (Abbildung 3-4, links). Sie erzeugen Totzonen in ihrem Nachlaufgebiet, welche sowohl die axiale Vermischung der kontinuierlichen als auch der dispersen Phase erhöhen.
- Der Innendurchmesser der Glasschüsse ist nicht konstant über der Höhe. Für die Montage muss der Statorscheibendurchmesser so gewählt werden, dass ein radialer Spalt (1 [mm] ~ 2 [mm]) zwischen Statorkäfig und Glasschuss bestehen bleibt (Abbildung 3-4, Mitte). Wie die durch Statorhülsen verursachten Totgebiete bewirken Kurzschlussströmungen im äußeren Spalt eine Erhöhung der axialen Dispersion beider Phasen.

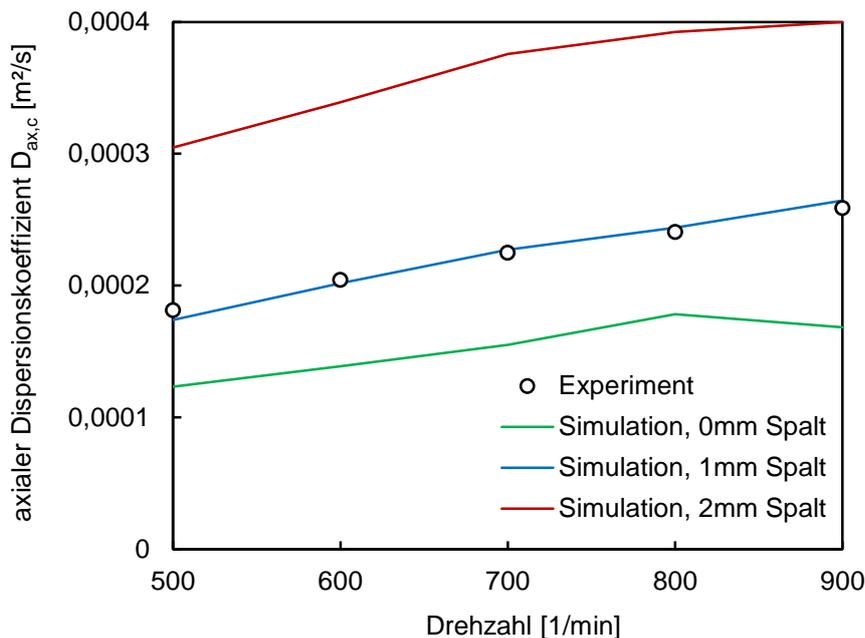


**Abbildung 3-4: Statorkäfig mit Distanzhülsen (links); Spalt zwischen Statorkäfig und Glasschuss (mitte); Konturen des Geschwindigkeitsbetrages: Kurzschlussströmung im Spalt zwischen benachbarten Compartments (rechts)**

Die Berücksichtigung dieser Abweichungen von der idealen Geometrie ist in der Simulation prinzipiell möglich, aus numerischer Sicht ist aber nur die Implementierung des äußeren Spaltes sinnvoll, da sie auch in der axialsymmetrischen 2D-Darstellung möglich ist.

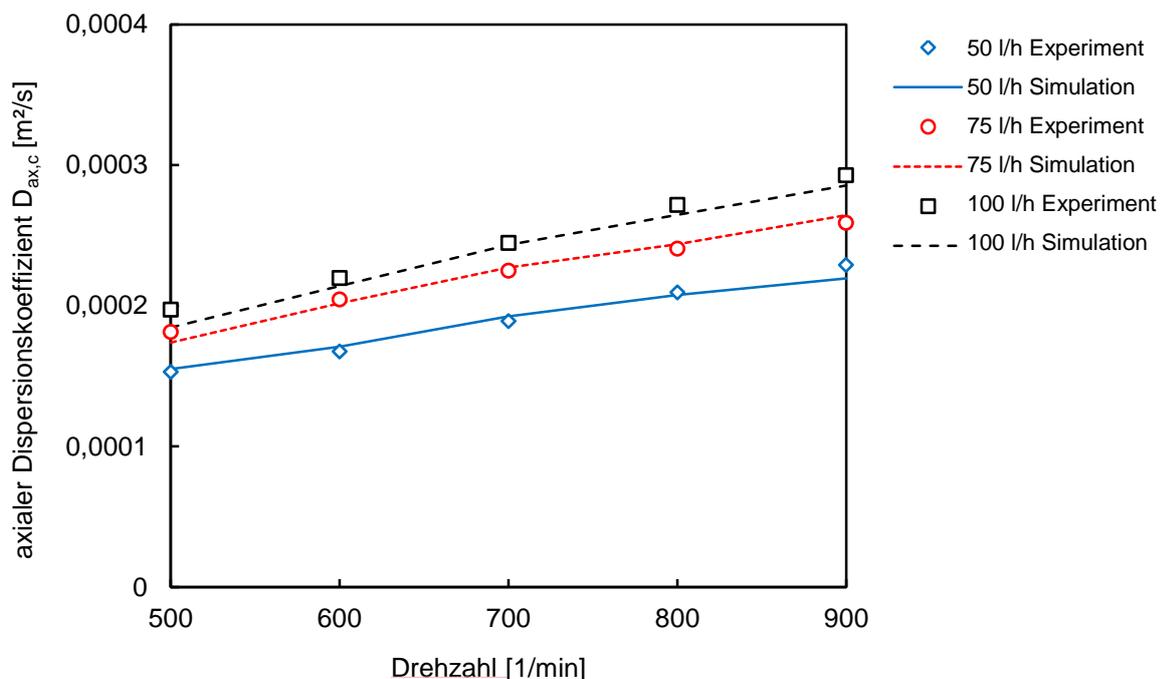
Abbildung 3-5 zeigt den Vergleich zwischen experimentellen und numerischen Ergebnissen bei Variation der Spaltbreite. Bei Nichtberücksichtigung der Kurzschlussströmung (0mm

Spalt, grüne Linie) wird die axiale Vermischung wie in GURKER [42] und HADERER [59] zu gering vorhergesagt.



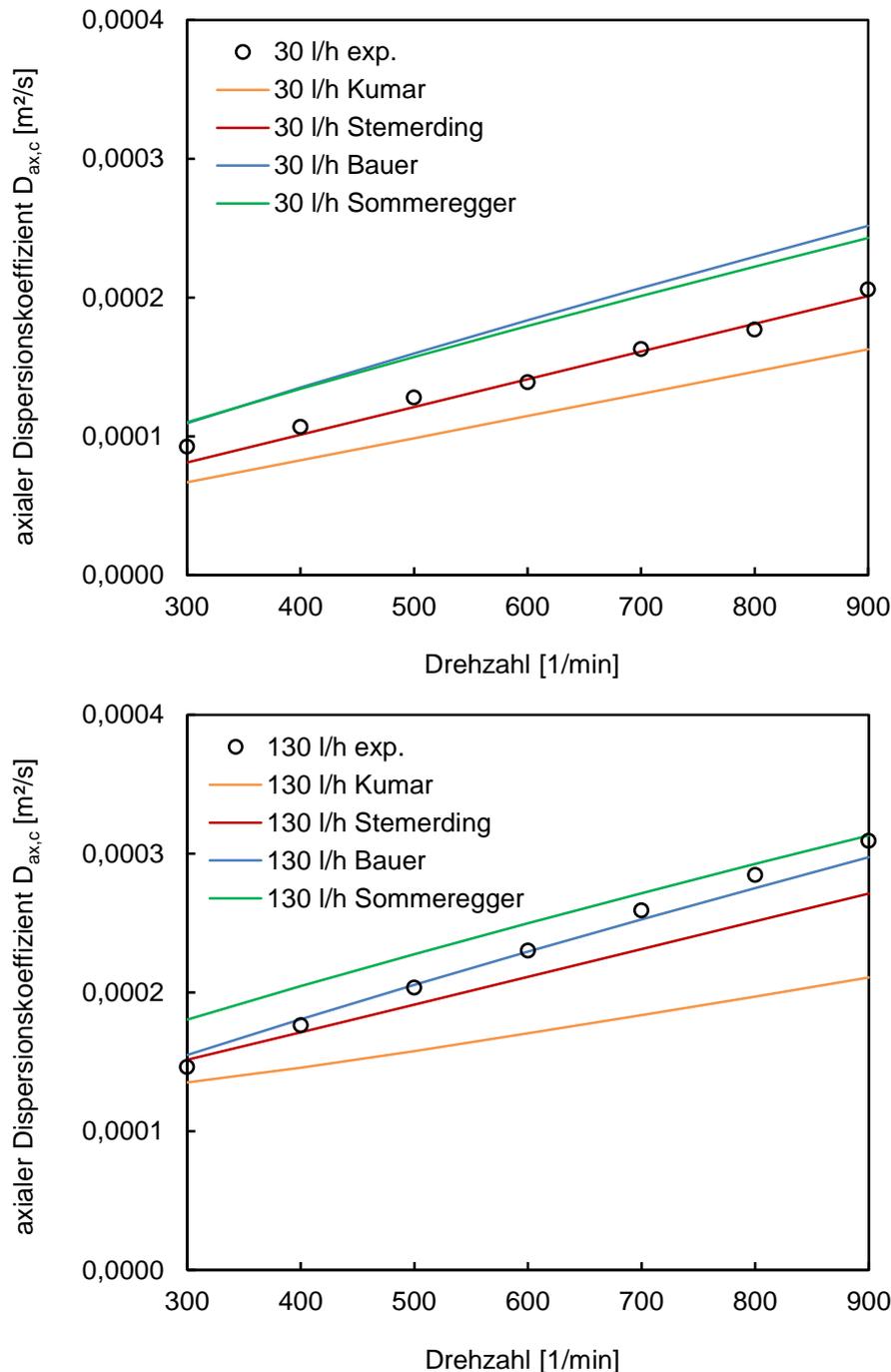
**Abbildung 3-5: Vergleich der experimentellen und simulierten  $D_{ax}$ -Werte bei verschiedenen Spaltbreiten, 75 l/h,  $H_c/D_k = 0,34$**

Erst durch Berücksichtigung der entsprechenden Spaltbreite (1 [mm], blaue Linie), konnten die experimentellen Daten aus Kapitel 2.4.2 mit sehr hoher Übereinstimmung abgebildet werden. Abbildung 3-6 zeigt, dass die hohe Voraussagekraft für den gesamten technisch relevanten Betriebsbereich der Rührintensität bzw. der Kolonnenbelastung gegeben ist.



**Abbildung 3-6: Vergleich der simulierten  $D_{ax,c}$ -Werte mit experimentellen Daten aus Tracerversuchen, RDC100, 1 [mm] Spalt,  $H_c/D_k = 0,34$ .**

Die Vorhersagekraft der Einphasensimulationen wird im Vergleich mit empirischen Korrelationen, die je nach Kolonnenbelastung unterschiedlich gute Übereinstimmung mit Messdaten liefern, noch deutlicher. Während bei geringer Belastung die Korrelation von STEMERDING [54] zu befriedigender Übereinstimmung führt (Abbildung 3-7 oben), ist dies bei hohen Durchsätzen mit der Korrelation von BAUER [55] der Fall (Abbildung 3-7 unten). Eine ganzheitliche Übereinstimmung über den technisch relevanten Bereich der Betriebsparameter ist im Gegensatz zur CFD-Simulation mit keiner der betrachteten empirischen Korrelation möglich.



**Abbildung 3-7: Vergleich der experimentellen  $D_{ax,c}$ -Werte mit empirischen Korrelationen,  $H_c/D_T = 0,34$ , oben: 30[l/h], unten: 130[l/h].**

### 3.1.3 Designoptimierung für Einphasenbetrieb

Der Simulationsalgorithmus aus vorangegangenem Kapitel, der zur Übereinstimmung mit Messergebnissen verschiedener Betriebsbedingungen geführt hat, soll im folgenden Kapitel dazu verwendet werden, eine geometrische Optimierung hinsichtlich des axialen Dispersionskoeffizienten  $D_{ax,c}$  durchzuführen. Die Optimierung bezüglich Wirbelintensität (bzw. Zirkulation  $\Gamma$ ) und Flächennutzung der Wirbel wird beziehend zur Wirkung auf den Einzeltropfen im Kapitel 3.2.2.2 behandelt.

Ausgehend von der Geometrie des am Institut verfügbaren RDC150 [41], [40], wurden die geometrischen Kenngrößen in einer Sensitivitätsanalyse mit 84 Einzelsimulationen systematisch variiert. Der Volumenstrom wurde mit 190 [l/h] (=12,35 [m<sup>3</sup>/m<sup>2</sup>h]) konstant gehalten, die Drehzahl wurde zwischen 300 [1/min], 400 [1/min] und 500 [1/min] variiert. Das validierte Simulationssetup (Vernetzung, Randbedingungen, Turbulenzmodellierung, Wandbehandlung, etc.) wurde aus vorangegangenem Kapitel übernommen.

Die Optimierung erfolgte für eine ideale Geometrie. Der Spalt zwischen Statorscheibe und Außenwand, dessen Modellierung für die Übereinstimmung mit experimentellen Daten essentiell war, wurde nicht berücksichtigt. Die lokale Verfeinerung des Rechnetzes im Bereich des Spaltes bedeutet neben der komplexeren Gittergenerierung auch eine deutliche Steigerung der Zellenanzahl, die für Simulationsserien nicht sinnvoll ist.

Die folgenden Simulationsergebnisse sollen nicht als endgültige Designempfehlungen verstanden werden, da der Einfluss der dispersen Phase und des Stoffüberganges noch nicht berücksichtigt werden. Vielmehr sollen diese Simulationsergebnisse den qualitativen und quantitativen Einfluss der geometrischen Parameter auf die axiale Rückvermischung verdeutlichen und als Basis für eine vertiefende Optimierung der Zweiphasenströmung dienen.

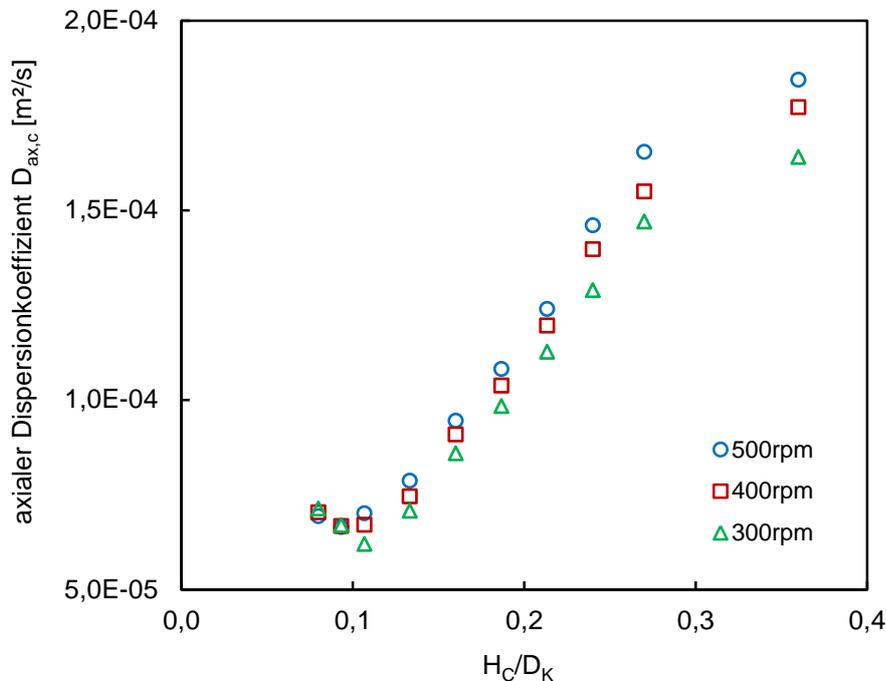
#### 3.1.3.1 Einfluss der Compartmenthöhe (I)

Für die Untersuchung des Einflusses der Compartmenthöhe ( $H_C/D_K$ ) wurden der Wellendurchmesser  $D_W$ , der Rotorscheibendurchmesser  $D_R$  und der Statorscheibendurchmesser  $D_S$  konstant gehalten. Die Simulationsreihe wurde für drei Drehzahlen, 300 [1/min], 400 [1/min] und 500 [1/min], durchgeführt. In Abbildung 3-8 ist als Zielwert dieser Optimierung die Abhängigkeit der axialen Dispersionskoeffizienten  $D_{ax,c}$  von der Compartmenthöhe dargestellt. Übereinstimmend mit den Vorschlägen von KOSTERS [7] und MISEK [8] wird das Optimum, unabhängig von der Drehzahl, bei möglichst geringer Compartmenthöhe,  $H_C/D_K \sim 0,1$ , vorhergesagt<sup>12</sup>. Mit zunehmender Compartmenthöhe steigt die axiale Vermischung, da

---

<sup>12</sup> Unterhalb von  $H_C/D_K \sim 0,1$  konnte keine stationär konvergierte Lösung errechnet werden.

die Anzahl axialer Strombrecher pro Meter Kolonnenhöhe abnimmt, und die freien axialen Strömungspfade verlängert werden. Eine große Anzahl an Rotorscheiben (= kleine Compartmenthöhe) bedingt neben der Minimierung des  $D_{ax,c}$  auch einen höheren Energieeintrag und eine höhere Wahrscheinlichkeit des Tropfenbruchs, der sich typischerweise im Bereich der Rotorspitzen ereignet.



**Abbildung 3-8: Simulierte  $D_{ax,c}$ -Werte bei Variation der Compartmenthöhe**

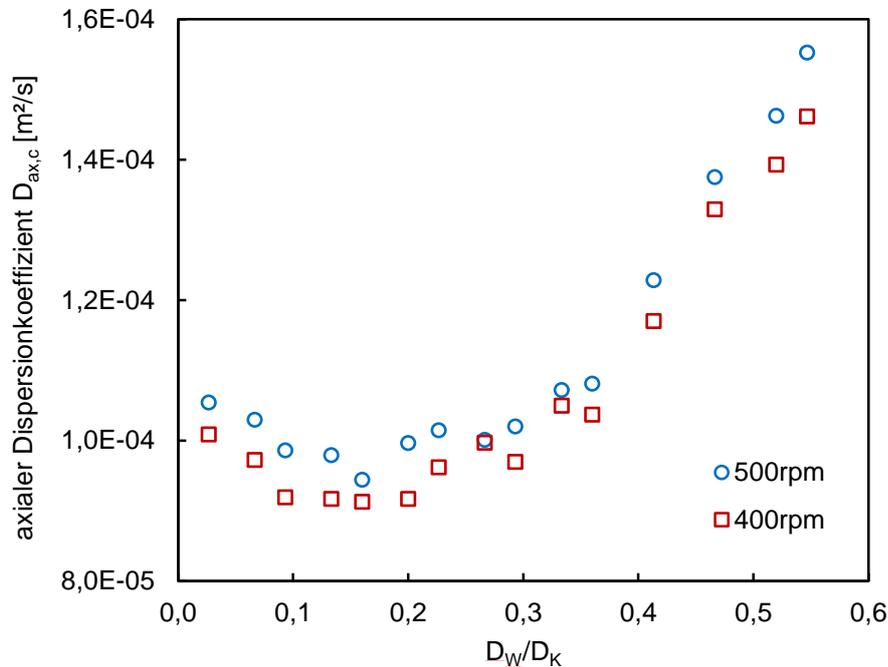
Bei zu gering gewählter Compartmenthöhe  $H_C$  können sich keine stationären Toruswirbel ausbilden, die die ganze Compartmentbreite ausfüllen. Wie in der späteren Überprüfung der Zweiphasenströmung deutlich wird (Kapitel 3.2.1.3) entstehen wellennahe Totzonen, die im Betrieb von der spezifisch leichteren Phase aufgefüllt werden und somit das effektive Reaktorvolumen verkleinern. Folglich ist die geringstmögliche Compartmenthöhe  $H_C$  anzustreben, die eine totzonenfreie Ausbildung von Toruswirbeln gestattet.

Diese untere Grenze und somit die Designempfehlung bezüglich der Compartmenthöhe ist aus der isolierten Betrachtung des  $D_{ax,c}$  nicht ersichtlich und soll bei der späteren (Kapitel 3.2.2.3) kombinierten Variation von  $H_C$  und  $B_C$  unter Berücksichtigung des Wirbelausbildung und des Tropfenverhaltens diskutiert werden.

### 3.1.3.2 Einfluss des Wellendurchmessers

Für die Untersuchung des Einflusses des Wellendurchmessers  $D_W$  wurden die übrigen Abmessungen ( $H_C$ ,  $D_R$  und  $D_S$ ) konstant gehalten. Die Simulationsreihe wurde für zwei Drehzahlen, 400 [1/min] und 500 [1/min], durchgeführt. Abbildung 3-9 zeigt die Abhängigkeit der axialen Dispersionskoeffizienten  $D_{ax,c}$  vom Wellendurchmesser  $D_W$ . Der ähnliche

Datenverlauf des Welleneinflusses und des Höheneinflusses (Abbildung 3-8) deutet auf die Koppelung der beiden geometrischen Parameter hin. Verringerung des Wellendurchmessers bewirkt eine relative Verbreiterung des Compartments. Dies wirkt sich analog zur Reduktion der Compartmenthöhe mit einer Verringerung der axialen Rückvermischung aus.



**Abbildung 3-9: Simulierte  $D_{ax,c}$ -Werte bei Variation des Wellendurchmessers.**

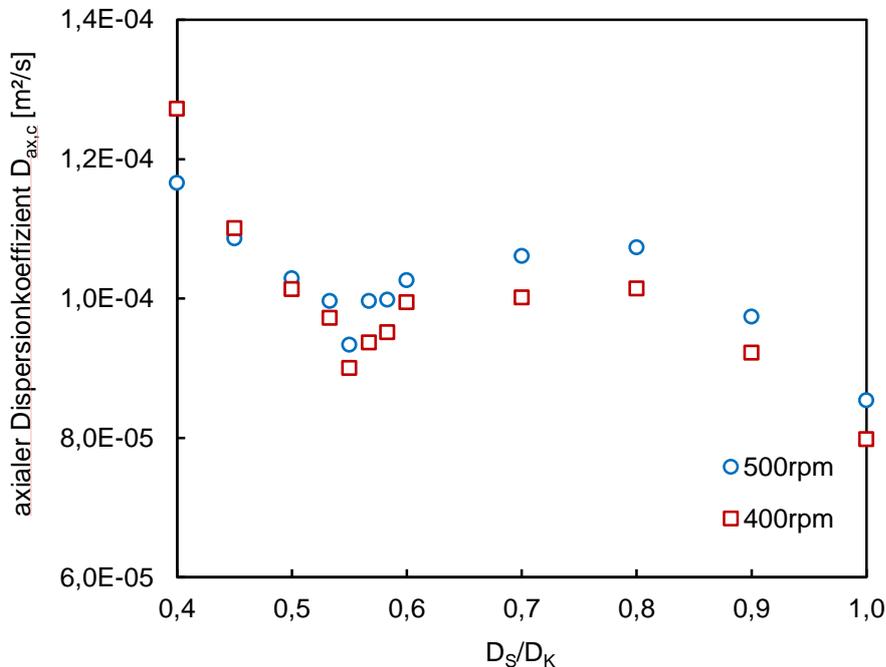
Vergleicht man die Absolutwerte des  $D_{ax,c}$  in Abbildung 3-9 und Abbildung 3-8 so wird deutlich, dass der Einfluss des Wellendurchmessers auf die axiale Vermischung geringer ist, verglichen mit der Variation der Compartmenthöhe. Ebenso ist das Minimum der Datensätze weniger eindeutig. Bei  $D_W/D_K < 0,4$  bewirkt eine Variation des Wellendurchmessers nur unwesentliche Veränderung der axialen Vermischung der kontinuierlichen Phase<sup>13</sup>. KOSTERS [7] und MISEK [8] geben keine Korrelation für den Wellendurchmesser an, die Designempfehlung dieser Arbeit wird nach der kombinierten Variation von  $H_C$  und  $B_C$  in Kapitel 4.2 gegeben.

### 3.1.3.3 Einfluss der Spaltposition

Abschließend wurde die radiale Position des Spaltes zwischen Rotor- und Statorscheiben untersucht. Der Rotorscheibendurchmesser  $D_R$  und der Statorscheibendurchmesser  $D_S$  wurden kohärent variiert, Wellendurchmesser  $D_W = 25$  [mm] und Compartmenthöhe  $H_C$  wurden konstant gehalten. Die für die problemlose Montage essentielle Forderung von  $D_R <$

<sup>13</sup> Obwohl bei zu geringen Wellendurchmessern nichtdurchmischte Totbereiche entstehen, die sich auf das Verweilzeitverhalten der dispersen Phase massiv auswirken, wie in der Zweiphasensimulation (Kapitel 3.2.1.3) ersichtlich wird.

$D_S$  wurde berücksichtigt, der radiale Abstand zwischen den Rotor- und Statorscheiben (Spaltbreite) wurde ebenfalls konstant gehalten. Die Simulationsreihe wurde für zwei Drehzahlen, 400 [1/min] und 500 [1/min], durchgeführt. Abbildung 3-10 zeigt die Abhängigkeit der axialen Vermischung von der radialen Lage des Rotor-Stator-Spaltes.



**Abbildung 3-10:  $D_{ax,c}$ -Werte bei der Variation der Spaltposition.**

Ein eindeutiges lokales Minimum wird bei  $D_S / D_T \sim 0,55$  vorhergesagt, was einer Verringerung des von KOSTERS [7] vorgeschlagenen Statordurchmessers  $D_S = 0,7 D_K$  entsprechen würde. Die Verschiebung des Rotor-Stator-Spaltes zur Welle hin erscheint wenig sinnvoll. Sie würde eine Verringerung des Rotordurchmessers und damit auch eine unerwünschte Verringerung des Energieeintrages bedeuten. Die Drehzahl müsste erhöht werden, um die gleiche Energiedissipation bereitzustellen. Interessanter erscheint das globale Minimum, das sich bei  $D_S = D_K$  befindet, d.h., bei Verschiebung des Rotor-Stator-Spaltes hin zur Kolonnenwand. Bei diesem Extremwert entfallen die Statorscheiben und deren Funktion als axiale Strombrecher wird von vergrößerten Rotorscheiben übernommen. Diese Konfiguration stellt bezüglich der kontinuierliche Phase die effizienteste Abtrennung der einzelnen Mischkammern voneinander dar, gleichzeitig wird der Rotordurchmessers und somit der Energieeintrag maximiert.

Dieses Ergebnis stellt das klassische RDC-Design von REMAN [5] und die Notwendigkeit von stationären Einbauten grundsätzlich in Frage und deutet auf die Möglichkeit hin, dass der RDC bei gleichzeitiger Reduktion der axialen Rückvermischung bzw. Erhöhung der Trenneffizienz fundamental vereinfacht werden kann. Obige Erkenntnis soll in den folgenden Kapiteln mit Hilfe von Zweiphasenströmungssimulationen überprüft werden.

## 3.2 Simulation der Zweiphasenströmung

Der Großteil aller in verfahrenstechnischen Apparaten auftretenden Strömungen sind Mehrphasenströmungen (Wirbelschichten, Fällungsreaktionen, Umströmung von Katalysatorpartikeln, Rektifikations-/ Absorptions-/ Extraktionskolonnen etc.). Die Definition von mehrphasigen Strömungen ist schwierig und oft nicht eindeutig. Beispielsweise wird die Strömung zweier nicht miteinander mischbarer Flüssigkeiten in einer Extraktionskolonne als zweiphasig bezeichnet, auch wenn sie thermodynamisch keine unterschiedlichen Phasen darstellen. Für die numerische Simulation von Mehrphasenströmungen ist es relevant, ob die Phasen dispergiert oder segregiert vorliegen. Bei der Simulation von segregierten Strömungen müssen grenzflächenrekonstruierende Modelle wie *Volume of Fluid (VOF)*, *Front-tracking* oder *Level-Set* [56] verwendet werden. HADERER [40] und GURKER [53] haben gezeigt, dass bisweilen nur der *Euler-Euler*-Ansatz und der *Euler-Lagrange*-Ansatz für die Simulation von Extraktionskolonnen sinnvoll sind, weshalb in dieser Arbeit nur auf diese eingegangen werden soll. Die Grenzflächenrekonstruktion ist zwar theoretisch möglich, wenn die Gitterauflösung fein genug ist und alle Grenzflächeneffekte (Koaleszenz, Spaltung, *Marangoni*-Effekte, stoffaustauschbedingte Effekte etc.) richtig modelliert sind, macht aber beim heutigen Stand der Rechenkapazitäten, Modellverfügbarkeit und Modellgenauigkeit wenig Sinn. Die Simulationen für diese Arbeit beschränken sich aus obigen Gründen auf die Hydrodynamik; Stofftransport wird nicht simuliert. Hierfür sei auf die Arbeit von HLAWITSCHKA [57] verwiesen.

In der *Euler-Euler*-Simulationsreihe wurde der variable Tropfendurchmesser durch Koppelung mit Tropfenpopulationsbilanzen berücksichtigt. Tropfenbruch und Tropfenzerfall wurden erfasst, das stoffaustauschbedingte Tropfenwachstum wurde vernachlässigt. Für die Lösung der Tropfenpopulationsbilanzen wurden einerseits die homogene Klassenmethode (*Homogeneous Discrete Method*), bei der alle Tropfenklassen mit demselben Geschwindigkeitsfeld transportiert werden, und andererseits die inhomogene Klassenmethode (*Inhomogeneous Discrete Method bzw. Inhomogeneous MUSIG Model*), bei der die durchmesserabhängige Aufstiegs geschwindigkeit berücksichtigt wird, verwendet. Zur Validierung wurden experimentelle Daten von SIMON [58] und SOMMEREGGER [59] herangezogen. Mit den validierten Parametern wurden anschließend die in der Einphasensimulation gefundenen geometrischen Optima überprüft.

In der *Euler-Lagrange*-Simulationsreihe wurde der Tropfendurchmesser konstant gehalten, Tropfenkoaleszenz und Tropfenbruch wurden vernachlässigt. Diese isolierte Untersuchung der Tropfen-Wirbel-Wechselwirkung lieferte Information über die Tropfenbahnen und deren Streuung bzw. Verweilzeitverteilung.

### 3.2.1 Euler-Euler Simulation

Beim *Euler-Euler-Ansatz* (auch *Two-Fluid-Model* oder *Multi-Fluid-Model*) werden die beiden Phasen im mathematischen Sinne als interpenetrierende Kontinuen betrachtet. Physikalisch kann eine Rechenzelle nicht mit beiden Phasen gefüllt sein, der volumetrische Phasenanteil  $\alpha_i$  muss eingeführt werden. Für beiden Phasen werden mit  $\alpha_i$  erweiterte Erhaltungsgleichungen gelöst. Über die Wechselwirkungskoeffizienten in den Impulserhaltungsgleichungen sowie über die Volumensanteile  $\alpha_i$  werden die Phasen mit einander gekoppelt. Es wird typischerweise davon ausgegangen, dass der Druck in allen Phasen gleich ist, es wird ein Druckfeld verwendet. Im *Euler-Euler-Ansatz* wird keine klare Grenzfläche dargestellt.  $\alpha_i$  stellt eine Volumsmittelung in jeder Zelle dar. Im Gegensatz zum *Euler-Lagrange-Ansatz* (Kapitel 3.2.2) besteht keine Limitierung bezüglich der maximal erfassbaren Dispersphasenanteile,  $\alpha_i$  kann Werte zwischen 0 und 1 annehmen. Turbulenztransportgleichungen können für jede Phase separat oder gemeinsam für alle Phasen (*Mixture Turbulence*) berechnet werden, letzteres wurde aus Gründen der Stabilität und der Rechenzeit in allen *Euler-Euler-Simulationen* dieser Arbeit angewandt.

#### 3.2.1.1 Modellierung

Für jede Phase muss ein eigener Satz an Erhaltungsgleichungen gelöst werden. Die Massenerhaltungsgleichung für die Phase  $i$  lautet:

$$\frac{\partial(\alpha_i \rho_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \vec{u}_i) = 0 \quad (3-10)$$

Für die Volumensanteile  $\alpha_i$  gilt die Summationsbedingung:

$$\sum_i \alpha_i = 1 \quad (3-11)$$

Die Impulsgleichung unterscheidet sich von der Betrachtung einer Phase durch den Quellterm  $F$ , der die Wechselwirkung beider Phasen beschreibt. Die Impulserhaltungsgleichung für die Phase  $i$  ist in Vektorschreibweise gegeben mit:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i \vec{u}_i) + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \vec{u}_i \vec{u}_i) = -\alpha_i \nabla p + \nabla \cdot \tau_i + \alpha_i \rho_i \vec{g} + \vec{F} \quad (3-12)$$

Ausgenommen die Schwerkraft  $g$  beinhaltet der Term  $F$  alle Kräfte, die auf den Tropfen wirken. WANG & MAO [60] haben im Rührkessel gezeigt, dass die Schleppkraft (*Drag Force*) in flüssig/flüssig-Dispersionen dominiert. Die virtuelle Massenkraft und der dynamische Auftrieb aufgrund von Partikelrotation (*Saffman Force*, *Magnus Force*) werden in dieser Arbeit vernachlässigt. Die Schleppkraft wird berechnet mit:

$$F_{Drag} = K_{d,c} \cdot (\vec{u}_d - \vec{u}_c) \quad (3-13)$$

mit dem Impulsaustauschkoeffizienten  $K_{d,c}$  und den Phasengeschwindigkeiten  $u_d$  und  $u_c$ . Der Impulsaustauschkoeffizient kann allgemein formuliert werden mit [56]:

$$K_{d,c} = \frac{\rho_d \cdot \alpha_d \cdot \alpha_c \cdot f}{\tau_d} \quad (3-14)$$

mit der *Drag Function*  $f$  und der partikulären Relaxationszeit  $\tau_d$ :

$$\tau_d = \frac{\rho_d \cdot d_d^2}{18\mu_c} \quad (3-15)$$

Die *Drag Function*  $f$  wird mit dem Widerstandsbeiwert  $C_D$  nach dem Modell von SCHILLER & NAUMANN [61] berechnet:

$$f = \frac{C_D \cdot \text{Re}}{24} \quad (3-16)$$

mit:

$$C_D = \begin{cases} 24 (1 + 0,15 \text{Re}^{0,687}) / \text{Re} & \text{Re} \leq 1000 \\ 0,44 & \text{Re} > 1000 \end{cases} \quad (3-17)$$

Und der relativen Reynoldszahl  $\text{Re}$ :

$$\text{Re} = \frac{\rho_c \cdot |\vec{u}_d - \vec{u}_c| \cdot d_d}{\mu_c} \quad (3-18)$$

### 3.2.1.1.1 Rechengitter & Diskretisierung

Wie in der Einphasensimulation (Kapitel 3.1) wurde eine 2D-Ebene axialsymmetrisch simuliert, um Rechenzeit zu sparen. Im Gegensatz zur Einphasensimulation musste der transiente Löser, mit einer Zeitschrittweite von 0,2 Sekunden, verwendet werden. Die Gesamtanzahl der Zellen musste ebenfalls reduziert werden: es wurden 9 Compartments simuliert (Abbildung 3-11), die Evaluierung erfolgte im mittleren Compartment. Auf die Zellenverdichtung in Wandnähe wurde verzichtet, die Grenzschichten wurden mit *Standard Wall Functions* berechnet. Die Zellenanzahl konnte auf ~10.000 reduziert werden (*quads* mit 1 [mm] bis 1,4 [mm] Seitenlänge). Die Turbulenz wurde analog zur Simulation der Einphasenströmung mit dem *Reynolds Stress Model* modelliert. Es wurde aus numerischen Stabilitätsgründen [40] ein Turbulenzfeld für beide Phasen berechnet (*Mixture Turbulence*).

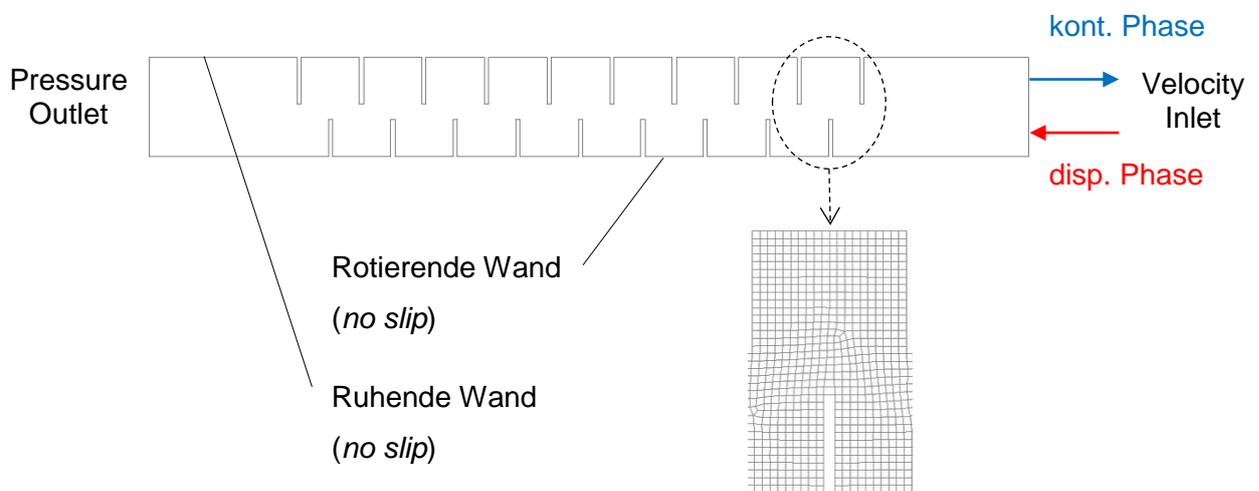


Abbildung 3-11: Randbedingungen mit Rechengitter für ein Compartment.

Die Algorithmen zur örtlichen und zeitlichen Diskretisierung der Transportgleichungen sind in Tabelle 3.4 angegeben. Zur Beurteilung der Konvergenz wurden neben den Residuen zwei Variablenmonitore verwendet, der über das Gesamtvolumen gemittelte Sauterdurchmesser und der absolute Hold-Up.

Tabelle 3.4: Algorithmen für den Euler/Euler Ansatz

Impuls	<i>QUICK</i>
Volumensanteil $\alpha_i$	<i>First Order Upwind</i>
$k, \epsilon,$	<i>First Order Upwind</i>
Reynoldsspannungen	<i>QUICK</i>
Tropfenklassen ( <i>bins</i> )	<i>First Order Upwind</i>
transiente Diskretisierung	<i>First Order Implicit</i>

### 3.2.1.1.2 Tropfenpopulationsbilanzen

Für die statistisch-mathematische Betrachtung des dynamischen Verhaltens von Partikelsystemen haben sich in den letzten Jahrzehnten Populationsbilanzen (*Population Balance Equation*, PBE) etabliert. Ausgehend von der ersten statistischen Beschreibung von Kristallisationsvorgängen durch HULBURT & KATZ [62] werden Populationsbilanzen heute für die Beschreibung nahezu aller Dispersionen in verfahrenstechnischen Prozessen (Absorption, Kristallisation, Wirbelschichttechnik etc.) eingesetzt. VALENTAS ET AL. [63] haben als erste die PBE für den Tropfenzerfall in der flüssig/flüssig-Extraktion formuliert, viele Autoren haben seither das mathematische Gerüst erweitert. Ein Überblick über die Verwendung von PBEs in der flüssig/flüssig-Extraktion wird in PFENNIG ET AL. [64] gegeben. Für eine ausführliche und allgemeine Abhandlung über Populationsbilanzen sei auf RAMKRISHNA [65] und PASCHEDAG [66] verwiesen, da die folgende Einleitung bewusst kurz gehalten ist.

Analog zu den Erhaltungsgrößen Impuls, Energie und Masse können für andere innere Eigenschaften der dispersen Phase Bilanzgleichungen formuliert werden. Diese Eigenschaften können sich auf die Partikelgeometrie beziehen (charakteristische Durchmesser, Volumen, Formfaktor, etc.) oder auf stoffliche Eigenschaften wie Zusammensetzung, Farbe oder ähnliches. Mathematisch werden die inneren Eigenschaften als eigene Koordinatensysteme betrachtet. Der numerische Aufwand steigt exponentiell mit der Anzahl der Koordinaten [66], daher soll in der vorliegenden Arbeit ausschließlich auf die dynamische Änderung einer inneren Koordinate, des Tropfenvolumens bzw. des Tropfendurchmessers, eingegangen werden. Folgende partielle Differentialgleichung beschreibt die räumliche und zeitliche Änderung der Anzahldichteverteilung  $n(x, V, T)$  der dispersen Phase:

$$\frac{\partial n(x, V, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{u}(x, V, t)n(x, V, t)) = S(x, V, t) \quad (3-19)$$

Abgesehen von der konvektiven Änderung werden alle Phänomene, die eine Änderung der Partikelgrößenverteilung verursachen mit dem Quellterm  $S(x, V, t)$  berücksichtigt. Dies sind Nukleation, Wachstum, Bruch/Zerfall und Koaleszenz. In der flüssig/flüssig-Extraktion werden typischerweise nur Tropfenzerfall und Tropfenkoaleszenz mit jeweils zwei Termen berücksichtigt:

$$S(x, V, t) = \underbrace{B^C(x, V, t) - D^C(x, V, t)}_{\text{Koaleszenz}} + \underbrace{B^B(x, V, t) - D^B(x, V, t)}_{\text{Zerfall}} \quad (3-20)$$

mit der zerfallsbedingten Tropfenentstehung (Birth due to Break-up)  $B^B$ :

$$B^B(x, V, t) = \int_V^\infty n_{dp} g(V') \beta(V, V') n(V', t) dV', \quad (3-21)$$

der zerfallsbedingten Tropfenvernichtung (Death due to Break-up)  $D^B$ :

$$D^B(x, V, t) = g(V) n(V, t), \quad (3-22)$$

der koaleszenzbedingten Tropfenentstehung (Birth due to Coalescence)  $B^C$ :

$$B^C(x, V, t) = \frac{1}{2} \int_0^V a(V - V', V') n(V - V', t) n(V', t) dV', \quad (3-23)$$

und der koaleszenzbedingten Tropfenvernichtung (Death due to Coalescence)  $D^C$ :

$$D^C(x, V, t) = \int_0^\infty a(V, V') n(V, t) n(V', t) dV'. \quad (3-24)$$

Darin sind  $V$  das Volumen des Tochtertröpfens und  $V'$  das Volumen des Muttertröpfens. Modelle für die Bruchfrequenz  $g(V')$ , die Tochtertröpfenverteilung  $\beta(V, V')$  und die Koaleszenzrate  $a(V, V')$  müssen in *Ansys Fluent* implementiert werden.

Zur Koaleszenz fluider Partikel existiert eine Vielzahl von Veröffentlichungen, LIAO & LUCAS [67] geben einen Überblick. In der vorliegenden Arbeit wurde das am weitesten verbreitete Modell für turbulente flüssig/flüssig-Dispersionen von COULALOGLOU & TAVLARIDES [68] als *user-defined-function* (UDF) implementiert. Das Modell beruht auf der kinetischen Gastheorie und der *film drainage theory*. Zwei kollidierende Tropfen koaleszieren, wenn die Kontaktzeit die Zeit für Film-Drainage im Tropfenzwickel übersteigt. Die Koaleszenzrate  $a(d, d')$  ist das Produkt aus Kollisionsfrequenz  $h(d, d')$  und Koaleszenzeffizienz  $\lambda(d, d')$ :

$$a(d, d') = h(d, d') \cdot \lambda(d, d'), \quad (3-25)$$

mit der Kollisionsfrequenz  $h(d, d')$ :

$$h(d, d') = C_3 \cdot \frac{\varepsilon^{1/3}}{1 + \alpha} (d + d')^2 \cdot (d^{2/3} + d'^{2/3})^{1/2}, \quad (3-26)$$

und der Koaleszenzeffizienz  $\lambda(d, d')$ :

$$\lambda(d, d') = \exp \left[ -C_4 \cdot \frac{\eta_c \rho_c \varepsilon}{\sigma^2 (1 + \alpha)^3} \left( \frac{d \cdot d'}{d + d'} \right)^4 \right] \quad (3-27)$$

$C_3$  und  $C_4$  sind freie Modellparameter.

Für den Zerfall fluider Partikel ist die Auswahl an Modellen noch größer als bei der Koaleszenz, ein Überblick wird in LIAO & LUCAS [69] gegeben. Das Modell von COULALOGLOU & TAVLARIDES [68] wurde auch für den Tropfenbruch implementiert. Die Modellvorstellung geht vom Tropfenbruch aus, wenn die Energie des turbulenten Wirbels die Grenzflächenspannung des Tropfens übersteigt. Für die Bruchrate  $g(d')$  geben die Autoren an:

$$g(d') = C_1 \cdot \frac{\varepsilon^{1/3}}{d^{2/3} (1 + \alpha)} \exp \left( -C_2 \frac{\sigma (1 + \alpha)^2}{\rho_d \varepsilon^{2/3} d^{5/3}} \right) \quad (3-28)$$

mit  $C_1$  und  $C_2$  als freie Modellparameter.

Die Tochtertropfenverteilung  $\beta(d, d')$  wurde auf zwei Arten modelliert. Für binären Zerfall wurde das Modell von VALENTAS [63] implementiert:

$$\beta(d^3, d'^3) = \frac{2.4}{d'^3} \exp \left( -4.5 \frac{(2 \cdot d^3 - d'^3)^2}{d'^6} \right) \quad (3-29)$$

Für nicht-binären Zerfall im RDC stellen BAHMANYAR & SLATER [77] eine Beta-Verteilung vor, bei der die durchschnittliche Anzahl  $X_{dp}$  der entstehenden Tochtertropfen variabel ist:

$$\beta(d, d') = 3X_{dp} \cdot (X_{dp} - 1) \cdot \left[ 1 - \left( \frac{d}{d'} \right)^3 \right]^{(X_{dp}-2)} \cdot \frac{d^5}{d'^6} \quad (3-30)$$

Die Autoren stellen außerdem eine empirische Korrelation für die Anzahl der entstehenden Tropfen an, in dieser Arbeit wurde  $X_{dp}$  als weiterer freier Parameter betrachtet.

### 3.2.1.1.3 Lösen der Tropfenpopulationsbilanzen

Für die Lösung der Tropfenpopulationsbilanz stehen in *Ansys Fluent* zwei Ansätze zur Verfügung; die *Klassenmethode* (CM) und die *Momentenmethode* (MOM).

Bei der *Klassenmethode* (CM) wird Tropfengrößenverteilung von einem Satz von Klassen (*bins*) repräsentiert. Jede Klasse wird von einer eigenen Transportgleichung beschrieben. Die Klassenbreite und Klassenanzahl muss a priori bestimmt werden. Die Tropfengrößenverteilung wird bei dieser numerisch robusten Methode direkt berechnet, muss aber mit einer großen Anzahl an Transportgleichungen (20 bis 40) erkaufte werden.

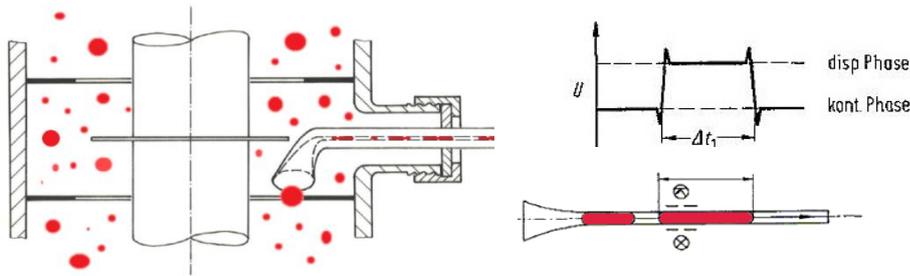
Numerisch günstiger ist die *Momentenmethode* (MOM) [71], bei der die Tropfengrößenverteilung nicht direkt in einzelne Klassen diskretisiert wird, sondern ein Satz (typischerweise 4 bis 6) von Momenten gelöst wird. Da die Verteilung über ihre Momente beschrieben wird, muss sie wieder aus ihnen rekonstruiert werden. Die exakte Form der Verteilung geht dabei verloren, dafür müssen nur wenige zusätzliche Transportgleichungen für die Momente gelöst werden. Die anfänglichen Probleme mit der Schließung des Gleichungssystems und der Beschränkung auf konstante Aggregation und Wachstum wurden in der *Quadrature Method of Moments* (QMOM) von MCGRAW [72] behoben. Weiterentwicklungen wurden mit der *Sectional Quadrature Method of Moments* (SQMOM) von ATTARAKIH ET AL. [73] und der *Direct Quadrature Method of Moments* (DQMOM) von MARCHISIO & FOX [74] präsentiert.

Ein weiterer Ansatz die Populationsbilanz zu lösen sind stochastische *Monte-Carlo-Methoden*, auf denen beispielsweise das Kolonnensimulationstool *ReDrop* [75] basiert. Eine detaillierte Übersicht wird in RAMKRISHNA [65] gegeben.

