



Annika Graftschafter, BSc

Hydrodynamik und Stoffaustausch in einem modifizierten Drehscheibenextraktor im Labormaßstab

MASTERARBEIT

zur Erlangung des akademischen Grades

Diplom-Ingenieurin

Masterstudium Verfahrenstechnik

eingereicht an der

Technischen Universität Graz

Betreuer

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

am Institut für Chemische Verfahrenstechnik und

Umwelttechnik

Zweitbetreuer

Dipl.-Ing. Enes Aksamija

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 entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe. Das in TUGRAZonline hochgeladene Textdokument ist mit der vorliegenden Masterarbeit identisch.

Datum

Unterschrift

“Everything should be made as simple as possible, but not simpler.”
Albert Einstein

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei all denen bedanken, die mich bei der Fertigstellung meiner Diplomarbeit unterstützt haben.

Besonderer Dank gebührt Univ. Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Matthäus Siebenhofer und Herrn Dipl.-Ing. Enes Aksamija. Die engagierte, persönliche Betreuung und das große Interesse, sowie der fachliche Input bei der Entwicklung meiner Diplomarbeit, haben mich motiviert und mir immer wieder neuen Antrieb gegeben.

Weiters möchte ich mich bei allen Kolleginnen und Kollegen sowie bei allen Mitarbeitern des Instituts für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik für die besonders große Hilfsbereitschaft und das kameradschaftliche Arbeitsklima bedanken.

Der größte Dank gebührt jedoch meiner Familie, die durch bedingungsloses Vertrauen und Unterstützung meine Studienzeit zu einem unvergesslichen Lebensabschnitt werden ließ.

Kurzfassung

In dieser Arbeit wurde eine gerührte Flüssig/Flüssig-Extraktionsanlage im Labormaßstab, mit einem Kolonnendurchmesser von 0,03 [m], bezüglich ihrer Trennleistung und Hydrodynamik unter dem Einsatz verschiedener Rührerdesigns experimentell untersucht. Hierfür wurden die Einbauten eines gewöhnlichen Drehscheiben-Extraktors (Rotating Disc Contactor – RDC) nach den Erkenntnissen und Designregeln von AKSAMIJA [1] insofern modifiziert, dass sich ein Hybrid aus RDC und Taylor-Couette-Reaktor ergab. AKSAMIJA bezeichnet diesen Extraktor auch als Taylor-Couette-Disc-Contactor (TCDC). Die Trennleistung wurde mittels Stoffaustauschversuchen mit dem Stoffsystem Wasser – n-Butanol – ShellSol-T ermittelt. Vor Beginn der Stoffaustauschversuche wurden die maximalen Kolonnenbelastungen bzw. die Flutgrenzen der Kolonne beim Einsatz verschiedener TCDC-Rührerdesigns im zweiphasigen Betrieb bestimmt. Durch die hydrodynamischen Versuchsreihen wurde gezeigt, dass die Auslegungsregeln der verwendeten TCDCs im Scale-Down nicht anwendbar waren, da aufgrund nicht reduzierbarer Stoffeigenschaften, wie Oberflächenspannung und die daraus resultierende Tropfengröße, der Flutpunkt bereits bei niedrigen Kolonnenbelastungen erreicht wurde. Die TCDC – Rührerdesigns wurden daraufhin durch das Anwinkeln und Verkleinern des Durchmessers der Rotorscheiben, modifiziert. Die Flutgrenze der Kolonne konnte dadurch signifikant erhöht werden. Mit drei modifizierten TCDC-Rührerdesigns wurden die Stoffaustauschversuche durchgeführt und die Trennleistung, sowie die HTU/NTU-Werte untereinander verglichen. Die beste Trennleistung konnte Rührerdesign 4, mit 10° nach unten angewinkelten und im Durchmesser um 1[mm] verkleinerten Rotorscheiben, erzielen. Der ursprüngliche Durchmesser der nichtmodifizierten Rotorscheiben des TCDC betrug 25,5 [mm]. Neben den Untersuchungen der Hydrodynamik und der Trennleistung, wurden ebenso photographische Aufzeichnungen der Strömungsentwicklung in der Kolonne durchgeführt, dokumentiert und gegenübergestellt.

Weiters beschäftigte sich ein Teil dieser Arbeit mit der mehrphasigen Strömungssimulation einer klassischen Extraktionskolonne. Mit Hilfe von experimentell ermittelten Daten der axialen Dispersion, wurden die Simulationsergebnisse validiert. Der Einfluss verschiedener Tropfendurchmesser, der in der Simulation angenommenen monodispersen Phase, auf die

axiale Dispersion der kontinuierlichen Phase $D_{ax,c}$, wurde untersucht. Ein deutlicher Anstieg des axialen Dispersionskoeffizienten wurde beim Reduzieren des Tropfendurchmessers von 1,6 [mm] auf 1,5 [mm] festgestellt. Mit 1,3 [mm] und 1,5 [mm] konnte der Verlauf der axialen Dispersion in Abhängigkeit des organischen Volumenstroms aus den Experimenten reproduziert werden. Mit einer Tropfengröße von 1,6 [mm] korrelierte der axiale Dispersionskoeffizient, entgegen der theoretischen Erwartung, negativ mit dem steigenden Volumenstrom. In dieser Arbeit wurde mit Hilfe des Euler/Euler-Verfahrens der Mehrphasensimulation die Komplexität der Strömung in der gerührten RDC-Extraktionskolonne mit ausreichender Genauigkeit modelliert und eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten erzielt.

Abstract

In this master thesis a stirred liquid/liquid-extraction plant in laboratory scale with a column diameter of 0,03 [m] was experimentally investigated regarding separation performance and hydrodynamics, using different stirrer designs. The internals of a classical rotating disc contactor (RDC) were modified according to the design rules of AKSAMİJA [1]. This resulted in a hybrid of RDC and Taylor-Couette reactor, described by AKSAMİJA as Taylor-Couette-Disc-Reactor (TCDC). The separation capacity was determined by mass transfer experiments using the test system water – n-butanol – shellsol-T. Before the start of the mass transfer experiments, the maximum column capacity and the flooding point were determined by using different TCDC-stirrers. The findings of these experiments indicate that the design rules for the used TCDC do not apply for the scale-down because of the irreducible material properties such as surface tension and the resulting drop size. The flooding point of the column was observed at low column capacity. Therefore, the TCDC-designs had to be modified by inclining and reducing the diameter of the rotor discs which resulted in a significant increase of the column's flooding point. In total, the mass transfer experiments were carried out with three different modified TCDC-designs. All results of the separation as well as the HTU/NTU-values were compared among each other. The best separation performance was achieved by using a design at which the rotor discs were inclined downwards at a 10° angle while the diameter was reduced by 1 [mm]. The original diameter of the non-modified rotor disc was 25,5 [mm]. In addition to the studies of hydrodynamics and separation performance, photographic records of the flow distribution in the column were documented and compared.

Another part of this thesis dealt with the multiphase flow simulation of a classic extraction column. The simulation results were validated with experimental data. For the multiphase flow simulation, a mono-disperse drop size distribution was assumed. The influence of different droplet diameters on the axial dispersion of the continuous phase $D_{ax,c}$ was examined. By reducing the droplet diameter from 1,6 [mm] to 1,5 [mm], a significant increase of the axial dispersion coefficient was observed. The actual trend of axial dispersion with increasing organic flow rates was reproducible with 1,3 [mm] and 1,5 [mm] droplet diameter. In contrast to the theoretical expectations, the axial dispersion

coefficient correlated negatively with increasing organic flow rates above a droplet size of 1,6 [mm]. In this thesis it was shown that the Eulerian – Eulerian model for multiphase simulations is able to describe the complexity of the flow in the stirred RDC-column with sufficient accuracy and a good agreement with experimental data.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Zielsetzung	1
2	Theoretische Grundlagen Extraktion.....	3
2.1	Flüssig/Flüssig-Extraktion (Solventextraktion).....	4
2.2	Flüssig/Flüssig - Extraktoren.....	5
2.2.1	Rotating Disc Contactor - RDC.....	5
2.2.2	Taylor-Couette-Reaktor - TCR.....	7
2.3	Dimensionierung von Flüssig/Flüssig - Extraktoren.....	8
2.3.1	Phasengleichgewicht	8
2.3.2	Stofftransport in Extraktionsapparaten.....	11
2.3.2.1	Stoffübergang	11
2.3.2.2	Stoffdurchgang	14
2.3.3	Vermischungseffekte – die Axiale Dispersion	16
2.3.3.1	Dispersionsmodell	18
2.3.3.2	HTU-NTU Konzept.....	19
3	Grundlagen Computational Fluid Dynamics.....	20
3.1	Grundlagen zu mathematischer Modellierung der Transportprozesse - Erhaltungsgleichungen	20
3.1.1	Kontinuitätsgleichung - Massenerhaltung.....	21
3.1.2	Impulserhaltungsgleichung.....	22
3.1.3	Energiegleichung	23
3.1.4	Lösen der Erhaltungsgleichungen	23
3.1.5	Anfangsbedingung und Randbedingungen.....	24
3.1.5.1	Anfangsbedingung.....	24
3.1.5.2	Randbedingungen	25
3.1.5.3	Richtlinien für Randbedingungen.....	26
3.1.6	Numerische Methoden – Diskretisierung	27
3.1.6.1	Finite-Volumen-Methode (FVM).....	28