### 3.2.1.2 Validierung

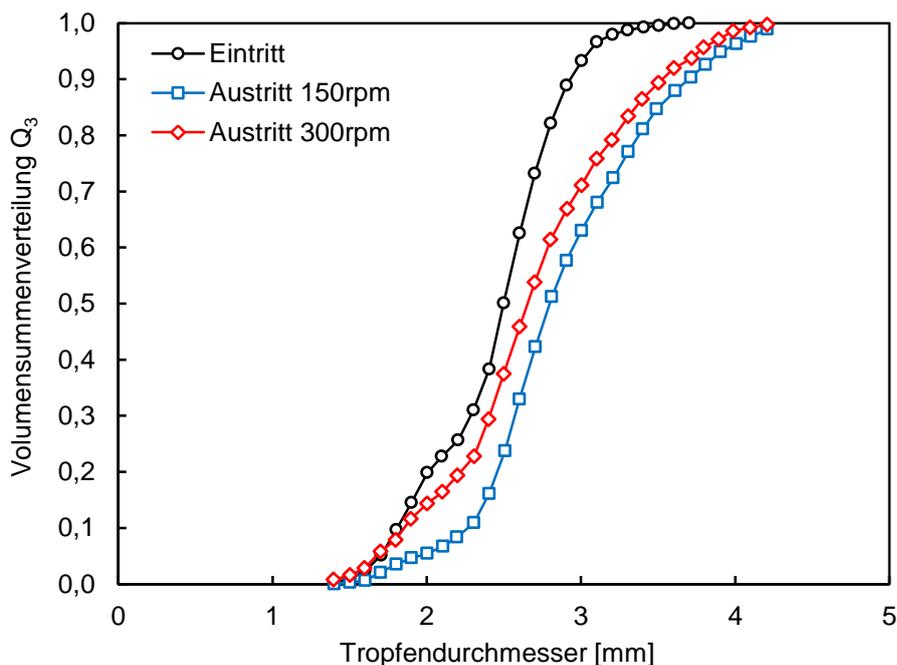
Die experimentelle Validierung der turbulenten Zweiphasenströmung in gerührten Kolonnen ist nicht trivial. Im technisch relevanten Betriebszustand ist die fein dispergierte Strömung opak, optische Methoden wie PIV oder LDA sind entweder bei niedrigem Hold-Up oder nur in Außenwandnähe möglich. Die Zugabe von Tracerpartikeln ist im Zweiphasenbetrieb ebenfalls kritisch. Diese akkumulieren an Phasengrenzflächen und beeinflussen sowohl das Bruch- und Koaleszenzverhalten als auch die Phasentrennung massiv. Elektrische Messverfahren mittels Drahtgeflechtsensoren (*wire mesh sensors*, [76]) oder *Electrical Capacitance Tomography* [77] können zwar den über den Kolonnenquerschnitt gemittelten Hold-Up liefern, die räumliche Auflösung ist allerdings für die Messung einer Tropfengrößenverteilung zu gering. Vielversprechend erscheinen neue Entwicklungen wie die Kombination von *Laser Induced Fluorescence* (LIF) mit PIV von HLAWITSCHKA [78] oder die Integration von optischen Onlinesonden in die Kolonnengeometrie von MICKLER ET AL. [79] oder MAAß ET AL. [87]. Letztere Methode wurde für die finale Überprüfung der optimierten

Geometrie (Kapitel 4.3.2) in Zusammenarbeit mit der Firma *Sopat GmbH* angewandt. Für den RDC existieren aus oben genannten Gründen bisweilen nur wenige gemessene Tropfengrößenverteilungen, für die Validierung dieser Arbeit wurden Messdaten von SIMON [58] und SOMMEREGGER [59] herangezogen. Beide Autoren erhielten ihre Verteilungen für das Stoffsystem Toluol-Wasser mit der Absaugmethode nach PILHOFFER & MILLER [80]. Dabei werden Tropfen aus der turbulenten Dispersion mit einem Trichter isokinetisch (i.e. mit der lokalen Strömungsgeschwindigkeit) abgesaugt und anschließend in einer Kapillare gestreckt, wo sie eine Lichtschranke passieren (Abbildung 3-12).



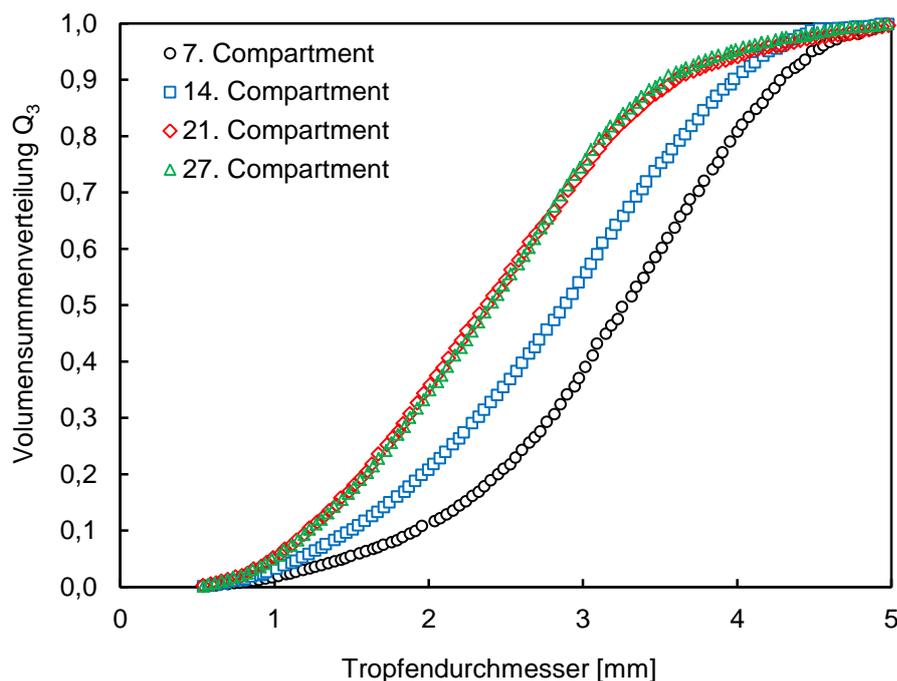
**Abbildung 3-12: Schematischer Aufbau von SOMMEREGGER [59] zur Tropfenabsaugung nach PILHOFFER & MILLER [80].**

Die Sprünge der Lichtintensität werden von einem Phototransistor registriert, das Volumen der Tropfen ist proportional zur Dauer des konstanten Schrankensignals (Abbildung 3-12, rechts). SIMON [66] maß die Tropfengrößenverteilung eines RDC150 an zwei Positionen im Abstand von 5 Compartments bei zwei Rotordrehzahlen, 150 [1/min] und 300 [1/min]. Die Volumenströme beider Phasen betragen jeweils 100 [l/h]. Die gemessenen  $Q_3$ -Summenverteilungen sind in Abbildung 3-13 dargestellt.



**Abbildung 3-13: Experimentelle Tropfengrößenverteilung von SIMON [58] für einen RDC150.**

SOMMEREGGER [67] maß die Tropfengrößenverteilung eines RDC100 an 4 Positionen (i.e. im 7., 14., 21.- und 27. Compartment) im Gegenstrom als auch bei stehender kontinuierlicher Phase und 600 [1/min]. Für die Validierung sollen die Daten ohne Gegenstrom, 100 [l/h] disperse Phase und 0 [l/h] kontinuierliche Phase, herangezogen werden. Wie in Abbildung 3-14 ersichtlich ist, stellt sich ab einer stoffsystemspezifischen Höhe eine konstante Tropfengrößenverteilung ein, Tropfenzerfall und Tropfenbruch stehen im Gleichgewicht (grüne und rote Symbole). Im Gegensatz zu SIMON [58] wird die Verteilung von SOMMEREGGER [67] nach dem Eintritt (7. Compartment) aufgrund des wesentlich höheren Energieeintrages zu kleineren Tropfendurchmessern hin verschoben.

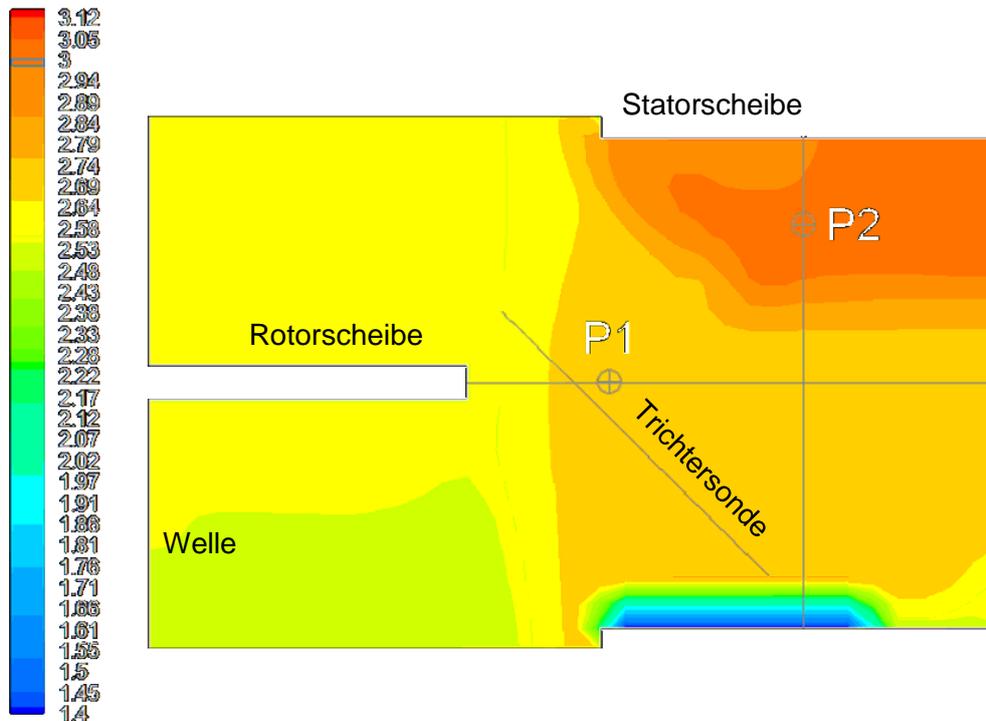


**Abbildung 3-14: Experimentelle Tropfengrößenverteilung von SOMMEREGGER [67], RDC100.**

### 3.2.1.2.1 Homogene Klassenmethode

Zur möglichst präzisen Erfassung der variierenden Tropfengrößenverteilung wurde die disperse Phase in 29 Klassen unterteilt, das Intervall der möglichen Tropfendurchmesser wurde zwischen 1,4 mm und 4,2 mm definiert. Die Phasenkopplung erfolgte über die Schleppkraft eines repräsentativen Tropfendurchmessers (Sauterdurchmesser  $d_{32}$ ), der für jede Rechenzelle und jeden Zeitschritt aus den 29 Transportgleichungen der Tropfenklassen berechnet wurde. Für die disperse Phase, repräsentiert durch den Sauterdurchmesser  $d_{32}$ , wurde in der homogenen Klassenmethode ein gemeinsames Geschwindigkeitsfeld berechnet. Die Modelle für Bruch und Koaleszenz (Gleichungen (3-26) bis (3-29)) wurden als *user-defined-functions* (UDF) implementiert. Die Modellkonstanten für Tropfenbruch wurden aus der Arbeit von DRUMM [51] mit  $C_1 = 0,005$  und  $C_2 = 0,1$  übernommen. Die Konstanten für die Tropfenkoaleszenz in Gleichungen (3-26) und (3-27)

wurden wie in SIMON [66] auf  $C_3 = 1,8 \cdot 10^{-2}$  und  $C_4 = 1,88 \cdot 10^{11}$  gesetzt. Binärer Zerfall mit der Tochterverteilungsfunktion nach VALENTAS [71], Gleichung (3-29), wurde angenommen. Die Simulation wurde instationär gerechnet, mit einer Zeitschrittweite von 0,05sec und 20 Iterationen pro Zeitschritt. Neben dem Residuenverlauf wurden Monitore des integrierten Volumenanteiles (Hold-Ups) der sekundären Phasen für die Überwachung des Simulationsfortschrittes einerseits, und als Konvergenzkriterium andererseits verwendet.

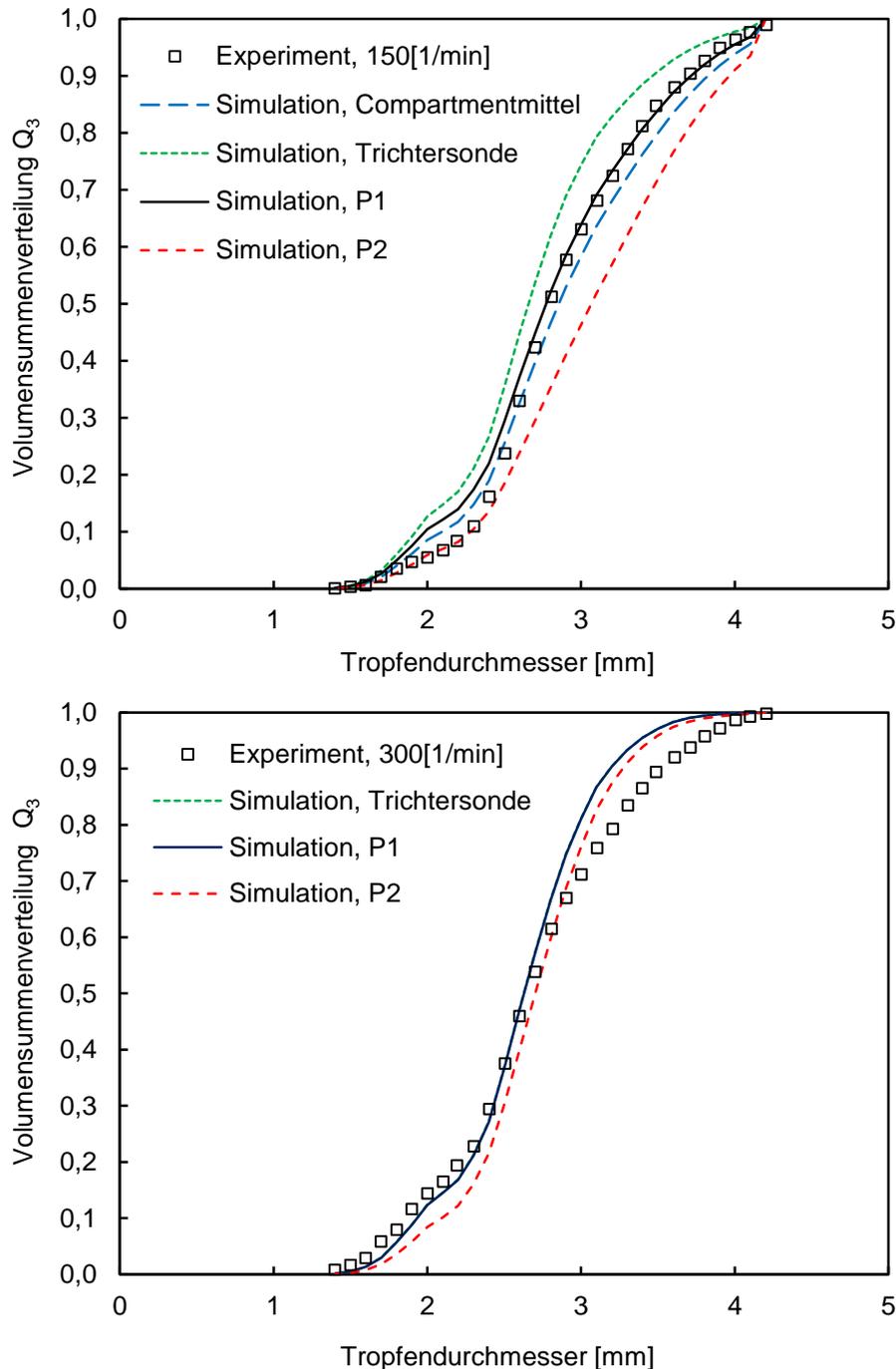


**Abbildung 3-15: Konturplot des Sauterdurchmessers innerhalb des 5. Compartments nach dem Tropfeinlass, 150 [rpm], 100 [l/h] Wasser, 100 [l/h] Toluol.**

Der Konturplot in Abbildung 3-15 zeigt, dass der lokale Sauterdurchmesser innerhalb eines Compartments keineswegs homogen verteilt ist. Bereiche zwischen den Rotorscheiben weisen erwartungsgemäß kleinere Tropfendurchmesser auf als Bereiche zwischen den Statorscheiben. In den Koaleszenzzonen unter der Statorscheiben (siehe Wirbelumkehr in Kapitel 2.3.4) sind die größten Sauterdurchmesser zu beobachten. Die lokale Ungleichverteilung des Sauterdurchmessers bringt einen zusätzlichen Freiheitsgrad bzw. eine Fehlerquelle für den experimentellen Abgleich ein.

Während die Trichtersonde invasiv Tropfen in einem begrenzten Bereich absaugt (angedeutet durch die diagonale Linie in Abbildung 3-15) und über diesen gemittelte Verteilungen liefert, ist das Strömungsfeld in der Simulation ungestört und liefert momentane Tropfengrößenverteilungen in jeder Rechenzelle. Da die exakte Messanordnung nicht bekannt bzw. in 2D nicht abbildbar ist, wurde die Auswertung auf vier Arten durchgeführt: Punktuell in den Punkten P1 und P2, und gemittelt, einerseits über das gesamte Compartment, und andererseits über die diagonale Linie „Trichtersonde“.

Je nach Position und Art der Auswertung variiert die Übereinstimmung mit dem Experiment, siehe **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.** Mit der punktuellen uswertung im Punkt P1 konnte für 150[1/min] und 300[1/min] (Abbildung 3-16) die beste Übereinstimmung erzielt werden.

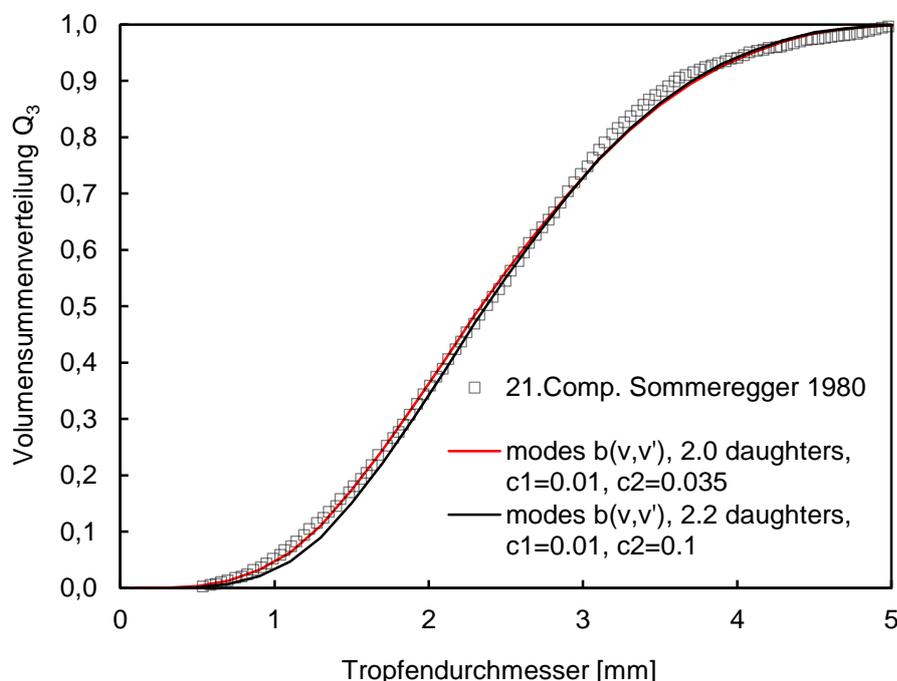


**Abbildung 3-16: Vergleich der gemessenen Tropfengrößenverteilungen von SIMON [58] (Symbole) mit den simulierten Verteilungen an verschiedenen Detektionsstellen (Linien) bei 150 [1/min] (oben) und 300 [1/min] (unten).**

In einer zweiten Simulationsreihe wurde versucht die experimentellen Daten von SOMMEREGGER [67] abzubilden. Wegen der bereits breiteren Verteilung am Eintritt (7. Compartment) wurde auch das Intervall möglicher Tropfengrößen breiter gewählt, 25

Klassen sollten den Bereich zwischen 0,1[mm] und 5,1[mm] abdecken. Simuliert wurden 23 Compartments bei 600[rpm], 0[l/h] kontinuierliche Phasenbelastung und 100[l/h] disperse Phasenbelastung. Die Modellkonstanten für die Tropfenkoaleszenz in Gleichungen (3-26) und (3-27) wurden wie in SIMON [66] auf  $C_3 = 1,8 \cdot 10^{-2}$  bzw.  $C_4 = 1,88 \cdot 10^{11}$  gesetzt. Die Konstanten für den Tropfenzerfall in Gleichung (3-28),  $C_1$  und  $C_2$ , mußten im Rahmen dieser Simulationsreihe neu angepasst werden. Die Anzahl der entstehenden Tochtertropfen  $X_{dp}$  konnte durch die Implementierung der Tochtertropfenverteilung von BAHMANYAR & SLATER [70] für nicht-binären Zerfall (Gleichung (3-23)) ebenfalls variiert werden. Dies ermöglicht einerseits eine physikalisch genauere Modellierung, da nicht mehr binärer Zerfall angenommen werden muss. Andererseits wird durch die variable Anzahl der entstehenden Tochtertropfen  $X_{dp}$  eine weitere Unbekannte eingeführt, die den Abgleich mit dem Experiment weiter erschwert.

Abbildung 3-17 zeigt den beispielhaften Vergleich zweier simulierter Tropfengrößenverteilungen mit den Literaturdaten von SOMMEREGER [67]. Es wird deutlich, dass die gewünschte bzw. gemessene Tropfengrößenverteilung durch verschiedene Kombinationen der Modellkonstanten  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$ ,  $C_4$  und  $X_{dp}$  mit hoher Übereinstimmung abgebildet werden kann, was eine eindeutige Bestimmung dieser Konstanten ohne isolierter Betrachtung unmöglich macht. Falsche Annahmen bei der Anzahl der entstehenden Tochtertropfen können beispielsweise durch Anpassen der Modellkonstante  $C_2$  wieder kompensiert werden.

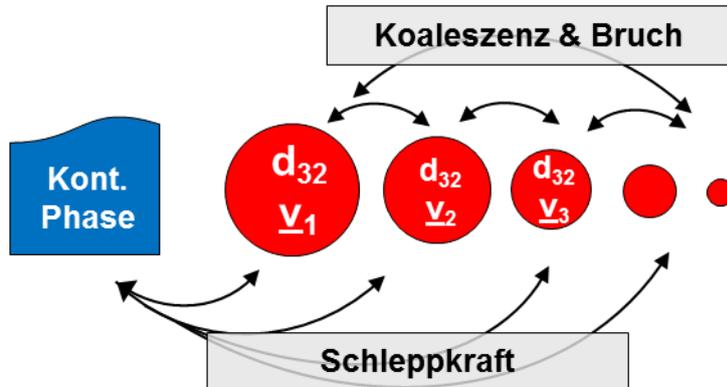


**Abbildung 3-17: Vergleich der gemessenen Tropfengrößenverteilungen von SOMMEREGER [59] (Symbole) mit den simulierten Verteilungen (Linien).**

### 3.2.1.2.2 Inhomogene Klassenmethode

Eine der Limitierungen der homogenen Klassenmethode ist die Zuordnung aller Tropfenklassen zu einem einzigen Geschwindigkeitsfeld. Trotz der numerisch aufwändigen Berücksichtigung des Tropfenzerfalls und der Tropfenkoaleszenz werden alle Klassen mit der gleichen Phasengeschwindigkeit, jener des repräsentativen Durchmessers  $d_{32}$ , bewegt. Bei der Inhomogenen Klassenmethode (*Inhomogeneous MUSIG model* [89]) wird diese Beschränkung überwunden, indem Gruppen von Klassen zu sekundären Pseudo-Phasen zusammengefasst werden. Für jede sekundäre Phase wird ein eigenes Geschwindigkeitsfeld berechnet, die Abhängigkeit der Sedimentationsgeschwindigkeit vom Tropfendurchmesser kann damit erfasst werden.

In der vorliegenden Simulationsreihe wurden allen sekundären Phasen die gleichen Stoffwerte (Viskosität und Dichte) zugeteilt. Die Phasenkopplung zwischen den sekundären Phasen und der kontinuierlichen Phase wurde über die *drag force* nach SCHILLER & NAUMANN [69] (Gleichung (3-17)) modelliert. Untereinander übten die sekundären Phasen keine Schleppkraft aus, die Wechselwirkung der sekundären Phasen erfolgte über den koaleszenz- bzw. bruchbedingten Massenaustausch zwischen den einzelnen Tropfenklassen, der durch die Tropfenpopulationsbilanzen (Kapitel 3.2.1.1.2) bestimmt wurde. Die Wechselwirkungen sind in Abbildung 3-18 schematisch dargestellt.

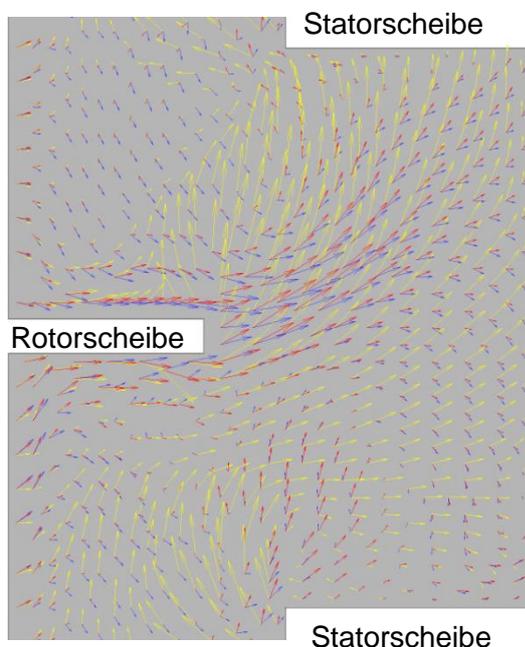


**Abbildung 3-18: Schematische Darstellung der Wechselwirkungen bei der Inhomogenen Klassenmethode.**

Wie im vorangegangenen Kapitel wurden 23 Compartments simuliert bei der Rührintensität von 600 [rpm], 0 [l/h] kontinuierlicher Phasenbelastung und 100[l/h] disperser Phasenbelastung. Die disperse Phase (Toluol) wurde auf fünf sekundäre Phasen, zu je fünf Klassen unterteilt (25 Klassen gesamt). Der Durchmesserbereich wurde wie bei der homogenen Klassenmethode zwischen 0,1 [mm] und 5,1 [mm] festgelegt. Die Modellkonstanten für die Tropfenkoaleszenz (Gleichungen (3-26) und (3-27)) wurden wie in SIMON [66] auf  $C_3 = 1,8 \cdot 10^{-2}$  bzw.  $C_4 = 1,88 \cdot 10^{11}$  gesetzt. Es wurde die Tochterverteilungsfunktion von BAHMANYAR & SLATER [77] mit binärem Tropfenzerfall ( $X_{dp} = 2$ ) verwendet. Die Konstanten für

den Tropfenzerfall in Gleichung (3-28),  $C_1$  und  $C_2$ , konnten nicht aus dem vorangegangenen Kapitel übernommen werden. Beim Wechsel auf die inhomogene Klassenmethode mußten diese Konstanten neu angepasst werden. Präsentierte Ergebnisse wurden mit  $c_1 = 0.005$  und  $c_2 = 0.05$  erzielt. Die Simulation wurde wie im vorigen Kapitel diskontinuierlich durchgeführt, mit einer Zeitschrittweite von 0,05 sec, bei 20 Iterationen pro Zeitschritt.

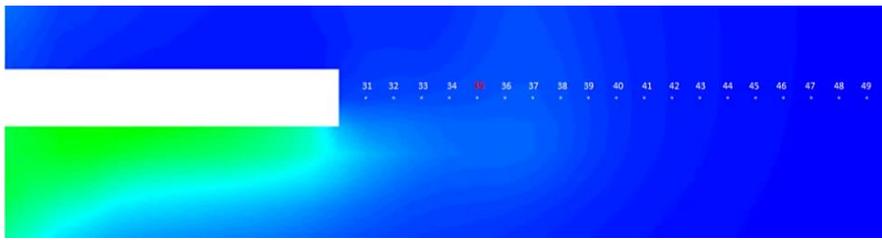
Abbildung 3-19 zeigt, dass die *inhomogene Klassenmethode* in der Lage ist, die unterschiedlichen Geschwindigkeitsfelder polydispenser Mehrphasenströmungen abzubilden. Große Tropfen (4,1 [mm] bis 5,1 [mm], gelbe Vektorpfeile) können wegen der dominierenden Auftriebskraft nicht gegen die freie Aufstiegsrichtung geschleppt werden und sedimentieren in einer S-förmigen Bahn zwischen Rotor- und Statorscheibe. Die Vektoren kleiner Tropfenklassen (0,1 [mm] bis 1,1 [mm], rote Vektorpfeile) sind viel stärker mit der kontinuierlichen Phase ausgerichtet und können dieser auch gegen die freie Sedimentationsrichtung folgen.



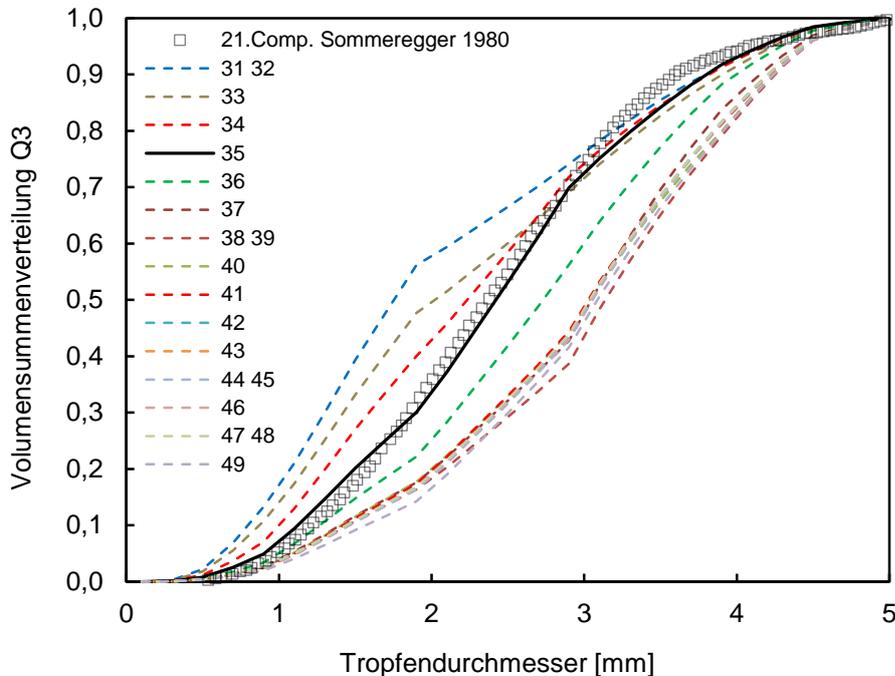
**Abbildung 3-19: Projizierte Geschwindigkeitsvektorfelder der einzelnen Phasen:**  
**blau: kontinuierliche Phase;**  
**rot: Tropfenklassen zwischen 0,1mm und 1,1mm;**  
**gelb: Tropfenklassen zwischen 4,1mm und 5,1mm.**

Trotz der qualitativ korrekten Abbildung des Strömungsverhaltens stellen sich analog zur monodispersen Betrachtung für die quantitative Auswertung die gleichen Probleme der Auswertungsposition. Im Folgenden soll der Einfluss der Auswertungsposition nochmal verdeutlicht werden.

Die Summenverteilung des Volumens  $Q_3$  wurde entlang einer Linie auf Rotorniveau an 19 Punkten im Abstand von 1 [mm], siehe Abbildung 3-20, punktuell ausgelesen. Die Verteilungen sind der gemessenen Tropfengrößenverteilung von SOMMEREGGER [67] in Abbildung 3-21 gegenübergestellt.



**Abbildung 3-20: Hold-Up-Verteilung und äquidistante Auswertungspunkte auf Rotorniveau.**



**Abbildung 3-21: Vergleich der gemessenen TGV von SOMMEREGGER [59] (Symbole) mit den simulierten Verteilungen (Linien) an verschiedenen Auswertungspunkten.**

Es ist ersichtlich, dass im vermuteten Bereich der Tropfenabsaugung von SOMMEREGGER [67] Punkte existieren, an denen eine hervorragende Übereinstimmung mit dem Experiment erzielbar ist ( $x = 35$  [mm]). Gleichzeitig wird deutlich, dass eine seriöse Validierung der inhomogenen Klassenmethode noch nicht möglich ist. Bei Wahl eines um nur wenige Millimeter versetzten Messpunktes weicht die Simulation bereits signifikant von den Messdaten ab. Durch den Mangel an experimentellen Literaturdaten, den nicht abschätzbaren experimentellen Fehler invasiver Messmethoden und die endlosen Kombinationsmöglichkeiten freier Modellparameter ( $c_1$ ,  $c_2$ ,  $c_3$ ,  $c_4$ ,  $X_{dp}$ , Auswertungsposition, etc.) kann der oben gezeigte CFD-Algorithmus nur bedingt für die prädiktive Analyse von Extraktionskolonnen empfohlen werden. Zwar können experimentelle Ergebnisse nach der Parameteranpassung mit hoher Genauigkeit abgebildet werden, durch die Ungewissheit der Modellkonstanten ist die quantitative Extrapolierbarkeit des Algorithmus auf unterschiedliche Betriebszustände oder Apparateskalen aber anzuzweifeln. Die Überprüfung der Einphasenoptima soll mit der numerisch günstigeren homogenen Klassenmethode, mit fixen Modellkonstanten aus vorigem Kapitel, durchgeführt werden.

### 3.2.1.3 Überprüfung der Einphasenströmungsoptima

Die Erkenntnisse aus der Einphasenströmungsoptimierung (Kapitel 3.1.3), nämlich die Reduktion des Wellendurchmessers auf  $D_W \sim D_K/6$  und die Erhöhung des Rotorscheibendurchmessers bei Wegfall des Stators, sollen im zweiphasigen Betriebszustand überprüft werden. Die validierten Simulationsparameter sollen konstant gehalten werden, es soll ausschließlich der Einfluss der Compartmentgeometrie auf das Strömungsfeld, die Tropfengrößenverteilung und den Hold-Up untersucht werden. Die Optimierung beschränkt sich aus Gründen der explodierenden Rechenzeiten auf 4 geometrische Konfigurationen (Abbildung 3-22) bei zwei Drehzahlen, 150 [1/min] und 300 [1/min]:

- Klassische RDC-Referenzgeometrie wie in GURKER [42] und SIMON [66]:  
 $D_W = 54$  [mm],  $D_R = 90$  [mm],  $D_S = 105$  [mm]
- Klassische RDC-Geometrie mit verringertem Wellendurchmesser  $D_W = D_K/6$ :  
 $D_W = 25$  [mm],  $D_R = 90$  [mm],  $D_S = 105$  [mm]
- Statorlose RDC-Geometrie mit erhöhtem Rotordurchmesser:  
 $D_W = 54$  [mm],  $D_R = 133$  [mm]
- Statorlose RDC-Geometrie mit verringertem Wellendurchmesser  $D_W = D_K/6$ :  
 $D_W = 25$  [mm],  $D_R = 133$  [mm]

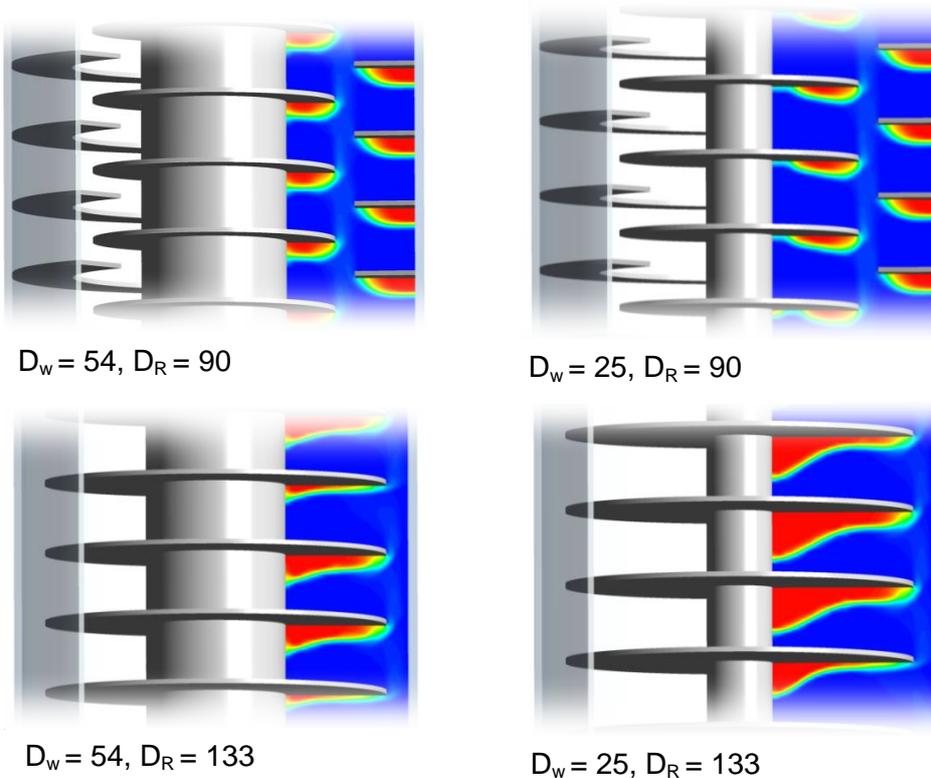
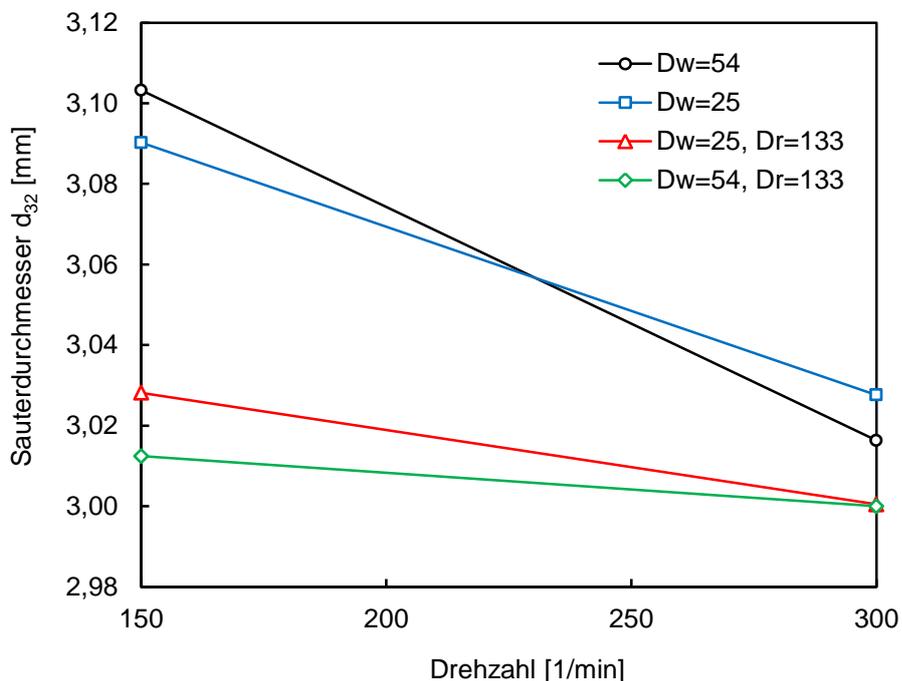


Abbildung 3-22: Untersuchte Geometrien mit Konturplot des Dispersenanteils bei 150 [1/min] (rot = disperse Phase, blau = kont. Phase).

Der Kolonnendurchmesser soll mit  $D_K = 150$  [mm], die Compartmenthöhe mit  $H_C = 30$  [mm] für alle vier Konfigurationen konstant gehalten werden. Es sollen wie bei der Validierung 9 Compartments simuliert werden. Die Detektion erfolgt im mittleren Compartment bzw. am Austritt. Der Volumenstrom beträgt für beide Phasen jeweils 100 [l/h],  $B_{GES.} = 13$  [m<sup>3</sup>/(m<sup>2</sup>h)]. Zur möglichst präzisen Erfassung von Einflüssen auf die Tropfengrößenverteilung soll die feine Unterteilung in 29 Klassen beibehalten werden. Das Intervall der möglichen Tropfendurchmesser ist wie zuvor zwischen 1,4 [mm] und 4,2 [mm] festgelegt. Die disperse Phase strömt am Eintritt monodispers mit einem Tropfendurchmesser von 3 [mm] ein, es sei nur binärer Tropfenzerfall nach VALENTAS [71] erlaubt (Gleichung (3-29)). Die Modellkonstanten für den Tropfenzerfall in Gleichung (3-28) sollen wie in DRUMM [51] auf  $C_1 = 5 \cdot 10^{-3}$  und  $C_2 = 0,1$  gesetzt werden, die Modellkonstanten für die Tropfenkoaleszenz in Gleichungen (3-26) und (3-27) wie in SIMON [66] auf  $C_3 = 1,8 \cdot 10^{-2}$  und  $C_4 = 1,88 \cdot 10^{11}$ . Die Grenzflächenspannung für das System Toluol/Wasser wird mit  $\sigma = 0,0344$  [N/m] konstant angenommen. Insgesamt werden pro Zeitschritt und Rechenzelle 46 Transportgleichungen gelöst.

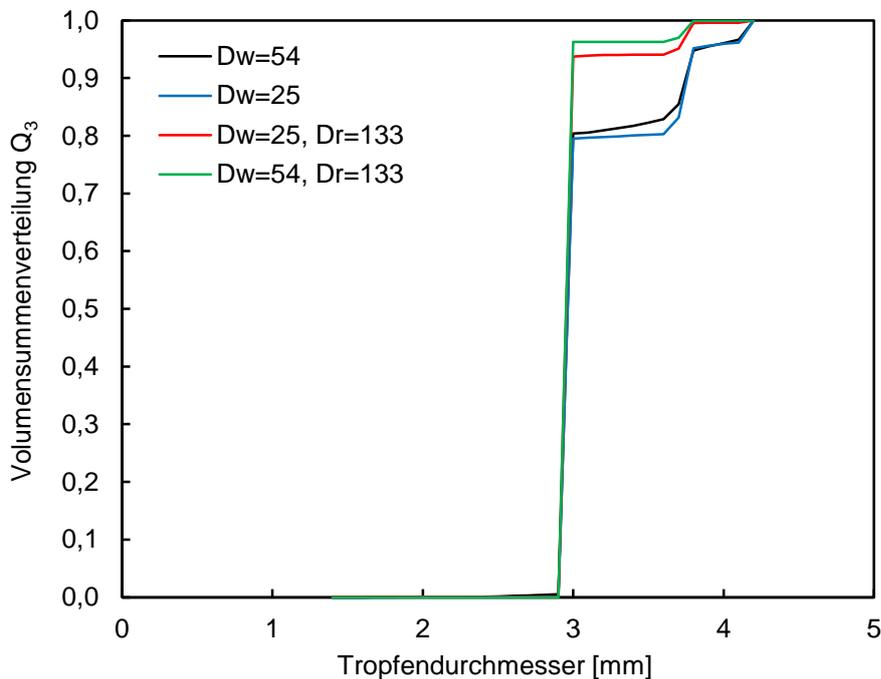
Abbildung 3-23 zeigt den mittleren Sauterdurchmesser am Austritt in Abhängigkeit von der Drehzahl. Wie erwartet bewirkt die Erhöhung der Drehzahl bzw. des Energieeintrages bei allen vier Konfigurationen eine Verringerung des mittleren Tropfendurchmessers.



**Abbildung 3-23: Vergleich der durch Simulation ermittelten Sauterdurchmesser am Austritt bei Variation der Geometrie und Drehzahl.**

Ebenso erwartbar ist die Lage der Kurven, Geometrien mit erhöhtem Rotordurchmesser haben bei gleicher Drehzahl höhere Umfangsgeschwindigkeiten, was zu erhöhtem Energieeintrag, erhöhter Energiedissipation  $\epsilon$  und folglich zu kleineren Tropfendurchmessern

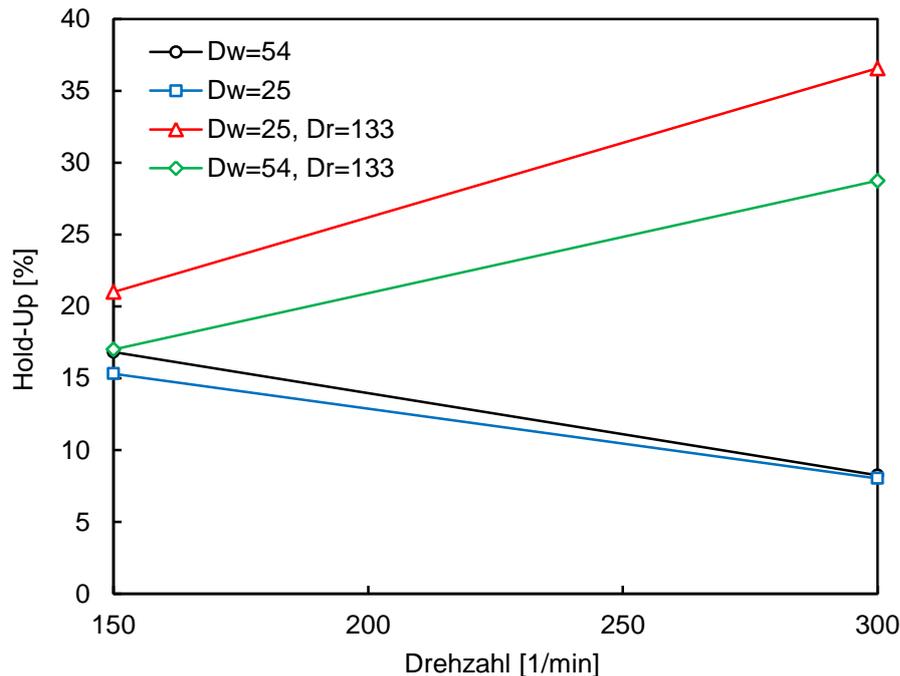
führt. In Abbildung 3-24 sind die mittleren Tropfengrößensummenverteilungen bei 150 [1/min] dargestellt. Der Vergleich zeigt, dass eine Rotorscheibenvergrößerung nicht nur die Tropfengröße verringert sondern auch deren Verteilung verkleinert.



**Abbildung 3-24: Vergleich der durch Simulation berechneten Tropfengrößenverteilungen am Austritt bei Variation der Geometrie.**

Tropfenbruch findet zum größten Teil in unmittelbarer Nähe zur Rotorspitze statt, wo die Energiedissipation am höchsten ist. Während einem Tropfen in der klassischen RDC-Geometrie mehr Platz zum Umgehen dieses Gebietes zur Verfügung steht, wird er in der statorlosen Ausführung geometriebedingt durch diesen Bereich geleitet. Alle Tropfen durchwandern gezwungenermaßen das gleiche Gebiet hoher Bruchwahrscheinlichkeit, was zur Verringerung des Sauterdurchmessers führt, bei gleichzeitiger Verengung der Tropfengrößenverteilung. Enge Tropfengrößenverteilungen resultieren in homogeneren Sedimentationsgeschwindigkeiten und folglich niedrigeren Werten für die axiale Vermischung der dispersen Phase  $D_{ax,d}$ . Der Verzicht auf Statorscheiben bei gleichzeitiger Erhöhung des Rotordurchmessers bewirkt also nicht nur eine Minimierung der axialen Rückvermischung der kontinuierlichen Phase  $D_{ax,c}$  (siehe Kapitel 3.1.3.3) sondern liefert durch die Verengung der Verteilung auch einen positiven Beitrag zur axialen Dispersion der dispersen Phase  $D_{ax,d}$ . Anders verhält es sich bei der Reduktion des Wellendurchmessers. Der Vergleich der roten Kurven ( $D_W = 25$  [mm],  $D_R = 133$  [mm]) mit den grünen Kurven ( $D_W = 54$  [mm],  $D_R = 133$  [mm]) in Abbildung 3-23 und Abbildung 3-24 macht deutlich, dass die Reduktion des Wellendurchmessers auf  $D_W = D_K/6$  im zweiphasigen Betrieb zu einer tendenziellen Verschlechterung der Betriebscharakteristik führt. Die Tropfengröße wird erhöht und die

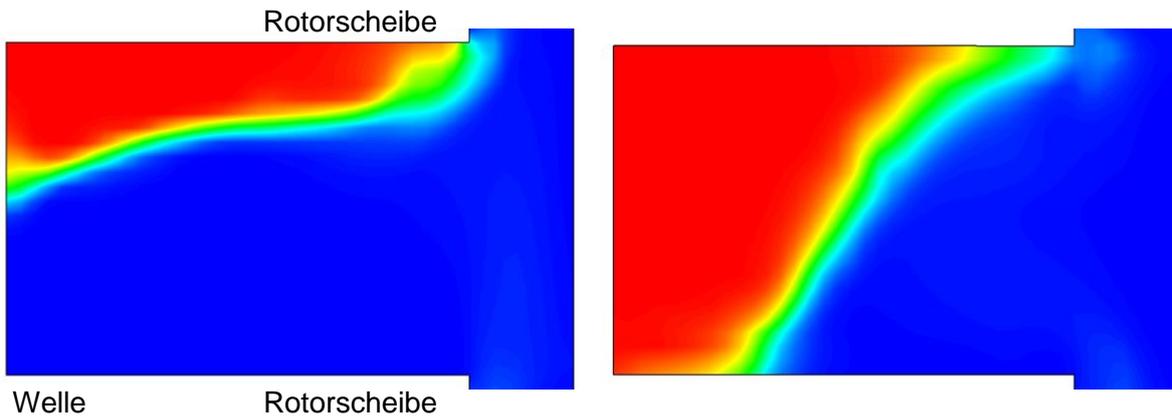
Verteilung verbreitert. Zudem ist der simulierte Hold-Up (Abbildung 3-25) für die Geometrien mit erhöhtem Rotordurchmesser ( $D_R = 133$  [mm]) mit ~28% bzw. ~36% unrealistisch hoch.