3.1.7	Geometrie und Gitter	28
3.1.7.2	Grenzschichtbehandlung – Netzverdichtung.....	29
3.1.8	Turbulenzmodellierung	32
3.1.8.1	RANS-Modelle.....	33
3.1.9	Transport in mehrphasigen Systemen.....	35
3.1.9.1	Typische charakteristische Größen zur Beschreibung von Mehrphasenströmungen	36
3.1.9.2	Wechselwirkungen zwischen kontinuierlicher und disperser Phase	37
3.1.10	Ansätze zur Mehrphasenmodellierung	37
3.1.10.1	Euler/Lagrange Verfahren (Discrete Phase Model-DPM)	38
3.1.10.2	Euler/Euler-Verfahren	39
3.1.11	Modellierung von Mehrphasenströmungen.....	39
3.1.11.1	Massenerhaltung.....	39
3.1.11.2	Impulserhaltung	40
4	Experimenteller Teil.....	41
4.1	Anfertigung der TCDC – Rührerdesigns.....	42
4.2	Aufbau der Versuchsanlage.....	46
4.3	Hydrodynamische Versuche.....	47
4.3.1	Hold-Up und Flutpunkt - Rührerdesign 1	48
4.3.2	Hold-Up und Flutpunkt - Rührerdesign 2	50
4.3.3	Vergleich Hold-Up und Flutpunkt - Rührerdesign 1 und 2.....	51
4.3.4	Vergleich Hold-Up und Flutpunkt – Rührerdesign 1 und 5 (TCDC).....	52
4.3.5	Vergleich Hold-Up und Flutpunkt – Rührerdesign 2 und 6 (modifizierter TCDC).....	53
4.3.6	Gegenüberstellung aller hydrodynamisch vermessener Designs	54
4.4	Stoffaustauschversuche	56
4.4.1	Stoffsystem	56
4.4.2	Versuchsdurchführung.....	57
4.4.3	Ergebnisse Stoffaustausch	58
4.4.3.1	Stoffaustauschversuch 1 mit Rührerdesign 2	58
4.4.3.2	Stoffaustauschversuch 2 mit Rührerdesign 2	61

4.4.3.3	Stoffaustauschversuch 3 mit Rührerdesign 3	63
4.4.3.4	Stoffaustauschversuch 4 mit Rührerdesign 4	65
4.4.3.5	Gegenüberstellung der Stoffaustauschversuche	67
4.5	Photographische Auswertung	70
4.5.1	Vergleich der Rührerdesigns 2, 3 und 4	71
4.5.2	Strömungsverhalten bei Rührerdesign 2	75
4.5.2.1	Vergleich bei steigendem Volumenstrom	75
4.5.2.2	Vergleich bei steigender Drehzahl	75
4.5.3	Strömungsverhalten bei Rührerdesign 3	76
4.5.3.1	Vergleich bei steigendem Volumenstrom	76
4.5.3.2	Vergleich bei steigender Drehzahl	76
4.5.4	Strömungsverhalten bei Rührerdesign 4	77
4.5.4.1	Vergleich bei steigendem Volumenstrom	77
4.5.4.2	Vergleich bei steigender Drehzahl	77
4.5.5	Strömungsverhalten bei Rührerdesign 6	78
5	CFD Simulation	79
5.1	Geometrie und Gitter	80
5.1.1	Netzqualität	82
5.2	Simulationseinstellungen und Modelle	82
5.2.1	Modellierung der axialen Dispersion	84
5.2.2	Konvergenzkriterien	86
5.3	Ergebnisse	87
5.3.1	Einphasige Simulation	87
5.3.2	Mehrphasige Simulation	88
5.3.3	Zusammenfassung der Ergebnisse	91
6	Zusammenfassung	92
7	Symbolverzeichnis	94
8	Literaturverzeichnis	97
9	Anhang	100

9.1 Stoffdaten	100
9.2 Flüssig/Flüssig-Gleichgewichtsdaten	101
9.3 Ergebnisse der Stoffaustauschversuche.....	102
9.4 Ergebnisse der CFD-Simulation.....	103

1 Einleitung und Zielsetzung

Durch eine stetig steigende Vernetzung der Weltwirtschaft und der daraus resultierenden internationalen Konkurrenzsituation, wird eine immer höhere Anforderung an die Entwicklung von Verfahren gestellt. Kürzere Produktlebenszyklen zwingen die Industrie die Produktionsverfahren zu beschleunigen, gleichzeitig jedoch werden hochwertige Produkte sowie eine Reduktion des Verbrauches von Ressourcen und der Umweltbelastung gefordert. Um diese Forderungen erfüllen zu können, haben sich im Bereich der Verfahrensplanung zwei Methoden entwickelt. Einerseits führt der Einsatz numerischer Strömungssimulationen zu einer Zeit- und Kostenersparnis in der Optimierung und Auslegung von Apparaten, andererseits wird die Methode der Anlagen- und Prozessminiaturisierung immer häufiger verwendet [2, 3]. Strömungssimulationen stoßen jedoch auch auf ihre Grenzen, denn sie können nicht jedes verfahrenstechnische Problem mit hinreichender Genauigkeit modellieren. So können zum Beispiel im Bereich der Extraktion, welches das Hauptthema dieser Arbeit darstellt, Benetzungsvorgänge und Koaleszenz nicht ausreichend modelliert werden. Des Weiteren fordert die Modellierung verfahrenstechnischer Anwendungen immer Validierung mit experimentellen Daten. Durch den Einsatz kleinerer Laboranlagen können ebenso Kosten und Zeit reduziert werden. Sie erlauben einen flexibleren Einsatz und leichtere Modifikationen, benötigen weniger Platz und erfordern geringere Mengen an verwendeten Substanzen. Der Einsatz kleiner Laboranlagen im Bereich der Extraktion erweist sich jedoch ebenso als schwierig. Wandeffekte fallen hier deutlich höher aus und die Tropfengröße der dispersen Phase ist nicht beliebig reduzierbar.

Ziel dieser Arbeit ist es, eine gerührte Flüssig/Flüssig-Extraktionsanlage im Labormaßstab, mit einem Kolonnendurchmesser von 0,03 [m], bezüglich ihrer Trennleistung bei Einsatz verschiedener Rührerdesigns experimentell zu untersuchen. Hierfür werden die Einbauten eines gewöhnlichen Drehscheiben-Extraktors (Rotating Disc Contactor – RDC) nach den Erkenntnissen und Designregeln von AKSAMIA [1] insofern modifiziert, als sich ein Hybrid aus RDC und Taylor-Couette-Reaktor ergibt. AKSAMIA bezeichnet diesen Extraktor auch als Taylor-Couette-Disc-Contactor (TCDC). Durch die Versuche werden die Auslegungsregeln des TCDC im Scale-Down untersucht.

Der zweite Teil dieser Arbeit beschäftigt sich mit der mehrphasigen Strömungssimulation eines klassischen RDC100¹. Mit Hilfe von experimentell ermittelten Daten der axialen Dispersion der kontinuierlichen Phase, soll gezeigt werden, inwieweit durch Mehrphasensimulation qualitative Ergebnisse reproduzierbar sind. Die Strömungssimulation wird mit dem Softwarepaket ANSYS FLUENT durchgeführt.

¹ 100 bezeichnet den Durchmesser der Kolonnenwand in [mm].

2 Theoretische Grundlagen Extraktion

Extraktion bezeichnet ein thermisches Trennverfahren, bei dem ein Wertstoff aus Flüssigkeits- bzw. aus Feststoffgemischen mit Hilfe eines Lösungsmittels herausgelöst wird. Hierfür werden die Trägerphase und das Lösungsmittel miteinander in Kontakt gebracht. Der Wertstoff in der Trägerphase geht aufgrund besserer Löslichkeit in das Lösungsmittel (Extraktionsmittel, Extraktphase) über, wodurch keine zusätzliche thermische Energie benötigt wird. Voraussetzung für die Extraktion ist das Vorliegen einer ausgeprägten Mischungslücke. Diese Mischungslücke entsteht, da das Lösungsmittel nicht oder nur teilweise mit der Trägerphase mischbar ist. Dadurch bildet sich eine Phasengrenze aus und es findet Stoffaustausch statt. Bei der Extraktion wird die an Wertstoff verarmte Phase als Raffinatphase bezeichnet, und die an Wertstoff beladene Phase als Extraktphase. Der Wertstoff befindet sich nach der Extraktion im Lösungsmittel und wird mit Hilfe nachlaufender Prozesse wie zum Beispiel der Rektifikation schlussendlich vom Lösungsmittel abgetrennt. Das gereinigte Lösungsmittel kann anschließend wieder dem Extraktionsprozess zugeführt werden.

Abhängig vom vorliegenden Stoffsystem unterscheidet man zwischen zwei Arten der Extraktion; der Flüssig/Flüssig-Extraktion oder auch Solventextraktion und der Feststoffextraktion. Bei der Solventextraktion ist der Wertstoff in einem flüssigen Stoff gelöst, bei der Feststoffextraktion sind die festen oder flüssigen Wertstoffe in festen Extraktionsgütern eingeschlossen. Des Weiteren gibt es noch die Gas/Flüssig-Extraktion, welche aber als eigenes Trennverfahren unter dem Namen Absorption bekannt ist. Der Vollständigkeit halber muss in diesem Kontext auch die Hochdruckextraktion erwähnt werden, bei der mit Hilfe überkritischer Gase schwerflüchtige oder thermisch instabile Naturstoffe extrahiert werden [4, 5, 6].

In der vorliegenden Arbeit werden ausschließlich flüssige Stoffsysteme betrachtet, demzufolge wird im folgenden Kapitel die Flüssig/Flüssig-Extraktion näher erläutert.