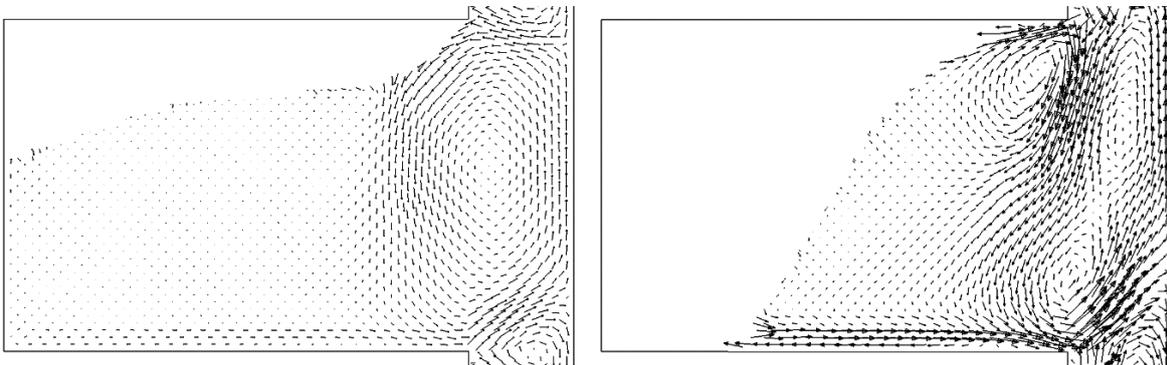
**Abbildung 3-25: Vergleich des simulierten Hold-Up am Austritt bei Variation der Geometrie.**

Extraktionskolonnen können bei derart hohen Dispersphasenanteilen praktisch nicht betrieben werden. Auch wenn das Überschreiten des Flutpunktes mit dem Euler-Euler-Modell noch nicht vorhergesagt werden kann, so liefert es dennoch Einsicht in das Verhalten der dispersen Phase bei zu niedrig dimensionierten Compartments. Bildet sich bei 150 [1/min] noch eine dynamische Settlerzone unter den Rotorscheiben aus (Abbildung 3-26, links), werden bei weiterer Erhöhung der Drehzahl auf 300 [1/min] die Totgebiete in Wellennähe von der spezifisch leichteren dispersen Phase aufgefüllt (Abbildung 3-26, rechts). Der zu gering gewählte Wellendurchmesser wird durch Koaleszenz und Akkumulation mit der dispersen Phase „korrigiert“.

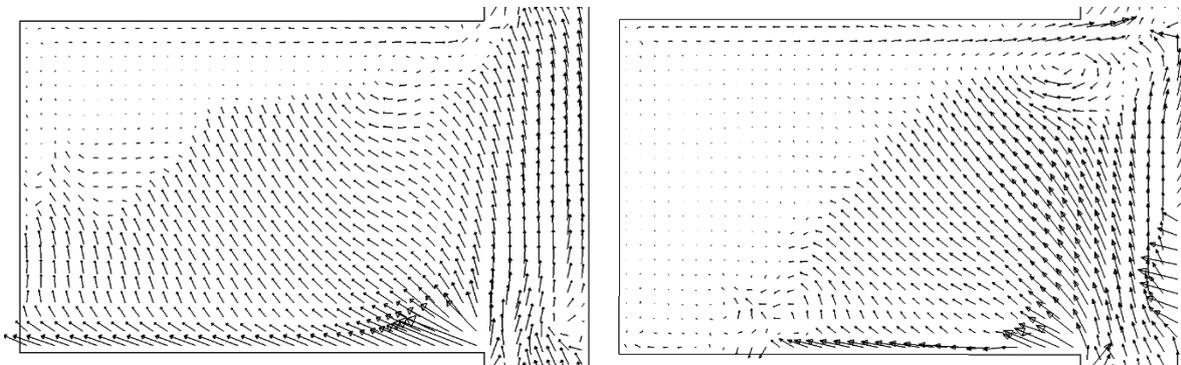
Die Geschwindigkeitsvektorplots der kontinuierlichen und dispersen Phase (Abbildung 3-27, Abbildung 3-28), verdeutlichen die Ursache für die Entstehung von wellennahen Totgebieten bei zu niedrig dimensionierten Compartments. Die kontinuierlichen Toruswirbel können nicht über die gesamte Compartmentbreite  $B_C$  aufrecht erhalten werden, sie sind auf die äußeren Bereiche der Kolonne begrenzt, wellennahe Bereiche können radial nicht durchmischt werden und werden folglich von der spezifisch leichteren Phase aufgefüllt (Abbildung 3-26). Das effektive Kolonnenvolumen wird auf die radial durchmischten Gebiete reduziert.



**Abbildung 3-26: Volumenanteil der dispersen Phase (rot = 100%) bei  $D_W = 54$  [mm],  $D_R = 133$  [mm]. Links: 150 [1/min], rechts: 300 [1/min].**



**Abbildung 3-27: Projizierter Vektorplot der kontinuierlichen Phase bei  $D_W = 54$  [mm],  $D_R = 133$  [mm]. Links: 150 [1/min], rechts: 300 [1/min].**



**Abbildung 3-28: Projizierter Vektorplot der dispersen Phase bei  $D_W = 54$  [mm],  $D_R = 133$  [mm]. Links: 150 [1/min], rechts: 300 [1/min].**

Die Ergebnisse verdeutlichen die Wichtigkeit des korrekten  $H_C/B_C$ -Verhältnisses für die Ausbildung von Wirbeln bzw. die Vermeidung von Totgebieten. Auf den Einfluss der Compartmenthöhe soll in numerisch günstigeren Euler-Lagrange Simulationen im Hinblick auf die Wirbelbildung und die Wirkung auf Einzeltropfen nochmal näher eingegangen werden. Es soll die kleinstmögliche Compartmenthöhe gefunden werden, die eine völlige radiale Durchmischung des Compartments ohne Ausbildung von Totbereichen erlaubt.

### 3.2.2 Euler-Lagrange Simulationen

Im Gegensatz zum *Euler-Euler*-Ansatz, bei dem beide Phasen als Kontinua mit *Navier-Stokes*-Gleichungen (*Eulersche* Betrachtungsweise) berechnet werden, wird beim *Euler-Lagrange*-Ansatz nur die kontinuierliche Phase als Kontinuum betrachtet. Für die disperse Phase werden die Trajektorien aller dispergierten Partikel bzw. Tropfen individuell durch das Strömungsfeld verfolgt (*Lagrangesche* Betrachtungsweise). Die Limitierung dieser Betrachtungsweise liegt in der Vernachlässigung des Volumensanteils der dispersen Phase. Die Genauigkeit der Modellierung sinkt mit steigendem Dispersphasenanteil, von der Simulation mehrphasiger Systeme mit über 10% -12% volumetrischem Dispersphasenanteil wird abgeraten [57]. Typische Hold-Up Werte gerührter Extraktionskolonnen liegen mit ~20% weit außerhalb des für *Euler-Lagrange* Betrachtungen zulässigen Bereiches. Im Folgenden Kapitel soll daher der Einfluss der Toruswirbel der kontinuierlichen Phase auf den starren Einzeltröpfchen untersucht werden. Schwarmeffekte wie Koaleszenz, Bruch oder *hindered settling* sollen in diesem Abschnitt ebenso wenig berücksichtigt werden wie Tropfenverformung oder innere Zirkulationsströmungen. Die Phasenkopplung soll einseitig erfolgen, d.h. das stationäre Strömungsprofil der kontinuierlichen Phase (analoge Modellierung zu Kapitel 3.1) wird durch die Sedimentation der Einzeltröpfchen nicht verändert.

#### 3.2.2.1 Modellierung

Die Tropfen wurden vereinfachend als starre Kugeln modelliert. Diese Annahme ist streng genommen nur für den ersten hydrodynamischen Bereich nach HENSCHKE [90] zulässig. Bis zu einem kritischen Durchmesser (bei technisch relevanten Stoffsystemen ~1 [mm] bis ~2 [mm]) verhalten sich Tropfen wie starre Kugeln. Bei größeren Tropfendurchmessern setzen durch die beweglichen Phasengrenzen innere Zirkulationsströmungen ein, Tropfen beginnen zu oszillieren oder werden verformt. Diese Bereiche wurden im Rahmen dieser Arbeit nicht untersucht. Die folgende Simulationsreihe soll vielmehr den prinzipiellen Einfluss der Compartmenthöhe auf die Wirbelbildung der kontinuierlichen Phase und deren Wechselspiel mit Partikeln quantitativ beurteilen. Die Trajektorien werden durch die Integration der Partikelkräftebilanz berechnet:

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = F_d(\vec{u} - \vec{u}_p) + \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + \vec{F} \quad (3-31)$$

mit der Schleppkraft (*drag force*)  $F_d$ :

$$F_d = \frac{18\mu C_D \text{Re}}{\rho_p d_p^2 24}, \quad (3-32)$$

und der Partikel-Reynoldszahl  $Re$ :

$$Re = \frac{\rho d_p |\vec{u}_p - \vec{u}|}{\mu}, \quad (3-33)$$

und dem Widerstandbeiwert  $C_D$  nach MORSI & ALEXANDER [91]:

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2} \quad (3-34)$$

mit den über viele Bereiche der  $Re$ -Zahl gültigen Modellkonstanten  $a_1$ ,  $a_2$  und  $a_3$ . Mit der zusätzlichen Kraft  $F$  in Gleichung (3-31) können alle weiteren auf den Tropfen wirkenden Kräfte (*Saffman force*, *virtual mass force*, etc.) berücksichtigt werden. In der vorliegenden Arbeit wurden neben der Schleppekraft und der Auftriebskraft keine weiteren Kräfte bilanziert. Die turbulenten Trajektorien der Einzeltropfen wurden mit demselben Algorithmus wie in Kapitel 3.1.1.3 berechnet und ausgewertet.

### 3.2.2.2 Optimierung: Einfluss der Compartmenthöhe (II)

In der Optimierung der Einphasenströmung in Kapitel 3.1.3.1 wurde der Einfluss der Compartmenthöhe  $H_c$  auf die axiale Vermischung der kontinuierlichen Phase systematisch untersucht. Dabei wurde festgestellt, dass die Compartmenthöhe im technisch relevanten Bereich monoton und annähernd linear mit der axialen Rückvermischung der kontinuierlichen Phase korreliert. Der Einfluss auf die Wirbelstruktur und dem daraus resultierenden zweiphasigen Betriebszustand wurde an dieser Stelle noch nicht diskutiert. In der Simulation der Zweiphasenströmung mit dem Euler-Euler-Modell wurde daraufhin deutlich, dass zu geringe Compartmenthöhe fatale Auswirkungen auf den zweiphasigen Betriebszustand hat, da Toruswirbel nicht beliebig flachgedrückt werden können. Bei zu gering gewähltem Compartmenthöhenverhältnis  $H_c/H_B$  bilden sich in Wellennähe Totzonen aus, welche nicht von der radialen Durchmischung der Toruswirbel erfasst werden und von der spezifisch leichteren Phase aufgefüllt werden (Abbildung 3-26). Dies bedingt eine massive Verkleinerung des effektiven Kolonnenvolumens und reduziert folglich die Trennleistung.

Im folgenden Kapitel soll die Optimierung der Compartmenthöhe fortgesetzt werden. Gesucht wird die kleinstmögliche Compartmenthöhe, die eine völlige radiale Durchmischung des Apparates gewährleistet. Gleichzeitig soll die Intensität der Toruswirbel (Zirkulation) maximiert werden, die Sedimentationsgeschwindigkeit der Einzeltropfen sowie deren Streuung (axiale Dispersion) sollen ebenfalls minimiert werden. Die Simulationreihe wurden an jeweils 7 Variationen von  $H_c/H_B$  für die klassische und die aus Kapitel 3.1.3.3 resultierende statorlose Ausführung eines RDC100 durchgeführt. Die hydraulische Belastung

der kontinuierlichen Phase wurde mit  $45 \text{ [l/h]} \propto 7,44 \text{ [m}^3\text{/(m}^2\text{h)]}$  konstant gehalten. Jeweils 20 Compartments mit periodischen Rändern wurden bei zwei Drehzahlen, 295 [1/min] und 650 [1/min] betrachtet. Die mittlere effektive Aufstiegsgeschwindigkeit bzw. der axiale Dispersionskoeffizient der Einzeltropfen  $D_{\text{ax,Einzeltropfen}}$  wurden aus jeweils 30.000 injizierten SST-Kugeln analog zu Kapitel 2.4.1 mit dem Dispersionsmodell [41] errechnet. Die Simulation wurde für 8 diskrete Tropfendurchmesser zwischen 1[mm] und 3[mm] durchgeführt. Die konstant geführten Abmessungen ( $D_W$ ,  $D_R$  bzw.  $D_S$ ) der simulierten Geometrien sind an die Laborkolonnen (Tabelle 2.1) angelehnt, die Versuchsmatrix mit Ergebnissen ist im Anhang tabellarisch zusammengefasst (Tabelle 8.18 bis Tabelle 8.23). In Abbildung 3-29 sind die Wirbelkonturen nach dem *Q-Kriterium* [37] (Gleichung (1-10)) bei Variation der Compartmenthöhe dargestellt.

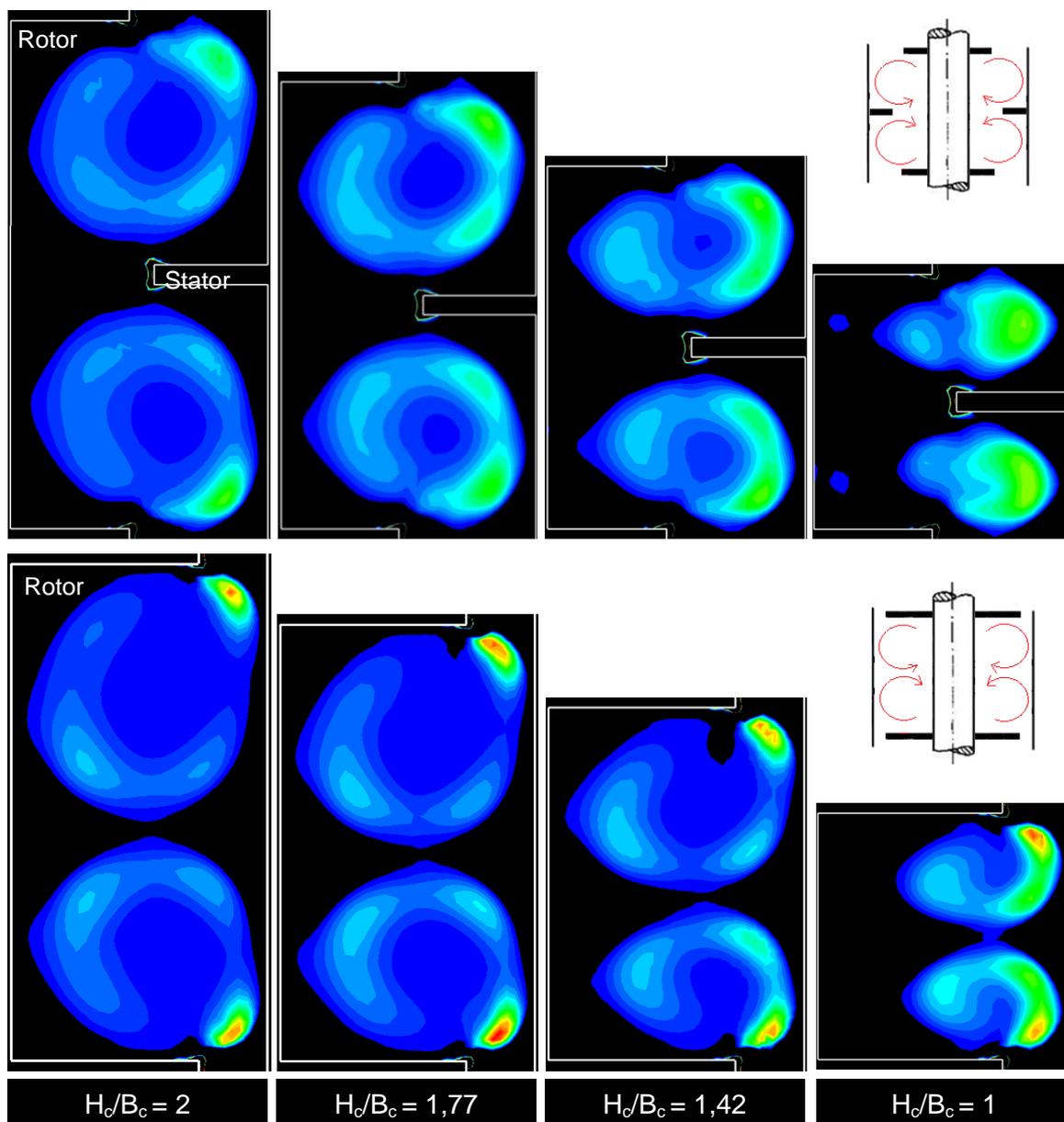
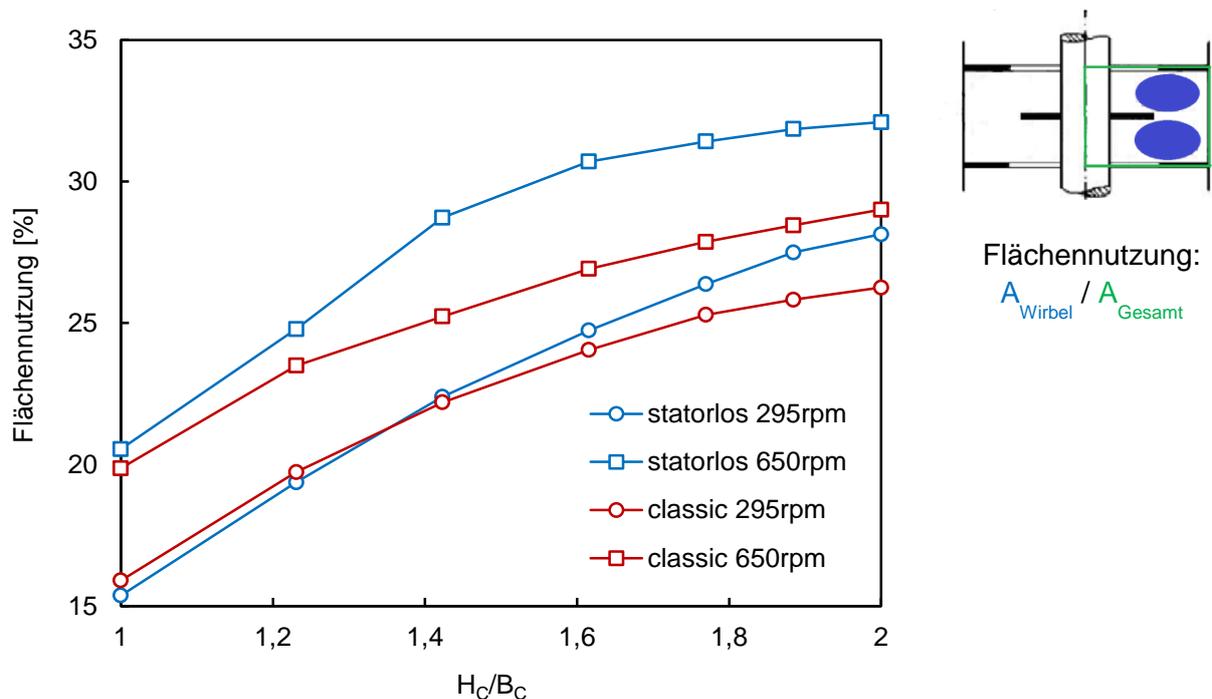


Abbildung 3-29: Konturplots positiver Q-Werte bei Variation der Compartmenthöhe, 650 [1/min], 7,44 [m<sup>3</sup>/(m<sup>2</sup>h)], klassisches Design (oben), statorloses Design (unten).

Aus Abbildung 3-29 wird klar, dass der Querschnitt der Toruswirbel nur annähernd kreisförmige Formen annehmen kann. Durch Verringerung der Compartmenthöhe kann der Wirbelquerschnitt maximal auf eine Ellipse mit dem Achsenverhältnis von  $\sim 1,5$  flachgedrückt werden. Weitere Reduktion der Compartmenthöhe bewirkt eine verstärkte Abnahme der Wirbelquerschnittsfläche bei gleichzeitiger Intensivierung der Wirbelintensität und Erzeugung nicht durchmischter Totbereiche in Wellennähe. Abbildung 3-30 zeigt den Verlauf der Flächennutzung<sup>14</sup> der Wirbelquerschnitte in Abhängigkeit von der Compartmenthöhe und der Drehzahl.

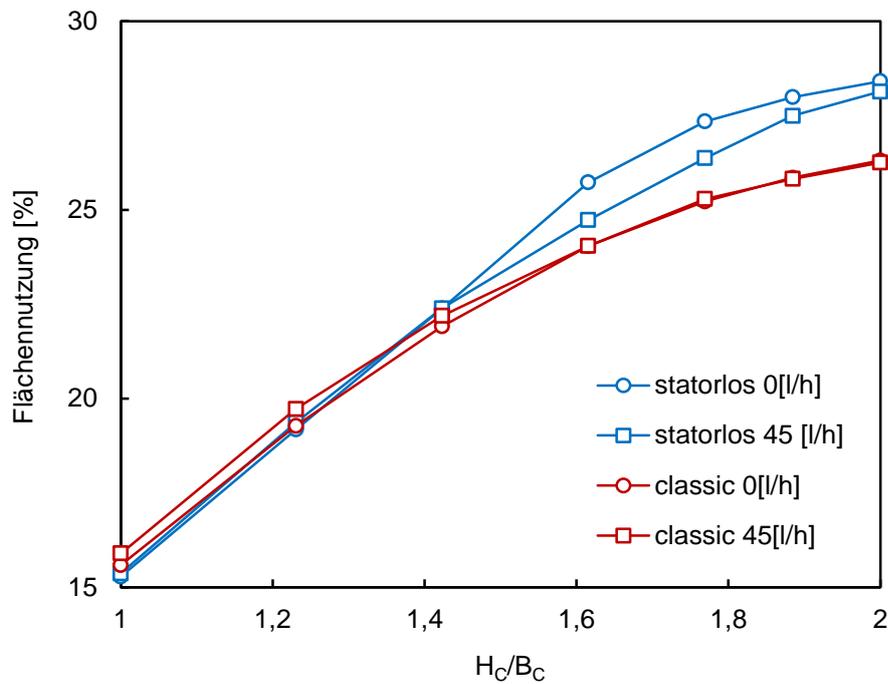


**Abbildung 3-30: Flächennutzung der Wirbel in Abhängigkeit von der Compartmenthöhe bei Variation der Drehzahl,  $45 \text{ [l/h]} = 7,4 \text{ [m}^3\text{/(m}^2\text{h)]}$ .**

Durch das Fehlen der Statorscheiben und deren Grenzschichten steht in der statorlosen Ausführung mehr Volumen für die Wirbelausbildung zur Verfügung (blaue Linien). Die Ausbildung der Totzonen in Wellennähe ist am Knick der Kurven im Bereich zwischen  $H_c/H_B = 1,3$  und  $H_c/H_B = 1,4$  erkennbar.

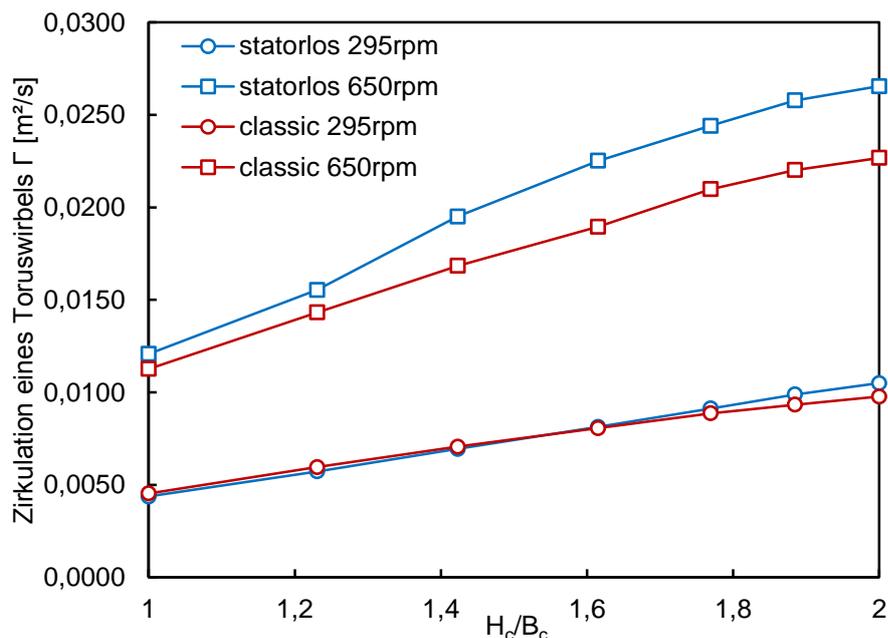
Die Variation der Phasenbelastung hat deutlich geringeren Einfluss auf die Flächenausnutzung der Toruswirbel (siehe Abbildung 3-31). Die Verläufe beider geometrischen Konfigurationen sind bei stehender Flüssigkeitssäule praktisch gleich wie im Falle der axialen Durchströmung mit  $45 \text{ [l/h]}$  bzw.  $7,4 \text{ [m}^3\text{/(m}^2\text{h)]}$ .

<sup>14</sup> Die Wirbelquerschnittsfläche  $A_{\text{Wirbel}}$  ist bewusst auf die theoretisch verfügbare Fläche  $A_{\text{Gesamt}}$  bezogen, damit der ökonomischen Forderung nach dem größtmöglichen Reaktorvolumen im Compartment, bzw. dem kleinstmöglichen Wellendurchmesser Rechnung getragen wird.



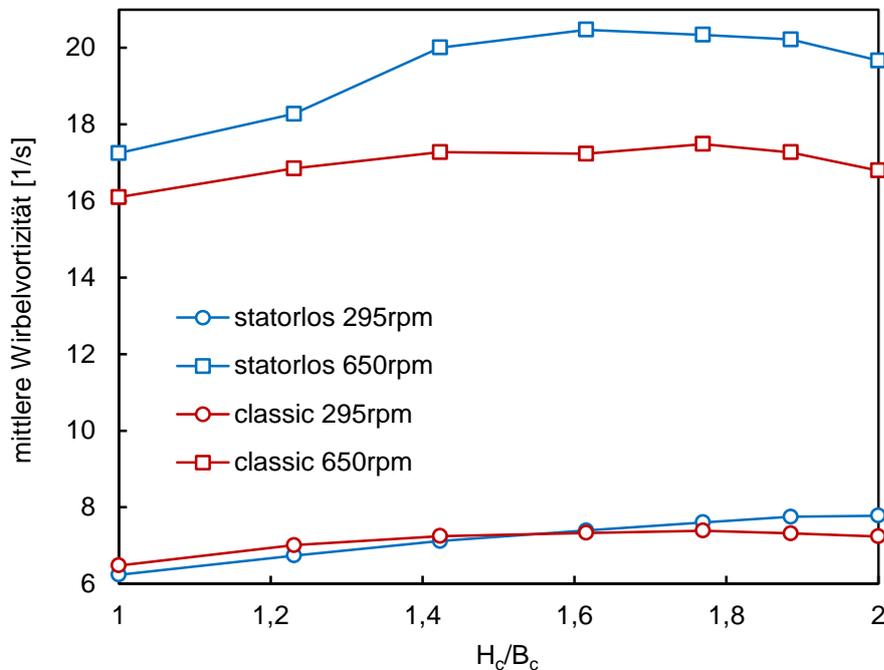
**Abbildung 3-31: Flächennutzung der Wirbel in Abhängigkeit von der Compartmenthöhe bei Variation der kontinuierlichen Phasenbelastung, 295 [1/min].**

Durch Integration der Vortizität gemäß Gleichung (1-9) über die Wirbelfläche aus dem Q-Kriterium (Gleichung (1-10)) kann die Zirkulation  $\Gamma$  (Wirbelstärke), berechnet werden. Der Verlauf in Abhängigkeit von Compartmenthöhe und Drehzahl ist für beide Geometrien in Abbildung 3-32 dargestellt. Im Gegensatz zum Trend der Flächenausnutzung, ist ein Einbruch der Verläufe bei beginnender Ausbildung der Totzonen nicht erkennbar. Für die Identifizierung der hydrodynamisch optimalen Compartmenthöhe ist die Zirkulation als absolutes Maß ungeeignet, da die Fläche, über die theoretisch integriert werden könnte, nicht konstant ist.



**Abbildung 3-32: Zirkulation pro Wirbel bei Variation der Compartmenthöhe, 7,4 [m<sup>3</sup>/(m<sup>2</sup>h)].**

Um die Wirbelstärke trotz unterschiedlicher Integrationsgrenzen bzw. Wirbelflächen vergleichen zu können, wurde die Wirbelzirkulation auf die Gesamtfläche des Compartments (siehe  $A_{\text{Gesamt}}$  in Abbildung 3-30) bezogen. Die resultierende Größe soll als mittlere Wirbelvortizität bezeichnet werden, der Verlauf bei Variation der Compartmenthöhe und der Drehzahl ist in Abbildung 3-33 dargestellt.

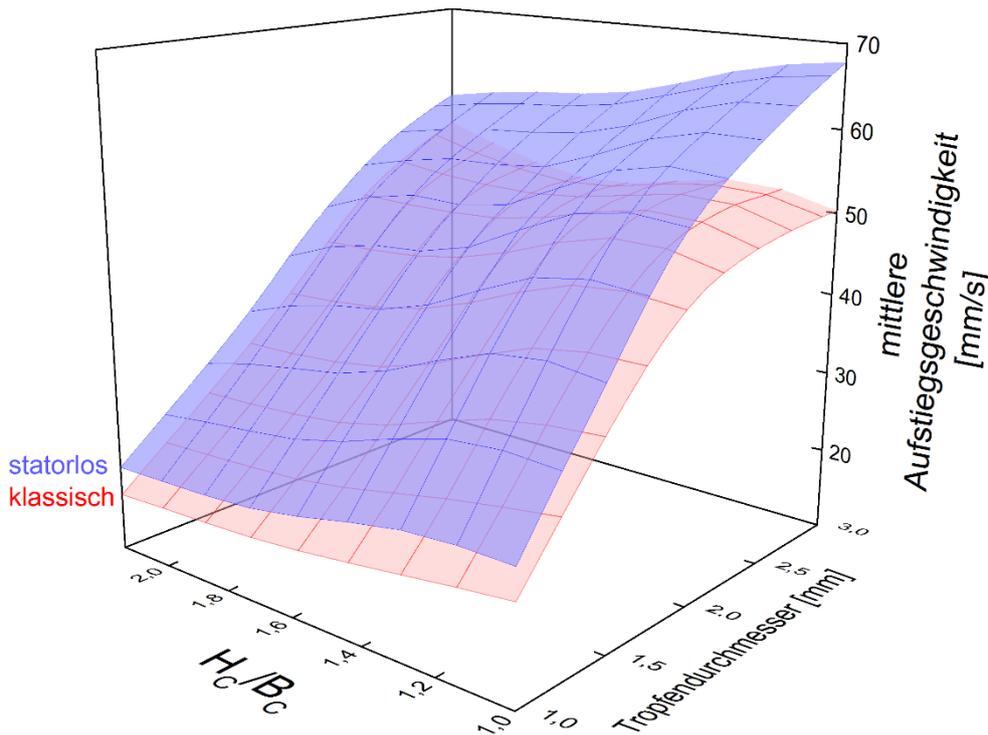


**Abbildung 3-33: Zirkulation bezogen auf die Gesamtfläche bei konst. Belastung und Variation der Compartmenthöhe,  $7,4 \text{ [m}^3/(\text{m}^2\text{h})$ ].**

Im unteren Drehzahlbereich (295 [1/min]) unterscheidet sich die mittlere Wirbelvortizität nur unwesentlich zwischen den geometrischen Konfigurationen. Im höheren Drehzahlbereich (650 [1/min]) wird dagegen ein deutlicher Unterschied zugunsten der statorlosen Ausführung erkennbar. Interessant scheint die Erkenntnis, dass sich eine moderate Wirbelstauchung in Relation zum geometrischen Optimum von  $H_c/H_B = 2$  positiv auf die mittlere Wirbelvortizität auswirkt. Bei Reduktion der Compartmenthöhe unter  $H_c/H_B \sim 1,3$  wird im RDC ohne Statorringe ein Abfall der mittleren Wirbelvortizität beobachtet.

Im Folgenden soll der Einfluss der Toruswirbel auf die mittlere Sedimentationsgeschwindigkeit und die Verweilzeitverteilung der dispersen Phase bei Variation der Compartmenthöhe diskutiert werden. Für die Auswertung der Breite der Verweilzeitverteilung soll, wie in vorangegangenen Kapiteln, das Dispersionsmodell [41] herangezogen werden. Der errechnete Dispersionskoeffizient  $D_{ax, \text{einzeltropfen}}$  ist allerdings nicht mit dem tatsächlichen  $D_{ax, d}$  zu verwechseln. Der Dispersionskoeffizient der dispersen Phase  $D_{ax, d}$  beinhaltet alle Schwarmeffekte, wie Tropfenbruch und Koaleszenz, die sich auf die Tropfengrößenverteilung und somit auf die Verweilzeitverteilung auswirken. Beim  $D_{ax, \text{einzeltropfen}}$  sollen Schwarmeffekte oder Effekte beweglicher Phasengrenzen bewusst

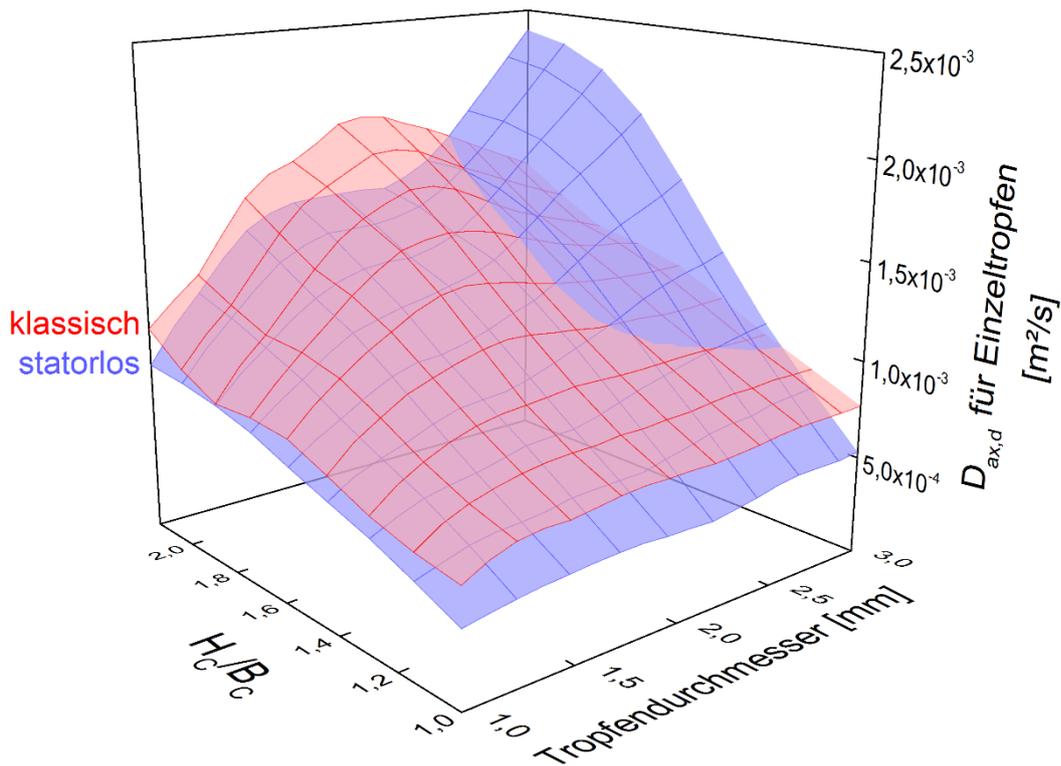
ausgeklammert werden. Durch die einseitige Phasenkoppelung kann die Euler-Lagrange-Simulation als Aneinanderfolge von 30.000 virtuellen Einzelversuchen mit identen Versuchsbedingungen interpretiert werden. Der  $D_{ax, \text{einzel}}^{\text{tropfen}}$  liefert ein Maß für die Streuung der Sedimentationspfade starrer Kugeln nach Interaktion mit den turbulenten Toruswirbeln entlang einer definierten axialen Wegstrecke<sup>15</sup>. Der Vergleich der simulierten mittleren Aufstiegs- und Abstiegsgeschwindigkeiten ist in Abhängigkeit von der Compartmenthöhe und dem Tropfendurchmesser in Abbildung 3-34 dargestellt. Im Anhang (Tabelle 8.24 bis Tabelle 8.27) sind die Ergebnisse tabellarisch zusammengefasst.



**Abbildung 3-34: Mittlere Aufstiegs- und Abstiegsgeschwindigkeit eines Einzeltröpfchens in Abhängigkeit von der Compartmenthöhe und dem Tropfendurchmesser, 295 [1/min], 0 [m<sup>3</sup>/(m<sup>2</sup>h)]**

Es ist ersichtlich, dass die mittlere Aufstiegs- und Abstiegsgeschwindigkeit der simulierten starren Einzelkugeln in der klassischen Ausführung über den gesamten untersuchten Bereich der Compartmenthöhen bzw. der Tropfendurchmesser niedrigere Werte aufweist. Statorscheiben stellen zusätzliche axiale Strombrecher dar und erzwingen daher höhere mittlere Verweilzeiten der dispersen Phase. Die verzögernde Wirkung der Statorscheiben geht aber gleichzeitig mit einer erhöhten Streuung der Tropfentrajektorien einher. In Abbildung 3-35 wird dieser Sachverhalt anhand der Verläufe des  $D_{ax, \text{einzel}}^{\text{tropfen}}$  deutlich.

<sup>15</sup> Für die Berechnung der Bodensteinzahl  $Bo$  bzw. des axialen Dispersionskoeffizienten ist die Kenntnis des konvektiven Transportes notwendig, siehe Gleichung (1-14). Hierfür wurde die freie Aufstiegs- und Abstiegsgeschwindigkeit einer Kugel in ungestörter ausgedehnter Flüssigkeitssäule gleicher Höhe verwendet.



**Abbildung 3-35: Simulierte  $D_{ax,einzeltropfen}$ -Werte für Einzeltropfen in Abhängigkeit von der Compartmenthöhe und des Tropfendurchmessers, 295 [1/min], 0 [m³/(m²h)].**

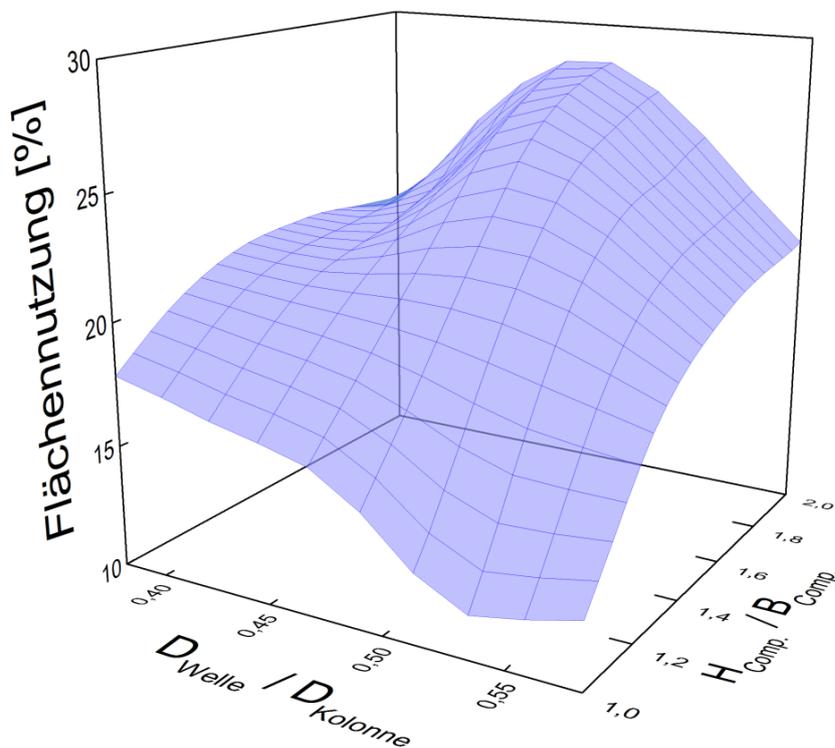
Im Bereich technisch relevanter Tropfengrößen ( $<2,5$  [mm])<sup>16</sup> werden in der klassischen Ausführung deutlich erhöhte  $D_{ax}$ -Werte gegenüber dem statorlosen Design vorhergesagt. Analog zu den Ergebnissen der axialen Vermischung der kontinuierlichen Phase (Kapitel 3.1.3.1) bewirken die verkürzten axialen Strömungspfade niedriger Compartments in beiden Ausführungen auch eine Reduktion der axialen Vermischung von sedimentierenden Einzeltropfen. Der  $D_{ax,einzeltropfen}$  korreliert monoton und unabhängig vom Tropfendurchmesser mit der Compartmenthöhe. Auf ein Optimum kann aufgrund der Betrachtungen der axialen Rückvermischung nicht eindeutig geschlossen werden. Die Forderung nach möglichst geringer Compartmenthöhe kann aber sowohl aufgrund der axialen Dispersion der kontinuierlichen Phase (Kapitel 3.1.3.1), als auch aufgrund der Streuung der Tropfenbahnen, abgeleitet werden.

Die Ermittlung des Optimums soll im folgenden Kapitel über die Minimierung der Totbereiche und die Maximierung der Wirbelstärke erfolgen.

<sup>16</sup> Der Bereich zwischen 2,5mm und 3mm stellt bei der untersuchten Drehzahl von 295[1/min] einen Zustand dar, der sich unterhalb des Betriebsbereiches befindet. Die Wirbelschleppkraft ist zu gering im Verhältnis zur Auftriebskraft der Tropfen. Im realen Betrieb sind der Energieeintrag und die Tropfengröße fest miteinander verknüpft.

### 3.2.2.3 Gekoppelte Variation von Compartmenthöhe und Wellendurchmesser

Im vorangegangenen Kapitel wurde die maximal zulässige Wirbelstauchung analysiert. Bei der Variation der Compartmenthöhe wurden der Wellendurchmesser  $D_W$  bzw. die Compartmentbreite  $B_C$  konstant gehalten. Wie in Kapitel 3.2.1.3 gezeigt wurde, sind diese zwei geometrischen Kenngrößen fest aneinander gekoppelt und definieren die theoretisch verfügbare Fläche und die mögliche Form der Toruswirbel. Sowohl zu geringe Compartmenthöhe als auch zu geringer Wellendurchmesser resultieren in zu flachen Compartments, die zur Ausbildung von wellennahen Totbereichen führen. Als Konsequenz bzw. Schlussfolgerung daraus sind diese Kenngrößen gekoppelt zu variieren. Abbildung 3-36 bis Abbildung 3-38 zeigen die Flächennutzung und Intensität der Toruswirbel bei Variation der Compartmentbreite und der Compartmenthöhe. Die Ergebnisse sind tabellarisch im Anhang (Kapitel 8.4.2.3) zusammengefasst.



**Abbildung 3-36: Simulierte Flächennutzung der Toruswirbel im statorlosen RDC100 (TCDC) in Abhängigkeit von der Compartmenthöhe und dem Wellendurchmesser.**

Die höchsten Werte für die Wirbelflächennutzung und die Zirkulation werden unabhängig von der Compartmenthöhe  $H_C$  bei einem Wellendurchmesser-Verhältnis von  $D_W/D_T = 0,5$  erreicht. Bezüglich der Compartmenthöhe kann aus dem Flächenverlauf kein eindeutiges Optimum abgeleitet werden. Mit der Kenntnis der höchst zulässigen Wirbelstauchung (Ellipse mit Seitenverhältnis  $\sim 1,5$ , siehe Abbildung 3-29) lässt sich die Mindesthöhe des Compartments mit  $H_C/B_C = 1,33$  angeben.

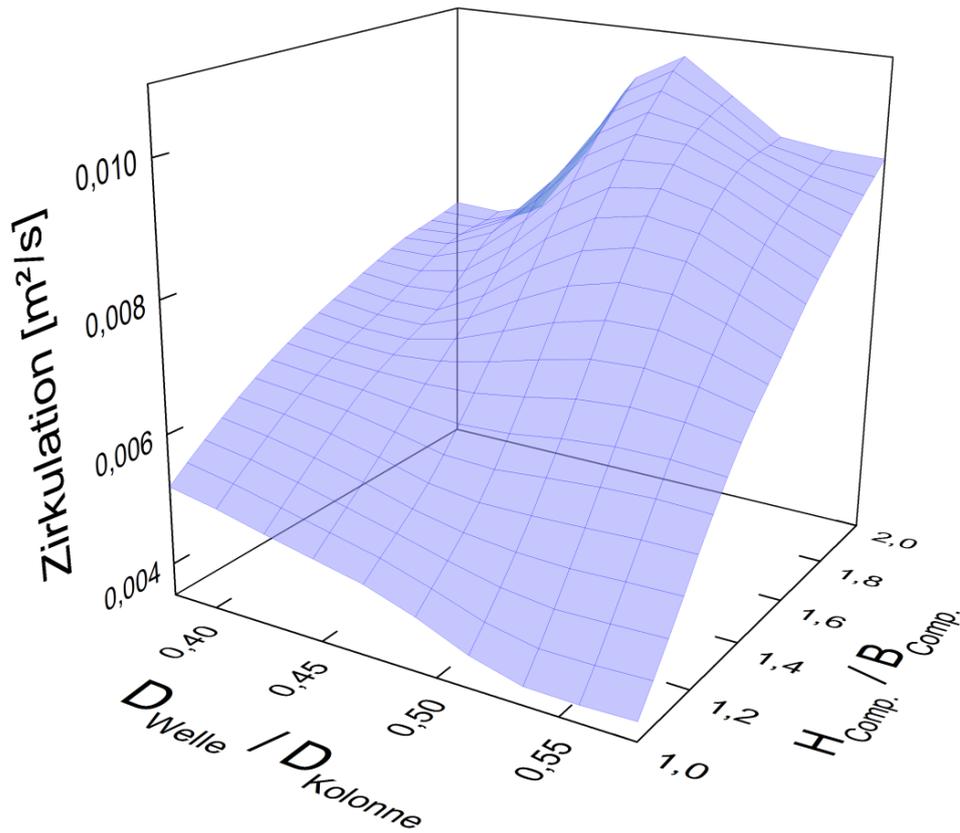


Abbildung 3-37: Simulierte Zirkulation  $\Gamma$  der Torus-Wirbel im optimierten RDC100 in Abhängigkeit von der Compartmenthöhe und dem Wellendurchmesser

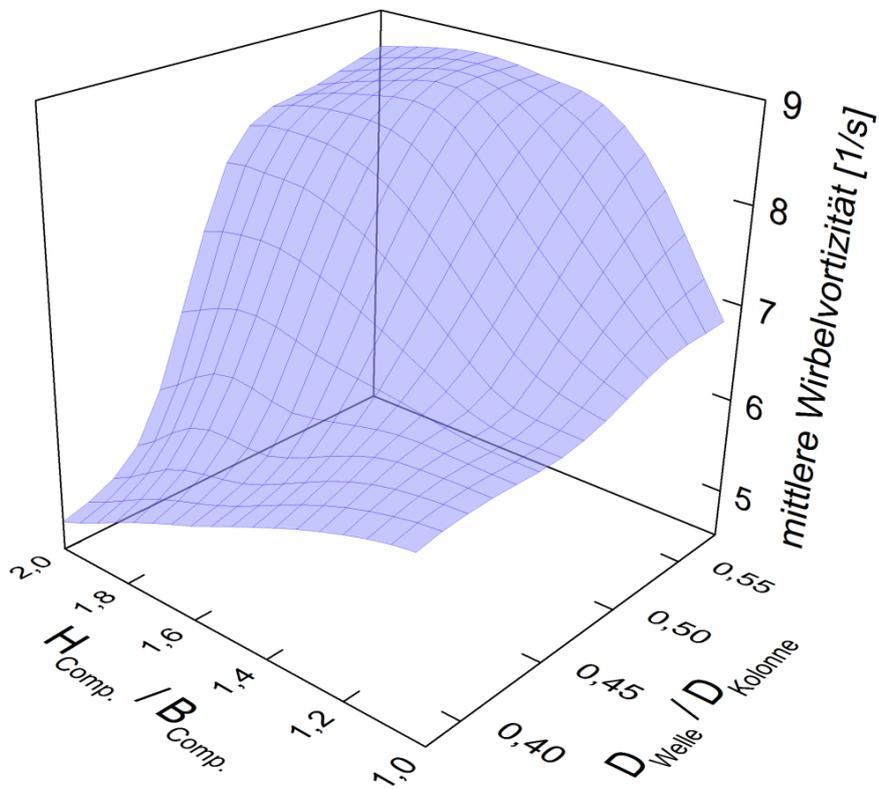


Abbildung 3-38: Mittlere Wirbelvortizität im optimierten RDC100 in Abhängigkeit von der Compartmenthöhe und dem Wellendurchmesser

### 3.2.2.4 Maßstabsvergrößerung mittels CFD

Mit der Kenntnis des optimalen Wellendurchmessers und der maximal zulässigen Wirbelstauchung lässt sich die statorlose Compartmentgeometrie vollständig bestimmen. Im Kapitel 3.2.2.3 wurde der hydrodynamisch optimale Wellendurchmesser für einen statorlosen RDC100 mit  $D_W > 0,5 D_K$  ermittelt. Dieses Optimum soll für Apparate industriellen Maßstabs mit Kolonnendurchmessern von 400 [mm], 1000 [mm] und 2000 [mm] überprüft werden. Die Kolonnenbelastung soll mit  $B = 12 \text{ [m}^3\text{/(m}^2\text{h)]}$  konstant gehalten werden. Wie in der industriellen Praxis üblich, soll die Rotordrehzahl beim Scale up angepasst werden, sodass konstante Umfangsgeschwindigkeit an der Rotorspitze gewährleistet ist,  $v_{Um} = 2,3 \text{ [m/s]}^{17}$ . Das Verhältnis  $H_c/B_c = 2 = \text{konst.}$  soll für jede Variation des Wellendurchmessers zwei ideal kreisförmige Toruswirbel zulassen (Abbildung 3-39). Detaillierte Ergebnisse zu folgenden Simulationsserien sind in den Arbeiten von VOGL [92], LANDFAHRER [93] und SARZIO [47] zu finden.