2.1 Flüssig/Flüssig-Extraktion (Solventextraktion)

Bei der Solventextraktion ist der Wertstoff oder der abzutrennende Schadstoff in einer flüssigen Trägerphase gelöst, wobei das Lösungsmittel und die Trägerphase idealerweise ineinander vollständig unlöslich sind. Die beiden Phasen erzeugen dadurch eine stark ausgebildete Mischungslücke. Wesentlich bei der Solventextraktion ist das Erzeugen großer Stoffaustauschflächen um auch bei kurzen Kontaktzeiten der beiden Phasen einen hohen Stoffaustausch zu erzielen. Umgesetzt wird dies indem eine der beiden Phasen mit Hilfe von außen einwirkender, mechanischer Energie wie zum Beispiel durch rotierende Einbauten, Pulsation oder Vibration dispergiert wird. Weiters ist eine hohe Dichtedifferenz der beiden Phasen von Bedeutung, damit sie am Ende der Extraktion mit Schwerkraft oder Zentrifugalkraft wieder getrennt werden können und auch im Apparat sedimentieren.

Das Anwendungsgebiet der Solventextraktion reicht von der Chemie-, Pharma- und Lebensmittelindustrie bis hin zu großtechnischen Prozessen der Petrochemie und auch metallurgischen Prozessen. In den letzten Jahren wurde die Extraktion zum Haupteinsatzgebiet bei der Aufbereitung von Brauch- und Abwässern. Da die Solventextraktion bei Umgebungsbedingungen durchgeführt werden kann und die eigentlichen Lösungsvorgänge keinen merklichen Energieaufwand fordern, findet diese Art der thermischen Trennung immer weitere Verbreitung [7].

Die Flüssig/Flüssig - Extraktion wird bevorzugt eingesetzt [5]:

- bei thermisch empfindlichen Stoffen oder bei Stoffen die bei höheren Temperaturen chemisch reagieren
- bei der Trennung azeotroper Gemische
- bei sehr geringen Siedepunktdifferenzen der zu trennenden Komponenten
- bei geringer Konzentration des zu trennenden Wert- bzw. Schadstoffs
- bei sehr hohen oder niedrigen Siedepunkten der Komponenten.

Im Wesentlichen wird die Extraktion durch drei physikalische Phänomene bestimmt. Diese sind der Stoffaustausch, die Fluidodynamik und das Tropfenpopulationsverhalten in dispergierten Systemen. Der Stoffaustausch steht mit der Fluidodynamik im Zusammenhang, daher müssen Extraktionskolonnen viele Anforderungen erfüllen, um einen möglichst guten Stoffaustausch zu gewährleisten [8].

Im folgenden Kapitel werden jene Anforderungen an Flüssig/Flüssig-Extraktionsapparaten erläutert.

2.2 Flüssig/Flüssig - Extraktoren

Das Ziel von Extraktionsapparaten ist den Stoffaustausch und somit die Trennleistung zu maximieren. Einen sehr wichtigen Faktor zur Maximierung stellt das Dispergieren einer der beiden Phasen dar. Folglich wird eine gute Durchmischung und Verteilung im Apparat gewährleistet, sowie die Phasengrenzfläche zwischen den Phasen erhöht. Das Erhöhen der Phasengrenzfläche wirkt sich wiederum positiv auf den Stoffaustausch aus. Durch starke Turbulenzen d.h. durch hohe Relativgeschwindigkeiten der beiden Phasen wird der Stoffdurchgangskoeffizient verbessert. Eine weitere wichtige Anforderung an Extraktionsapparate ist das Aufrechterhalten möglichst großer Triebkräfte. Triebkräfte werden durch Rückvermischungen verringert. Besonders bei Flüssig/Flüssig-Extraktionsapparaten ist die axiale Rückvermischung sehr stark ausgeprägt und fordert spezielle Konstruktionen in Extraktionsapparate wie zum Beispiel Statorscheiben. Flüssigkeiten können durch mechanischen Energieeintrag wie zum Beispiel durch rotierende Einbauten, Pulsation oder Vibration dispergiert werden. Es haben sich im Laufe der Jahre viele verschiedene Ausführungen von statischen bis hin zu pulsierenden und gerührten Extraktionskolonnen entwickelt. Dennoch hat sich aufgrund der Möglichkeit höherer Durchsätze der Rotating Disc Contactor, kurz RDC als einer der industriellen Spitzenreiter im Bereich gerührter Flüssig/Flüssig-Extraktoren hervorgetan [5, 9].

2.2.1 Rotating Disc Contactor - RDC

Der Rotating Disc Contactor etabliert sich bereits seit dem Jahr 1952 und ist unter den gerührten Extraktionsapparaten einer der meist verbreiteten. Seine Vorteile liegen im Bereich hoher Durchsätze und dem Einsatz hochviskoser Medien. Verglichen mit anderen, komplexeren Bauformen ist die Trennleistung jedoch etwas geringer. Beim RDC werden die beiden flüssigen Phasen im Gegenstrom geführt. Die schwere Phase wird im oberen Teil der Kolonne zugeführt, die leichte Phase im unteren. Mittels horizontaler Rotorscheiben welche auf einer gemeinsamen Welle angebracht sind, wird mechanische

Energie eingetragen und die beiden axial anströmenden Phasen werden radial nach außen beschleunigt und durchmischt. Die kontinuierliche Phase reißt die dispergierte Phase mit sich und es bildet sich ein typisches Strömungsregime aus. In den Kolonnen befinden sich höhenversetzt zu den Rotorscheiben, Statorscheiben. Sie verringern die axiale Rückvermischung und teilen die Kolonnen in Kammern (Compartments) ein. In Abbildung 2-1 ist der schematische Aufbau einer RDC-Kolonne, sowie ein einzelnes Compartment dargestellt.

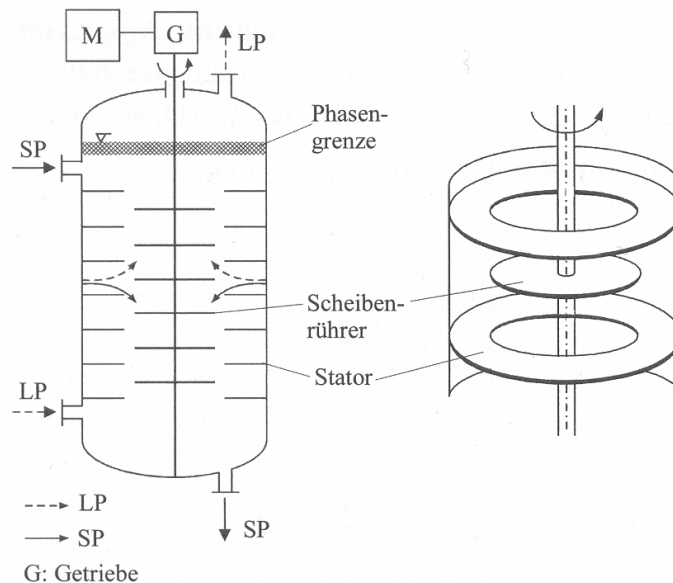


Abbildung 2-1 – Aufbau einer RDC-Kolonne [5]

In den Compartments bilden sich aufgrund der radialen Beschleunigung typische toroidale Strömungswirbel aus. Die Verweilzeit der dispersen Phase in den Compartments wird dadurch verlängert und der Stoffaustausch positiv beeinflusst. Durch die Drehzahl des Rotors kann die Tropfengröße der dispersen Phase beeinflusst werden. Je höher die Drehzahl, desto feiner dispergiert die Phase und desto größer wird deren Austauschfläche. Zu hohe Drehzahlen bewirken jedoch zu geringe Tropfengrößen, wodurch die Tropfen der dispersen Phase nicht mehr aufsteigen können und die Kolonne flutet. Wird die leichte Phase dispergiert, bildet sich die prinzipielle Phasengrenze am Kopf der Kolonne, wohingegen diese am Boden der Kolonne gebildet wird, wenn die schwere Phase dispergiert wird. Im Bildungsbereich der Phasengrenze wird der Kolonnenquerschnitt erweitert, um die Koaleszenz der dispersen Phase zu beschleunigen [4, 5, 9].

2.2.2 Taylor-Couette-Reaktor - TCR

Das Prinzip eines Taylor-Couette-Reaktors bildet die ebene Couette-Strömung. Die ebene Couette-Strömung ist eine stationäre, laminare Strömung welche sich zwischen zwei parallel angeordneten ebenen Platten ausbildet, wenn eine dieser Platten relativ mit der Geschwindigkeit U zur anderen verschoben wird. In dem Fluid zwischen den Platten bildet sich dadurch ein lineares Strömungsprofil $u(x)$. Über den Plattenabstand ist die Scherrate $\dot{\gamma}$ konstant (Gleichung 2.1). In Abbildung 2-2 ist auf der linken Seite eine ebene Couette-Strömung und auf der rechten Seite eine zylindrische Couette-Strömung dargestellt [10].

$$\dot{\gamma} = \frac{U}{d} \quad (2.1)$$

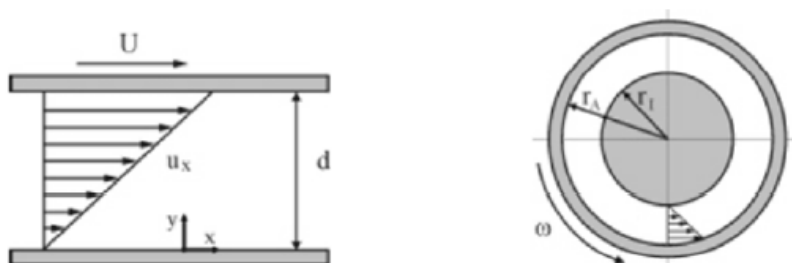


Abbildung 2-2 – Couette-Strömung. Links: eben Couette-Strömung; rechts: zylindrische Couette-Strömung [10]