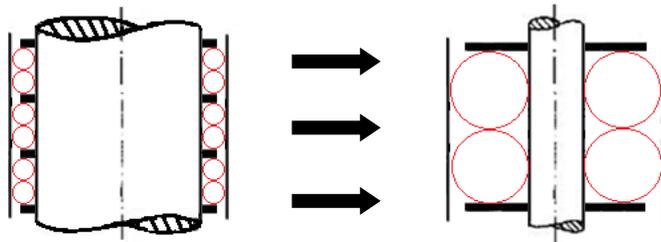


Abbildung 3-39: Variation des Wellendurchmessers mit  $H_c/B_c = 2 = \text{konst.}$

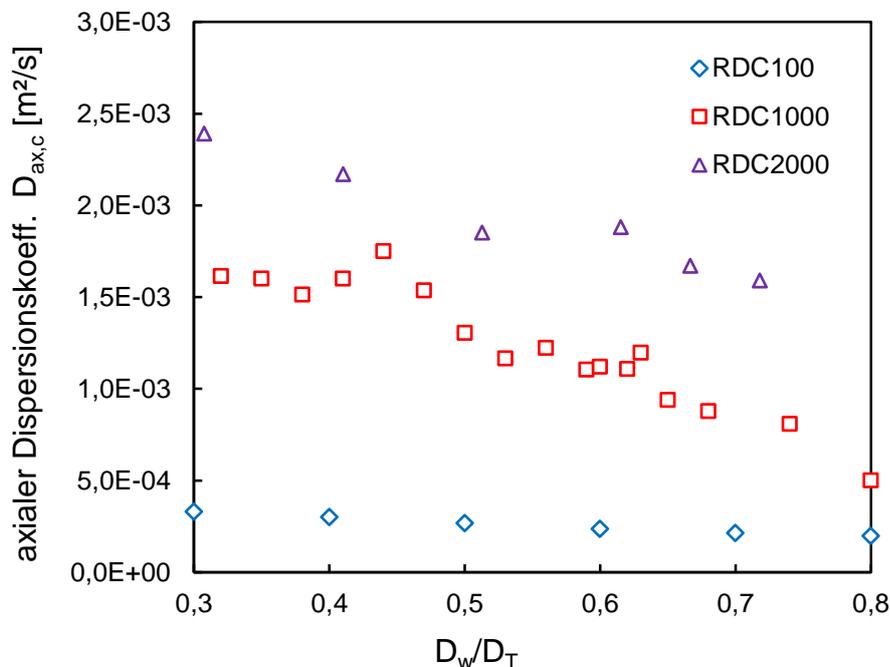
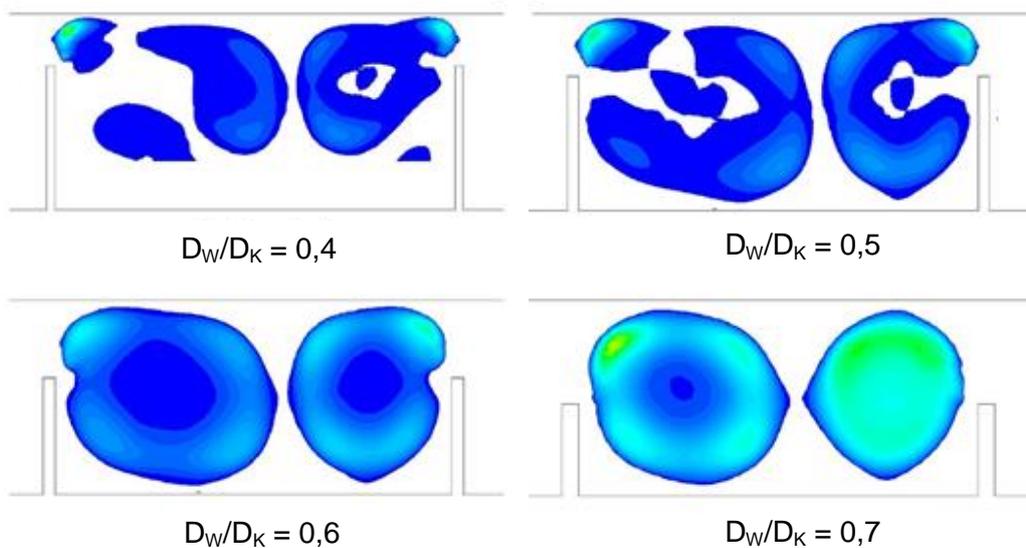


Abbildung 3-40: Simulierte axiale Dispersionskoeffizienten  $D_{ax,c}$  in Abhängigkeit vom Wellendurchmesser; Skalierung des Kolonnendurchmessers bis zu 2 m.

<sup>17</sup> Entspricht  $\sim 500 \text{ [1/min]}$  im RDC150, Tabelle 2.1.

Abbildung 3-40 zeigt den Verlauf der simulierten axialen Dispersionskoeffizienten in Abhängigkeit vom Wellendurchmesser bei verschiedenen Kolonnendurchmessern. Durch das konstant geführte Verhältnis  $H_C/B_C = 2$ , steigt die Compartmenthöhe mit abnehmendem Wellendurchmesser (siehe Abbildung 3-39). Wie bereits bei den Simulationen des RDC100, wird auch bei größeren Kolonnendurchmessern der annähernd lineare Zusammenhang der axialen Vermischung von der Compartmenthöhe bestätigt. Der Einbruch der toroidalen Wirbelstruktur, der bei etwa  $D_W = 0,5 D_K$  eintritt, kann an den Verläufen des  $D_{ax,c}$  nicht abgelesen werden. Abbildung 3-41 zeigt stellvertretend für alle untersuchten Kolonnendurchmesser die Wirbelkonturen bei Variation des Wellendurchmessers in einem RDC400.



**Abbildung 3-41: Q-Konturen eines RDC400 bei Variation des Wellendurchmessers für  $H_C/B_C = 2 = \text{konst.}$ , [92].**

Bei Wellendurchmessern unterhalb von  $D_W = 0,5 D_K$  ist die Ausbildung von Sekundärwirbeln in Wellennähe zu beobachten. Die zwei erwünschten Hauptwirbel können nicht über die gesamte Compartmentbreite  $B_C$  gestreckt werden. Beim quantitativen Vergleich der Wirbelflächennutzung (Abbildung 3-42) ist dieser Einbruch bei  $D_W/D_K = 0,5$  für alle Kolonnendurchmesser bis 1000 [mm] zu beobachten. Im Falle des RDC2000 konnte das Wirbelmuster nur bis  $D_W/D_K = 0,6$  aufrecht erhalten werden [47]. Die Verläufe der Wirbelzirkulation in Abbildung 3-43 bestätigen das Optimum von  $D_W/D_K = 0,5$  im Labormaßstab.

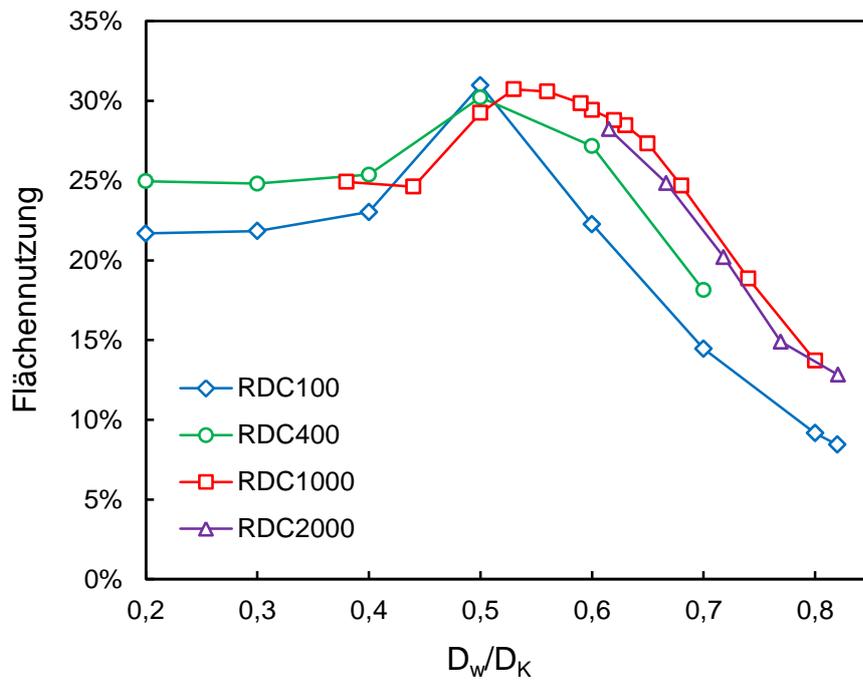


Abbildung 3-42: Simulierte Flächennutzung der Toruswirbel bei Variation des Wellendurchmessers für 4 Kolonnendurchmesser.

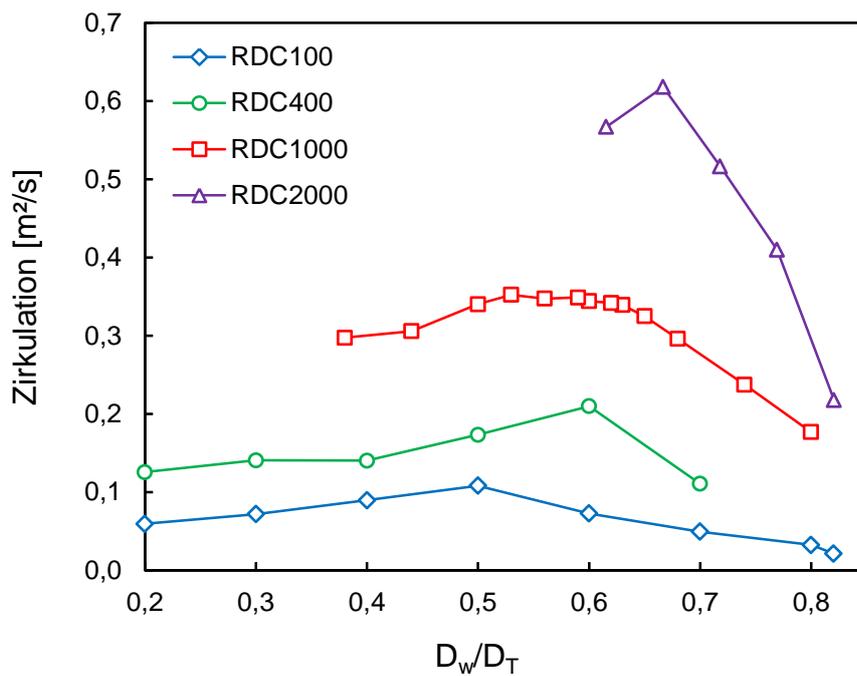


Abbildung 3-43: Simulierte Zirkulation zweier Toruswirbel eines Compartments in Abhängigkeit vom Wellendurchmesser für die Skalierung des Kolonnendurchmessers bis zu 2 [m].

## 4 Optimiertes Design: Der Taylor-Couette Disc Contactor (TCDC)

Die im Wechselspiel aus CFD-Simulation und Experiment gefundene Vereinfachung des klassischen RDC-Designs durch Entfall von Statorscheiben stellt hydrodynamisch gesehen einen Hybrid aus einem RDC und einem Taylor-Couette Reaktor dar. Durch die Zusammenführung beider Konzepte ergibt sich für die flüssig/flüssig-Extraktion eine effiziente und robuste Betriebscharakteristik, die im folgenden Kapitel näher beschrieben werden soll. Basierend auf den experimentellen und numerischen Erkenntnissen dieser Arbeit sollen im Anschluss Designempfehlungen für den neuen Extraktortyp abgeleitet werden. Abschließend werden experimentelle Ergebnisse präsentiert, welche die Vorteile des TCDC gegenüber dem klassischen RDC-Design bezüglich Trennleistung und Betriebsgrenzen belegen.

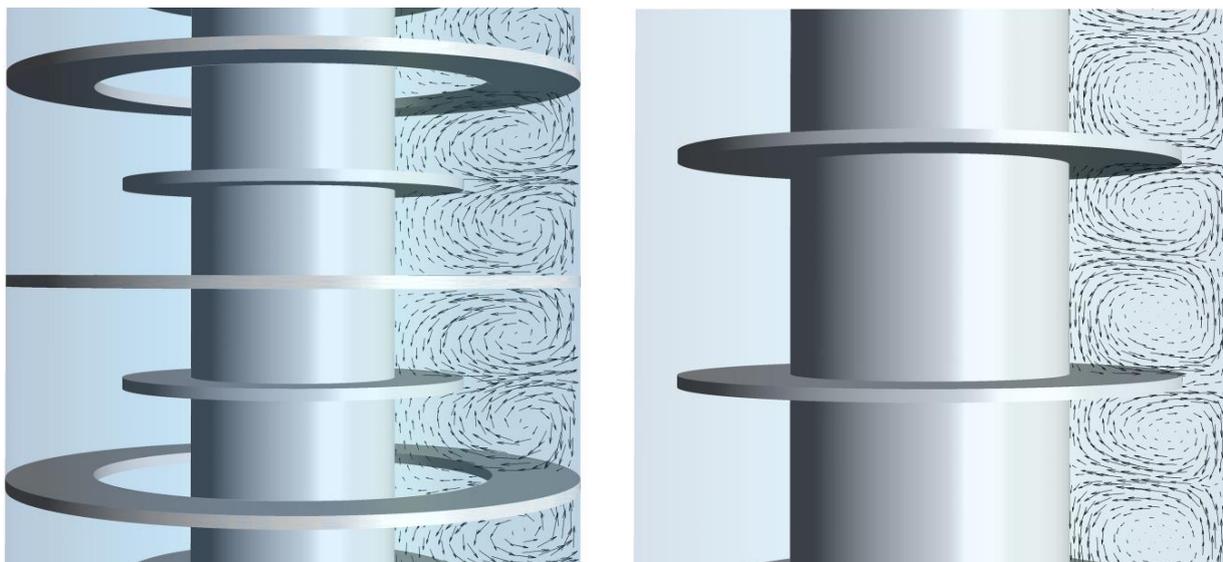
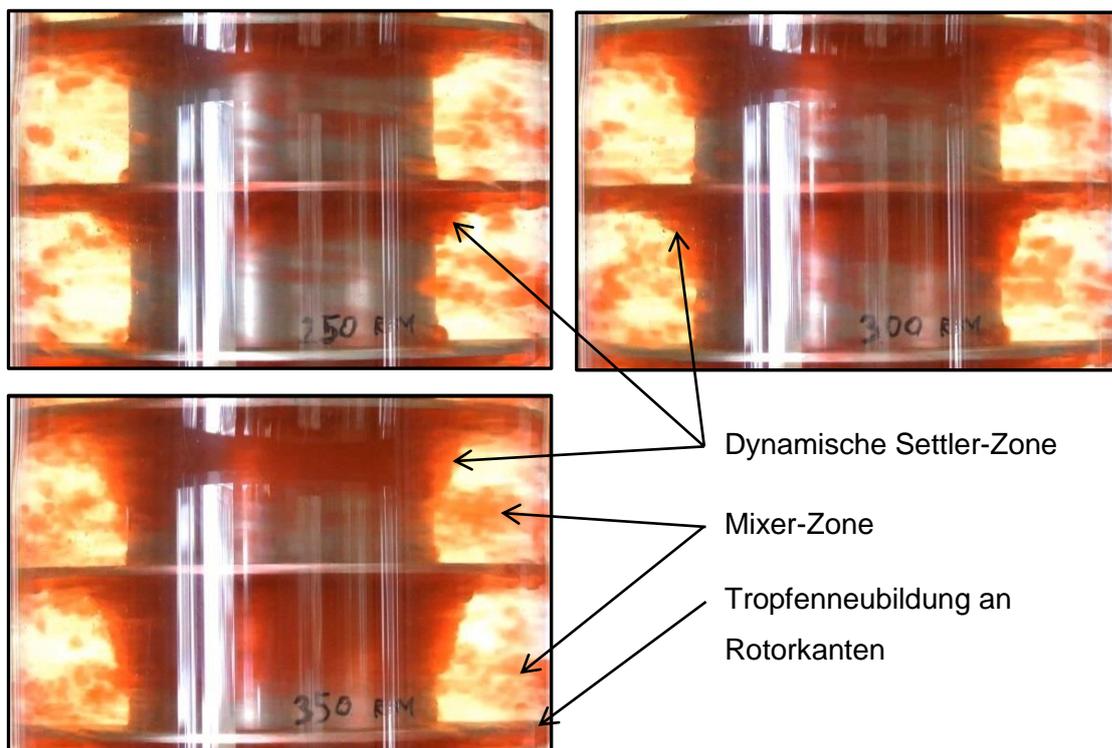


Abbildung 4-1: Gegenüberstellung der Geometrie und Wirbelstrukturen des klassischen RDC-Designs (links) und des Taylor-Couette Disc Contactors TCDC (rechts).

### 4.1 Betriebscharakteristik

Wird der Abstand zwischen Rotorscheiben ( $H_C$ ) richtig gewählt, kann das statorlose RDC-Design als konstruktive Stützung instabiler Taylorwirbel eines Taylor-Couette Reaktors (Kapitel 1.5.1) interpretiert werden. Die konstruktive Eingrenzung der Toruswirbel durch Rotorscheiben löst zwei wesentliche Probleme, die Taylor-Couette-Reaktoren für die industrielle Umsetzung bisweilen ungünstig erscheinen ließen. Zum Ersten kann der Zylinderspalt bzw. das aktive Reaktorvolumen signifikant vergrößert werden. Das Wirbelmuster kann ohne Bildung nichtdurchmischter Totbereiche bis  $D_W = 0,5 D_K$

aufrechterhalten werden<sup>18</sup>. Zum Zweiten werden die azimuthalen Instabilitäten der Toruswirbel durch die Rotorscheiben minimiert. Die turbulenten Taylor-Couette Wirbel können auch im zweiphasigen Gegenstrombetrieb über den gesamten Betriebsbereich stabil ohne Tendenz der Wirbelumkehr, die im klassischen RDC-Design bei zu geringer Compartmenthöhe  $H_C$  beobachtet werden kann (Abbildung 2-14), aufrecht erhalten werden. Der Taylor-Couette Disc Contactor weist im Betrieb bei Zweiphasenströmung eine zusätzliche Betriebscharakteristik auf, die in etablierten gerührten Kolonnentypen nicht zu beobachten ist bzw. nur mit hohem konstruktiven Mehraufwand zu bewerkstelligen ist. Durch die Erhöhung des Durchmessers werden unter den Rotorscheiben dynamische Settlerzonen rekoaleszierter disperser Phase ausgebildet<sup>19</sup> (siehe Abbildung 4-2). Im Gegensatz zu den statischen rekoaleszierten Bereichen unter Statorblechen des klassischen RDC (Abbildung 2-14), entsteht im TCDC ein dynamischer Bereich, der die Rehomogenisierung des Tropfenschwarms erzwingt. Die Abfolge von Tropfenneubildung an den Rotorkanten, Mischen in den turbulenten Toruswirbeln (Mixer-Zone) und Rekoaleszenz in den dynamischen Settlerzonen ermöglicht die Realisierung des Mixer-Settler-Prinzips in jedem Compartment. Erhöhung der Drehzahl bewirkt sowohl eine Intensivierung der Mixer-Zone<sup>20</sup> als auch eine Vergrößerung der dynamischen Settler-Zone (Abbildung 4-2).



**Abbildung 4-2: Der Taylor-Couette Disc Contactor (TCDC) in Betrieb bei 250 [1/min], 300 [1/min] und 350 [1/min].**

<sup>18</sup> Die Spaltbreiten der stabilen Taylor-Couette Strömung liegen typischerweise bei  $D_W \sim 0,8 \cdot D_K$  [31].

<sup>19</sup> Auch über den Rotorscheiben, bei geringen Betriebsbelastungen und hohem Energieeintrag bzw. Stoffsystemen mit niedriger Grenzflächenspannung.

<sup>20</sup> Durch Verlängerung der spiralförmigen Tropfenbahn zwischen Rotorspitze und Settler-Zone sowie Erhöhung der Turbulenz.

Im Vergleich zum klassischen Rotating Disc Contactor weist das vereinfachte statorlose Design sowohl bezüglich der Hydrodynamik als auch bezüglich der praktischen Handhabung eine Reihe von Vorteilen auf. Neben der geringeren axialen Dispersion der kontinuierlichen Phase, werden auch die hydrodynamischen Parameter der dispersen Phase begünstigt. Das Gebiet höchster Energiedissipation und höchster Tropfenbruchwahrscheinlichkeit im Bereich der Rotorspitzen befindet sich in der klassischen Ausführung zentral im Compartment. Sedimentierenden Tropfen wird viel Raum zum Umgehen dieser Bereiche zur Verfügung gestellt, was zu breiten Tropfengrößenverteilungen und hohen  $D_{ax,d}$ -Werten führt. Im Gegensatz dazu wird im TCDC der gesamte Tropfenschwarm geometriebedingt durch das Gebiet hoher Bruchwahrscheinlichkeit bzw. Redispergierung geleitet, was eine homogenere Tropfengrößenverteilung zur Folge hat. Zweiphasenströmungssimulationen bestätigen kleinere mittlere Durchmesser mit engeren Tropfengrößenverteilungen im TCDC. Zudem bewegen sich die sedimentierenden Tropfen auf geordneteren Bahnen und sind lokal immer im Gleichstrom mit der kontinuierlichen Phase. Obige Effekte wirken sich neben der Minimierung des  $D_{ax,d}$  auch positiv auf die Flutgrenze aus, wie im Kapitel 4.3.1 experimentell bestätigt wird. Die optimierte Hydrodynamik beider Phasen führt aufgrund der Analogie zum Stofftransport auch zu einer Erhöhung der Trennleistung, was in Stoffaustauschversuchen bestätigt wurde (Kapitel 4.3.2.). Durch den Verzicht auf Statorscheiben vereinfachen sich neben der Apparateauslegung auch Reinigung und Wartung, da *fouling* bzw. Mulmbildung im Bereich der Statorscheiben ausgeschlossen werden kann. Die Investitionskosten fallen durch die einfachere Bauweise und die Materialersparnis ebenfalls entscheidend geringer aus.

## 4.2 Designregeln für den TCDC

Im folgenden Kapitel sollen Designregeln für den Taylor-Couette Disc Contactor aus den Erkenntnissen der experimentellen Untersuchungen (Kapitel 2) und der numerischen Strömungssimulation (Kapitel 3) abgeleitet werden. Abschließend (Kapitel 4.3) werden die Designregeln im direkten experimentellen Vergleich zum klassischen Design bezüglich Trennleistung und Betriebsgrenzen validiert. In der Einphasenströmungsoptimierung (Kapitel 3.1.3.3) der axialen Rückvermischung wurde dargestellt, dass die Abtrennung der Compartments am effizientesten ist, wenn auf Statorscheiben verzichtet wird und deren Funktion von vergrößerten Rotorscheiben übernommen wird. Mit dem Ziel vergleichbare Durchsätze zum klassischen Design zu ermöglichen, kann nach Gleichsetzen der resultierenden freien Querschnittsfläche zwischen Rotorscheibe und Kolonnenaußenwand, mit der kleinsten Querschnittsfläche im klassischen Design<sup>21</sup>, ein Bereich von:

---

<sup>21</sup> Mantelfläche eines stumpfen Kegels, der zwischen Rotorspitze und Stator-Innenkante aufgespannt wird.

$$D_R = (0,85 \cdots 0,9) \cdot D_K \quad (4-1)$$

für den vergrößerten Rotordurchmesser empfohlen werden. In Relation zum klassischen RDC nach REMAN [5] vereinfacht sich die weiterte Auslegung des Taylor-Couette Disc Contactors um einen Designparameter, da keine Angabe zum Statorscheibendurchmesser gemacht werden muss. Bezüglich des Wellendurchmessers  $D_W$  wurde in Kapitel 3.2.2 deutlich, dass die toroidalen Wirbel im Bereich von

$$D_W \approx 0,5 \cdot D_K \quad (4-2)$$

die höchsten Werte für Wirbel-Flächenausnutzung und Wirbelzirkulation aufweisen. Geringere Wellendurchmesser führen zur Akkumulation der spezifisch leichteren Phase in wellennahen Totgebieten (Abbildung 3-26) und erhöhen deren axiale Vermischung. Dieses optimale Verhältnis konnte in validierten CFD-Simulationen (Kapitel 3.2.2.4) auch für den industriellen Maßstab (400 mm, 1000 mm) bestätigt werden.

Aus Kapitel 2.6 und Kapitel 3.1.3.1 ging die Forderung nach möglichst geringer Compartmenthöhe  $H_C$  hervor. Dem wurde in Kapitel 3.2.2.2 entgegengesetzt, dass die toroidalen Wirbel nicht beliebig gedrückt werden können, die elliptische Form des Wirbelquerschnittes kann ein Achsenverhältnis von  $a/b=1,5$  nicht überschreiten. Mit dem aus Gleichung (4-2) bekannten Wellendurchmesser und der Compartmentbreite  $B_C=(D_K-D_W)/2$ , lässt sich, bei Forderung von zwei Toruswirbeln je Compartment, die Untergrenze der Compartmenthöhe  $H_C$  mit:

$$H_C = 1,3 \cdot B_C \quad (4-3)$$

festlegen. Für Anwendungen abseits der flüssig/flüssig-Extraktion, bei denen die Maximierung der Wirbelkernvolumina im Vordergrund steht, beispielsweise für die Akkumulation von Partikeln im Wirbelkern, können höhere Compartmenthöhen gewählt werden, welche die Ausbildung runder Toruswirbel ermöglichen:

$$H_C = 2 \cdot B_C \quad (4-4)$$

Mit den Gleichungen (4-1) bis (4-4) ist die vereinfachte Compartmentgeometrie des TCDC vollständig definiert. Im folgenden Kapitel sollen obige Designempfehlungen im direkten experimentellen Vergleich mit dem klassischen RDC-Design im Hinblick auf Trennleistung und Betriebsgrenzen am RDC100 (siehe Tabelle 2.1) validiert werden.

## 4.3 Experimenteller Vergleich

Die Empfehlung des vereinfachten Designs von RDC-Extraktoren in dieser Arbeit stützt sich auf Erkenntnisse aus hydrodynamischen Untersuchungen. Trotz der Analogie zwischen Impuls- und Stofftransport kann aufgrund der Vielzahl verschränkter physikalischer Phänomene eine Optimierung bezüglich des Stofftransportes nicht a priori angenommen werden. Die Vorhersage der Flutgrenzen ist mit Hilfe von heute verfügbaren CFD-Modellen ebenfalls nicht möglich. Die Trennleistung sowie der Betriebsbereich sollen deshalb im folgenden Kapitel im direkten experimentellen Vergleich mit der klassischen RDC-Ausführung validiert werden.

### 4.3.1 Vergleich der Betriebsgrenzen

Für die Validierung der unteren Betriebsgrenzen wurden einerseits Einzeltropfenversuche mit PP-Kugeln (Kapitel 2.2) herangezogen, andererseits wurde die Videodokumentation der hydraulischen Belastungsversuche (Kapitel 4.3.1.2) hinsichtlich des Wechsels von Strömungsregimen ausgewertet.

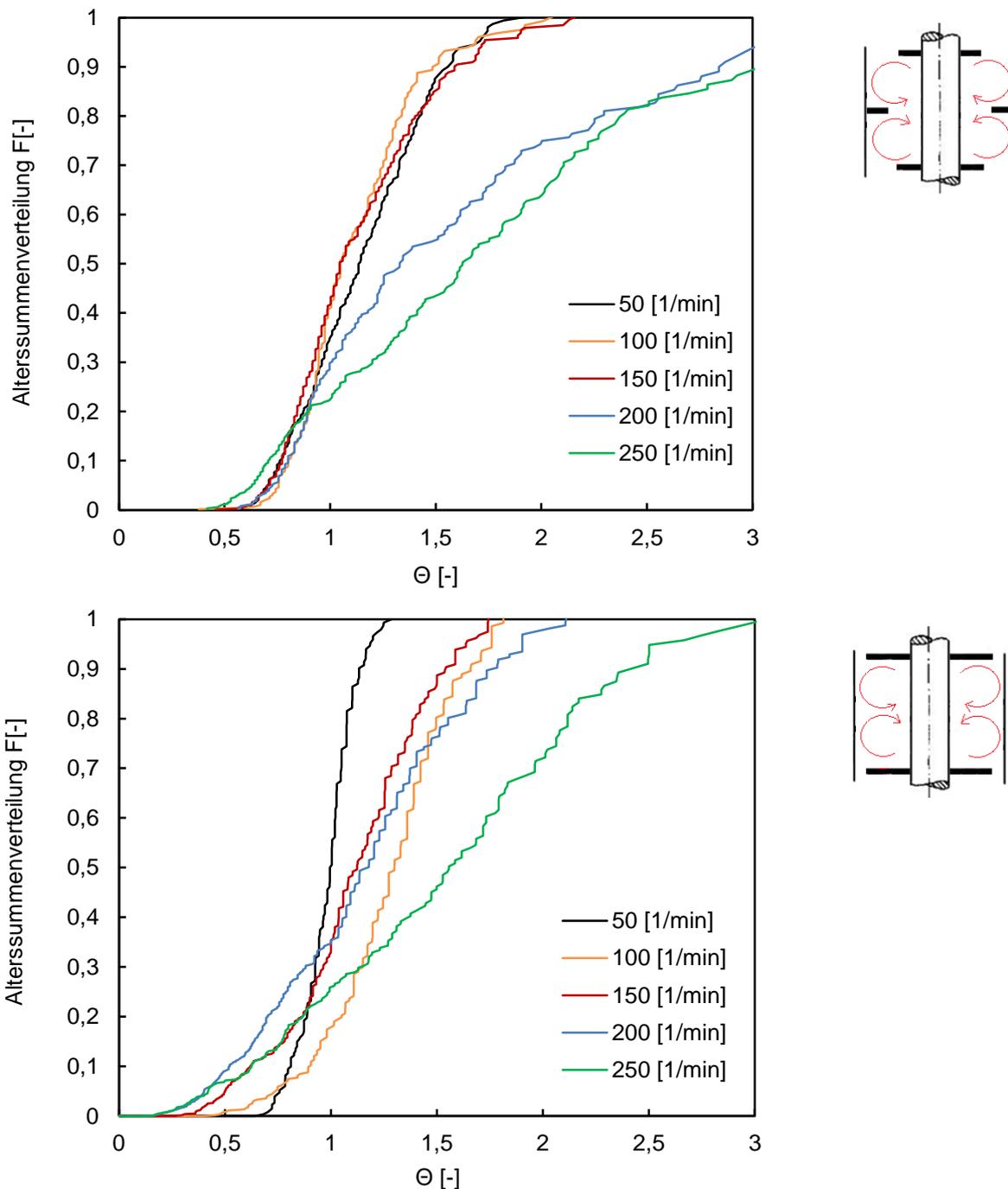
Die oberen Betriebsgrenzen (Flutgrenzen) wurden durch schrittweises Erhöhen der Drehzahl bei gegebener Gesamtbelastung und gegebenem Phasenverhältnis ermittelt.

#### 4.3.1.1 Untere Betriebsgrenze

Als untere Betriebsgrenze soll im Folgenden jene kritische Drehzahl verstanden werden, bei der die Schleppkraft der Toruswirbel gegenüber der freien Auftriebskraft der Tropfen dominiert und sich signifikant auf deren mittlere Sedimentationsgeschwindigkeit auswirkt. Unterhalb jener kritischen Drehzahl werden Tropfentrajektorien nicht maßgeblich beeinflusst, die resultierende spiralförmige Tropfenbahn unterscheidet sich in der Länge nur unwesentlich vom freien Sedimentationspfad einer Sprühkolonne ohne Energieeintrag. Erst durch den wiederholten radialen Tropfenmitriss durch die Toruswirbel wird die Tropfenbahn entscheidend verlängert und die mittlere Verweilzeit erhöht. Dieser sichtbare Umschlagspunkt des Strömungsregimes soll als Beginn des Betriebsbereiches gesehen werden.

In Abbildung 4-3 ist die Alterssummenverteilung von PP-Kugeln mit 2 mm Durchmesser für beide geometrischen Konfigurationen dargestellt. Bei 50 [1/min] (schwarze Linien) ist der Betriebsbereich in beiden Ausführungen noch nicht eingestellt. Der flachere Verlauf im klassischen Design ist auf die bremsende Wirkung der Statorscheiben zurückzuführen, die auch im schwach gerührten Zustand unabhängig von der Tropfengröße eine alternierende Tropfenbahn zwischen Rotor- und Statorscheiben erzwingen. Im TCDC ist der Verlauf

signifikant steiler und beschreibt das Verweilzeitverhalten eines Rohrreaktors<sup>22</sup>. Tropfen sedimentieren ungehindert in einer spiralförmigen Bahn im Bereich zwischen Rotorscheiben und Außenwand.

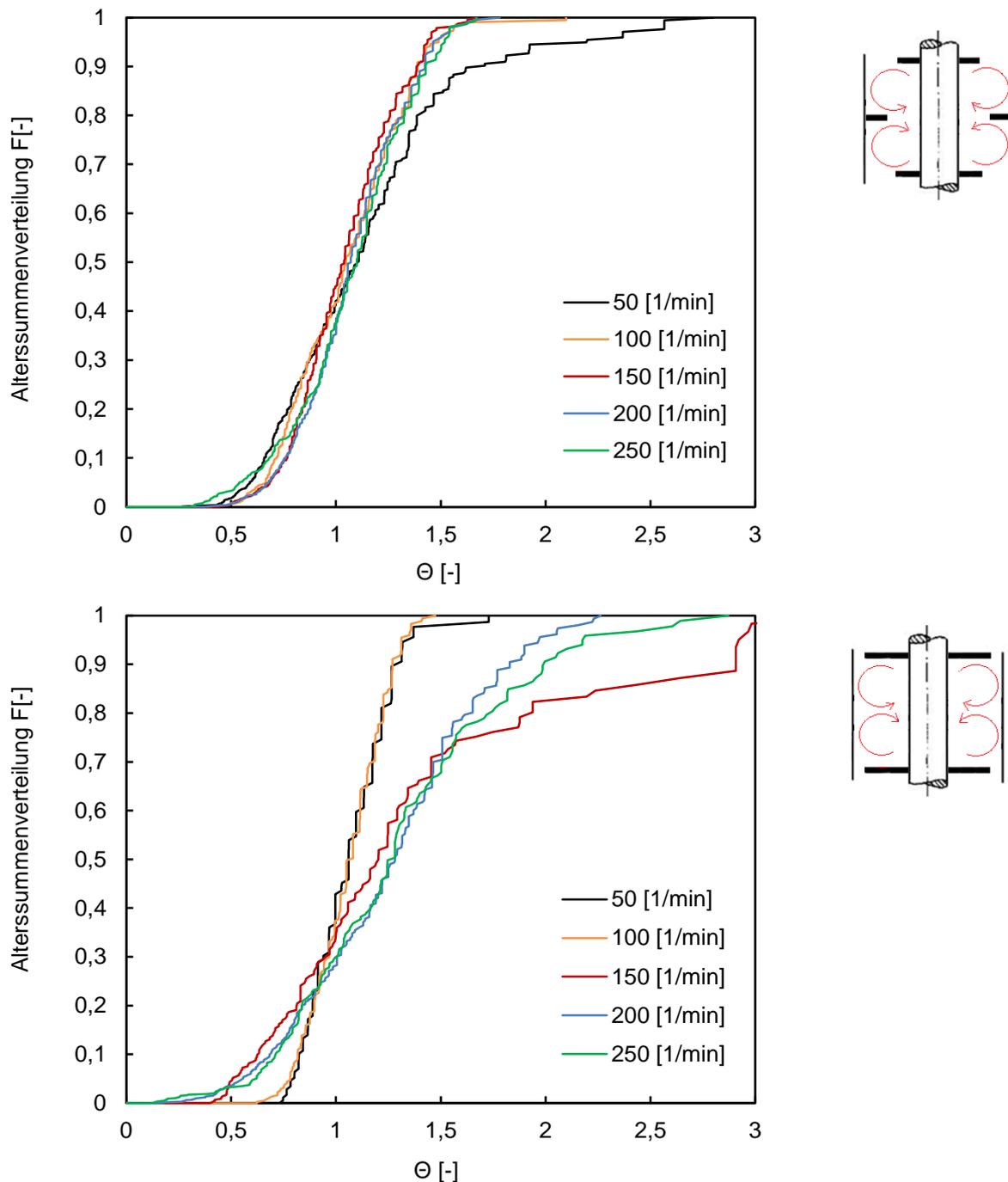


**Abbildung 4-3: Alterssummenverteilung  $F(\Theta)$  pro Compartment in Abhängigkeit von der Drehzahl, 2 [mm]-Kugeln, unten: TCDC, oben: RDC.**

Die schrittweise Erhöhung der Drehzahl um jeweils 50 [1/min] bewirkt in der klassischen Ausführung erst ab 200 [1/min] (blaue Kurve) eine signifikante Änderung des Verweilzeitverhaltens, im TCDC kann dies schon bei 100 [1/min] beobachtet werden (orange Kurve).

<sup>22</sup> Entspricht ~50 in Serie geschalteten Rührkesseln im Kaskadenmodell (*tank in series model*)

Dieses Ergebnis zeigt, dass die radiale Durchmischung der dispersen Phase im TCDC bei geringeren Drehzahlen realisiert werden kann bzw. der Betriebsbereich bei geringerem Energieeintrag aufrechterhalten werden kann.

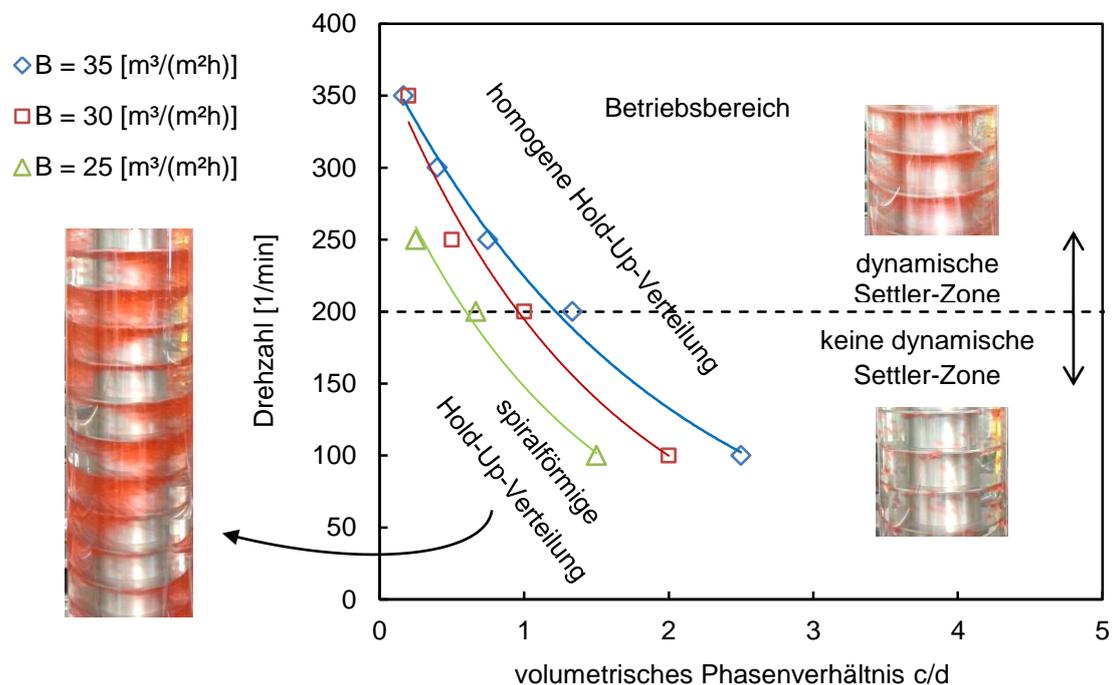


**Abbildung 4-4: Alterssummenverteilung  $F(\Theta)$  pro Compartment in Abhängigkeit von der Drehzahl, 2,5 [mm]-Kugeln, unten: TCDC, oben: RDC.**

Bei Vergrößerung des Kugeldurchmessers auf 2,5 [mm] kann in der klassischen RDC-Geometrie im untersuchten unteren Drehzahlbereich kein Regimewechsel beobachtet werden (Abbildung 4-4, oben), alle untersuchten Drehzahlen sind unter dem Betriebsbereich. Im Gegensatz dazu kann die erhöhte Auftriebskraft der 2,5 [mm]-Kugeln im TCDC bereits bei

150 [1/min] überwunden werden (Abbildung 4-4, unten). Diese experimentellen Ergebnisse verdeutlichen die erhöhte Schleppkraft (*drag force*) der geometrisch gestützten *Taylor-Couette*-Wirbel bei Sedimentationsversuchen starrer Einzeltropfen, d.h. bei vernachlässigbar niedrigem Hold-Up.

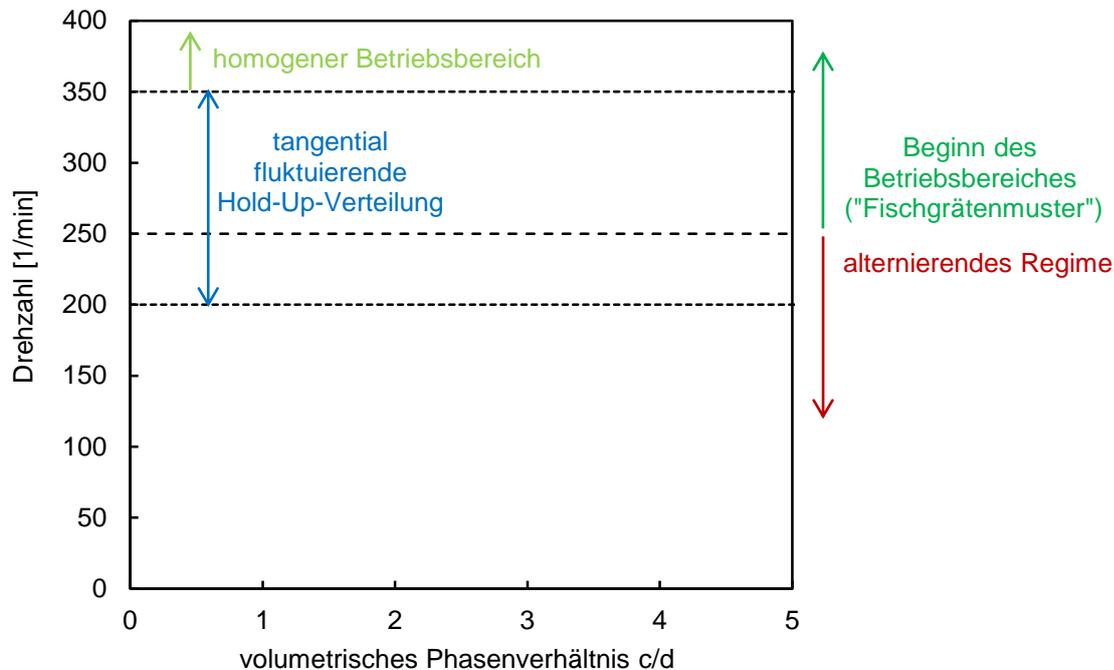
Auf die Stabilität des TCDC-Strömungsregimes bei Überlagerung mit einem dispersen Tropfenschwarm kann nach Auswertung der Videodokumentation der hydrodynamischen Belastungsversuche (Kapitel 4.3.1.2) geschlussfolgert werden. In Abbildung 4-5 ist eine Einteilung der frei unterscheidbaren Strömungsregime des untersuchten TCDC100 in Abhängigkeit von der Drehzahl, der Gesamtbelastung und dem volumetrischen Phasenverhältnisses dargestellt. Betrachtet man die Ausbildung dynamischer Settler-Zonen als den Beginn des Betriebsbereiches, so muss unabhängig vom volumetrischen Phasenverhältnis eine stoffsystemabhängige kritische Drehzahl ( $\sim 200$  [1/min], schwarze Linie) überschritten werden. Für die tangentielle Homogenverteilung des Hold-Up, muss in Abhängigkeit von der Gesamtbelastung und dem Phasenverhältnisses (farbige Kurven in Abbildung 4-5) eine weitere kritische Drehzahl überschritten werden. Unterhalb jener Grenze wird eine spiralförmige Bahn der dispersen Phase induziert. Dieses Verhalten deckt sich mit den Beobachtungen, die von DAVIS & WEBER [17] am klassischen TC-Reaktor im unteren Drehzahlbereich gemacht wurden (Abbildung 1-5).



**Abbildung 4-5: Einteilung der Strömungsregime des TCDC100 im unteren Drehzahlbereich in Abhängigkeit von der Gesamtbelastung B und dem Phasenverhältnis.**

Die spiralförmige Hold-up Verteilung im TCDC unterstreicht die hydrodynamische Ähnlichkeit zum klassischen *Taylor-Couette*-Regime, das im TCDC trotz bzw. wegen der geometrischen Eingriffe aufrechterhalten werden kann.

Im klassischen RDC hingegen, kann im festen Drehzahlbereich zwischen 200 [1/min] und 350 [1/min] eine tangentielle Fluktuation der Hold-Up-Verteilung beobachtet werden (Abbildung 4-6). Diese pulsierende Ungleichverteilung ist wegen der strombrechenden Wirkung der Statorhülsen weniger geordnet als im TCDC und kann im genannten Drehzahlbereich weitestgehend unabhängig von Belastung oder Phasenverhältnis beobachtet werden.



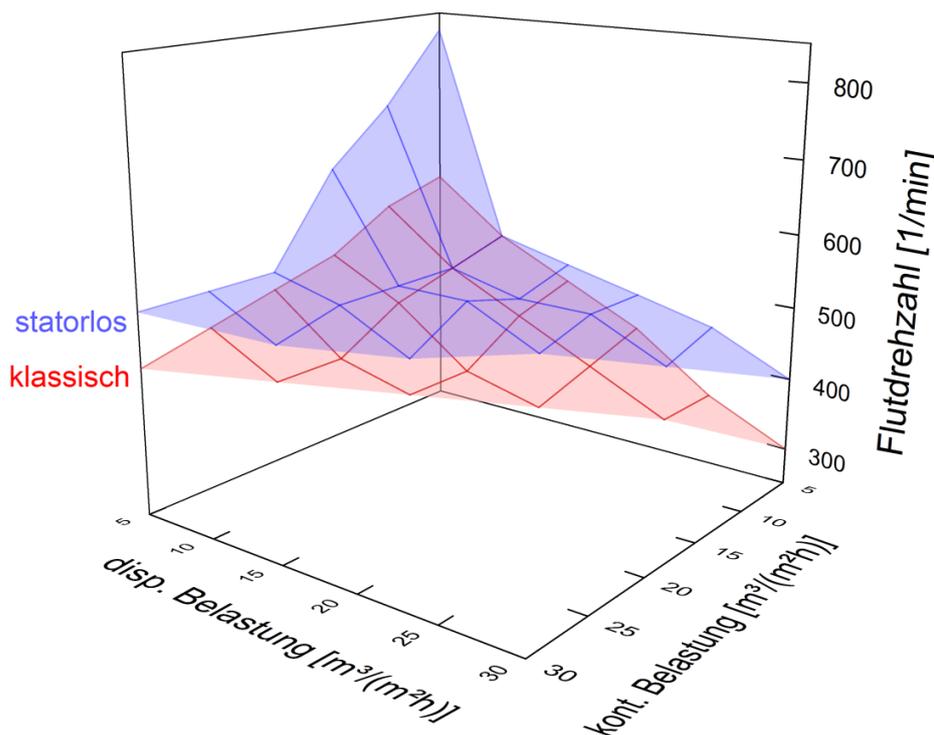
**Abbildung 4-6: Strömungsregime des klassischen RDC bei niedrigen Drehzahlen und hydraulischen Belastungen zwischen 25 [m<sup>3</sup>/(m<sup>2</sup>h)] und 35 [m<sup>3</sup>/(m<sup>2</sup>h)].**

Unterhalb von ~250 [1/min] wird, analog zum Einzeltropfenexperiment, ein Strömungsregime beobachtet, bei dem die disperse Phase alternierend gegen Rotor- bzw. Statorscheiben prallt. Die Funktion der Toruswirbel wird in diesem Bereich nicht ausgenutzt, der Apparat befindet sich noch nicht im Betriebszustand. Ab ~250 [1/min] beginnt die Ausbildung des gewünschten „Fischgrättermusters“, bei dem Tropfen auch entgegen der freien Sedimentationsrichtung vom Toruswirbel mitgerissen werden. Bis zu der Drehzahl von ~350 [1/min] ist das gewünschte Tropfenbild mit der tangentialen Fluktuation des Hold-Up überlagert. Streng genommen kann erst ab dieser kritischen Drehzahl vom erwünschten homogenen Betriebsbereich gesprochen werden.

Sowohl das Verweilzeitverhalten starrer Einzelkugeln, als auch die Regimewechsel bei Zweiphasenströmung, verdeutlichen den Beginn des Betriebsbereiches bei geringeren Drehzahlen bzw. bei niedrigerem Energieeintrag im Taylor-Couette-Disc-Contactactor.

### 4.3.1.2 Obere Betriebsgrenze (Flutpunkt)

Die Flutgrenzen wurden in hydraulischen Belastungsversuchen mit dem Stoffsystem *ShellsoT*-Wasser (Tabelle 2.5) ohne Stoffaustausch verglichen. Nach Vorlage konstanter Volumenströme wurde die Drehzahl in Schritten von 25 [1/min] erhöht. Die axiale Lageänderung der Phasengrenze  $\Delta h$ , die als Maß für den dispers vorliegenden Anteil des Hold-Up interpretiert werden kann, wurde nach Erreichen stationärer Strömungsverhältnisse protokolliert. Die Lage des Hosenrohres (Abbildung 2-3), welche die initiale Lage der Grenzfläche festlegt, wurde über die gesamte Versuchsreihe konstant gehalten. Als Flutgrenze soll jene Drehzahl verstanden werden, bei der keine konstante Position der Grenzfläche im Kolonnenkopf erzielbar ist und somit zum Austrag der spezifisch schwereren Phase am Kolonnenkopf führt. Eine Übersicht zu den hydraulischen Belastungsversuchen ist im Anhang, in Tabelle 8.11 und Tabelle 8.12, zusammengefasst. Abbildung 4-7 zeigt die Flutdrehzahlen in Abhängigkeit der hydraulischen Phasenbelastungen im untersuchten Bereich bis 35 [m<sup>3</sup>/(m<sup>2</sup>h)] Gesamtbelastung.



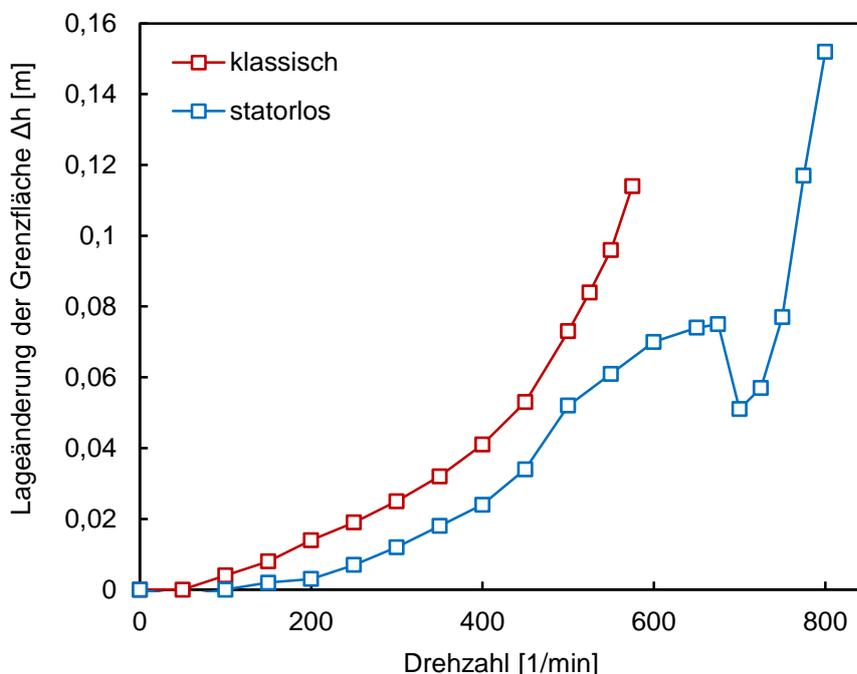
**Abbildung 4-7: Experimenteller Vergleich der Flutdrehzahlen in Abhängigkeit der Phasenbelastungen.**

Es ist ersichtlich, dass der TCDC (blaues Netz) über den gesamten technisch relevanten Belastungsbereich bei deutlich höheren Energieeinträgen (gleichbedeutend mit geringeren mittleren Tropfendurchmessern) betrieben werden kann. Für den industriellen Einsatz bedeutet dies höhere Eignung für den Einsatz von Stoffsystemen mit niedriger Grenzflächenspannung oder hoher Emulsionsneigung.

Die höhere Flutgrenze des TCDC kann auf zwei wesentliche Betriebscharakteristiken zurückgeführt werden:

- Einerseits bedingt die geometrische Konfiguration geringere Streuung der Tropfentrajektorien (Abbildung 3-35). Tropfen bewegen sich mit Ausnahme des Bereiches der Redispergierung an den Rotorspitzen immer im lokalen Gleichstrom mit der kontinuierlichen Phase.
- Andererseits wird durch die ständige Rekoaleszenz des Tropfenschwarmes in den dynamischen Settler-Zonen eine enge Tropfengrößenverteilung erzielt und die Ausbildung von Kleinsttropfen<sup>23</sup> im Compartment minimiert. Anreicherung von Kleinsttropfen kann im klassischen RDC beobachtet werden und begünstigt lokale Phasenumkehr und Fluten.

Während der klassische RDC über den gesamten untersuchten Betriebsbereich (rotes Netz) einen ebenen Verlauf der Flutgrenze aufweist, ist im Betrieb des TCDC mit niedriger Gesamtbelastung eine maximal betreibbare Drehzahl reproduzierbar, die den erwarteten ebenen Verlauf signifikant übersteigt (Abbildung 4-7, bei ~10 bis 15 [m<sup>3</sup>/(m<sup>2</sup>h)]). Diese Erweiterung des Betriebsbereiches kann auf die erneute Ausbildung dynamischer Settlerzonen, diesmal an den Oberseiten der Rotorscheiben, zurückgeführt werden. Dieser Effekt kann in Abbildung 4-8 am Verlauf des dispers vorliegenden Hold-Up (ausgedrückt über die Lage der Phasengrenzfläche), für 10 [m<sup>3</sup>/(m<sup>2</sup>h)] verdeutlicht werden.



**Abbildung 4-8: Experimenteller Vergleich der Lageänderung der Phasengrenzfläche in Abhängigkeit von der Drehzahl bei geringer hydraulischer Belastung,  $B_{\text{total}} = 10 \text{ [m}^3\text{/(m}^2\text{h)]}$ ,  $w/o=1$ .**

<sup>23</sup> d.h. Tropfen, deren Auftriebskraft nicht für die freie Sedimentation im Gegenstrom ausreicht.

Am Hold-Up-Verlauf der statorlosen TCDC-Ausführung ist ein sprunghafter Einbruch zu beobachten. Analog zur Ausbildung von Settler-Zonen an der Rotorunterseite, nach Überschreiten der ersten kritischen Drehzahl von  $n \sim 200$  [1/min] (Abbildung 4-5 bzw. Abbildung 4-9), werden nach Überschreiten der zweiten kritischen Drehzahl von  $n \sim 700$  [1/min] die Ecken an der Rotoroberseite ebenfalls mit der spezifisch leichteren Phase aufgefüllt. Die Lage der Grenzfläche im Kolonnenkopf repräsentiert nur den dispers vorliegenden Anteil des Hold-Up<sup>24</sup>. Jener Anteil der dispersen Phase, der in den dynamischen Settlerzonen gestaut ist, wird vom Druckgleichgewicht mit dem Hosenrohr (Abbildung 2-3) nicht erfasst und ist daher von der Grenzflächenposition nicht repräsentiert. Obiger Effekt wird beim Durchschreiten der kritischen Drehzahl sichtbar, der Übergang der Tropfen aus der Dispersion in die dynamischen Settlerzonen wirkt sich als sprunghafte Reduktion des Dispersphasen-Hold-Up aus. Dieser ist nach Überschreiten der zweiten kritischen Drehzahl wesentlich stärker von der Drehzahl abhängig (Abbildung 4-8).

Durch Ausbildung der zweiten dynamischen Settlerzone bei geringer Gesamtbelastung kann stationärer Betrieb mit deutlich höherem Energieeintrag ( $+200$  [1/min]) und höherem Hold-Up realisiert werden.

Der Vergleich bei hoher Gesamtbelastung ( $35$  [ $\text{m}^3/(\text{m}^2\text{h})$ ]) ist in Abbildung 4-9 und Abbildung 4-10 dargestellt. Die Hold-Up-Verläufe der klassischen RDC-Geometrie weisen überwiegend exponentiellen Charakter auf. Aus Sicht der Prozessregelung und der Berechenbarkeit des Apparates ist aber eine möglichst linearere Abhängigkeit von der Drehzahl erwünscht. Dies ist in der klassischen RDC-Ausführung nur bei hohem volumetrischen Phasenverhältnis  $c/d$ , d.h. bei vielfachem Überschuss der kontinuierlichen Phase (gelbe und schwarze Verläufe in Abbildung 4-10) erzielbar. In diesem Betriebszustand können die höchsten Hold-Up-Werte und die höchsten Drehzahlen realisiert werden. Für die übrigen Verläufe können in Übereinstimmung mit den Erkenntnissen aus Kapitel 4.3.3.1 die Scheitelpunkte der Hold-Up-Verläufe als Beginn des Betriebsbereiches interpretiert werden. (siehe Abbildung 4-6: Ausbildung des „Fischgrätmusters“ ab  $n \sim 250$  [1/min]).

Die Verläufe im TCDC sind über den gesamten Betriebsbereich weniger gekrümmt. Ausnahmen bilden die Einbrüche der Hold-Up-Verläufe bei  $n \sim 200$  [1/min] und Überschuss der dispersen Phase (grüne und violette Kurven in Abbildung 4-9). Sie markieren die erste kritische Drehzahl, ab der dynamische Settler-Zonen ausgebildet werden (Vergleiche Abbildung 4-5). Bei Erhöhung des volumetrischen Phasenverhältnisses  $c/d$  geschieht der Übergang fließend, die charakteristischen Einbrüche können am Hold-Up-Verlauf nicht mehr abgelesen werden.

Im Gegensatz zum klassischen RDC, werden die höchsten Hold-Up-Werte bei äquivolumetrischer Belastung,  $c/d \sim 1$ , erzielt. Im Betrieb mit hohem Überschuss an

---

<sup>24</sup> bzw. nur jenen Anteil der dispersen Phase, der nicht im Kontakt zu Wänden oder Einbauten steht.

kontinuierlicher Phase kann analog zum klassischen RDC eine Stabilisierung der Wirbel und eine Erhöhung der Flutgrenze erzielt werden. Gegenüber der klassischen Ausführung ist diese beim TCDC im gesamten untersuchten Belastungsbereich um 50-100 [1/min] erhöht.

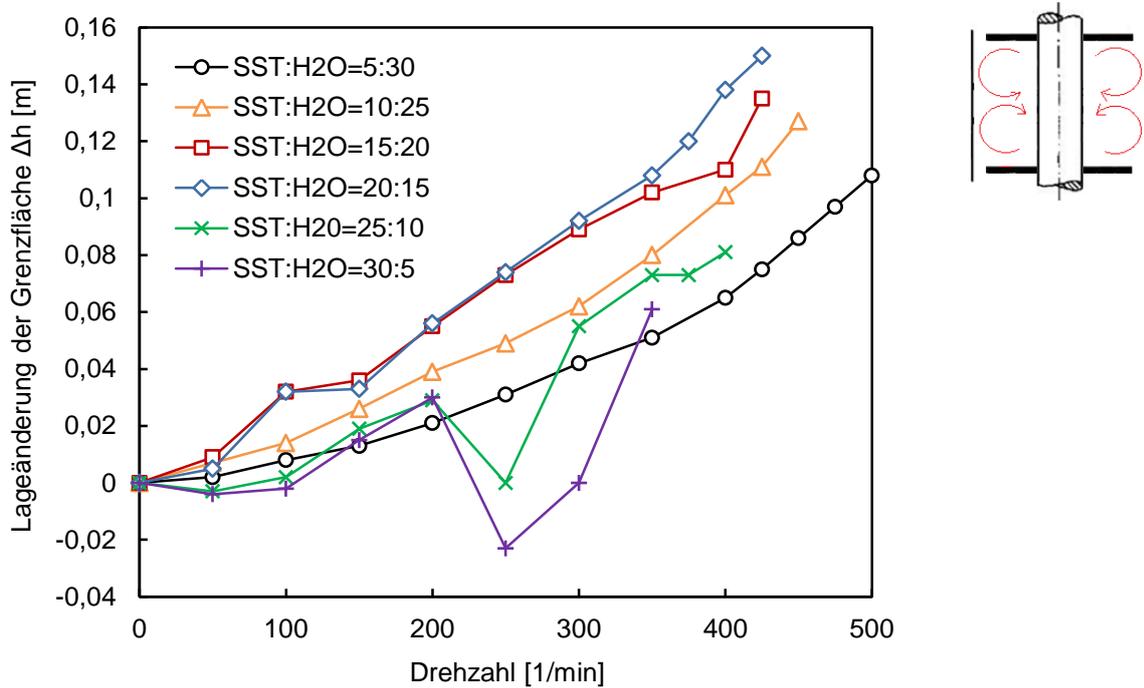


Abbildung 4-9: Bewegung der Grenzfläche im TCDC in Abhängigkeit von der Drehzahl und dem Phasenverhältnis bei hoher hydraulischer Belastung,  $B_{\text{total}} = 35 \text{ [m}^3\text{/(m}^2\text{h)]}$ .

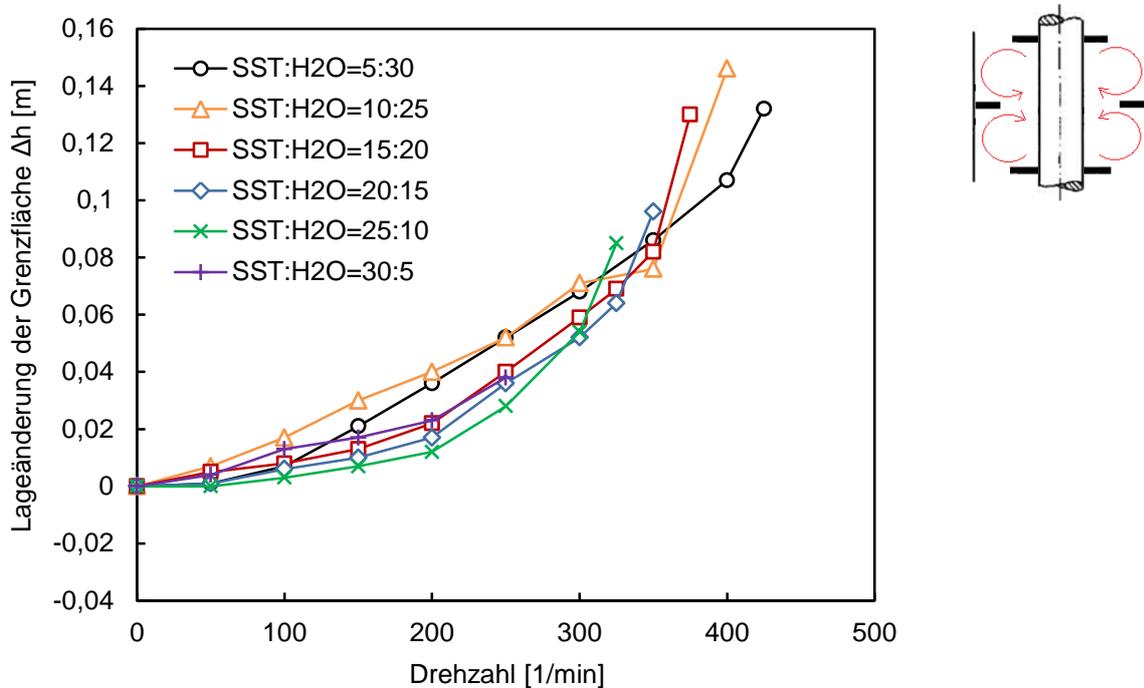


Abbildung 4-10: Bewegung der Grenzfläche im RDC in Abhängigkeit von der Drehzahl und dem Phasenverhältnis bei hoher hydraulischer Belastung,  $B_{\text{total}} = 35 \text{ [m}^3\text{/(m}^2\text{h)]}$ .

### 4.3.2 Vergleich der Tropfengrößenverteilung (TGV)

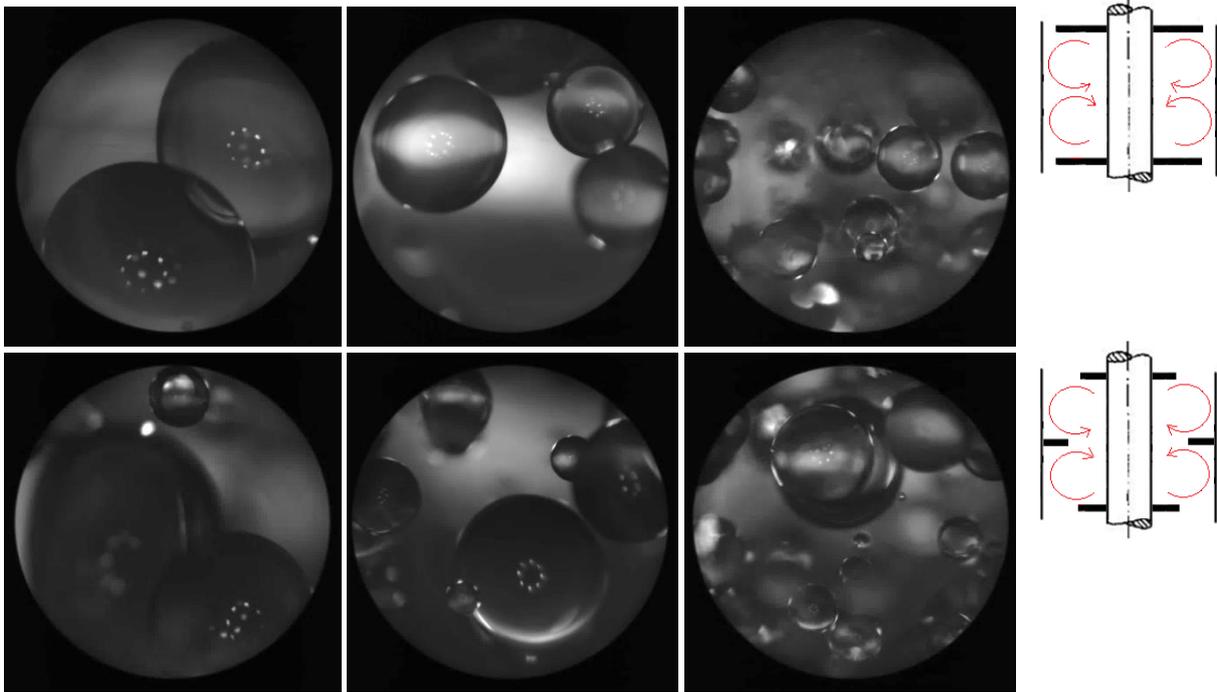
Die Messung der Tropfengrößenverteilung wurde mit einer Messsonde der Firma *SOPAT GmbH* durchgeführt. Die Sonde, bestehend aus einem Endoskop (DN12) mit integrierter Kamera und gekoppeltem Belichtungssystem [87], wurde am Einlass der kontinuierlichen Phase angebracht. Um hydrodynamische Einflüsse der invasiven Messsonde auf die Toruswirbel zu vermeiden, wurde die Messung nicht im Compartment, sondern in wandnaher Bulkströmung des Kolonnenkopfes nach 1 [m] aktiver Höhe durchgeführt. Die Anordnung wurde für beide Konfigurationen (RDC und TCDC) ident ausgeführt (Abbildung 4-11).



**Abbildung 4-11: Versuchsaufbau der endoskopischen TGV-Messung nach 1[m] aktiver Höhe.**

Die Auswertung des digitalen Bildmaterials (2477 x 1980 bei 5 fps) erfolgte nach Erstellung gemittelter Bilder (analog zu PIV, siehe Kapitel 2.3.2) mit der Auswertungssoftware von *SOPAT*. Durch den automatisierten *Pattern-Matching*-Algorithmus [94] war es möglich eine große Anzahl an Tropfen auszuwerten, ~17.000 insgesamt bei mindestens 2500 Tropfen pro Betriebspunkt. Die Versuche wurden einerseits bei konstanter Belastung ( $B = 20 \text{ [m}^3/(\text{m}^2\text{h})]$ ) und Variation der Rührintensität (250, 350, 450 und  $500 \text{ [1/min]}$ )<sup>25</sup> und andererseits bei konstanter Drehzahl (450 [1/min]) und Variation der Kolonnenbelastung (15, 20 und  $25 \text{ [m}^3/(\text{m}^2\text{h})]$ ) durchgeführt. Für alle TGV-Messungen wurde äquivolumetrisches Phasenverhältnis,  $c/d = 1$ , mit dem Stoffsystem *Shellsol-T/Wasser* gewählt. Anhand der Volumsverteilungen  $q_3$  und  $Q_3$  sollen im Folgenden die Messergebnisse verglichen und diskutiert werden. Die gemessenen Anzahlverteilungen  $q_0$  sowie die charakteristischen Kenngrößen ( $d_{10}$ ,  $d_{32}$ ,  $d_{43}$ , etc.) sind im Anhang tabellarisch zusammengefasst (Kapitel 8.3.2). Abbildung 4-12 zeigt beispielhaft Aufnahmen der Messsonde bei Variation der Drehzahl für beide Konfigurationen.

<sup>25</sup> 500[1/min] konnte im klassischen RDC wegen Fluten nicht vermessen werden.

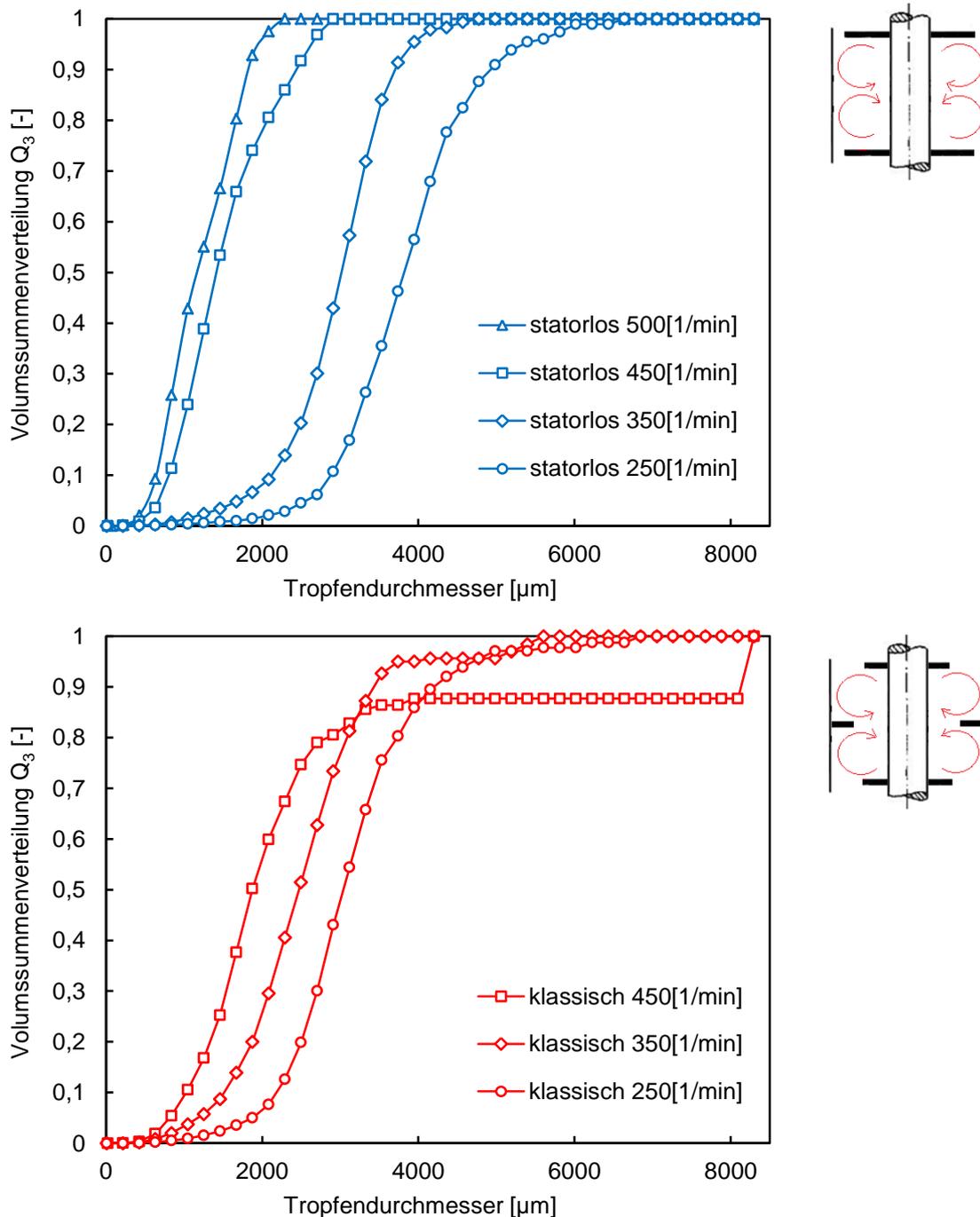


**Abbildung 4-12: Beispielhafte Aufnahmen der Messsonde bei 250 [1/min], 350 [1/min] und 450 [1/min],  $B = 20$  [m<sup>3</sup>/(m<sup>2</sup>h)],  $c/d=1$ .**

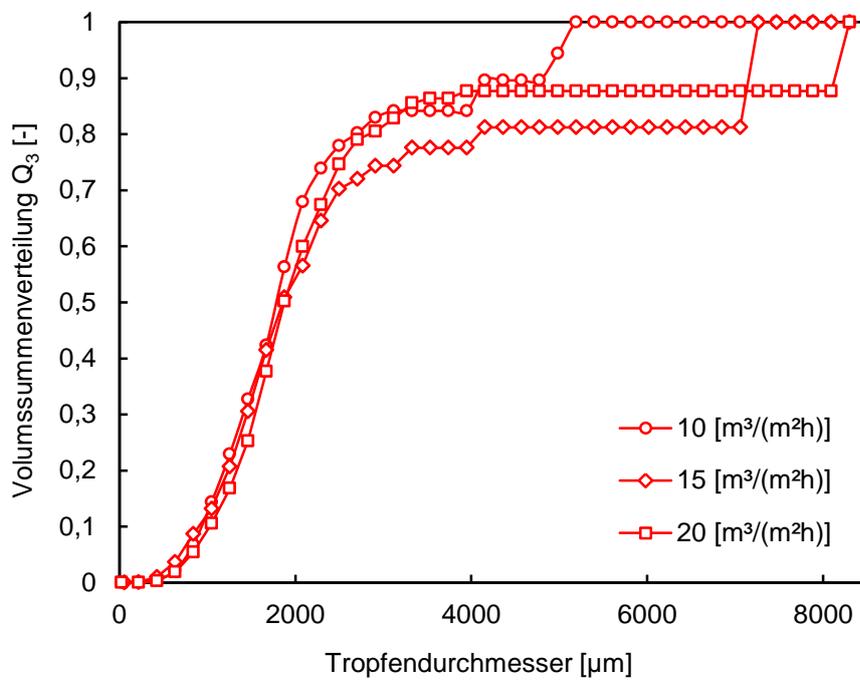
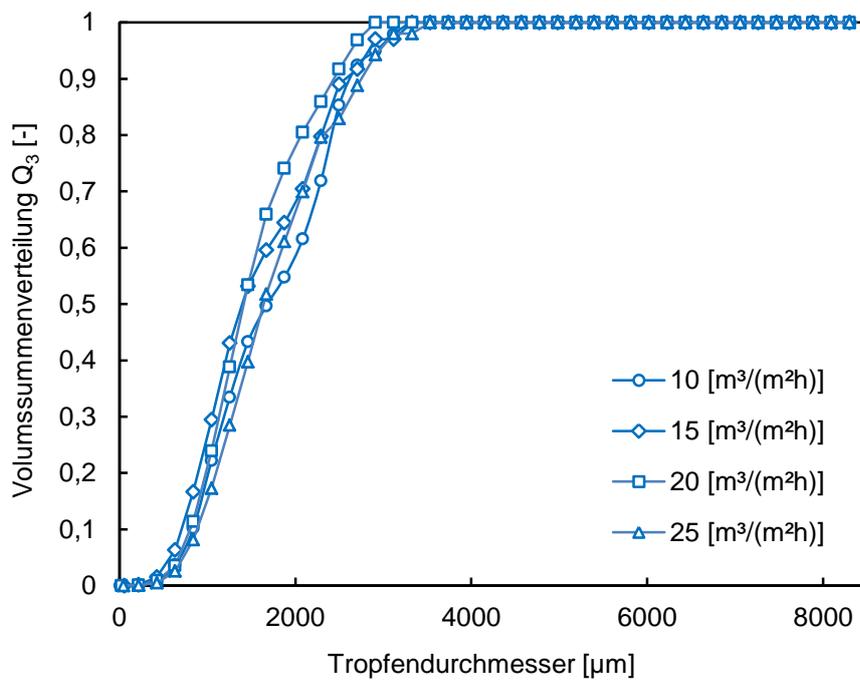
Die frei beobachtbare und mit CFD-Simulationen vorhergesagte (Kapitel 3.2.1.3) engere Tropfengröße des Taylor-Couette-Disc-Contactors konnte durch Aufnahmen mit der minimal invasiven Messsonde bestätigt werden. Die quantitative Auswertung des digitalen Bildmaterials ist in Form von Volumenverteilungsfunktionen  $q_3$  und  $Q_3$  in Abbildung 4-13 bis Abbildung 4-16 gegenübergestellt. Die Verschiebung der TGV zu kleineren Durchmessern mit erhöhtem Energieeintrag konnte für beide Konfigurationen erwartet und beobachtet werden. Unerwartet ist dagegen die Beobachtung, dass die Tropfengrößenverteilungen des klassischen RDC im niedrigeren Drehzahlbereich (250 [1/min] und 350 [1/min]) zu niedrigeren Durchmessern verschoben sind, obwohl der Energieeintrag der kleineren Rotorscheiben bei gleicher Drehzahl geringer ist. Diese Beobachtung kann auf die tropfenbrechende Wirkung der Statorscheiben zurückgeführt werden. Die Tropfenzerteilung des RDC-Stators ist aber aufgrund der Vielzahl möglicher Aufprallbedingungen weit weniger geordnet, als die geometrisch geleitete Tropfendispergierung an der Rotorspitze des TCDC. Dies kann mit der Breite (beispielsweise, die maximal auftretenden Tropfendurchmesser) aller gemessenen Volumenverteilungen bestätigt werden. Der auffallende Peak der  $q_3$ -Verteilung des klassischen RDC bei 450 [1/min] stellt keinen Ausreißer des Auswertungsalgorithmus dar, vielmehr unterstreicht er das Vorhandensein einer bimodalen Verteilung in der klassischen RDC-Ausführung. Überproportional große Tropfen von bis zu ~10mm Durchmesser, die sowohl wegen der Form<sup>26</sup> als auch wegen ihrer Größe außerhalb

<sup>26</sup> Die Erfassung nicht-runder Partikel ist Gegenstand aktueller Entwicklungen der Firma SOPAT und stand zum Zeitpunkt der Messung nicht zur Verfügung.

des Messbereiches der Sonde ( $<9000 \text{ } [\mu\text{m}]$ ) lagen, konnten in allen Betriebszuständen des klassischen RDC mit freiem Auge bei stationärem Betrieb beobachtet werden. Durch die punktuelle Messanordnung erfordert die Erfassung von Tropfen dieser Größenordnung einen weit höheren experimentellen Aufwand. Beispielsweise konnte im Betriebszustand  $450 \text{ } [1/\text{min}]$  und  $B = 20 \text{ } [\text{m}^3/(\text{m}^2\text{h})]$  bei  $\sim 2500$  ausgewerteten Tropfen nur ein einziger Tropfen mit  $>8 \text{ } [\text{mm}]$  Durchmesser erfasst werden. Wie in Abbildung 4-13 ersichtlich, ist der effizienz-mindernde Einfluss dieses Tropfens enorm, er macht etwa 10% des untersuchten Schwarmvolumens aus.



**Abbildung 4-13: Vergleich der Volumssummenverteilungen  $Q_3$  bei Variation der Drehzahl,  $B = 20 \text{ } [\text{m}^3/(\text{m}^2\text{h})]$  und äquivolumetrischem Phasenverhältnis  $c/d = 1$ , klassisches Design (unten), statorloses Design (oben).**



**Abbildung 4-14: Vergleich der Volumssummenverteilungen  $Q_3$  bei Variation der Belastung, 450 [1/min] und äquivolumetrischem Phasenverhältnis  $c/d = 1$ , klassisches Design (unten), statorloses Design (oben).**

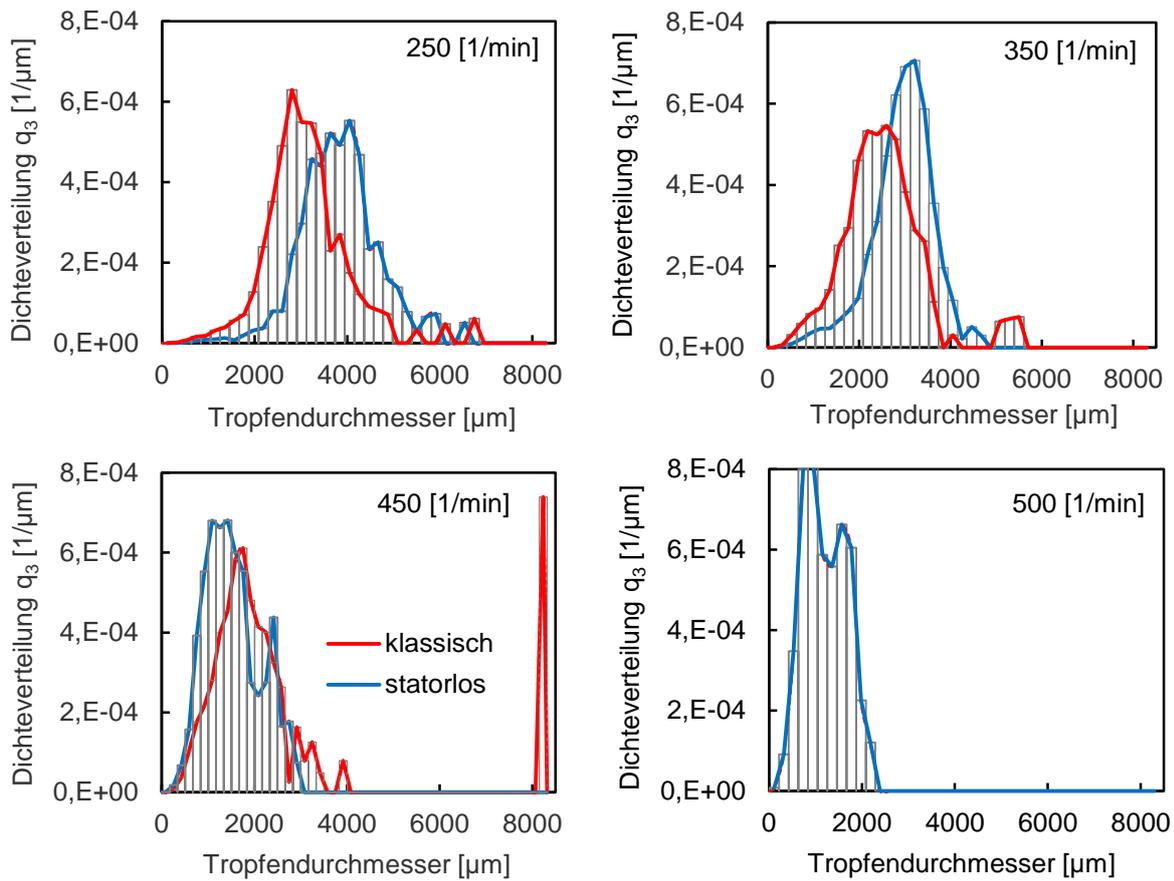


Abbildung 4-15: Vergleich der Volumsdichteverteilungen  $q_3$  bei Variation der Drehzahl,  $B = 20$  [ $\text{m}^3/(\text{m}^2\text{h})$ ] und äquivolumetrischen Phasenverhältnis  $c/d=1$ .

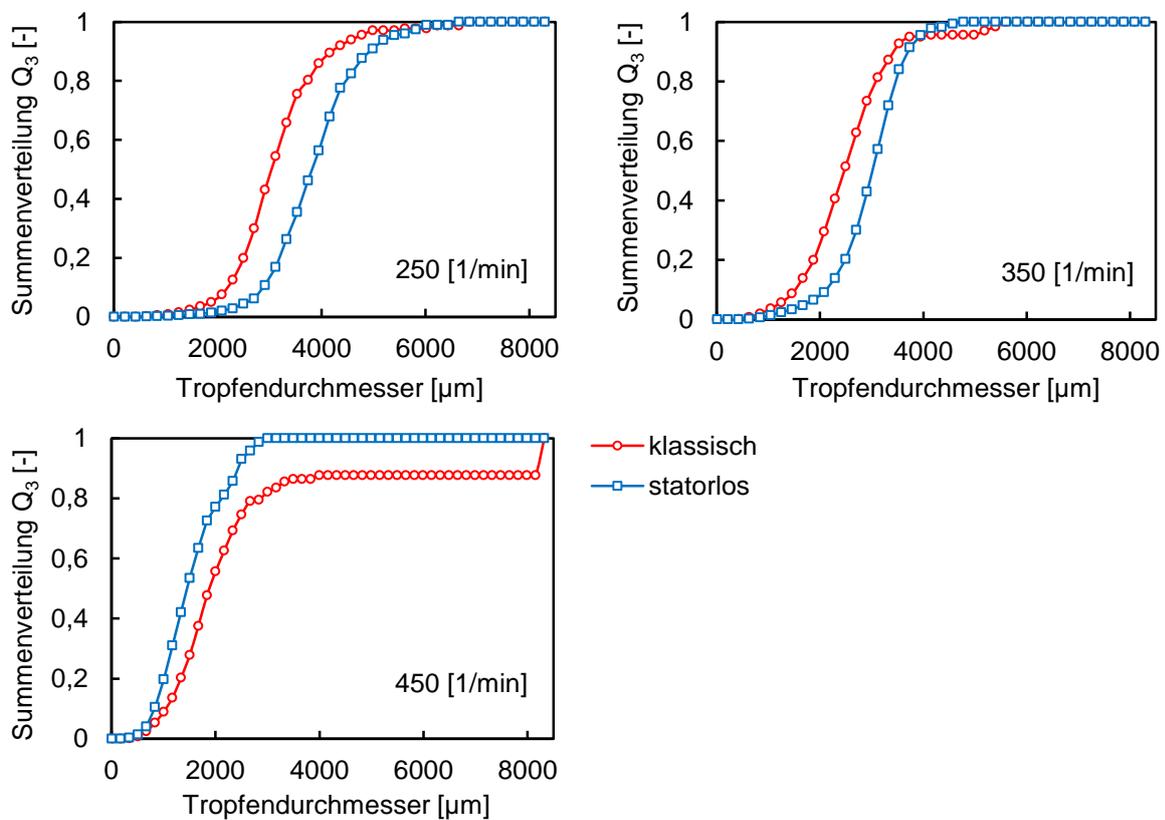
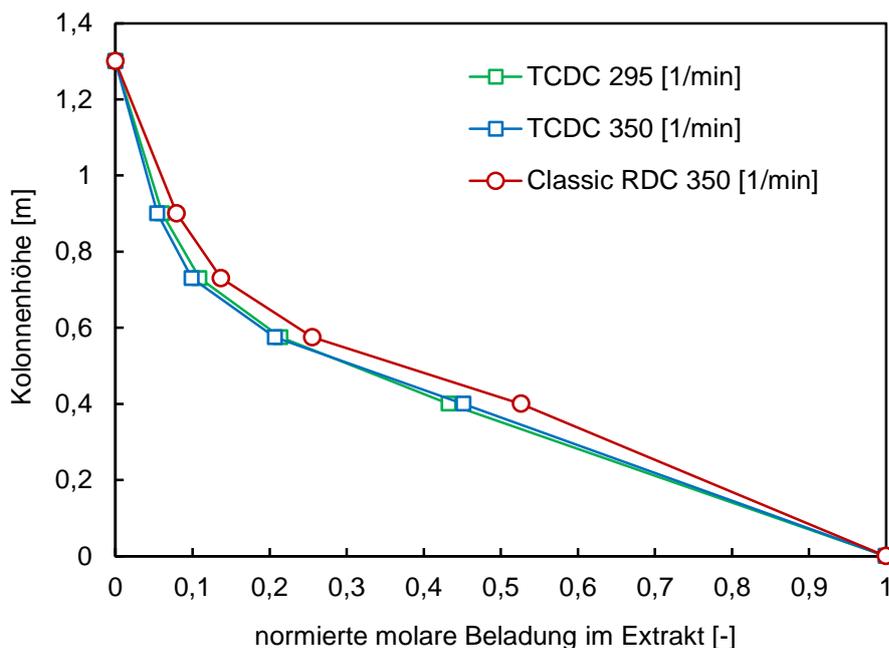


Abbildung 4-16: Vergleich der Volumssummenverteilungen  $Q_3$  bei Variation der Drehzahl,  $B = 20$  [ $\text{m}^3/(\text{m}^2\text{h})$ ] und äquivolumetrischen Phasenverhältnis  $c/d=1$ .

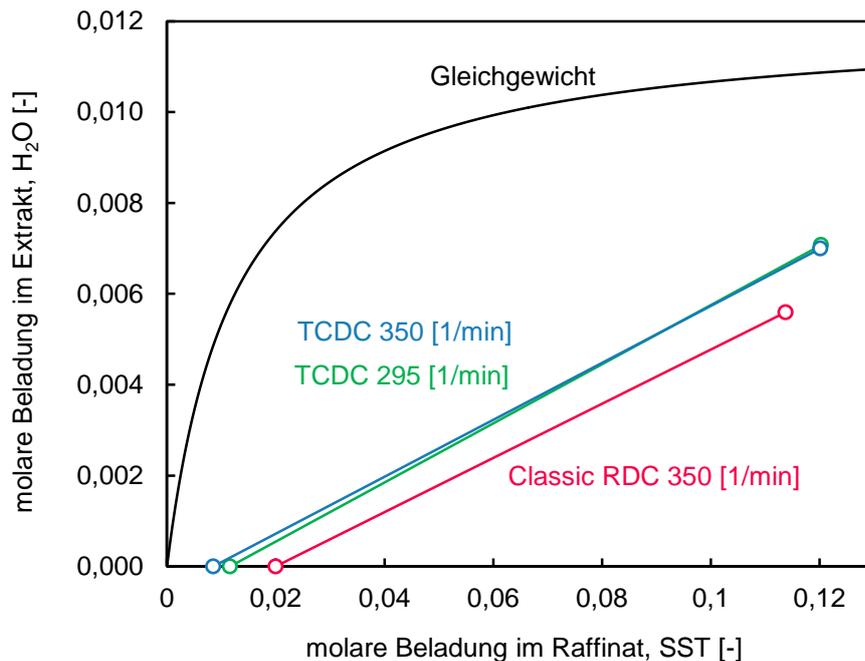
### 4.3.3 Vergleich der Trenneffizienz

Die vergleichenden Stoffaustauschversuche wurden unter gleichen Randbedingungen wie in Kapitel 2.5 durchgeführt (Stoffsystem *ShellsoT/n*-Butanol/Wasser, Stoffaustauschrichtung  $d \rightarrow c$ ). Im Vorfeld wurde eine Reihe von Stoffaustausch-versuchen durchgeführt, um einerseits die Dauer zum Erreichen des stationären Zustandes abzuschätzen und andererseits die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse sicherzustellen. Nach Erreichen des stationären Betriebszustandes ( $\sim 70$  [min]) wurden an den Ein- und Auslässen von beiden Phasen Proben entnommen. Entlang der aktiven Höhe standen vier Probenahmestellen für die kontinuierliche Phase zur Verfügung, welche für den Vergleich des Beladungsprofils herangezogen wurden. Über die Beladung der dispersen Phase kann im aktiven Kolonnenenteil keine Aussage gemacht werden, da die momentane lokale Beladung nur durch einphasige Probenahme bestimmt werden kann. Dies war bei der dispersen Phase nur vor der Dispergierung (Eintritt) und nach der Phasentrennung (Austritt) möglich. Die reale gekrümmte Form der Betriebslinie (Abbildung 1-10) konnte nicht berücksichtigt werden, die HTU- und die NTU-Werte wurden daher unter Annahme idealer Betriebsgeraden errechnet. Die Volumenströme wurden mit  $V_{\text{kont.}} = 45$  [l/h] und  $V_{\text{disp.}} = 40$  [l/h] konstant gehalten, was einer Gesamtkolonnenbelastung von  $14$  [ $\text{m}^3/(\text{m}^2\text{h})$ ] entspricht. Die Evaluierung wurde aufgrund der sich unterscheidenden Rotordurchmesser sowohl bei gleicher Drehzahl ( $350$  [1/min]) als auch bei gleicher Umfangsgeschwindigkeit der Rotor Spitze ( $295$  [1/min] im TCDC) durchgeführt. Im Gegensatz zu den rein hydrodynamischen Belastungsversuchen befanden sich die gewählten Drehzahlen wegen der stoffaustauschbedingt verringerten Grenzflächenspannung für beide Ausführungen im vollen Betriebsbereich.



**Abbildung 4-17: Vergleich der Beladungsverläufe in Abhängigkeit von der Höhe in der kontinuierlichen Phase.**

In Abbildung 4-17 sind die normierten Beladungsverläufe über der Kolonnenhöhe dargestellt. Die Verläufe des TCDC (grüne & blaue Kurven) variieren bei der Veränderung der Drehzahl um 55 [1/min] kaum, der Trend in Richtung höherer Trennleistung durch Energieeintrag ist erkennbar. Wesentlich größerer Unterschied kann beim Vergleich zwischen den geometrischen Konfigurationen festgestellt werden. Sowohl die Form der höhenabhängigen Beladungsverläufe in Abbildung 4-17, als auch die Verschiebung der Bilanzgeraden in Richtung Gleichgewicht (Abbildung 4-18), belegen die signifikant höhere Trennleistung des TCDC bei konstanten Versuchsbedingungen.