Die Grundform eines Taylor-Couette-Reaktors besteht aus zwei konzentrisch angeordneten, relativ zueinander rotierenden Zylindern, wie es in Abbildung 2-3 dargestellt ist. Einer der beiden Zylinder wird mit konstanter Winkelgeschwindigkeit gedreht, der andere Zylinder ist feststehend. In den meisten technischen Anwendungen wird der Innenzylinder angetrieben. In diesem Fall entstehen innerhalb des Spaltes nach Überschreiten einer kritischen Rotationsgeschwindigkeit gegenseitig rotierende torusförmige Wirbel, welche als Taylor-Wirbel bezeichnet werden. Diese Sekundärströmung kann sich nur dann ausbilden und aufrechterhalten werden, wenn die Zentrifugalkraft größer ist als die gegenwirkende Viskosität der Flüssigkeit. Dadurch wird die Flüssigkeit vom Innen- zum Außenzylinder getrieben und dort wieder zum Innenzylinder hin verdrängt, wodurch die Wirbelbildung erfolgt. Im Spalt können durch die unabhängig voneinander rotierenden Zylinder mit verschiedenen Drehgeschwindigkeiten viele weitere Strömungsformen generiert werden [10, 11].

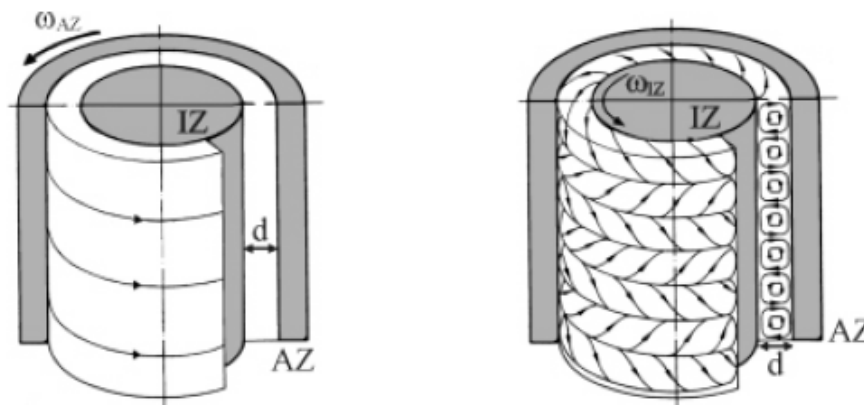


Abbildung 2-3 – Links: laminare zylindrische Taylor-Couette-Strömung; rechts: wirbelbehaftete Taylor-Couette-Strömung [10]

2.3 Dimensionierung von Flüssig/Flüssig - Extraktoren

Für die Auslegung technischer Apparate liefern Gleichgewichtszustände, auch wenn sie tatsächlich selten erreicht werden, eine thermodynamisch eindeutig definierte Grundlage. Um Flüssig/Flüssig-Extraktionen auslegen zu können werden das Phasengleichgewicht, sowie Grundlagen des Stoffaustausches und der Hydrodynamik in den Kolonnen benötigt [12].

2.3.1 Phasengleichgewicht

Viele thermische Trennverfahren, so auch die Flüssig/Flüssig-Extraktion, basieren auf der ungleichen Verteilung der Bestandteile zwischen zwei verschiedenen Phasen. Jedes System weist die Tendenz auf, dem Gleichgewichtszustand zuzustreben und damit ein Minimum an Energieaufwand zu erreichen. Das Gleichgewicht wird mit Hilfe von Triebkräften bewirkt, welche durch Gradienten zwischen zwei Phasen entstehen.

Gleichgewichtszustände werden asymptotisch mit der Zeit erreicht und können in mechanische, thermische und stoffliche Gleichgewichte eingeteilt werden. Mechanische Gleichgewichte weisen denselben Druck im System auf. Thermische Gleichgewichte besitzen einheitliche Temperatur und im stofflichen Gleichgewicht herrscht gleichmäßiges,

chemisches Potential. Ein System befindet sich somit im Gleichgewicht, wenn Druck, Temperatur und chemisches Potential jeder Phase gleich sind [12]:

$$p^\alpha = p^\beta = \dots = p^\pi \quad (2.2)$$

$$T^\alpha = T^\beta = \dots = T^\pi \quad (2.3)$$

$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta = \dots = \mu_i^\pi \quad (2.4)$$

Systeme die sich im Gleichgewicht befinden, weisen ein Minimum sämtlicher thermodynamischer Potentiale auf und können basierend auf den Hauptsätzen der Thermodynamik beschrieben werden [5].