**Abbildung 4-18: Vergleich der Betriebsgeraden im molaren Beladungsdiagramm.**

Nach Auswertung mit dem HTU-NTU-Ansatz (Gleichung (1-16)) kann bei Kenntnis der konstanten aktiven Gesamthöhe von 1 [m] ein quantitativer Vergleich gemacht werden. Bei Annahme linearer Betriebsgeraden können für den TCDC um bis zu 35% reduzierte Werte für die Höhe einer Übertragungseinheit (HTU) berechnet werden. In Tabelle 4.1 sind die Ergebnisse der abschließenden Stoffaustauschversuche zusammengefasst.

**Tabelle 4.1: HTU-NTU-Auswertung für  $H=1[m]$ ,  $B=14[m^3/(m^2h)]$ ,  $c/d=1,1$**

	TCDC	TCDC	RDC
<b>Drehzahl</b>	<b>295 [1/min]</b>	<b>350 [1/min]</b>	<b>350 [1/min]</b>
<b>NTU</b>	2,4	2,8	1,8
<b>HTU</b>	0,42 [m]	0,35 [m]	0,55 [m]
<b>Bilanzfehler</b>	4,6%	8,2%	2,7%

## 5 Zusammenfassung

Zielsetzung dieser Arbeit war die Optimierung eines seit Jahrzehnten industriell etablierten Apparatetyps für die flüssig/flüssig-Extraktion (*Rotating Disc Contactor*, RDC) in Hinblick auf die Anwendbarkeit für biobasierte Rohstoffe. Im Wechselspiel zwischen CFD-Simulation und Experiment konnte eine Reihe von bisher nicht dokumentierten Zusammenhängen der komplexen Zweiphasenströmung von der Apparategeometrie erarbeitet werden.

Im Technikumsmaßstab (DN100) wurde die einphasige Wirbelstruktur mit *Particle-Image-Velocimetry* bei zwei Konfigurationen der Compartmenthöhe untersucht. Hohe Compartments ermöglichten je nach Drehzahl und Belastung eine axiale Verschiebung/Verzerrung der Toruswirbel. Bei geringer Compartmenthöhe dagegen konnte im Wesentlichen nur ein Wirbelmuster beobachtet werden, bei dem allerdings die Wirbeldrehrichtung stochastisch variierte und auch bei Zweiphasenströmung umschlug. Die Wirbelumkehr verursachte eine heterogene Hold-Up-Verteilung über der Kolonnenhöhe durch Tropfenakkumulation und Koaleszenz in den hydrodynamischen Totbereichen.

In Tracerversuchen mit gesättigter NaCl-Lösung konnte die wirbelstabilisierende Wirkung der geringeren Compartmenthöhe gegenüber der dispersen Phase bestätigt werden. Auch wenn die zufällige Wirbelumkehr eine Ungleichverteilung des Hold-Up und eine Reduktion der Stoffaustauschfläche bewirkte, überwog in Summe die geringere Rückvermischung der kontinuierlichen Phase für letztendlich erhöhte Trenneffizienz bei Reduktion der Compartmenthöhe. Obige Messergebnisse wurden in Folge dazu benutzt, die hydrodynamische CFD-Modellierung zu validieren und deren Vorhersagepotential für die anschließende Geometrieoptimierung zu erhöhen. Bei der Validierung der Turbulenzmodelle konnte nur das *Reynolds-Stress-Model* in Kombination mit *Enhanced Wall Treatment*, das stark verdrallte Strömungsfeld zufriedenstellend abbilden. Alle *RANS*-Turbulenzmodelle, die isotrope Turbulenz annehmen, konnten ausgeschlossen werden. Durch Anwendung des Euler-Lagrange Modells mit masselosen Partikeln und der Berücksichtigung konstruktiver Nichtidealitäten der Pilotkolonne konnte der  $D_{ax,c}$  über den gesamten Betriebsbereich in Abhängigkeit von Drehzahl und Belastung vorhergesagt werden.

In den ersten experimentell validierten Sensitivitätsanalysen der geometrischen Verhältnisse konnte eine fundamentale Vereinfachung der etablierten RDC-Ausführung als hydrodynamisch optimale Konfiguration identifiziert werden, nämlich der Wegfall von Statorscheiben bei gleichzeitiger Erhöhung der Rotordurchmesser. Diese vereinfachte Konfiguration wurde wegen der hydrodynamischen Analogie zur Taylor-Couette-Strömung als konstruktive Stützung der Wirbelstruktur interpretiert (Taylor-Couette Disc Contactor, TCDC). Anschließende Zweiphasenströmungssimulationen bestätigten einerseits die positive

Wirkung des größeren Rotordurchmessers (kleinere Tropfen und engere Verteilung), andererseits wurden die Auswirkungen zu niedrig dimensionierter Compartments bei Zweiphasenströmung deutlich. Da die elliptische Wirbelform nicht beliebig gestaucht werden kann, werden bei Unterschreitung eines kritischen Längenverhältnisses von  $H/B \sim 1,5$  Totzonen im Bereich der Welle ausgebildet, die von der spezifisch leichtere Phase aufgefüllt werden und somit das aktive Apparatvolumen reduzieren. Das hydrodynamische Minimum für den Wellendurchmesser bezüglich Wirbelstärke und Totzonenausbildung konnte unabhängig vom Apparatedurchmesser mit  $D_W \approx 0,5 D_K$  bestimmt werden. Durch die annähernd lineare Skalierung des Wellendurchmessers mit dem Kolonnendurchmesser ergibt sich für die industrielle Praxis, in der bisweilen der Wellendurchmesser ohne Berücksichtigung der Wirbeldynamik dimensioniert wurde, die ökonomische Frage nach dem maximal sinnvollen Kolonnendurchmesser. Gleichzeitig ist der unerwartet hohe Wert für das Optimum des Wellendurchmessers eine mögliche Ursache für den Einbruch der Trenneffizienz beim Scale up von gerührten Extraktionskolonnen.

Aus Erkenntnissen der validierten CFD-Simulationen konnten für den neuen Apparatetyp Designregeln abgeleitet werden, die im Gegensatz zu den in der Literatur verfügbaren Designempfehlungen für den RDC, die Compartmentgeometrie vollständig beschreiben und auf der optimalen Stützung der Wirbelstruktur basieren. Die empfohlenen Regeln wurden im direkten experimentellen Vergleich mit dem klassischen RDC bezüglich Tropfengrößenverteilung, Trennleistung und Betriebsbereich im Pilotmaßstab geprüft. Aufgrund der dynamischen Settlerzonen und der geordneten Redispergierung an den vergrößerten Rotorscheiben konnten mit dem System Shellsol-T/Wasser signifikant engere Tropfengrößenverteilungen im TCDC beobachtet werden. Stoffaustauschversuche mit der Übergangskomponente n-Butanol zeigten für den TCDC bei gleichen Versuchsbedingungen reduzierte HTU-Werte um bis zu 35%. Aufgrund der optimierten Zweiphasenströmung konnte gleichzeitig eine Verbreiterung des Betriebsbereiches beobachtet werden. Die Schleppwirkung der Toruswirbel setzte einerseits bei geringeren Drehzahlen ein, andererseits konnte die kritische Drehzahl für Fluten bei allen Belastungen und Phasenverhältnissen signifikant erhöht werden.

Mit dem Taylor-Couette Disc Contactor wurde ein neuer Apparatetyp entdeckt, der aufgrund der hydrodynamischen Eigenschaften und der elegant einfachen Konstruktion ein breites Einsatzgebiet auch abseits der flüssig/flüssig-Extraktion verspricht. Neben der besonderen Eignung für Stoffsysteme mit hoher Emulsionsneigung, hoher Viskosität und hohem Feststoffanteil öffnet das Fehlen von Statorringen ein breites Anwendungsfeld für Partikelklassierung und Partikelfluidisierung. Durch die rückblickend logisch erscheinende Hybridisierung des RDC mit dem Taylor-Couette-Reaktor konnten die für den jeweiligen Apparat typischen Probleme minimiert bzw. eliminiert werden.

## 6 Symbolverzeichnis

$A$	Stoffaustauschfläche	[m <sup>2</sup> ]
$A_Q$	Querschnittsfläche der Kolonne	[m <sup>2</sup> ]
$a$	Spezifische Stoffaustauschfläche	[m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> ]
$B_C$	Compartmentbreite	
$B_o$	Bodenstein-Zahl	
$c$	Konzentration	[mol/l]
$c^*$	Gleichgewichtskonzentration	[mol/l]
$D$	Diffusionskoeffizient	[m <sup>2</sup> /s]
$D_{ax}$	Axialer Dispersionskoeffizient	[m <sup>2</sup> /s]
$D_K$	Kolonnendurchmesser	[m]
$D_R$	Rotordurchmesser	[m]
$D_S$	Statordurchmesser	[m]
$D_W$	Wellendurchmesser	[m]
$E_{t,00}$	Altersverteilung im Open-Vessel-System	
$E_{\theta,00}$	Normierte Altersverteilung im Open-Vessel-System	
$\dot{V}$	Volumenstrom des Feed	[m <sup>3</sup> /s]
$\vec{F}$	Kraftvektor	[N]
$\vec{g}$	Erdbeschleunigung (= 9,81)	[m/s <sup>2</sup> ]
$H$	Höhe, Apparatehöhe	[m]
$H_c$	Compartmenthöhe	[m]
$J_\phi$	Molekularer Fluss der Größe $\phi$	
$k$	Stoffdurchgangskoeffizient	[m/s]
$L$	Länge bzw. Abstand	[m]
$\dot{N}, \dot{n}$	Stoffmengenstrom bzw. spez. Stoffmengenstrom	[mol], [mol/s]
$n_i$	Stoffmenge der Komponente $i$	[mol]

---

$p$	Druck	[bar]
$Q$	Wärme	[J]
$Re$	Reynolds-Zahl	
$S$	Tensor der Scherrate	
$S_\phi$	Quelle oder Senke der Größe $\phi$	
$T$	Temperatur	[K]
$t$	Zeit	[s]
$u, v, w$	Geschwindigkeiten bzw. Lehrrohrgeschwindigkeiten	[m/s]
$\bar{u}$	Mittlere bzw. reale Geschwindigkeit	[m/s]
$u'$	Schwankung der Geschwindigkeit	[m/s]
$u_\tau$	Wandschubspannungsgeschwindigkeit	[m/s]
$V, \dot{V}$	Volumen bzw. Volumenstrom	[m], [m <sup>3</sup> /s]
$x, y, z$	Koordinatenrichtungen	
$X, X^*$	Molbeladung im Raffinat bzw. Gleichgewichtsbeladung	[mol/mol]
$Y$	Molbeladung im Extrakt	[mol/mol]
$y^+$	Dimensionsloser Abstand	

## 6.1 Griechische Symbole und Sonderzeichen

$\alpha, \omega$	Ein- und Ausgang der Apparates	
$\beta$	Stoffübergangskoeffizient	[m/s]
$\varepsilon$	Extraktionsfaktor	[-]
$\Gamma$	Diffusionskoeffizient	[m <sup>2</sup> /s]
$\Delta$	Differenz	
$\theta$	Dimensionslose Zeit	
$\mu$	Dynamische Viskosität	[Pa s]
$\rho$	Dichte	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\sigma$	Grenzflächenspannung	[N/m]
$\tau$	Mittler Verweilzeit	[s]

---

---

$\tau_w$	Wandschubspannung	[N/m <sup>2</sup> ]
$\bar{\tau}$	Spannungstensor	[N/m <sup>2</sup> ]
$\varphi_d$	Hold Up der dispersen Phase	
$\nabla$	Nabla-Operator	
$\Omega$	Vortizitätstensor	
$c, d, R$	Indizes für kontinuierliche, disperse und Raffinatphase	

## 6.2 Abkürzungen

ARD	Asymmetric Disc Contactor
CFD	Computational Fluid Dynamics
CCD	Charged-Coupled Device
DSD	Drop Size Distribution
EFCE	European Federation of Chemical Engineering
LDA	Laser-Doppler-Anemometrie
HDU	Höhe der dispersen Übertragungseinheit
HTU	Höhe einer theoretischen Übertragungseinheit
NTU	Number of Transfer Units
PBE	Population Balance Equation
PIV	Particle Image Velocimetry
PP	Polypropylen
PTFE	Polytetrafluorethylen
QVF-RZE	Rührzellenextraktor der Firma QVF
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes Equation
RDC	Rotating Disc Contactor
RSM	Reynolds Stress Model
SST	ShellSol-T
TGV	Tropfengrößenverteilung
TCDC	Taylor-Couette Disc Contactor

---

## 7 Literaturverzeichnis

- [1] H. Brandt, K.-H. Reissinger und J. Schröter, *Chem. Ing. Tech.*, Bd. 50, Nr. 5, pp. 345-354, 1978.
- [2] K. Sattler und H. J. Feindt, *Thermal Separation Processes - Principles and Design*, Weinheim; NewYork; Basel; Cambridge; Tokyo: VCH Verlagsgesellschaft mbH, 1995.
- [3] A. Mersmann, M. Kind und J. Stichlmair, *Thermische Verfahrenstechnik - Grundlagen und Methoden*, Berlin: Springer, 2005.
- [4] T. Lo, M. Baird und C. Hanson, *Handbook of Solvent Extraction*, John Wiley & Sons, 1983.
- [5] G. H. Reman.USA Patent 2,601,674, 1952.
- [6] S. Weiß, W. Berghoff, E. Grahn, G. Gruhn, M. Güsewell, W. Plötner, H. Robel und M. Schubert, „Verfahrenstechnische Berechnungsmethoden,“ in *Thermisches Trennen - Ausrüstungen und ihre Berechnung*, Weinheim, VCH Verlagsgesellschaft mbH, 1986.
- [7] W. C. G. Kusters, „Rotating Disc Contactor,“ in *Handbook of Solvent Extraction*, John Wiley & Sons, 1983, pp. 391-406.
- [8] T. Misek, „Drehscheibenextraktoren und deren Berechnung (tschechisch),“ 1964.
- [9] G. Husung, „Tropfengröße, spezifische Wellenleistung und Energiedissipation in gerührten Gegenstromextraktoren,“ *Chemie Ingenieur Technik*, Bd. 56, Nr. 7, pp. 548-549, 1984.
- [10] M. M. Krishnaiah, M. U. Pai, M. V. R. Rao und S. R. S. Sastri, „Performance of a rotating disk contactor with perforated rotors,“ *British Chemical Engineering*, Nr. 12, p. 719–721, 1967.
- [11] Z. Jia-Wen, Z. Shou-Hua, Z. Xiao-Kui, C. Xiao-Xiang, S. Yuan-Fun und A. Vogelpohl, „Hydrodynamics, Axial Mixing and Mass Mransfer in Open Turbine Rotating Disc Contactor (OTRDC),“ *Chem. Eng. Technol.*, Bd. 14, pp. 167-177, 1991.

- 
- [12] Y. D. Wang, W. Y. Fei, J. H. Sun und Y. K. Wan, „Hydrodynamics and Mass Transfer Performance of a Modified Rotating Disc Contactor (MRDC),“ *Trans IChemE*, Bd. A, Nr. 80, pp. 392-400, 2002.
- [13] T. Misek und J. Marek, „Asymmetric Rotating Extractor,“ *Br. Chem. Eng.*, Bd. 15, Nr. 2, pp. 202-207, 1970.
- [14] [Online]. Available: [http://www.eia.gov/dnav/pet/pet\\_pri\\_spt\\_s1\\_d.htm](http://www.eia.gov/dnav/pet/pet_pri_spt_s1_d.htm). [Zugriff am 20.2.2014].
- [15] A. Pfennig, Autor, [Performance]. TU Graz, 2012.
- [16] G. I. Taylor, „Stability of a Viscous Liquid Contained between Two Rotating Cylinders,“ *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, Bd. 223, pp. 289-343, 1923.
- [17] M. W. Davis und E. J. Weber, „Liquid-liquid extraction between rotating concentric cylinders,“ *Ind. Eng. Chem*, Bd. 52, Nr. 11, pp. 929-934, 1960.
- [18] D. Coles, „Transition in circular Couette flow,“ *Journal of Fluid Mechanics*, Bd. 21, Nr. 3, pp. 385-425, 1965.
- [19] D. C. Andereck, S. S. Liu und H. S. Swinney, „Flow regimes in a circular Couette system with independently rotating cylinders,“ *J. Fluid Mech.*, Bd. 164, pp. 155-183, 1986.
- [20] K. Kataoka, H. Doi, T. Hongo und M. Futagawa, „Ideal plug flow properties of Taylor vortex flow,“ *Journal of Chemical Engineering of Japan*, Bd. 8, Nr. 6, pp. 472-476, 1975.
- [21] B. Judat, A. Racina und M. Kind, „Macro- and Micromixing in a Taylor-Couette Reactor with Axial Flow and their Influence on the Precipitation of Barium Sulfate,“ *Chemical Engineering & Technology*, Bd. 27, Nr. 3, pp. 287-292, 2004.
- [22] B. Haut, B. H. Amor, L. Coulon, A. Jacquet und V. Halluin, „Hydrodynamics and mass transfer in a Couette–Taylor bioreactor for the culture of animal cells,“ *Chemical Engineering Science*, Bd. 58, Nr. 3-6, pp. 777-784, 2003.
-

- 
- [23] T. Grebe, *Simulation und Modellierung des Mischverhaltens von Taylor-Couette-Reaktoren*, Paderborn: Universität Paderborn, 2004.
- [24] A. Racina, *Dissertation: Vermischung in Taylor-Couette Strömung*, Karlsruhe: Universitätsverlag Karlsruhe, 2008.
- [25] C. M. V. Moore und C. L. Cooney, „Axial Dispersion in Taylor-Couette Flow,“ *AiChE Journal*, Bd. 41, Nr. 3, pp. 723-727, March 1993.
- [26] R. M. Lueptow, A. Docter und K. Min, „Stability of axial flow in an annulus with a rotating inner cylinder,“ *Physics of Fluids*, Bd. 4, Nr. 11, pp. 2446-2455, 1992.
- [27] M. M. Resende, P. Tardioli, V. M. Fernandez, A. L. O. Ferreira, R. L. C. Giordano und R. C. Giordano, „Distribution of suspended particles in a Taylor Poiseuille vortex flow reactor,“ *Chemical Engineering Science*, Bd. 56, pp. 755-761, 2001.
- [28] O. Richter, H. Hoffmann und B. Kraushaar-Czarnetzki, „Effect of the rotor shape on the mixing characteristics of a continuous flow Taylor-vortex reactor,“ *Chemical Engineering Science*, Bd. 63, pp. 3504-3513, 2008.
- [29] N. Ohmura, T. Suemasu und Y. Asamura, „Particle classification in Taylor vortex flow with an axial flow,“ *Journal of Physics: Conference Series*, Nr. 14, pp. 64-71, 2005.
- [30] G. Baier, *Liquid liquid extraction based on a new flow pattern: two-fluid taylor-couette flow*, Madison: University of Wisconsin, 1999.
- [31] C. A. Jones, „Nonlinear Taylor vortices and their stability,“ *J. Fluid Mech.* 102, p. 249, 1981.
- [32] C. A. Jones, „The transition to wavy Taylor vortices,“ *J. Fluid Mech.* 157, p. 135, 1984.
- [33] J. C. Godfrey, D. Houlton, K. R. M. Ramlochan und M. J. Slater, „Single Phase Axial Mixing in Rotating Disc Contactors,“ *Trans IChemE*, Bd. 79, Nr. A, pp. 156-162, 2001.
- [34] V. Kolar, „Brief Notes on Vortex Identification,“ *Recent Advances in Fluid Mechanics, Heat & Mass Transfer and Biology*, pp. 23-28, 2011.
- [35] P. Chakraborty, S. Balachandar und R. J. Adrain, „On the relationships between local
-

- 
- vortex identification schemes,“ *J. Fluid Mech.*, Bd. 535, pp. 189-214, 2005.
- [36] R. Cucitore, M. Quadrio und A. Baron, „On the effectiveness and limitations of local criteria for the identification of a vortex,“ *European Journal of Mechanics B/Fluids*, Bd. 18, Nr. 2, pp. 261-282, 1999.
- [37] J. C. R. Hunt, A. A. Wray und P. Moin, „Eddies, stream, and convergence zones in turbulent flows,“ *Center for Turbulence, Research Report, CTR-S88*, pp. 193-208, 1988.
- [38] U. Dallmann, „Topological Structures of Three-Dimensional Flow Separation,“ *Deutsche Forschungs- und Versuchsanstalt für Luft- und Raumfahrt DFVLR-IB Report No. 221-82 A07*, 1983.
- [39] J. Jeong und F. Hussain, „On the Identification of a Vortex,“ *Journal of Fluid Mechanics*, Nr. 285, pp. 69-94, 1995.
- [40] J. Zhou, R. J. Adrian, S. Balachandar und T. M. Kendall, „Mechanisms for Generating Coherent Packets of Hairpin Vortices in Channel Flow,“ *Journal of Fluid Mechanics*, Nr. 387, pp. 353-396, 1999.
- [41] O. Levenspiel, *Chemical Reaction Engineering*, New York: John Wiley & Sons, 1999.
- [42] T. Gurker, *Experimentelle Charakterisierung einer gerührten Extraktionskolonne und Vergleich mittels Computational Fluid Dynamics*, Graz: Technische Universität Graz, 2010.
- [43] E. Aksamija, *Einphasige PIV-Untersuchungen einer gerührten Extraktionskolonne und die Evaluierung von Turbulenzmodellen in CFD*, Graz: Technische Universität Graz, 2009.
- [44] R. Prieler, *Optimierung der Hydrodynamik in einer RDC-Kolonne (Compartmenthöhe: 34mm)*, Graz: Technische Universität Graz, 2012.
- [45] K. Zörweg, *Optimierung der RDC-Geometrie (Basis: Compartmenthöhe = 18mm)*, Graz: Technische Universität Graz, 2012.
-

- 
- [46] C. Weinländer, Validierung einer optimierten RDC-Kolonne mit Stoffaustauschversuchen und CFD, Graz: TU Graz, 2014.
- [47] R. Sarzio, Graz: Konstruktionsübung, TU Graz, 2014.
- [48] J. Bujalski, W. Yang, J. Nikolov, C. Solnordal und M. Schwarz, „Measurement and CFD simulation of single-phase flow in solvent extraction pulsed column,“ *Chemical Engineering Science*, Bd. 29, Nr. 9, p. 2930–2938, 2006.
- [49] P. Kolb, *Hydrodynamik und Stoffaustausch in einem gerührten Miniplantextraktor der Bauart Kühni*, Kaiserslautern: Technische Universität Kaiserslautern, 2004.
- [50] M. Hlawitschka und H. Bart, „Determination of Local Velocity, Energy Dissipation and Phase Fraction with LIF- and PIV- Measurement in a Kühni miniplant Extraction Column,“ *Chem. Eng. Sci.*, Bd. 69, Nr. 1, pp. 138-145, 2012.
- [51] C. Drumm, *Coupling of Computational Fluid Dynamics and Population Balance Modelling for Liquid-Liquid Extraction*, Kaiserslautern: Technische Universität Kaiserslautern, 2010.
- [52] C. Drumm und H.-J. Bart, „Hydrodynamics in a RDC Extractor: Single and two-phase PIV Measurements and CFD Simulations,“ *Chemical Engineering & Technology*, Bd. 29, pp. 1297-1302, 2006.
- [53] C. Drumm, M. Hlawitschka und H.-J. Bart, „CFD Simulations and Particle Image Velocimetry Measurements in an Industrial Scale Rotating Disc Contactor,“ *AIChE Journal*, Vol. 57, Issue 1, pp. 10-26, 2011.
- [54] M. Raffel, C. Willert, S. Wereley und J. Kompenhans, *Particle Image Velocimetry - A Practical Guide*, Heidelberg; Berlin; New York: Springer-Verlag, 2007.
- [55] F. Widmer, *Chem. Rundschau*, Bd. 28, Nr. 26, p. 2, 1975.
- [56] A. Paschedag, *CFD in der Verfahrenstechnik - Allgemeine Grundlagen und mehrphasige Anwendungen*, Wiley-VCH Verlag.
- [57] ANSYS Inc., „ANSYS FLUENT Theory Guide,“ Canonsburg, 2010.
-

- 
- [58] S. Lecheler, *Numerische Strömungsberechnung*, Wiesbaden: Vieweg&Teubner, 2009.
- [59] G. H. Yeoh und J. Tu, *Computational Techniques for Multi-Phase Flows*, Oxford: Butterworth-Heinemann, 2010.
- [60] T. Haderer, *CFD-Simulation der Hydrodynamik einer gerührten Extraktionskolonne und Vergleich mit experimentell ermittelten hydrodynamischen Kenngrößen*, Graz: Technische Universität Graz, 2004.
- [61] C. Weiss, *Experimentelle Charakterisierung und numerische Simulation von dispersen Zweiphasenströmungen in gerührten Gegenstromkolonnen der Bauart RDC*, Graz: TU Graz, 1995.
- [62] A. D. Gosman und E. Ioannides, „Aspects of computer simulation of liquid-fuelled combustors,“ *J. Energy*. 7(6), pp. 482-490, 1983.
- [63] S. Stemerding, E. C. Lumb und J. Lips, „Axiale Vermischung in einer Drehscheiben-Extraktionskolonne,“ *Chemie Ingenieur Technik*, Bd. 35, Nr. 12, pp. 844-850, 1963.
- [64] R. Bauer, *Längsvermischung beider Phasen in einer gerührten Fest-Flüssig Extraktionskolonne*, Zürich: ETH Zürich, 1976.
- [65] M. Hlawitschka und H.-J. Bart, „CFD-Mass transfer Simulation of an RDC Column,“ *Computer Aided Chemical Engineering*, Bd. 31, pp. 920-924, 2012.
- [66] M. Simon, *Koaleszenz von Tropfen und Tropfenschwärmen*, Kaiserslautern: TU Kaiserslautern, 2004.
- [67] E. Sommeregger, *Hydrodynamik in Drehscheibenextraktoren*, Graz: Technische Universität Graz, 1980.
- [68] F. Wang und Z.-S. Mao, „Numerical and Experimental Investigation of Liquid–Liquid Two-Phase Flow in Stirred Tanks,“ *Ind. Eng. Chem. Res.*, Bd. 44, Nr. 15, p. 5776–5787, 2005.
- [69] L. Schiller und A. Naumann, „Über die grundlegenden berechnungen bei der schwerkraftaufbereitung,“ *Verein Deutscher Ingenieure*, pp. 318-320, 1933.
-

- 
- [70] H. Hulburt und S. Katz, *Chem.Eng.Sci* 19, pp. 555-574, 1964.
- [71] K. J. Valentas, O. Bilous und N. R. Amundson, „Analysis of breakage in dispersed phase systems,“ *Ind. Eng. Chem. Fundamentals*, Bd. 5, pp. 271-279, 1966.
- [72] A. Pfennig, D. Adinata, J. Ayesterán, F. Buchbender, M. Kalem und N. Kopriwa, „Tropfenpopulationsbilanzen zur Auslegung von Extraktionskolonnen,“ *Chemie Ingenieur Technik*, Bd. 83, Nr. 7, pp. 952-964, 2011.
- [73] D. Ramkrishna, *Population Balances: Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*, San Diego: Academic Press, 2000.
- [74] Y. Liao und D. Lucas, „A literature review on mechanisms and models for the coalescence process of fluid particles,“ *Chemical Engineering Science*, Bd. 65, Nr. 10, p. 2851–2864, 2010.
- [75] C. A. Coulaloglou und L. L. Tavlarides, „Description of interaction processes in agitated liquid-liquid dispersions,“ *Chemical Engineering Science*, Bd. 32, Nr. 11, p. 1289–1297, 1977.
- [76] Y. Liao und D. Lucas, „A literature review of theoretical models for drop and bubble breakup in turbulent dispersions,“ *Chemical Engineering Science*, Bd. 64, Nr. 15, p. 3389–3406, 2009.
- [77] H. Bahmanyar und M. J. Slater, „Studies of drop break-up in liquid-liquid systems in a rotating disc contactor. Part I: Conditions of no mass transfer,“ *Chemical Engineering & Technology*, Bd. 14, Nr. 2, pp. 79-89, 1991.
- [78] D. Randolph und M. A. Larson, *Theory of Particulate Processes. Analysis and Techniques of Continuous Crystallization*, San Diego: Academic Press, 1971.
- [79] R. McGraw, „Description of Aerosol Dynamics by the Quadrature Method of Moments,“ *Aerol Science and Technology*, Nr. 27, pp. 255-265, 1997.
- [80] M. M. Attarakih, C. Drumm und H.-J. Bart, „Solution of the population balance equation using the sectional quadrature method of moments (SQMOM),“ *Chemical Engineering Science*, Bd. 64, Nr. 4, pp. 742-752, 2009.
-

- 
- [81] D. L. Marchisio und R. O. Fox, „Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments,“ *Journal of Aerosol Science*, Bd. 36, Nr. 1, pp. 43-73, 2005.
- [82] M. Henschke, Auslegung pulsierter Siebbodenextraktionskolonnen, Aachen: Shaker Verlag, 2004.
- [83] H. Pietruske und H.-M. Prasser, „Wire-mesh sensors for high-resolving two-phase flow studies at high pressures and temperatures,“ *Flow Measurement and Instrumentation*, Nr. 18, p. 87–94, 2007.
- [84] W. Warsito und L.-S. Fan, *Chemical Engineering Science*, Bd. 56, p. 6455–6462, 2001.
- [85] M. W. Hlawitschka und H.-J. Bart, „Determination of Local Velocity, Energy Dissipation and Phase Fraction with LIF- and PIV- Measurement in a Kühni miniplant Extraction Column,“ *Chem. Eng. Sci.*, Bd. 69, Nr. 1, p. 138–145, 2012.
- [86] M. Mickler, S. Didas, M. Jaradat, M. Attarakih und H.-J. Bart, „Tropfenschwarmanalytik mittels Bildverarbeitung zur Simulation von Extraktionskolonnen mit Populationsbilanzen,“ *Chemie Ingenieur Technik*, Bd. 83, Nr. 3, pp. 227-236, 2011.
- [87] S. Maaß, S. Wollny, A. Voigt und M. Kraume, „Experimental comparison of measurement techniques for drop size distributions in liquid/liquid dispersions,“ *Experiments in Fluids*, Bd. 50, Nr. 2, pp. 259-269, 2011.
- [88] T. Pilhofer und H. D. Miller, *Chem.-Ing.Tech.*, Bd. 44, Nr. 5, p. 295, 1972.
- [89] E. Krepper, D. Lucas, T. Frank, H.-M. Prasser und P. Zwart, „The inhomogeneous MUSIG model for the simulation of polydispersed flows,“ *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 238, Nr. 7, p. 1690–1702, 2008.
- [90] M. Henschke, Auslegung pulsierter Siebboden-Extraktionskolonnen, Aachen: Shaker Verlag, 2004.
- [91] S. Morsi und A. Alexander, „An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems,“ *Journal of Fluid Mechanics* 55, pp. 193-208, 1972.
-

- [92] V. Vogl, *CFD-Simulation einer modifizierten Rotating Disc Column (RDC) im industriellen Maßstab*, Graz: Bachelorarbeit, TU Graz, 2014.
- [93] M. Landfahner, *CFD Simulation einer industriellen RDC-Kolonne zur Bestimmung des optimalen Wellendurchmessers*, Graz: Konstruktionsübung, TU Graz, 2013.
- [94] S. Maaß, J. Rojahn, R. Hänsch und M. Kraume, „Automated drop detection using image analysis for online particle size monitoring in multiphase systems,“ *Computers and Chemical Engineering*, Nr. 45, pp. 27-37, 2012.
- [95] A. Kumar und S. Hartland, „Prediction of Axial Mixing Coefficients in Rotating Disc and Asymmetric Rotating Disc Extraction Columns,“ *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Nr. Vol. 70, pp. 77-87, 1992.
- [96] Dantec Dynamics, „DynamicStudio V2.3 (Help Contents),“ 2009.
- [97] M. Hlawitschka und H. Bart, „ISEC 19th International Solvent Extraction Conference,“ in *Simulation of a miniplant Kühni extraction column coupled with PBM*, Santiago, Chile, 2011.
- [98] A. Mersmann, M. Kind und J. Stichlmair, *Thermische Verfahrenstechnik - Grundlagen und Methoden*, Berlin; Heidelberg; New York: Springer Verlag, 2005.
- [99] VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen, *VDI-Wärmeatlas*, Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 2006.
- [100] „[http://www.shell.com/home/content/chemicals/products\\_services/our\\_products/solvents/hydrocarbon\\_solvents/isoparaffins/product\\_data/](http://www.shell.com/home/content/chemicals/products_services/our_products/solvents/hydrocarbon_solvents/isoparaffins/product_data/),“ Shell. [Online]. [Zugriff am Mai 2012].
- [101] D. Coles, „Transition in circular Couette flow,“ *J. Fluid Mech.* 21, p. 385, 1965.

## 8 Anhang

### 8.1 Experimentelle Daten

#### 8.1.1 Technische Daten – Sedimentationsexperimente

Tabelle 8.1: High speed camera

<b>Kamera</b>	
<b>Firma</b>	Photon focus
<b>Modell</b>	DS1-D1024-160-PC-10
<b>Objektiv</b>	
<b>Firma</b>	Pentax
<b>Modell</b>	TV Lens 50mm 1:1.4

#### 8.1.2 Technische Daten PIV

Tabelle 8.2: Seeding-Partikel

<b>Bezeichnung</b>	Nylon 12, Polyamid 12
<b>CAS-Nummer</b>	24937-16-4
<b>Dichte bei Raumtemperatur</b>	1,03 [g/cm <sup>3</sup> ]
<b>Sauterdurchmesser <math>d_{32}</math></b>	50 [μm]
<b>Korngrößenverteilung</b>	30 – 70 [μm]
<b>Form</b>	rund, nicht exakt kugelförmig

Tabelle 8.3: Laser

<b>Hersteller</b>	Litron Lasers
<b>Modell-Nummer</b>	LDY303-PIV
<b>Max. Ausgangsleistung</b>	150 [W]
<b>Wellenlängen</b>	1053, 527 [nm]
<b>Laser-Klasse</b>	4

Tabelle 8.4: Kamera

<b>Hersteller</b>	Photron
<b>Modell</b>	Fastcam SA 1.1

Tabelle 8.5: Einstellungen in *Dantec Dynamic Studio* (Adaptive Correlation)

<b>Initial Interrogation Area Size</b>	64 x 64 [Pixel]
<b>Number of Refinement Steps</b>	2
<b>Final Interrogation Area Size</b>	16 x 16 [Pixel]
<b>Overlap</b>	25 [%]
<b>Min. Peak Height Relative to Peak 2</b>	1,2
<b>Interrogation Area Offset</b>	Central Difference

### 8.1.3 Gemessene Vektorfelder

#### 8.1.3.1 H/D=0,34

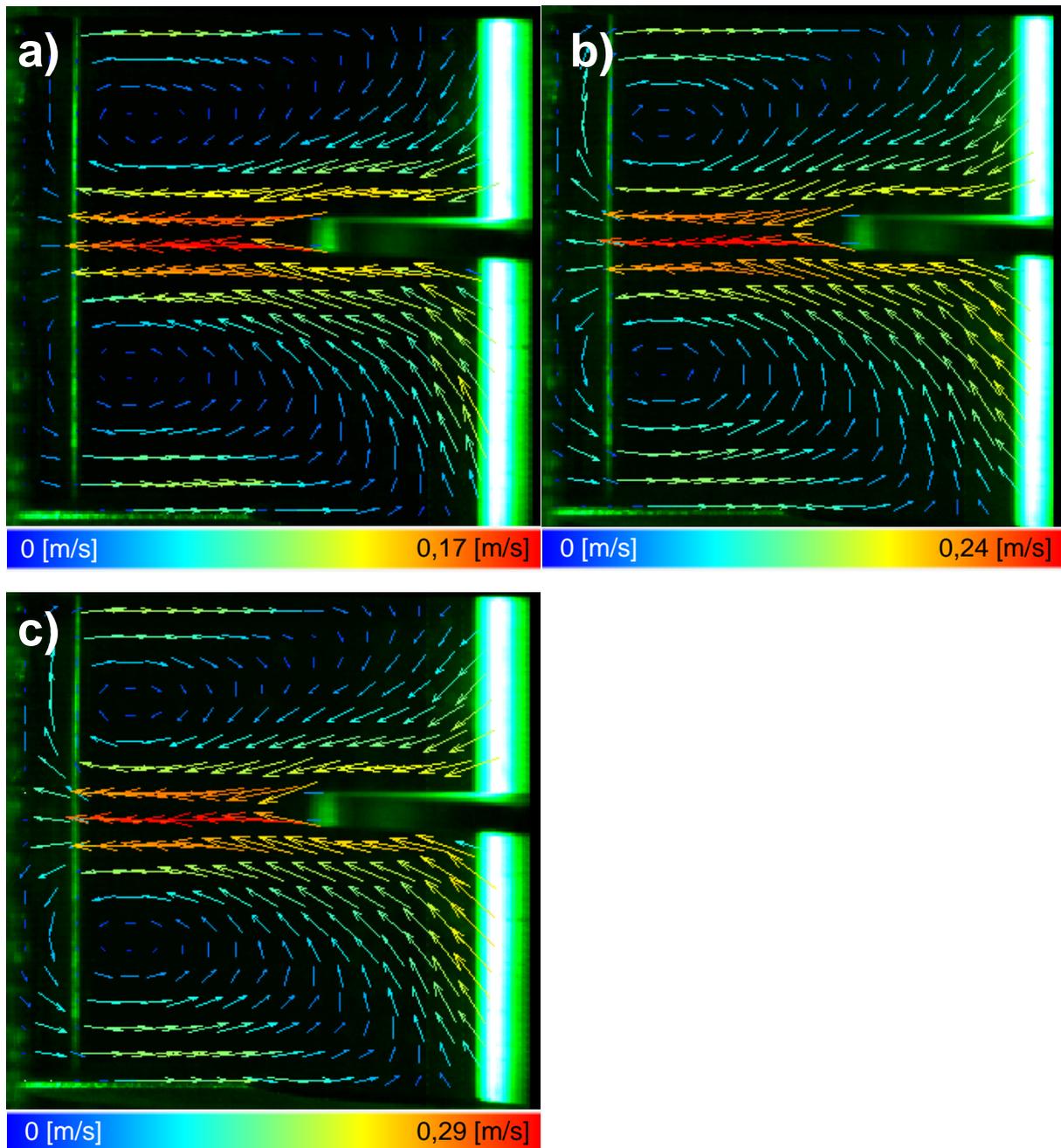


Abbildung 8-1: Geschwindigkeitsvektorfelder für  $\dot{V}_{\text{kont.}} = 0$  [l/h] und a) 400[rpm], b) 600[rpm] und c) 800[rpm]

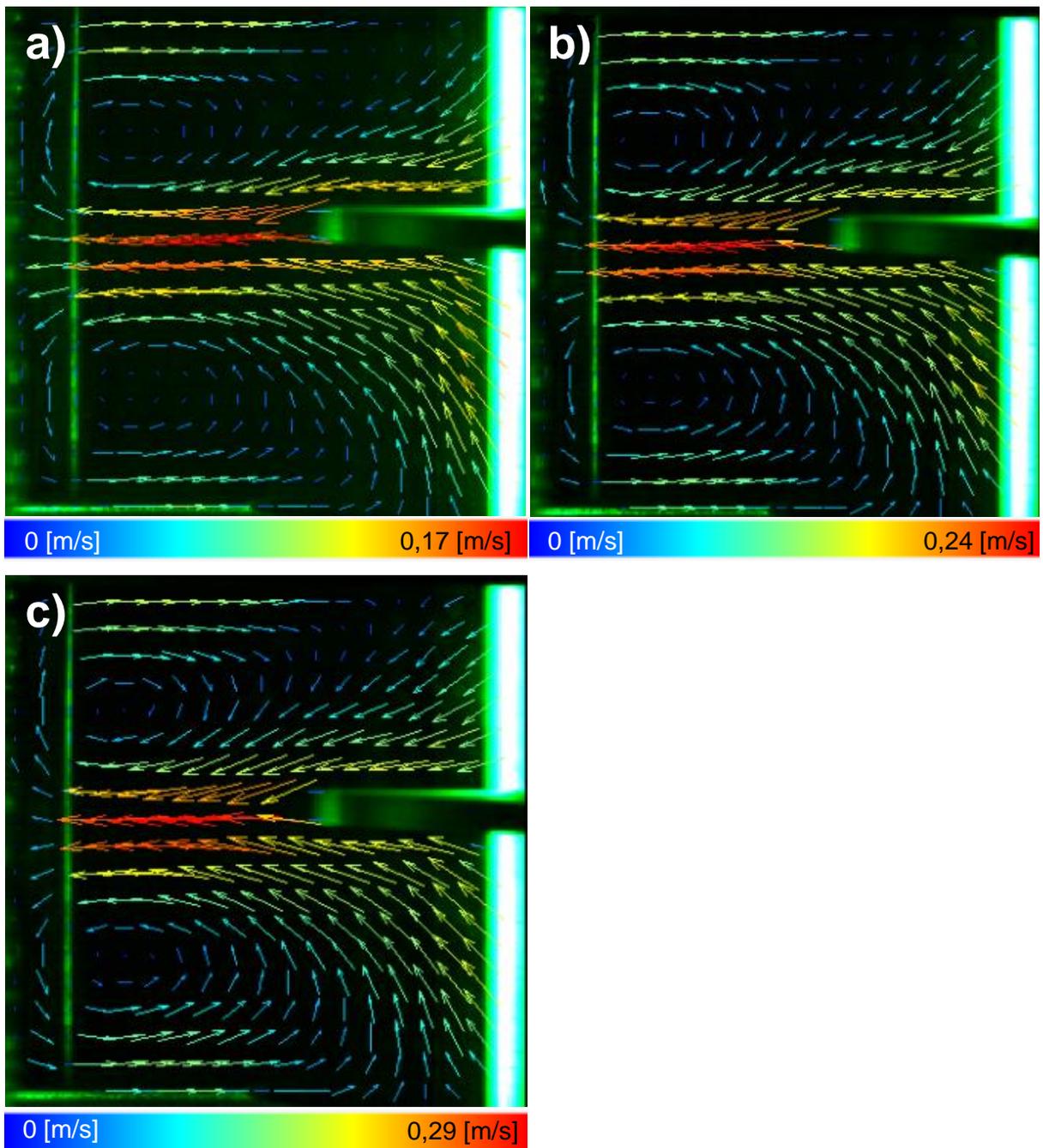


Abbildung 8-2: Geschwindigkeitsvektorfelder für  $\dot{V}_{\text{kont.}} = 30$  [l/h] und a) 400[rpm],  
b) 600[rpm] und c) 800[rpm]

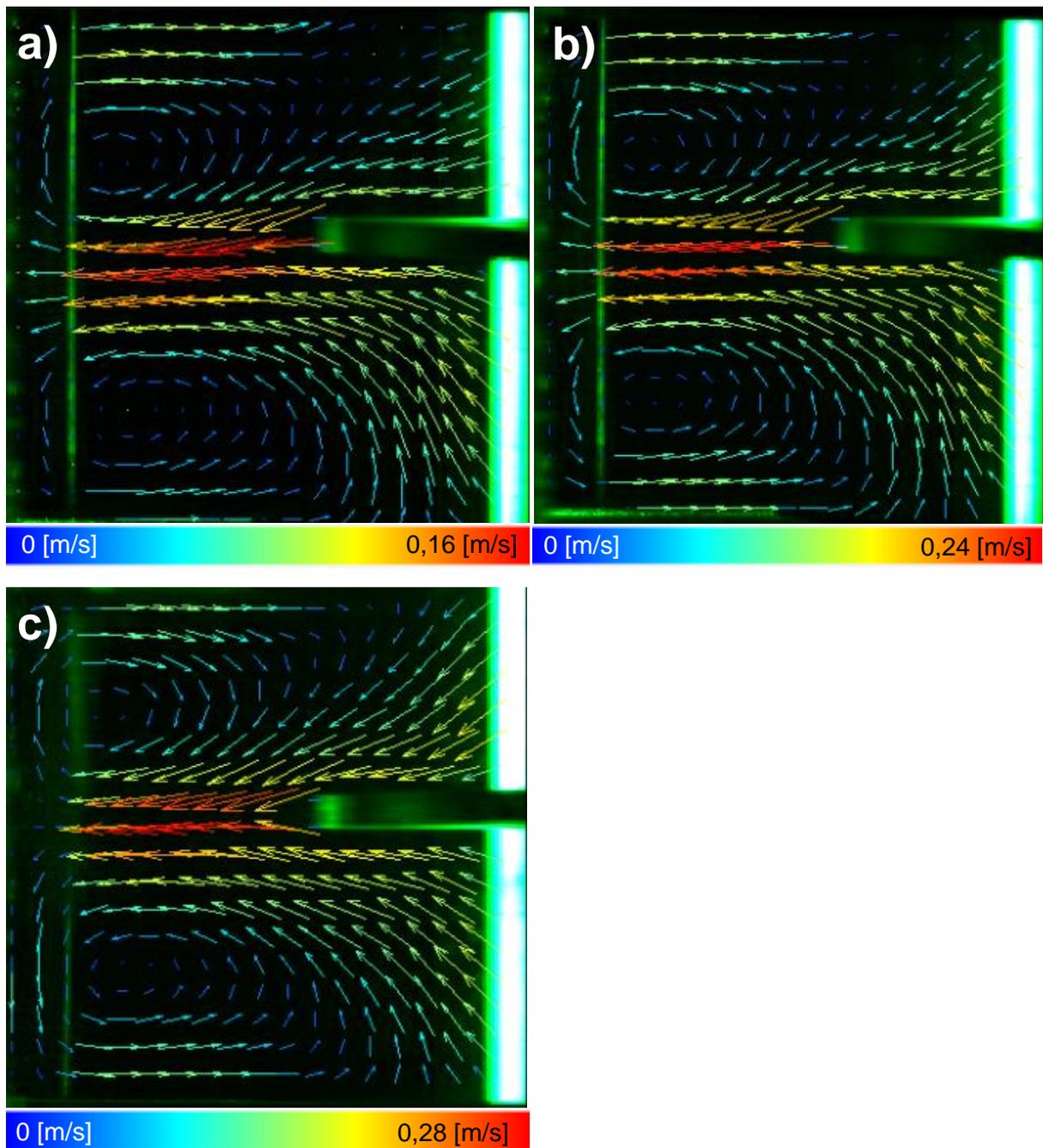


Abbildung 8-3: Geschwindigkeitsvektorfelder für  $\dot{V}_{\text{kont.}} = 50 \text{ [l/h]}$  und a) 400[rpm],  
b) 600[rpm] und c) 800[rpm]

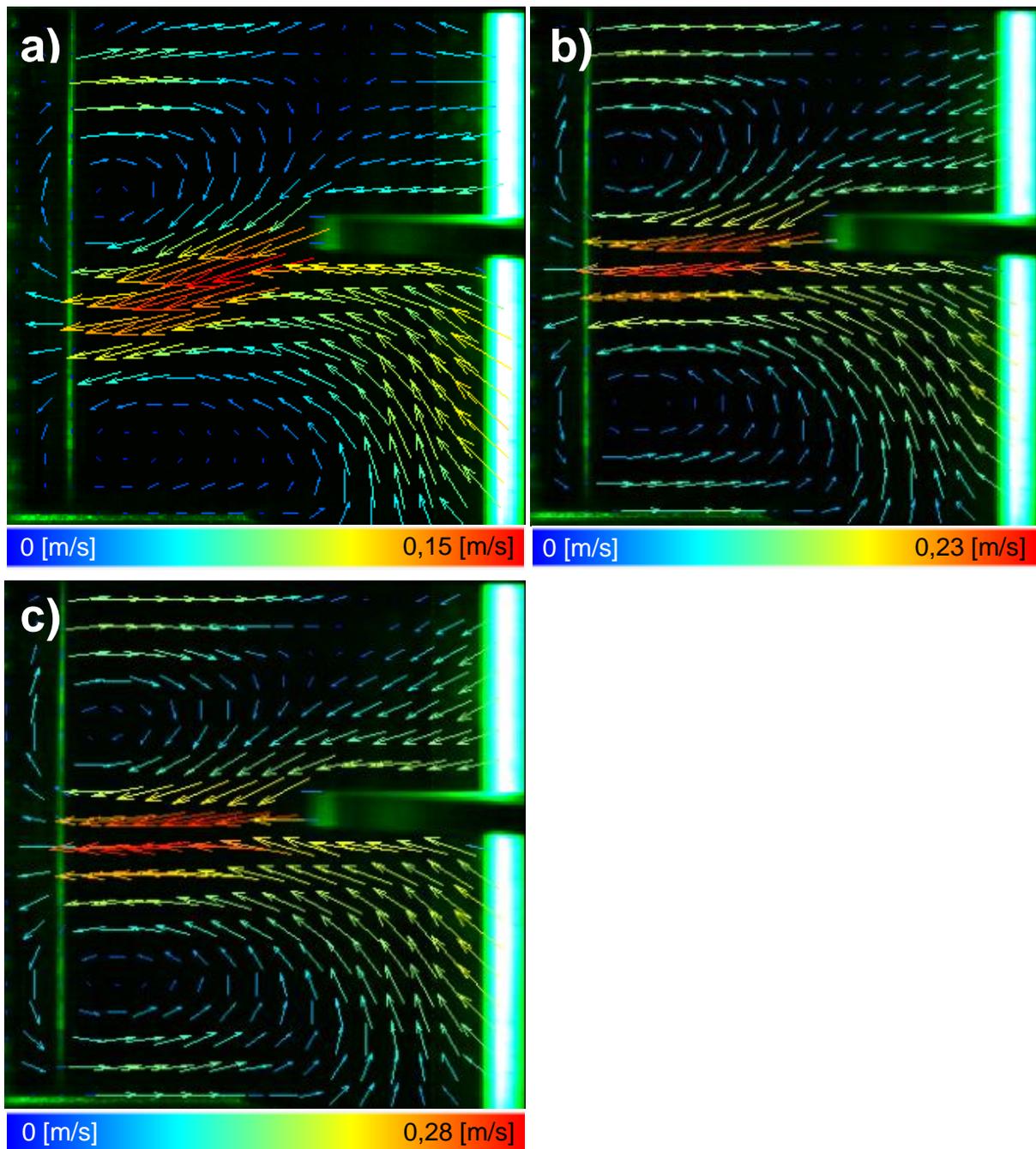


Abbildung 8-4: Geschwindigkeitsvektorfelder für  $\dot{V}_{\text{kont.}} = 75$  [l/h] und a) 400[rpm], b) 600[rpm] und c) 800[rpm]

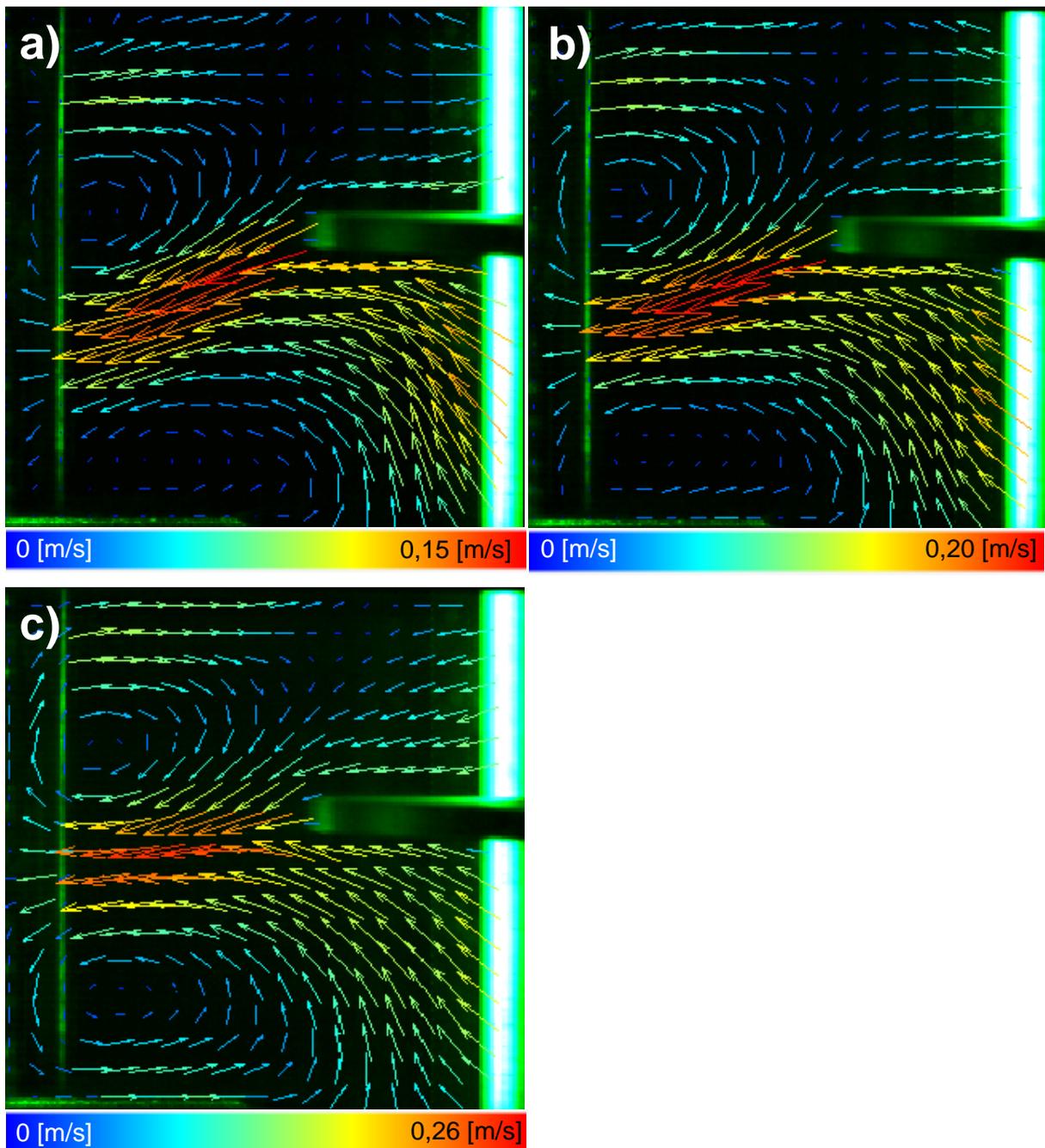


Abbildung 8-5: Geschwindigkeitsvektorfelder für  $\dot{V}_{\text{kont.}} = 100$  [l/h] und a) 400[rpm],  
b) 600[rpm] und c) 800[rpm]

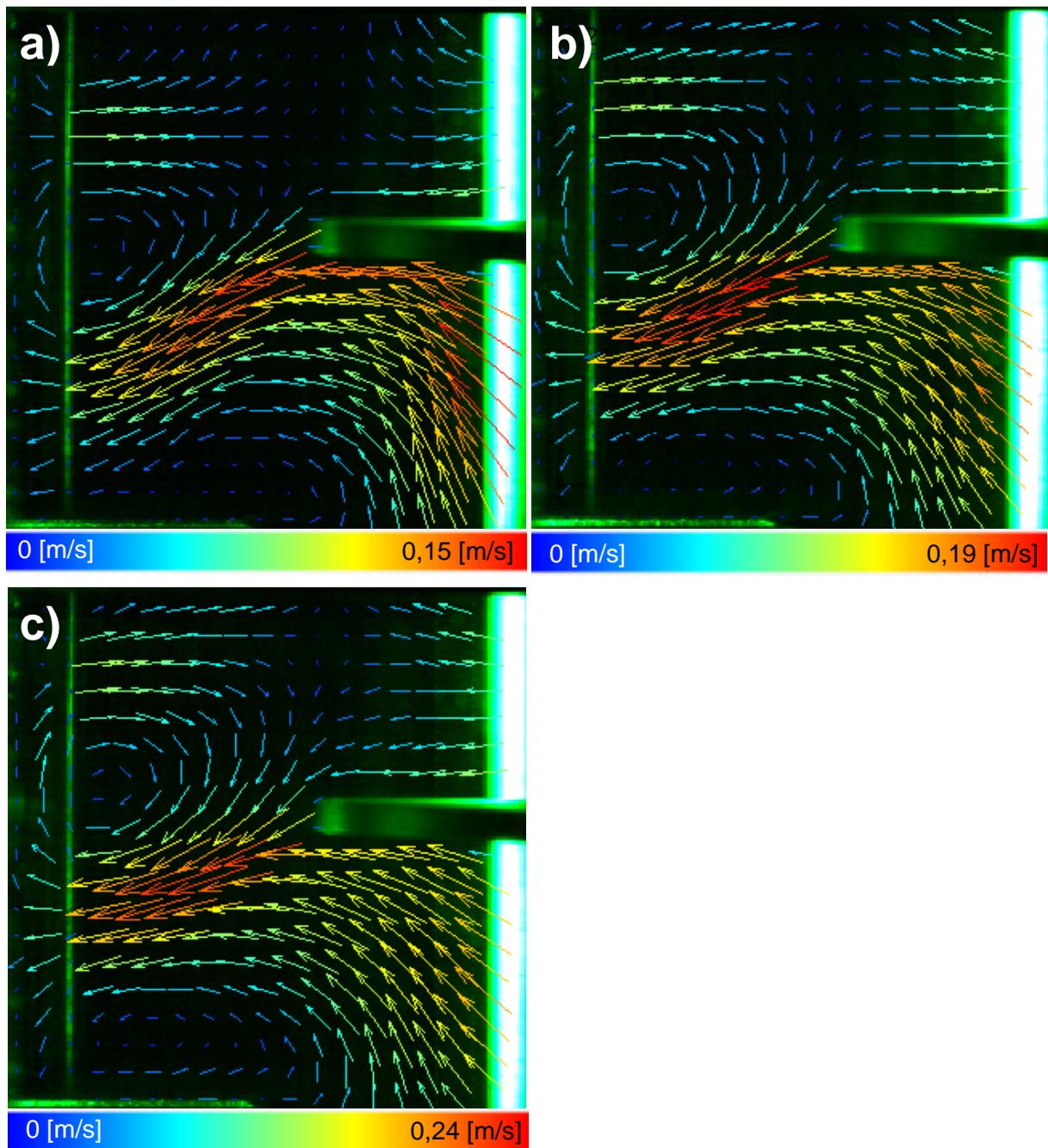


Abbildung 8-6: Geschwindigkeitsvektorfelder für  $\dot{V}_{\text{kont.}} = 130 \text{ [l/h]}$  und a) 400[rpm],  
b) 600[rpm] und c) 800[rpm]

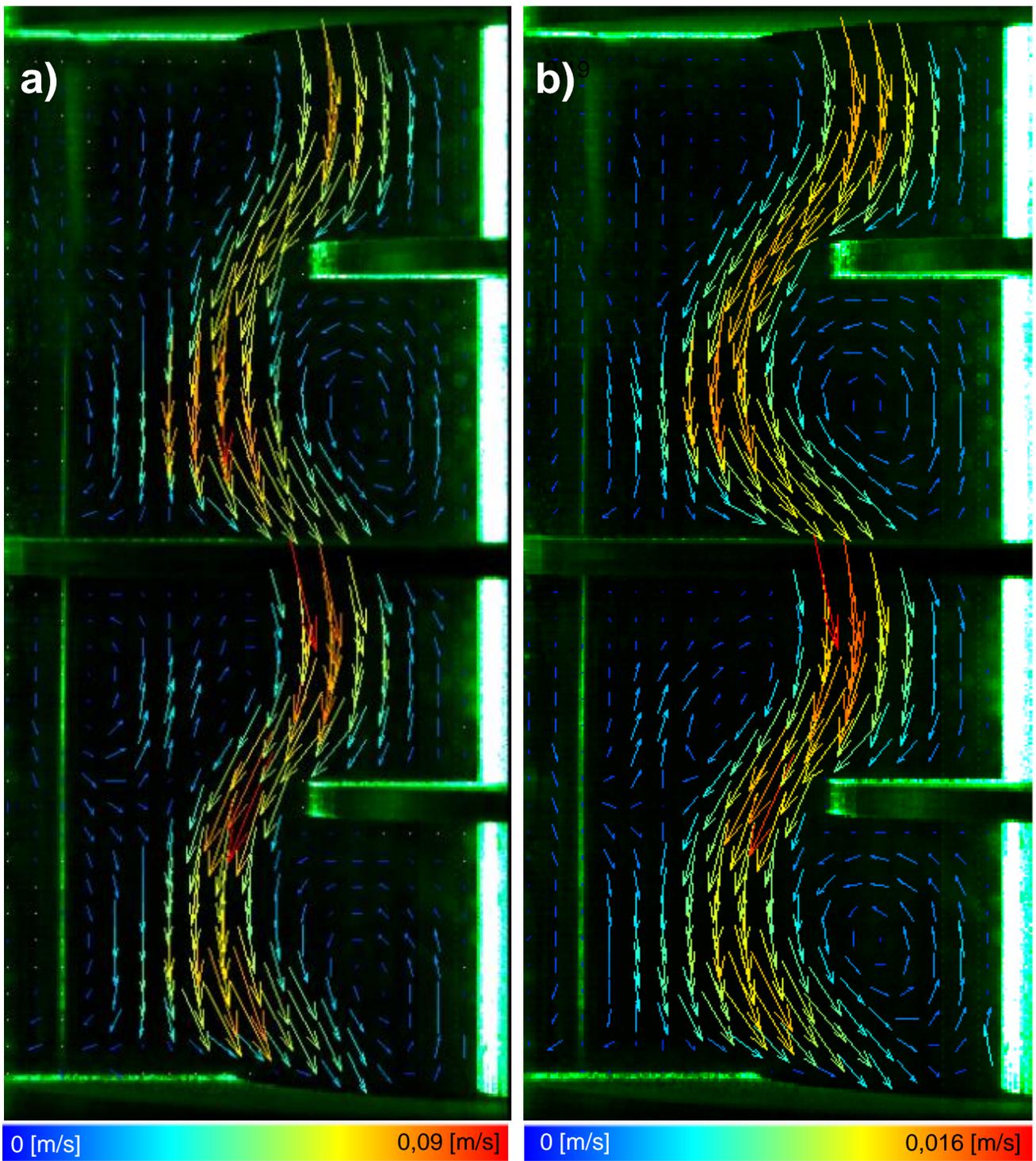


Abbildung 8-7: Geschwindigkeitsvektorfelder für  $n=0$ [rpm] und a) 75[l/h] und b) 130[l/h].

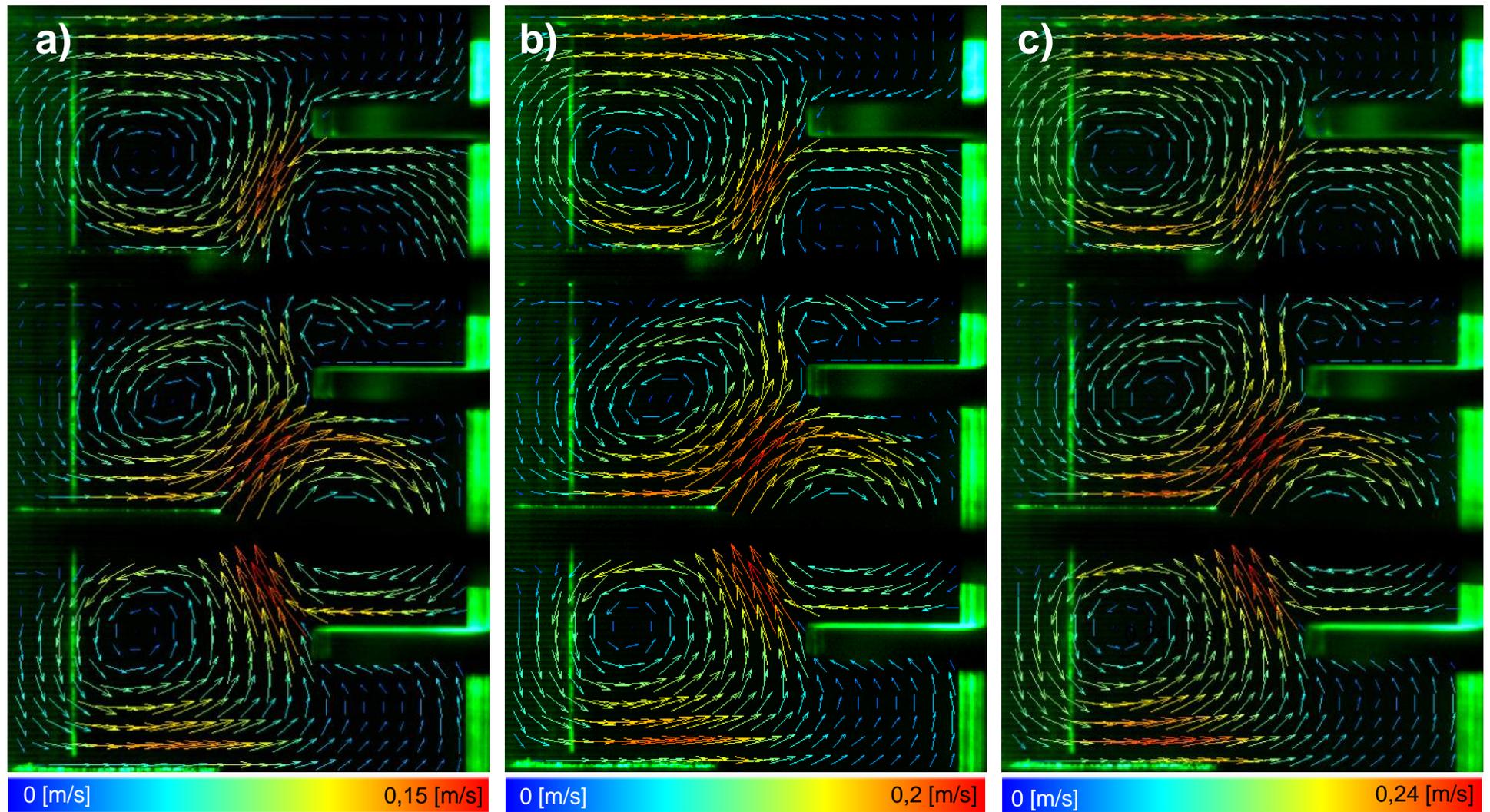
8.1.3.2  $H/D=0,18$ 

Abbildung 8-8: Geschwindigkeitsvektorfelder für  $\dot{V}_{\text{kont.}} = 0$  [l/h] und a) 400[rpm], b) 600[rpm] und c) 800[rpm]

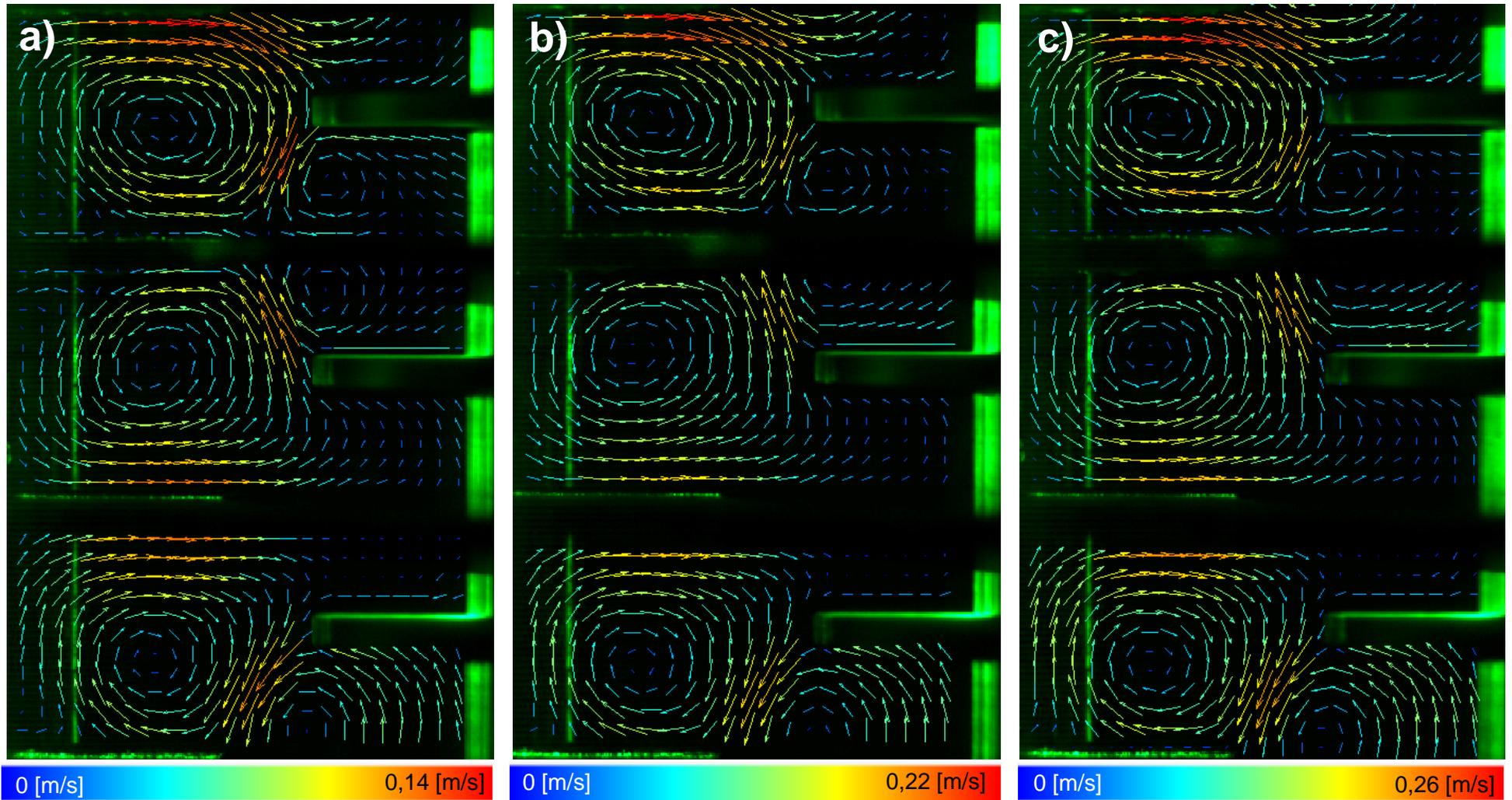


Abbildung 8-9: Geschwindigkeitsvektorfelder für  $\dot{V}_{\text{kont.}} = 50$  [l/h] und a) 400[rpm], b) 600[rpm] und c) 800[rpm]

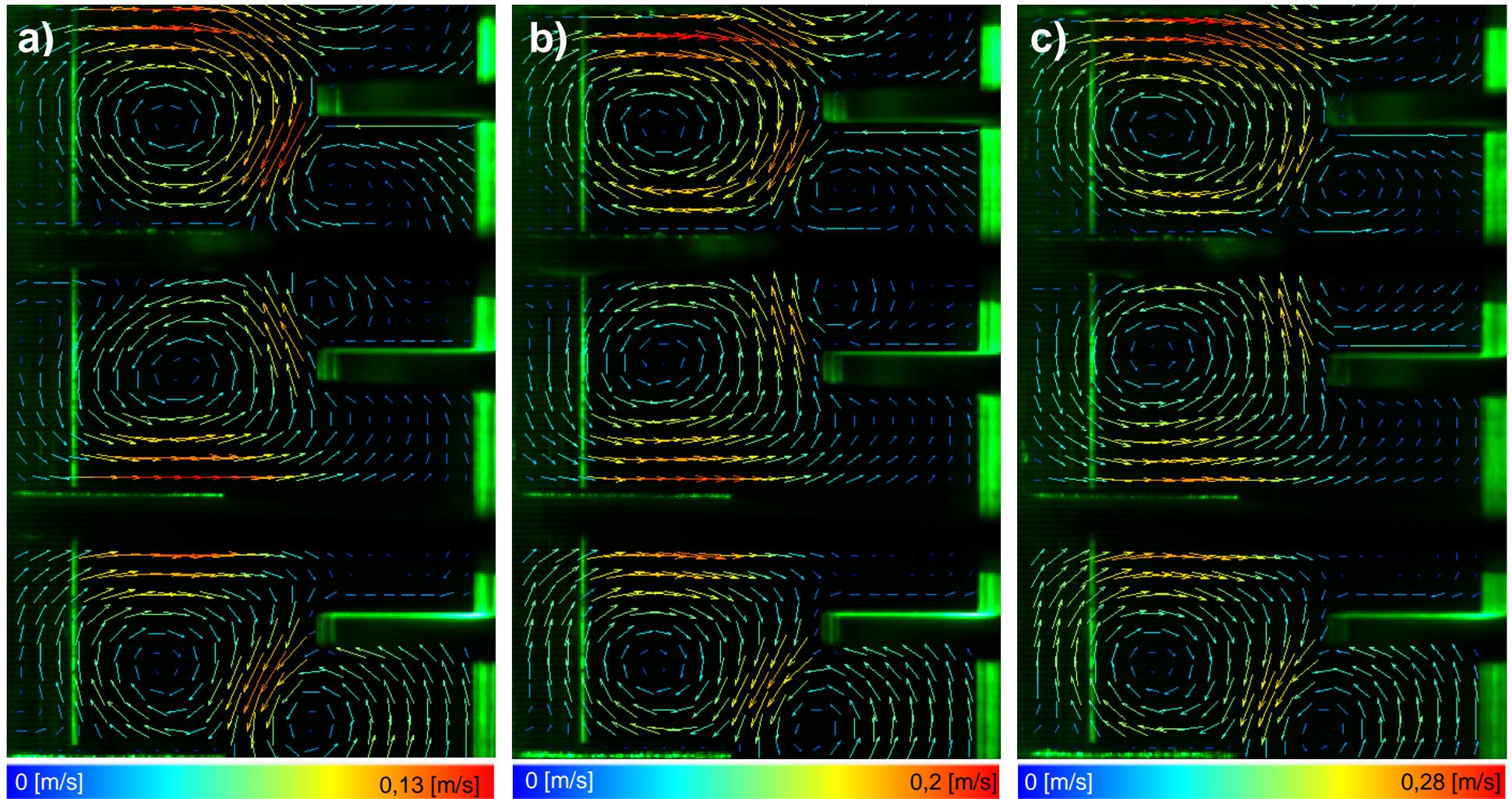


Abbildung 8-10: Geschwindigkeitsvektorfelder für  $\dot{V}_{\text{kont.}} = 75$  [l/h] und a) 400[rpm], b) 600[rpm] und c) 800[rpm]

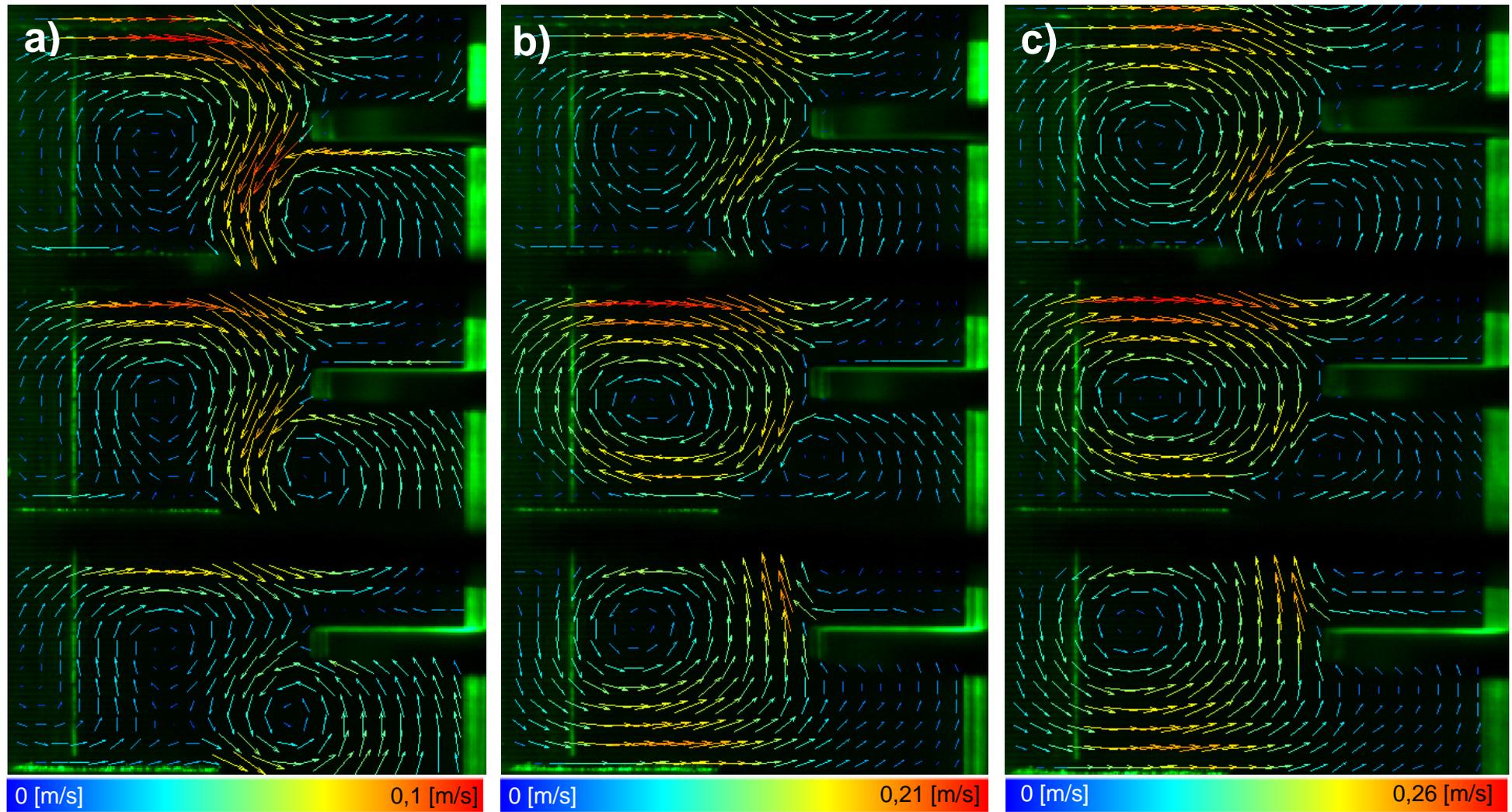


Abbildung 8-11: Geschwindigkeitsvektorfelder für  $\dot{V}_{\text{kont.}} = 100$  [l/h] und a) 400[rpm], b) 600[rpm] und c) 800[rpm].

## 8.2 Ergebnisse Tracerversuche

### 8.2.1 Axiale Vermischung bei $H_C/D_T = 0,34$

Tabelle 8.6: Gemittelte axiale Dispersionskoeffizienten im einphasigen Betrieb

Volumenstrom [l/h]	Drehzahl [1/min]	Kolonnenbelastung [m <sup>3</sup> /(m <sup>2</sup> ·h)]	D <sub>ax,c</sub> [m <sup>2</sup> /s]
30	300	4,5	9,24E-05
30	400	4,5	1,07E-04
30	500	4,5	1,28E-04
30	600	4,5	1,39E-04
30	700	4,5	1,63E-04
30	800	4,5	1,77E-04
30	900	4,5	2,06E-04
50	300	7,4	1,11E-04
50	400	7,4	1,39E-04
50	500	7,4	1,53E-04
50	600	7,4	1,67E-04
50	700	7,4	1,89E-04
50	800	7,4	2,09E-04
50	900	7,4	2,29E-04
75	300	11,2	1,26E-04
75	400	11,2	1,57E-04
75	500	11,2	1,81E-04
75	600	11,2	2,04E-04
75	700	11,2	2,25E-04
75	800	11,2	2,41E-04
75	900	11,2	2,59E-04
100	300	14,9	1,36E-04
100	400	14,9	1,66E-04
100	500	14,9	1,97E-04
100	600	14,9	2,20E-04
100	700	14,9	2,44E-04
100	800	14,9	2,72E-04
100	900	14,9	2,93E-04
130	300	19,3	1,46E-04
130	400	19,3	1,76E-04

130	500	19,3	2,03E-04
130	600	19,3	2,30E-04
130	700	19,3	2,59E-04
130	800	19,3	2,85E-04
130	900	19,3	3,09E-04

Tabelle 8.7: Gemittelte axiale Dispersionskoeffizienten im zweiphasigen Betrieb

Volumenstrom kont. Phase [l/h]	Volumenstrom disp. Phase [l/h]	Drehzahl [1/min]	Kolonnenbelastung [m <sup>3</sup> /(m <sup>2</sup> ·h)]	D <sub>ax,c</sub> [m <sup>2</sup> /s]
50	15	500	9,7	1,83E-04
50	15	600	9,7	2,09E-04
50	15	700	9,7	2,31E-04
50	15	800	9,7	2,54E-04
50	30	500	11,9	2,17E-04
50	30	600	11,9	2,48E-04
50	30	700	11,9	2,83E-04
50	30	800	11,9	3,05E-04
50	50	500	14,9	2,66E-04
50	50	600	14,9	3,01E-04
50	50	700	14,9	3,26E-04
50	50	800	14,9	3,36E-04
50	75	500	18,6	3,37E-04
50	75	600	18,6	3,73E-04
50	75	700	18,6	3,99E-04
50	100	500	22,3	4,02E-04
50	100	600	22,3	4,26E-04
75	15	500	13,4	2,02E-04
75	15	600	13,4	2,20E-04
75	15	700	13,4	2,45E-04
75	15	800	13,4	2,70E-04
75	30	500	15,6	2,26E-04
75	30	600	15,6	2,52E-04
75	30	700	15,6	2,81E-04
75	30	800	15,6	2,99E-04
75	50	500	18,6	2,65E-04

---

75	50	600	18,6	3,02E-04
75	50	700	18,6	3,16E-04
75	75	500	22,3	3,06E-04
75	75	600	22,3	3,36E-04
75	75	700	22,3	3,57E-04
75	100	500	26,0	3,52E-04
75	100	600	26,0	3,76E-04
100	15	500	17,1	2,12E-04
100	15	600	17,1	2,40E-04
100	15	700	17,1	2,61E-04
100	30	500	19,3	2,30E-04
100	30	600	19,3	2,62E-04
100	30	700	19,3	2,90E-04
100	50	500	22,3	2,65E-04
100	50	600	22,3	2,90E-04
100	50	700	22,3	3,12E-04
100	75	500	26,0	2,98E-04
100	75	600	26,0	3,23E-04
100	100	500	29,8	3,28E-04
100	100	600	29,8	3,61E-04
130	15	500	21,6	2,23E-04
130	15	600	21,6	2,54E-04
130	15	700	21,6	2,76E-04
130	30	500	23,8	2,37E-04
130	30	600	23,8	2,66E-04
130	30	700	23,8	3,00E-04
130	50	500	26,8	2,71E-04
130	50	600	26,8	2,93E-04
130	50	700	26,8	3,16E-04
130	75	500	30,5	2,98E-04
130	75	600	30,5	3,27E-04
130	100	500	34,2	3,19E-04
130	100	600	34,2	3,40E-04

---

## 8.2.2 Axiale Vermischung bei $H_C/D_T = 0,18$

Tabelle 8.8: Gemittelte axiale Dispersionskoeffizienten im einphasigen Betrieb

Volumenstrom [l/h]	Drehzahl [1/min]	Kolonnenbelastung [m <sup>3</sup> /(m <sup>2</sup> -h)]	$D_{ax,c}$ [m <sup>2</sup> /s]
50	400	7,4	8,40E-05
50	600	7,4	1,19E-04
50	800	7,4	1,56E-04
75	400	11,2	9,30E-05
75	600	11,2	1,27E-04
75	800	11,2	1,63E-04
100	400	14,9	1,00E-04
100	600	14,9	1,33E-04
100	800	14,9	1,66E-04

Tabelle 8.9: Gemittelte axiale Dispersionskoeffizienten im zweiphasigen Betrieb

Volumenstrom kont. Phase [l/h]	Volumenstrom disp. Phase [l/h]	Drehzahl [1/min]	Kolonnenbelastung [m <sup>3</sup> /(m <sup>2</sup> -h)]	$D_{ax,c}$ [m <sup>2</sup> /s]
30	15	400	6,75	1,10E-04
30	15	500	6,75	1,25E-04
30	15	600	6,75	1,45E-04
30	30	400	9	1,36E-04
30	30	500	9	1,68E-04
30	30	600	9	1,71E-04
30	50	400	12	1,52E-04
30	50	500	12	1,93E-04
30	50	600	12	2,16E-04
30	75	400	15,6	1,66E-04
30	75	500	15,6	2,27E-04
30	75	600	15,6	2,54E-04
50	15	400	9,7	9,39E-05
50	15	500	9,7	1,14E-04
50	15	600	9,7	1,35E-04
50	30	400	11,9	1,13E-04
50	30	500	11,9	1,43E-04
50	30	600	11,9	1,65E-04
50	50	400	14,9	1,37E-04
50	50	500	14,9	1,66E-04
50	50	600	14,9	1,88E-04

50	75	400	18,6	1,58E-04
50	75	500	18,6	1,92E-04
50	75	600	18,6	2,20E-04
75	15	400	13,4	1,01E-04
75	15	500	13,4	1,18E-04
75	15	600	13,4	1,34E-04
75	30	400	15,6	1,18E-04
75	30	500	15,6	1,36E-04
75	30	600	15,6	1,50E-04
75	50	400	18,6	1,34E-04
75	50	500	18,6	1,52E-04
75	50	600	18,6	1,70E-04
75	75	400	22,3	1,55E-04
75	75	500	22,3	1,76E-04
100	15	400	17,1	1,13E-04
100	15	500	17,1	1,27E-04
100	15	600	17,1	1,43E-04
100	30	400	19,3	1,25E-04
100	30	500	19,3	1,38E-04
100	30	600	19,3	1,59E-04
100	50	400	22,3	1,47E-04
100	50	500	22,3	1,59E-04

## 8.2.3 Empirische Korrelationen

Tabelle 8-10: Empirische Korrelationen die axiale Dispersion

Autor	Korrelation	
KUMAR & HARTLAND [83]	$\frac{D_{ax}}{\bar{u} * h_c} = 0,42 + 0,29 * \frac{u_d}{u_c} + \left( 0,0126 * \frac{n * d_R}{u_c} + \frac{13,38}{3,18 + \frac{n * d_R}{u_c}} \right) * \left( \frac{u_c * d_R * \rho_c}{\mu_c} \right)^{-0,08} * \left( \frac{d_K}{d_R} \right)^{0,16} * \left( \frac{d_K}{h_c} \right)^{0,1} * \left( \frac{d_S}{d_K} \right)^2$	(8-1)
BAUER [55]	$\frac{D_{ax}}{\bar{u} * h_c} = 0,325 + 0,118 * \frac{Re_n^{0,83}}{Re_c} * \left( \frac{d_S}{d_K} \right)^2 * \left( \frac{d_K}{h_c} \right)^{0,33}$	(8-2)
STEMERDING ET. AL [54]	$\frac{D_{ax}}{\bar{u} * h_c} = 0,5 + 0,012 * \frac{n * d_R}{\bar{u}} * \left( \frac{d_S}{d_K} \right)^2$	(8-3)
SOMMEREGGER [59]	$\frac{D_{ax}}{\bar{u} * h_c} = 0,5 + 0,11 * \frac{Re_n^{0,83}}{Re_c} * \left( \frac{d_S}{d_K} \right)^2 * \left( \frac{d_K}{h_c} \right)^{0,33}$	(8-4)

## 8.3 Ergebnisse – experimenteller Vergleich RDC vs. TCDC

### 8.3.1 Flutgrenzen

Tabelle 8.11: Drehzahl am Flutpunkt, klassischer RDC100.

kont. Belastung	disp. Belastung	Flutdrehzahl	c/d	Gesamtbelastung
[m <sup>3</sup> /(m <sup>2</sup> h)]	[m <sup>3</sup> /(m <sup>2</sup> h)]	[1/min]	[-]	[m <sup>3</sup> /(m <sup>2</sup> h)]
25	5	475	5	30
20	10	425	2	30
15	15	400	1	30
10	20	400	0,5	30
5	25	350	0,2	30
15	5	525	3	20
10	10	500	1	20
5	15	475	0,33	20
20	5	500	4	25
15	10	475	1,5	25
10	15	450	0,67	25
5	20	425	0,25	25
30	5	450	6	35
25	10	425	2,5	35
20	15	400	1,33	35
15	20	375	0,75	35
10	25	350	0,4	35
5	30	300	0,167	35
5	10	525	0,5	15
10	5	575	2	15
5	5	600	1	10

Tabelle 8.12: Drehzahl am Flutpunkt, TCDC100.

kont. Belastung	disp. Belastung	Flutdrehzahl	c/d	Gesamtbelastung
[m <sup>3</sup> /(m <sup>2</sup> h)]	[m <sup>3</sup> /(m <sup>2</sup> h)]	[1/min]	[-]	[m <sup>3</sup> /(m <sup>2</sup> h)]
25	5	475	5	30
20	10	425	2	30
15	15	400	1	30
10	20	400	0,5	30
5	25	350	0,2	30
15	5	525	3	20
10	10	500	1	20

5	15	475	0,33	20
20	5	500	4	25
15	10	475	1,5	25
10	15	450	0,67	25
5	20	425	0,25	25
30	5	450	6	35
25	10	425	2,5	35
20	15	400	1,33	35
15	20	375	0,75	35
10	25	350	0,4	35
5	30	300	0,167	35
5	10	525	0,5	15
10	5	575	2	15
5	5	600	1	10

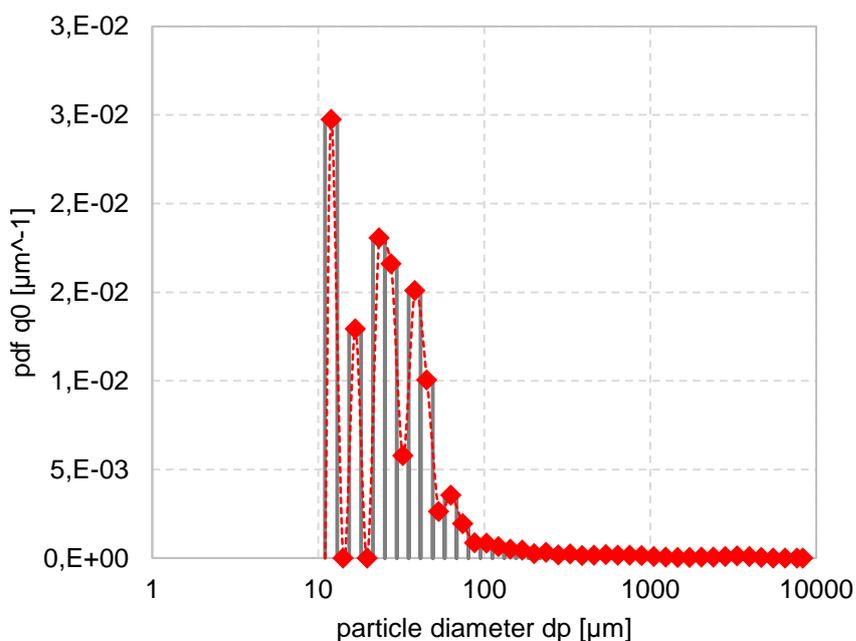
### 8.3.2 Tropfengrößenverteilungen

Tabelle 8.13: Charakteristische Kenngrößen der gemessenen TGV, 20 [m<sup>3</sup>/(m<sup>2</sup>h)], TCDC100.

		250 [1/min]	350 [1/min]	450 [1/min]	500 [1/min]
n [-]	(number of particles)	2549	2541	2449	2748
dg [µm]	(Geometric Mean)	178	444	523	468
d1,0 [µm]	(Arithmetic Mean)	967	1070	682	574
d2,0 [µm]	(Number-Surface Mean)	1733	1542	823	676
d3,0 [µm]	(Number-Volume Mean)	2213	1860	949	773
d3,2 [µm]	(Sauter Mean)	3608	2709	1261	1012
d4,3 [µm]	(De Brouckere Mean)	3852	2949	1509	1213
dmin [µm]	(Minimum Diameter)	12	11	24	71
dmax [µm]	(Maximum Diameter)	6640	4652	2822	2239
dn10 [µm]	(<10% of Number)	24	36	169	180
dn50 [µm]	(Median of Number)	71	614	607	520
dn90 [µm]	(<90% of Number)	3518	2912	1290	1018
dn95 [µm]	(<95% of Number)	3979	3214	1518	1269
dv10 [µm]	(<10% of Volume)	2879	2118	812	644
dv50 [µm]	(Median of Volume)	3843	3006	1407	1165
dv90 [µm]	(<90% of Volume)	4874	3705	2404	1840
dv95 [µm]	(<95% of Volume)	5361	3928	2643	1926

Tabelle 8.14: Charakteristische Kenngrößen der gemessenen TGV, 20 [m<sup>3</sup>/(m<sup>2</sup>h)], RDC100.

		250 [1/min]	350 [1/min]	450 [1/min]	500 [1/min]
n [-]	(number of particles)	2511	2501	2528	fluten
dg [μm]	(Geometric Mean)	720	760	659	fluten
d1,0 [μm]	(Arithmetic Mean)	1394	1091	851	fluten
d2,0 [μm]	(Number-Surface Mean)	1828	1367	1032	fluten
d3,0 [μm]	(Number-Volume Mean)	2119	1596	1224	fluten
d3,2 [μm]	(Sauter Mean)	2847	2176	1722	fluten
d4,3 [μm]	(De Brouckere Mean)	3136	2523	2626	fluten
dmin [μm]	(Minimum Diameter)	12	11	24	fluten
dmax [μm]	(Maximum Diameter)	6717	5407	8291	fluten
dn10 [μm]	(<10% of Number)	60	248	234	fluten
dn50 [μm]	(Median of Number)	987	794	712	fluten
dn90 [μm]	(<90% of Number)	3045	2315	1660	fluten
dn95 [μm]	(<95% of Number)	3384	2690	1932	fluten
dv10 [μm]	(<10% of Volume)	2178	1532	1029	fluten
dv50 [μm]	(Median of Volume)	3024	2456	1871	fluten
dv90 [μm]	(<90% of Volume)	4166	3387	8291	fluten
dv95 [μm]	(<95% of Volume)	4669	3714	8291	fluten

Abbildung 8-12: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Anzahl,  $q_0$ , 250 [1/min], 20 [m<sup>3</sup>/(m<sup>2</sup>h)], TCDC100.

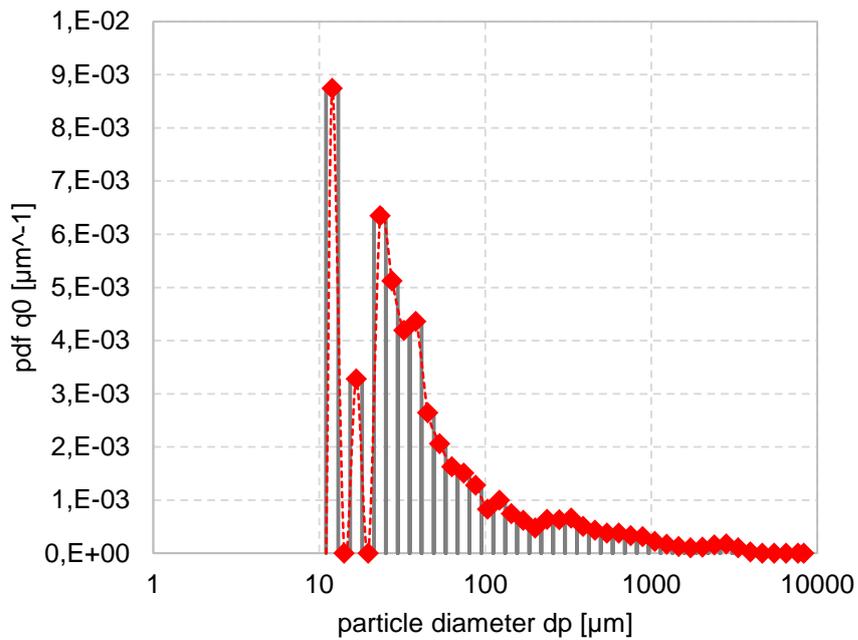


Abbildung 8-13: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Anzahl,  $q_0$ , 350 [1/min], 20 [ $\text{m}^3/(\text{m}^2\text{h})$ ], TCDC100.

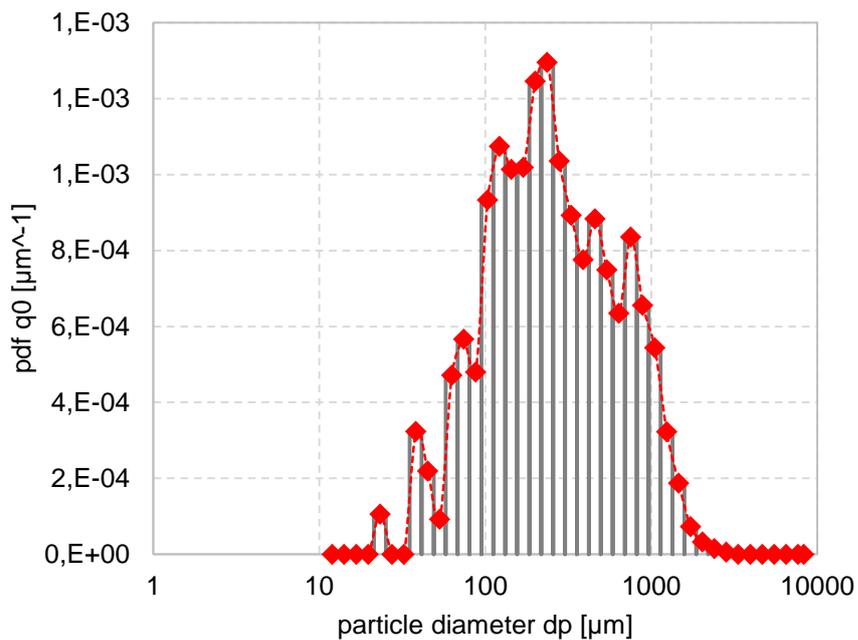


Abbildung 8-14: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Anzahl,  $q_0$ , 450 [1/min], 20 [ $\text{m}^3/(\text{m}^2\text{h})$ ], TCDC100.

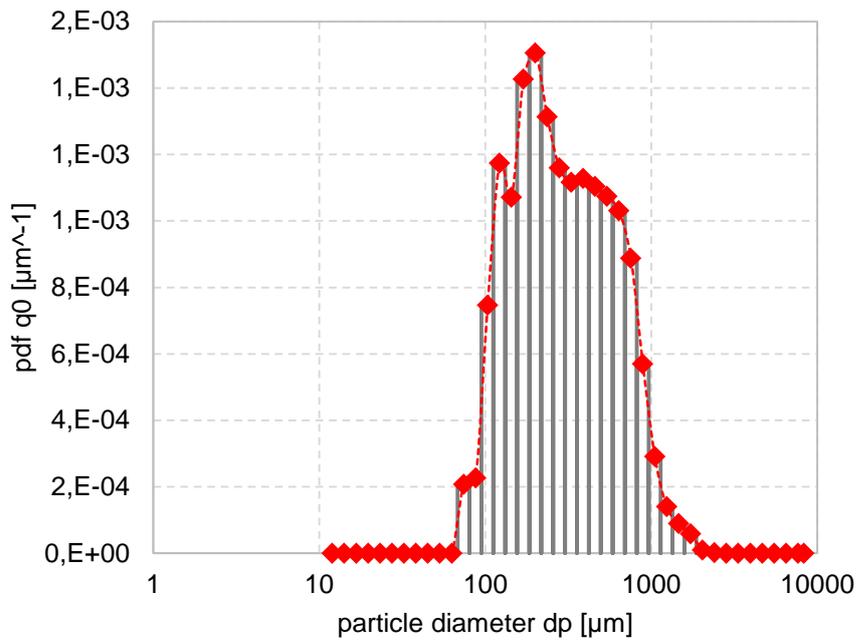


Abbildung 8-15: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Anzahl,  $q_0$ , 500 [1/min], 20 [ $\text{m}^3/(\text{m}^2\text{h})$ ], TCDC100.

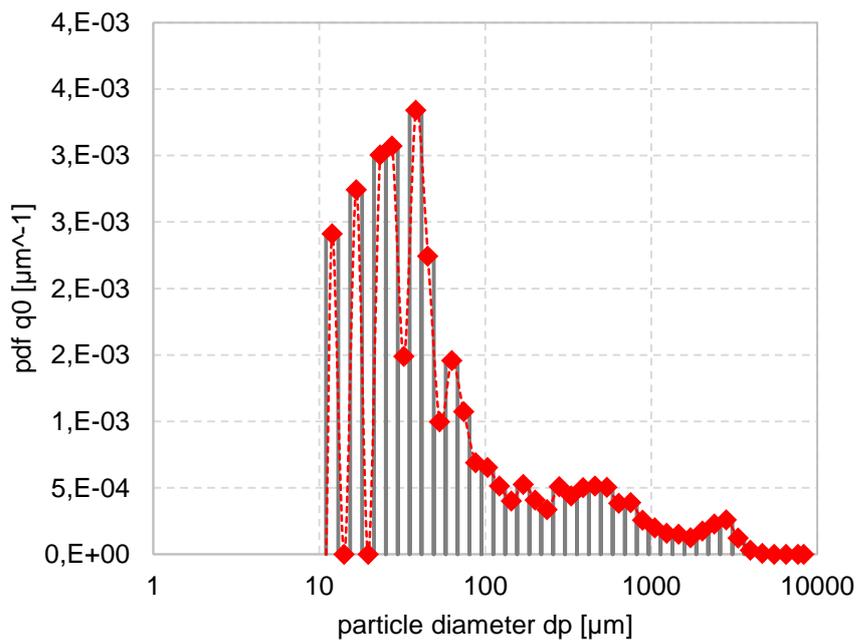


Abbildung 8-16: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Anzahl,  $q_0$ , 250 [1/min], 20 [ $\text{m}^3/(\text{m}^2\text{h})$ ], RDC100.

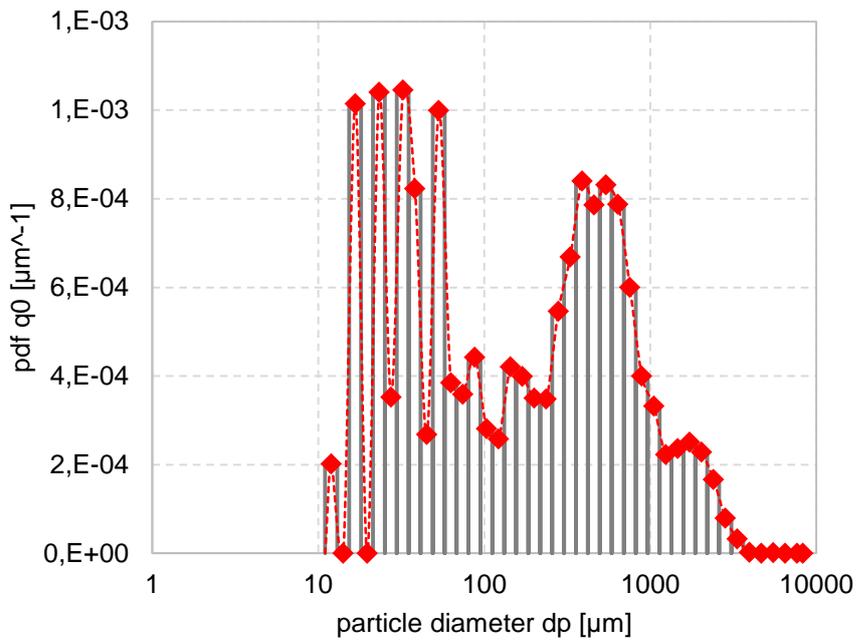


Abbildung 8-17: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Anzahl,  $q_0$ , 350 [1/min], 20 [ $\text{m}^3/(\text{m}^2\text{h})$ ], RDC100.

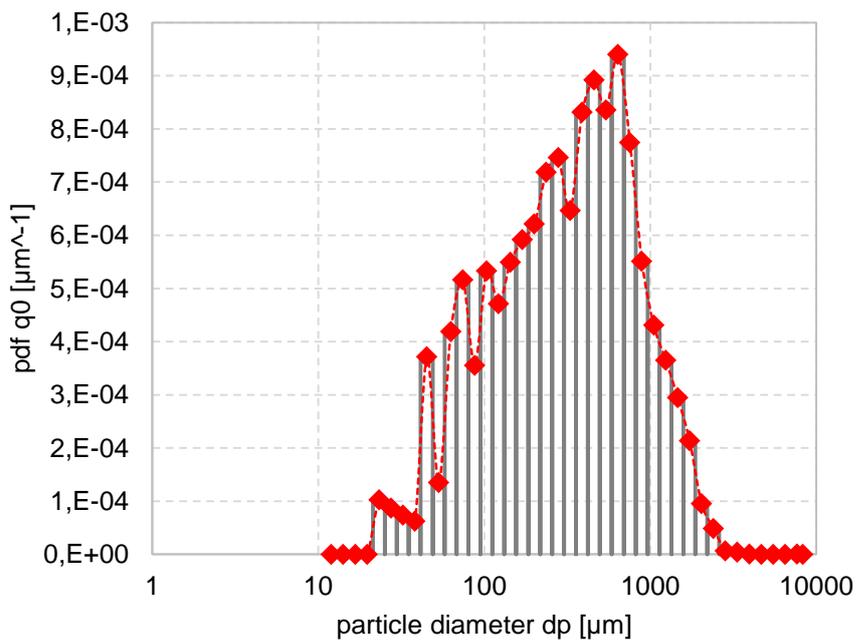


Abbildung 8-18: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Anzahl,  $q_0$ , 450 [1/min], 20 [ $\text{m}^3/(\text{m}^2\text{h})$ ], RDC100.

## 8.4 Simulationsdaten

### 8.4.1 Vergleich: *Standard Wall functions* vs. *Enhanced Wall Treatment*

Der Vergleich der Wandbehandlungsmethoden wurde für eine statorlose RDC100-Geometrie ( $H_C/D_K=0,38$ ;  $D_W/D_K=0,48$ ;  $D_R/D_K=0,86$ ) durchgeführt mit  $V_{\text{kont.}}=80$  [l/h],  $V_{\text{disp.}}=80$  [l/h] und einer vergleichsweise hohen Drehzahl von 900 [1/min]. Die zweite Phase wurde mit Euler-Euler modelliert, der Tropfendurchmesser mit  $d_{32}=2,5$  [mm] konstant gehalten, Tropfenpopulationsbilanzen wurden nicht gelöst. Die Turbulenz wurde mit RSM modelliert.

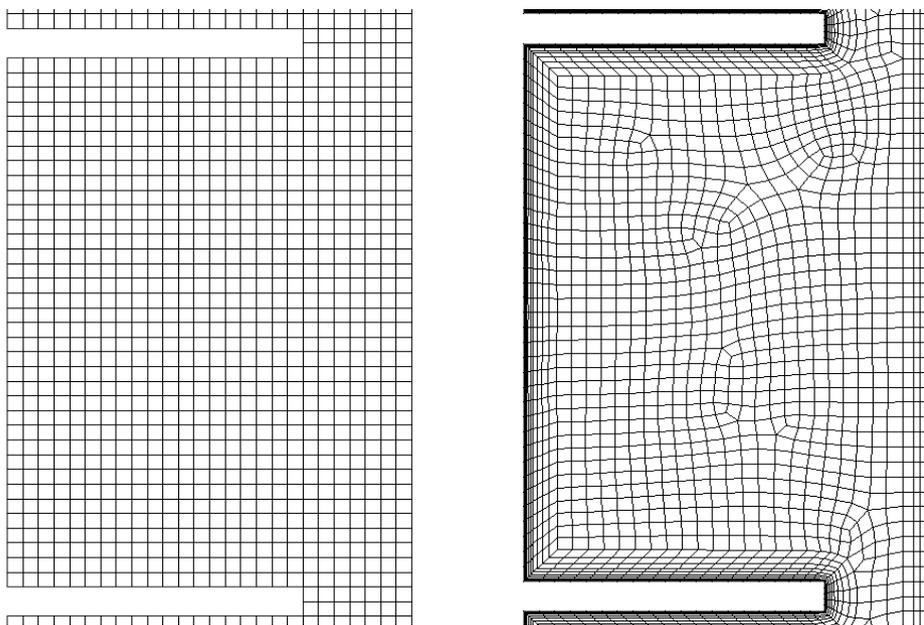


Abbildung 8-19: Vergleichene Rechengitter: strukturiertes Gitter mit *Standard Wall Functions* (links) und unstrukturiertes Gitter mit Zellenverdichtung in den *Enhanced Wall Treatment* (rechts)

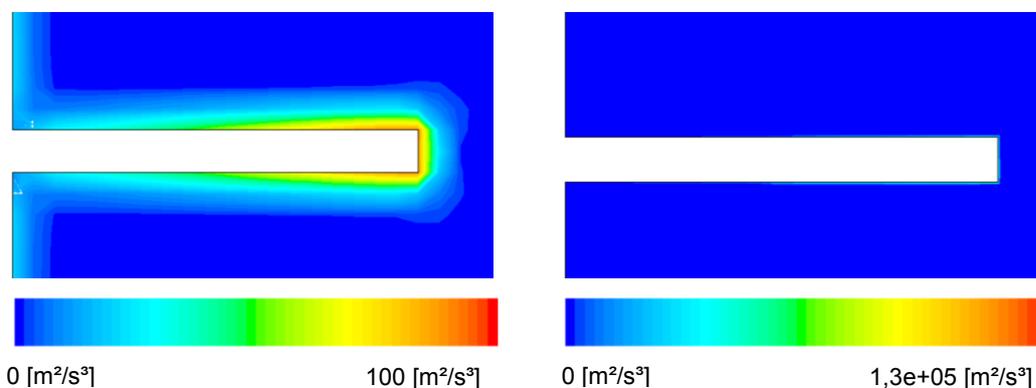
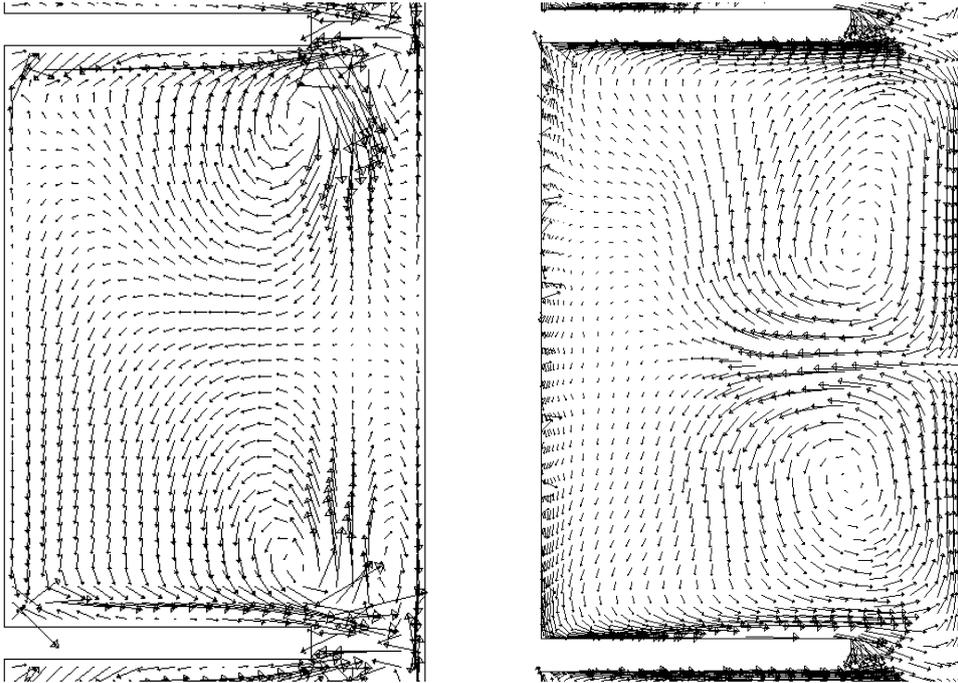
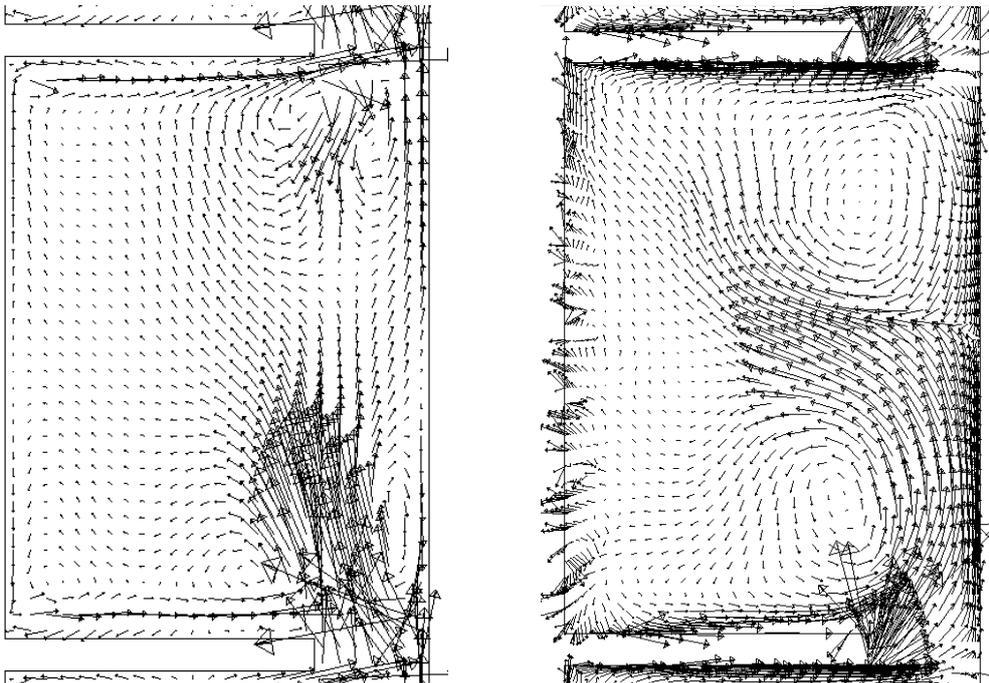


Abbildung 8-20: Vergleich der turbulenten Energiedissipation  $\epsilon$  an der Rotorspitze: *Standard Wall Functions* (links) und *Enhanced Wall Treatment* (rechts).



**Abbildung 8-21: Vergleich der kontinuierlichen Geschwindigkeitsvektoren:  
*Standard Wall Functions* (links) und *Enhanced Wall Treatment* (rechts).**



**Abbildung 8-22: Vergleich der dispersen Geschwindigkeitsvektoren:  
*Standard Wall Functions* (links) und *Enhanced Wall Treatment* (rechts).**

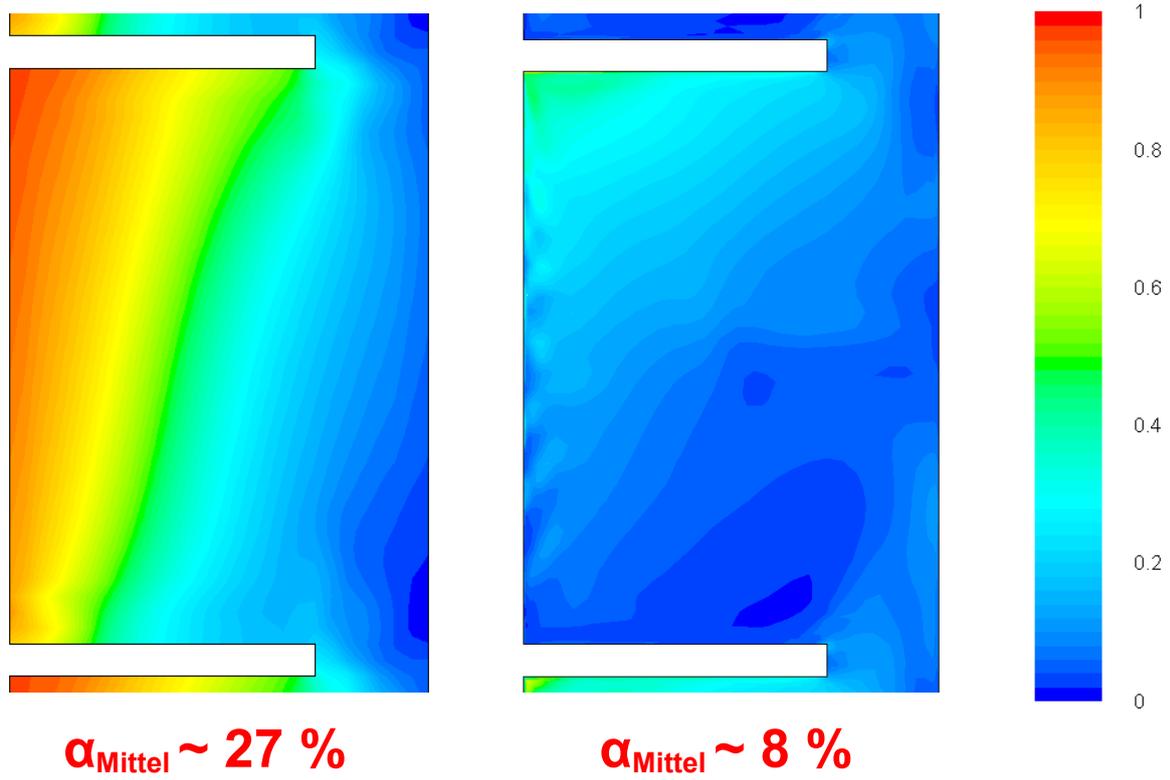


Abbildung 8-23: Vergleich der *Hold-Up*-Verteilung im Compartment:  
*Standard Wall Functions* (links) und *Enhanced Wall Treatment* (rechts).

## 8.4.2 Ergebnisse - Euler-Lagrange Simulation

### 8.4.2.1 Ergebnisse – Optimierung der axialen Rückvermischung $D_{ax,c}$

30.000 – 80.000 Rechenzellen.

RDC150

#### 8.4.2.1.1 Ergebnisse – Optimierung der Compartmenthöhe (I)

Tabelle 8.15:  $D_{ax,c}$  [ $m^2/s$ ] in Abhängigkeit der Compartmenthöhe  $H_C$  und der Drehzahl,  $V_{kont.} = 190[l/h]$ ,  $D_W=54mm$ ,  $D_R=90mm$ ,  $D_S=105mm$ ,  $D_T=150mm$ .

$H_C/D_T$ [-]	300 [1/min]	400 [1/min]	500 [1/min]
0,36	1,64E-04	1,77E-04	1,84E-04
0,27	1,47E-04	1,55E-04	1,65E-04
0,24	1,29E-04	1,40E-04	1,46E-04
0,21	1,13E-04	1,20E-04	1,24E-04
0,19	9,83E-05	1,04E-04	1,08E-04
0,16	8,59E-05	9,08E-05	9,45E-05
0,13	7,08E-05	7,45E-05	7,86E-05
0,11	6,20E-05	6,70E-05	7,01E-05
0,09	6,69E-05	6,67E-05	6,65E-05
0,08	7,13E-05	7,03E-05	6,93E-05

#### 8.4.2.1.2 Ergebnisse – Optimierung des Wellendurchmessers

Tabelle 8.16:  $D_{ax,c}$  [ $m^2/s$ ] in Abhängigkeit des Wellendurchmessers  $D_W$  und der Drehzahl,  $V_{kont.} = 190[l/h]$ ,  $H_C=26mm$ ,  $D_R=90mm$ ,  $D_S=105mm$ ,  $D_T=150mm$ .

$D_W/D_T$ [-]	400 [1/min]	500 [1/min]
0,55	1,46E-04	1,55E-04
0,52	1,39E-04	1,46E-04
0,47	1,33E-04	1,38E-04
0,41	1,17E-04	1,23E-04
0,36	1,04E-04	1,08E-04
0,33	1,05E-04	1,07E-04

<b>0,29</b>	9,70E-05	1,02E-04
<b>0,27</b>	9,97E-05	1,00E-04
<b>0,23</b>	9,62E-05	1,01E-04
<b>0,20</b>	9,17E-05	9,97E-05
<b>0,16</b>	9,13E-05	9,44E-05
<b>0,13</b>	9,17E-05	9,79E-05
<b>0,09</b>	9,20E-05	9,86E-05
<b>0,07</b>	9,73E-05	1,03E-04
<b>0,03</b>	1,01E-04	1,05E-04

#### 8.4.2.1.3 Ergebnisse – Optimierung der radialen Spaltposition

Tabelle 8.17:  $D_{ax,c}$  [m<sup>2</sup>/s] in Abhängigkeit der radialen Spaltposition und der Drehzahl,  $V_{kont.} = 190$  [l/h],  $H_C=26$ mm,  $D_W=25$ mm,  $D_R=90$ mm,  $D_T=150$ mm.

$D_S/D_T$ [-]	<b>400</b> [1/min]	<b>500</b> [1/min]
<b>1</b>	7,98E-05	8,54E-05
<b>0,9</b>	9,22E-05	9,74E-05
<b>0,8</b>	1,01E-04	1,07E-04
<b>0,7</b>	1,00E-04	1,06E-04
<b>0,6</b>	9,95E-05	1,03E-04
<b>0,583</b>	9,52E-05	9,99E-05
<b>0,567</b>	9,37E-05	9,97E-05
<b>0,55</b>	9,01E-05	9,34E-05
<b>0,533</b>	9,72E-05	9,97E-05
<b>0,5</b>	1,01E-04	1,03E-04
<b>0,45</b>	1,10E-04	1,09E-04
<b>0,4</b>	1,27E-04	1,17E-04

## 8.4.2.2 Ergebnisse – Optimierung der Compartmenthöhe (II)

### 8.4.2.2.1 Flächennutzung und Wirbelstärke

Alle nicht angegebenen Abmessungen wurden entsprechend der Laborkolonnen gewählt und konstant gehalten, ( $D_W = 48$  [mm],  $D_{R,Classic} = 72$  [mm],  $D_S = 77$  [mm],  $D_{R,Statorlos} = 86$  [mm]) siehe Tabelle 2.1. Die Werte gelten für 10 Compartments mit periodischen Rändern.

**Tabelle 8.18: Statorlose Geometrie,  $V_{kont.} = 45$  [l/h], 650 [1/min]**

$H_C$ [mm]	$H_C/D_T$ [-]	$H_C/B_C$ [-]	Wirbelfläche [m <sup>2</sup> ]	Gesamtfläche [m <sup>2</sup> ]	Flächennutzung [%]	$\Gamma_{Gesamt}$ [m <sup>2</sup> /s]
28	0,28	1,00	0,00288	0,014	20,5	0,242
34	0,34	1,23	0,00421	0,017	24,8	0,311
39	0,39	1,42	0,00560	0,0195	28,7	0,390
44	0,44	1,62	0,00675	0,022	30,7	0,450
48	0,48	1,77	0,00754	0,024	31,4	0,488
51	0,51	1,88	0,00812	0,0255	31,8	0,516
54	0,54	2,00	0,00867	0,027	32,1	0,531

**Tabelle 8.19: Statorlose Geometrie,  $V_{kont.} = 45$  [l/h], 295 [1/min]**

$H_C$ [mm]	$H_C/D_T$ [-]	$H_C/B_C$ [-]	Wirbelfläche [m <sup>2</sup> ]	Gesamtfläche [m <sup>2</sup> ]	Flächennutzung [%]	$\Gamma_{Gesamt}$ [m <sup>2</sup> /s]
28	0,28	1,00	0,00215	0,014	15,4	0,087
34	0,34	1,23	0,00329	0,017	19,4	0,115
39	0,39	1,42	0,00437	0,0195	22,4	0,139
44	0,44	1,62	0,00544	0,022	24,7	0,163
48	0,48	1,77	0,00633	0,024	26,4	0,183
51	0,51	1,88	0,00701	0,0255	27,5	0,198
54	0,54	2,00	0,00760	0,027	28,1	0,210

**Tabelle 8.20: Statorlose Geometrie,  $V_{\text{kont.}} = 0$  [l/h], 295 [1/min]**

$H_C$ [mm]	$H_C/D_T$ [-]	$H_C/B_C$ [-]	Wirbelfläche [m <sup>2</sup> ]	Gesamtfläche [m <sup>2</sup> ]	Flächennutzung [%]	$\Gamma_{\text{Gesamt}}$ [m <sup>2</sup> /s]
28	0,28	1,00	0,00214	0,014	15,3	0,089
34	0,34	1,23	0,00326	0,017	19,2	0,110
39	0,39	1,42	0,00437	0,0195	22,4	0,138
44	0,44	1,62	0,00566	0,022	25,7	0,168
48	0,48	1,77	0,00656	0,024	27,3	0,189
51	0,51	1,88	0,00714	0,0255	28,0	0,202
54	0,54	2,00	0,00767	0,027	28,4	0,213

**Tabelle 8.21: Klassische Geometrie,  $V_{\text{kont.}} = 45$  [l/h], 650 [1/min]**

$H_C$ [mm]	$H_C/D_T$ [-]	$H_C/B_C$ [-]	Wirbelfläche [m <sup>2</sup> ]	Gesamtfläche [m <sup>2</sup> ]	Flächennutzung [%]	$\Gamma_{\text{Gesamt}}$ [m <sup>2</sup> /s]
28	0,28	1,00	0,00278	0,014	19,9	0,225
34	0,34	1,23	0,00399	0,017	23,5	0,286
39	0,39	1,42	0,00492	0,0195	25,2	0,337
44	0,44	1,62	0,00592	0,022	26,9	0,379
48	0,48	1,77	0,00669	0,024	27,9	0,420
51	0,51	1,88	0,00726	0,0255	28,5	0,440
54	0,54	2,00	0,00783	0,027	29,0	0,454

**Tabelle 8.22: Klassische Geometrie,  $V_{\text{kont.}} = 45$  [l/h], 295 [1/min]**

$H_C$ [mm]	$H_C/D_T$ [-]	$H_C/B_C$ [-]	Wirbelfläche [m <sup>2</sup> ]	Gesamtfläche [m <sup>2</sup> ]	Flächennutzung [%]	$\Gamma_{\text{Gesamt}}$ [m <sup>2</sup> /s]
28	0,28	1,00	0,00223	0,014	15,9	0,091
34	0,34	1,23	0,00335	0,017	19,7	0,119
39	0,39	1,42	0,00433	0,0195	22,2	0,141
44	0,44	1,62	0,00529	0,022	24,0	0,161
48	0,48	1,77	0,00607	0,024	25,3	0,177
51	0,51	1,88	0,00658	0,0255	25,8	0,187
54	0,54	2,00	0,00709	0,027	26,3	0,195

**Tabelle 8.23: Klassische Geometrie,  $V_{\text{kont.}} = 0$  [l/h], 295 [1/min]**

$H_C$ [mm]	$H_C/D_T$ [-]	$H_C/B_C$ [-]	Wirbelfläche [m <sup>2</sup> ]	Gesamtfläche [m <sup>2</sup> ]	Flächennutzung [%]	$\Gamma_{\text{Gesamt}}$ [m <sup>2</sup> /s]
28	0,28	1,00	0,00218	0,014	15,6	0,090
34	0,34	1,23	0,00328	0,017	19,3	0,117
39	0,39	1,42	0,00427	0,0195	21,9	0,139
44	0,44	1,62	0,00529	0,022	24,0	0,161
48	0,48	1,77	0,00605	0,024	25,2	0,176
51	0,51	1,88	0,00659	0,0255	25,9	0,187
54	0,54	2,00	0,00710	0,027	26,3	0,196

**8.4.2.2 Ergebnisse – Sedimentationsgeschwindigkeit und  $D_{\text{ax,einzeltropfen}}$** 

Die mittlere Sedimentationsgeschwindigkeit wurde über 10 Compartments aus jeweils 30000 Versuchen/Injektionen ermittelt.

**Tabelle 8.24: Sedimentationsgeschwindigkeit starrer SST-Kugeln in [m/s] bei Variation des Kugeldurchmessers, Klassische Geometrie,  $V_{\text{kont.}} = 0$  [l/h], 295 [1/min].**

$H_C/D_T$ [-]	3 [mm]	2,5 [mm]	2,25 [mm]	2 [mm]	1,75 [mm]	1,5 [mm]	1,25 [mm]	1 [mm]
<b>0,28</b>	0,050	0,049	0,048	0,046	0,041	0,036	0,029	0,022
<b>0,34</b>	0,052	0,052	0,050	0,047	0,041	0,035	0,027	0,020
<b>0,44</b>	0,049	0,048	0,046	0,041	0,035	0,029	0,024	0,018
<b>0,51</b>	0,051	0,048	0,044	0,038	0,032	0,027	0,022	0,017
<b>0,58</b>	0,054	0,048	0,043	0,037	0,032	0,027	0,022	0,017

**Tabelle 8.25:  $D_{\text{ax,einzeltropfen}}$  starrer SST-Kugeln in [m<sup>2</sup>/s] bei Variation des Kugeldurchmessers, Klassische Geometrie,  $V_{\text{kont.}} = 0$  [l/h], 295 [1/min].**

$H_C/D_T$ [-]	3 [mm]	2,5 [mm]	2,25 [mm]	2 [mm]	1,75 [mm]	1,5 [mm]	1,25 [mm]	1 [mm]
<b>0,28</b>	7,70E-04	7,53E-04	7,28E-04	7,28E-04	7,27E-04	6,93E-04	6,81E-04	5,68E-04
<b>0,34</b>	9,43E-04	9,42E-04	9,25E-04	9,22E-04	9,02E-04	8,81E-04	7,97E-04	6,32E-04
<b>0,44</b>	1,26E-03	1,30E-03	1,35E-03	1,41E-03	1,42E-03	1,28E-03	1,10E-03	8,49E-04

<b>0,51</b>	1,36E-03	1,54E-03	1,68E-03	1,75E-03	1,66E-03	1,45E-03	1,15E-03	8,39E-04
<b>0,58</b>	1,61E-03	1,85E-03	1,96E-03	2,00E-03	1,83E-03	1,69E-03	1,32E-03	1,06E-03

**Tabelle 8.26: Sedimentationsgeschwindigkeit starrer SST-Kugeln in [m/s] bei Variation des Kugeldurchmessers, statorlose Geometrie (TCDC),  $V_{\text{kont.}} = 0$  [l/h], 295 [1/min]**

$H_C/D_T$	<b>3</b>	<b>2,5</b>	<b>2,25</b>	<b>2</b>	<b>1,75</b>	<b>1,5</b>	<b>1,25</b>	<b>1</b>
[-]	[mm]	[mm]	[mm]	[mm]	[mm]	[mm]	[mm]	[mm]
<b>0,28</b>	0,068	0,062	0,059	0,055	0,049	0,041	0,034	0,026
<b>0,34</b>	0,066	0,061	0,059	0,055	0,049	0,042	0,034	0,025
<b>0,44</b>	0,061	0,055	0,051	0,047	0,042	0,035	0,029	0,022
<b>0,51</b>	0,060	0,054	0,051	0,046	0,040	0,033	0,027	0,021
<b>0,58</b>	0,058	0,052	0,048	0,042	0,036	0,031	0,025	0,020

**Tabelle 8.27:  $D_{\text{ax,einzeltropfen}}$  starrer SST-Kugeln in [m<sup>2</sup>/s] bei Variation des Kugeldurchmessers, statorlose Geometrie (TCDC),  $V_{\text{kont.}} = 0$  [l/h], 295 [1/min].**

$H_C/D_T$	<b>3</b>	<b>2,5</b>	<b>2,25</b>	<b>2</b>	<b>1,75</b>	<b>1,5</b>	<b>1,25</b>	<b>1</b>
[-]	[mm]	[mm]	[mm]	[mm]	[mm]	[mm]	[mm]	[mm]
<b>0,28</b>	5,29E-04	4,99E-04	4,50E-04	4,48E-04	4,59E-04	4,43E-04	4,19E-04	3,76E-04
<b>0,34</b>	9,26E-04	8,44E-04	7,87E-04	7,19E-04	7,07E-04	6,57E-04	6,23E-04	5,22E-04
<b>0,44</b>	1,80E-03	1,50E-03	1,31E-03	1,20E-03	1,11E-03	1,06E-03	9,03E-04	7,19E-04
<b>0,51</b>	2,25E-03	1,75E-03	1,51E-03	1,39E-03	1,38E-03	1,29E-03	1,08E-03	8,29E-04
<b>0,58</b>	2,39E-03	1,79E-03	1,62E-03	1,61E-03	1,60E-03	1,51E-03	1,22E-03	8,70E-04

### 8.4.2.3 Ergebnisse – Gekoppelte Optimierung von Compartmenthöhe und Wellendurchmesser für die statorlose Geometrie

Alle nicht angegebenen Abmessungen wurden entsprechend der Laborkolonne gewählt und konstant gehalten, ( $D_{R,Statorlos} = 86$  [mm]) siehe Tabelle 2.1. Die Werte gelten für 10 Compartments mit periodischen Rändern,  $V_{kont.} = 0$  [l/h] und 295 [1/min].

**Tabelle 8.28: Statorlose Geometrie,  $D_W = 38$  [mm]**

$H_C$ [mm]	$H_C/D_T$ [-]	$H_C/B_C$ [-]	Wirbelfläche [m <sup>2</sup> ]	Gesamtfläche [m <sup>2</sup> ]	Flächennutzung [%]	$\Gamma_{Gesamt}$ [m <sup>2</sup> /s]
34	0,34	1,03	0,00308	0,017	18,1	0,107
39	0,39	1,19	0,00388	0,0195	19,9	0,120
44	0,44	1,35	0,00462	0,022	20,9	0,130
48	0,48	1,48	0,00512	0,024	21,3	0,137
54	0,54	1,68	0,00580	0,027	21,4	0,145
58	0,58	1,81	0,00619	0,029	21,3	0,149
64	0,64	2,00	0,00667	0,032	20,8	0,154

**Tabelle 8.29: Statorlose Geometrie,  $D_W = 43$  [mm]**

$H_C$ [mm]	$H_C/D_T$ [-]	$H_C/B_C$ [-]	Wirbelfläche [m <sup>2</sup> ]	Gesamtfläche [m <sup>2</sup> ]	Flächennutzung [%]	$\Gamma_{Gesamt}$ [m <sup>2</sup> /s]
30,5	0,305	1,00	0,00253	0,0153	16,58	0,097
39	0,39	1,30	0,00397	0,0107	20,36	0,124
44	0,44	1,47	0,00472	0,0121	21,47	0,134
48	0,48	1,61	0,00527	0,0133	21,97	0,142
54	0,54	1,82	0,00632	0,0150	23,40	0,161
59	0,59	2,00	0,00763	0,0164	25,87	0,161

**Tabelle 8.30: Statorlose Geometrie,  $D_W = 53$  [mm]**

$H_C$ [mm]	$H_C/D_T$ [-]	$H_C/B_C$ [-]	Wirbelfläche [m <sup>2</sup> ]	Gesamtfläche [m <sup>2</sup> ]	Flächennutzung [%]	$\Gamma_{Gesamt}$ [m <sup>2</sup> /s]
23,7	0,237	0,92	0,00155	0,0119	13,09	0,076
34	0,34	1,36	0,00355	0,0170	20,85	0,134

39	0,39	1,57	0,00464	0,0195	23,79	0,169
44	0,44	1,79	0,00545	0,0220	24,79	0,189
49	0,49	2,00	0,00635	0,0245	25,93	0,205

**Tabelle 8.31: Statorlose Geometrie,  $D_w = 58$  [mm]**

$H_C$ [mm]	$H_C/D_T$ [-]	$H_C/B_C$ [-]	Wirbelfläche [m <sup>2</sup> ]	Gesamtfläche [m <sup>2</sup> ]	Flächennutzung [%]	$\Gamma_{\text{Gesamt}}$ [m <sup>2</sup> /s]
23	0,23	1,00	0,00144	0,0115	12,53	0,076
28	0,28	1,24	0,00240	0,014	17,11	0,113
31	0,31	1,38	0,00292	0,0155	18,85	0,133
34	0,34	1,52	0,00338	0,017	19,86	0,148
39	0,39	1,76	0,00407	0,0195	20,88	0,171
44	0,44	2,00	0,00469	0,022	21,32	0,190

---

## 9 Veröffentlichungen

---

### Vorträge

#### 2014

Aksamija, E.; Siebenhofer, M.:

**Design and Operation Characteristics of Liquid-Liquid Extractors with Disc Supported Taylor-Couette-Flow.**

in: AIChE Annual Meeting, Atlanta am: 16.11.2014

Aksamija, E.; Siebenhofer, M.:

**Intensivierung durch Vereinfachung: der Taylor-Couette-Disc-Contactor.**

in: ProcessNet-Jahrestagung und 31. Jahrestagung der Biotechnologen 2014. Aachen am: 30.09.2014

Aksamija, E.; Siebenhofer, M.:

**Hybridisation of Taylor-Couette Reactors and RDC Columns.**

in: 20th International Solvent Extraction Conference 2014 – ISEC. Würzburg am: 07.10.2014

#### 2013

Painer, D.; Aksamija, E.; Lux, S.; Siebenhofer, M.:

**Isolation of acetic acid and formic acid from green liquor condensates.**

in: AIChE Annual Meeting, San Francisco am: 06.11.2013

Siebenhofer, M.; Lux, S.; Aksamija, E.; Feiner, R.:

**Process Intensification; Challenge, Targets and Experience.**

in: AIChE Annual Meeting, San Francisco am: 04.11.2013.

Aksamija, E.; Siebenhofer, M.:

**Progress in RDC-Design.**

in: AIChE Annual Meeting, San Francisco am: 6.11.2013

Aksamija, E.; Siebenhofer, M.:

**Statorlose RDC-Extraktionskolonnen; Design und Betriebscharakteristik.**

in: Jahrestreffen der Fachgemeinschaft Fluidynamik und Trenntechnik 2013, Würzburg 25. - 27. September 2013

---

**2012**

Aksamija, E.; Prieler, R.; Zörweg, K.; Siebenhofer, M.:

**CFD-supported design of internals geometry of rotating disc contactors.**

in: Achema 2012, Frankfurt am Main am: 19.06.2012

Buchbender, F.; Aksamija, E.; Pfennig, A.:

**ReDrop.**

in: AIChE Annual Meeting, Pittsburgh am: 28.10.2012

Aksamija, E.; Prieler, R. J.; Zörweg, K.; Pfennig, A.; Siebenhofer, M.:

**A Simplified and Optimized Novel Design of RDC-Columns.**

in: AIChE Annual Meeting, Pittsburgh am: 28.10.2012

Aksamija, E.; Siebenhofer, M.:

**RDC-Design and Operation Efficiency.**

in: AIChE 2012 Annual Meeting, Pittsburgh am: 28.10.2012

Aksamija, E.; Siebenhofer, M.:

**CFD-gestütztes Design von Drehscheibenextraktoren.**

in: Jahrestreffen der Fachgruppe „Extraktion“ und des Fachausschusses „Phytoextrakte – Produkte und Prozesse“, Clausthal-Zellerfeld am: 18.04.2012

Aksamija, E.; Weinländer, C.; Pfennig, A.; Siebenhofer, M.:

**CFD-gestütztes Design von Drehscheibenextraktoren.**

in: ProcessNet-Jahrestagungen und 30. Jahrestagung der Biotechnologen, Karlsruhe am: 10.09.2012

Aksamija, E.; Prieler, R.; Zörweg, K.; Pfennig, A.; Siebenhofer, M.:

**Optimiertes Design von Drehscheibenextraktoren.**

in: 8.Minisymposium Verfahrenstechnik, Linz am: 02.05.2012

**2011**

Aksamija, E.; Pfeffer R.; Siebenhofer, M.:

**CFD-Aided Optimization of Agitated Extraction Columns.**

in: AiCHE Annual Meeting, Minneapolis am: 16.10.2011

Aksamija, E.; Pfeffer, R. Siebenhofer, M.:

**CFD-Aided Optimization of Agitated Extraction Columns.**

in: Ansys Multiphase Flows: Simulation, Experiment and Application, Dresden 08.06.2011

Aksamija, E.; Pfeffer, R.; Siebenhofer, M.:

**CFD-Aided Design and Scale up of Agitated Extraction Columns.**

in: ISEC 19th International Solvent Extraction Conference, Santiago am: 03.10.2011

Aksamija, E.; Pfeffer, R.; Siebenhofer, M.:

**Optimierung der Kolonneneinbauten eines Drehscheibenextraktors mittels CFD.**

in: Workshop Mulm und ReDrop, Aachen am: 22.09.2011

Aksamija, E.; Pfeffer, R.; Siebenhofer, M.:

**CFD-Aided Optimization of Agitated Extraction Columns.**

in: 7. Minisymposium der Verfahrenstechnik, Graz am: 30.06.2011

**2010**

Aksamija, E.; Preisack, B.; Gurker, T.; Siebenhofer, M.:

**CFD Simulations of an RDC-Column for Apparatus Design and Scale up.**

in: AIChE Annual Meeting 2010, Salt Lake City am: 07.11.2010

Witek, G.; Aksamija, E.; Siebenhofer, M.; Uhlig, F.:

**Monofunctional Polysiloxanes: Production and Scale up.**

in: AIChE Annual Meeting 2010, Salt Lake City am: 07.11.2010

Aksamija, E.; Preisack, B.; Gurker, T.; Siebenhofer, M.:

**Single phase study of a RDC-column and evaluation of turbulence models using particle image velocimetry (PIV).**

in: 19th International Congress of Chemical and Process Engineering CHISA 2010, 7th European Congress of Chemical Engineering 7, Prag am: 28.08.2010

---

**Poster**

**2014**

Aksamija, E.; Siebenhofer, M.:

**Liquid-Liquid Extractors with Disc supported Taylor-Couette-Flow. –**

in: Symposium on Separation Science and Technology for Energy Applications, Oak Ridge, Tennessee, USA am: 27.10.2014

Hacker, V.; Nestl, S.; Voitic, G.; Lux, S.; Aksamija, E.; Gehrler, C.; Friedrich, T.:

**Hydrogen Production, Storage and Purification using the Steam Iron Process.**

in: 14th International Symposium on Metal-Hydrogen Systems, Manchester, 22.07.2014

## 2013

Aksamija, E.; Siebenhofer, M.:

### **Process Intensification in Liquid-Liquid Extraction.**

in: AIChE Annual Meeting, San Francisco am: 4.11.2013

Aksamija, E.; Weinländer, C.; Siebenhofer, M.:

### **A Novel Simplified Design For Agitated Extraction Columns.**

in: 9th European Congress of Chemical Engineering, Den Haag am: 21.04.2013

## 2011

Aksamija, E.; Pfeffer, R.; Siebenhofer, M.:

### **CFD-Aided Optimization of Agitated Extraction Columns.**

in: 8th European Congress of Chemical Engineering, Berlin am: 25.09.2011

## 2010

Aksamija, E.; Gurker, T.; Siebenhofer, M.:

### **Single-phase study of a RDC-column and evaluation of turbulence models using Particle Image Velocimetry (PIV).**

in: Jahrestreffen der Fachausschüsse CFD-Computational Fluid Dynamics und Wärme- und Stoffübertragung, Hamburg am: 08.03.2010

Aksamija, E.; Gurker, T.; Siebenhofer, M.:

### **Einphasige PIV-Untersuchungen einer gerührten Extraktionskolonne und die Evaluierung von Turbulenzmodellen in CFD.**

in: 28. DECHEMA-Jahrestagung der Biotechnologen und ProcessNet-Jahrestagung, Aachen, am: 21.09.2010

Aksamija, E.; Gurker, T.; Siebenhofer, M.:

### **Einphasige PIV-Untersuchungen einer RDC-Kolonne und Evaluierung von Turbulenzmodellen.**

in: 6. Minisymposium Verfahrenstechnik, Tulln am: 24.06.2010

## Beiträge in Fachzeitschriften

### 2014

Aksamija, E.; Siebenhofer, M.:

#### **Intensivierung durch Vereinfachung: der Taylor-Couette-Disc-Contactor.**

in: Chemie-Ingenieur-Technik 9 (2014) , S. 1456 – 1457

Aksamija, E.; Siebenhofer, M.:

#### **Viel einfacher Extrahieren!.**

in: CITplus 12 (2014) , S. 57 – 59

### 2013

Aksamija, E.; Siebenhofer, M.:

#### **Statorlose RDC-Extraktionskolonnen: Design und Betriebscharakteristik.**

in: Chemie-Ingenieur-Technik 85 (2013) 9, S. 1388

### 2012

Aksamija, E.; Prieler, R. J.; Zörweg, K.; Pfennig, A.; Siebenhofer, M.:

#### **CFD-gestütztes Design von Drehscheibenextraktoren.**

in: Chemie-Ingenieur-Technik (2012) 8, S. 1262 - 1262

### 2010

Gurker, T.; Aksamija, E.; Siebenhofer, M.:

#### **PIV-Untersuchungen einer RDC-Kolonne und Evaluierung von Turbulenzmodellen.**

in: Chemie-Ingenieur-Technik (2010) 9, S. 1385 – 1385

---

## Beiträge in Konferenz-Berichten

### 2012

Aksamija, E.; Prieler, R.; Zörweg, K.; Pfennig, A.; Siebenhofer, M.:

#### **Optimiertes Design von Drehscheibenextraktoren.**

in: Book of Abstracts zum 8.Minisymposium Verfahrenstechnik, (2012), S. 3 – 4

**2011**

Aksamija, E.; Pfeffer R.; Siebenhofer, M.:

**CFD-Aided Design and Scale up of Agitated Extraction Columns.**

in: ISEC 19th International Solvent Extraction Conference. (2011), S. 122 – 122

Aksamija, E.:

**CFD-Aided Optimization of Agitated Extraction Columns.**

in: 7.Minisymposium Verfahrenstechnik (2011), S. 9 – 10

**2010**

Aksamija, E.; Gurker, T.; Siebenhofer, M.:

**Einphasige PIV-Untersuchungen einer RDC-Kolonne und Evaluierung von Turbulenzmodellen.**

in: 6. Minisymposium Verfahrenstechnik, Tagungsband. (2010), S. 93 – 97

Aksamija, E.; Preisack, B.; Gurker, T.; Siebenhofer, M.:

**Single phase study of a RDC-column and evaluation of turbulence models using particle image velocimetry (PIV).**

in: Summaries 3 - Hydrodynamic processes and system engineering. (2010), S. 915 - 916