Der erste Hauptsatz der Thermodynamik beschreibt, dass Energien ineinander umwandelbar sind, jedoch nicht erzeugt oder vernichtet werden können.

$$dU = \delta Q + \delta W \quad (2.5)$$

Da der erste Hauptsatz der Thermodynamik nur die Umwandlung von Energieformen, jedoch nicht irreversible Prozesse berücksichtigt, wird der erste Hauptsatz zum zweiten Hauptsatz mit dem Einbringen der Entropie S erweitert und lautet:

$$dU = T * dS - p * dV \quad (2.6)$$

Erreicht die Entropie S in einem geschlossenen System ihren Maximalwert, so befindet sich dieses im Gleichgewicht und die innere Energie U erreicht ein Minimum (Extremalprinzip). Prozesse können nur ablaufen wenn $dS \geq 0$ ist. Durch die Erweiterung des zweiten Hauptsatzes mit dem chemischen Potential μ_i wie es in Gleichung 2.7 dargestellt ist, werden auch Informationen über Umwandlungsvorgänge, Ausgleichsvorgänge, Austausch von Materie und Gleichgewichtszustände im System beschrieben. Diese Beschreibung ist für verfahrenstechnische Anwendungen unumgänglich.

$$dU = T * dS - p * dV + \sum \mu_i * dn_i \quad (2.7)$$

Das chemische Potential stellt die Triebkraft für chemische Reaktionen, Phasenwechsel und diffusiven Stofftransport dar und ist die partielle Ableitung der Gibbs-Energie nach den Stoffmengen der Komponenten. Diese Ableitung wird auch als partielle molare Gibbs-Funktion \bar{G} bezeichnet [13].

$$\mu_i(T, p, \{x\}) = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T, p, n_j} \quad (2.8)$$

Durch das Einführen der Fugazität f lässt sich die Gibbs'sche Energie folgend darstellen:

$$dG = R * T * d(\ln f) \quad (2.9)$$

Die Fugazität ist eine Hilfsgröße zur einfacheren Beschreibung des chemischen Potentials. Im Gleichgewichtszustand gilt auch für die Fugazität:

$$f_i^\alpha = f_i^\beta = \dots = f_i^\pi \quad (2.10)$$

Wie bereits in Kapitel 2.1 erklärt, wird bei der Flüssig/Flüssig-Extraktion eine Mischungslücke zwischen zwei Phasen benötigt, d.h. die beiden Phasen sind nur begrenzt oder gar nicht miteinander mischbar. Eine homogene, flüssige Mischphase zerfällt immer dann in zwei flüssige Phasen, wenn die flüssige Mischphase thermodynamisch instabil ist und ihre Energie durch den Zerfall in zwei Phasen reduziert wird. Mit Hilfe der Gibbs'schen Enthalpie kann ein System als instabil bezeichnet werden und weist somit eine Mischungslücke auf, wenn seine molare freie Enthalpie G_M ein Maximum und zwei Wendepunkte besitzt (siehe Abbildung 2-4, Verlauf b). Zwischen den Wendepunkten im Konzentrationsbereich gilt das Instabilitätskriterium [14, 15]:

$$\left(\frac{\partial G_M}{\partial x^2} \right)_{T, p} < 0 \quad (2.11)$$

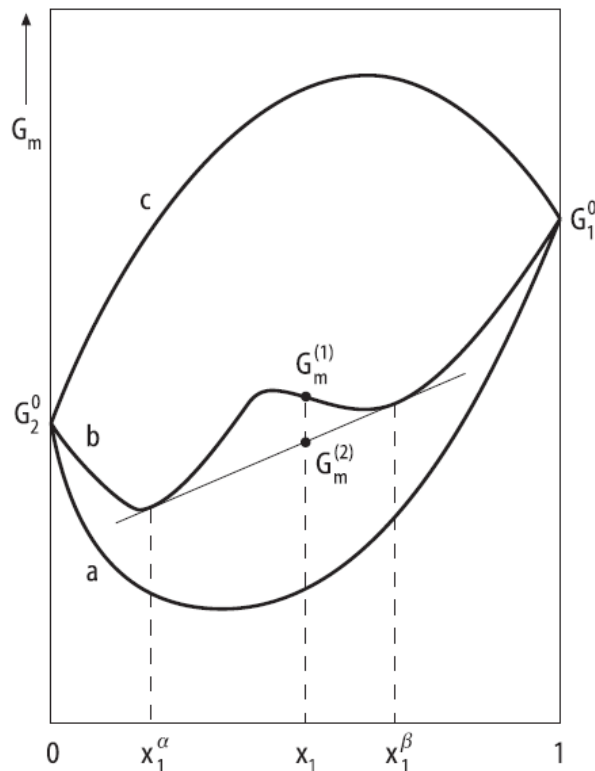


Abbildung 2-4 – Verläufe der Gibbs'schen Enthalpie in einem binären System [14]

2.3.2 Stofftransport in Extraktionsapparaten

2.3.2.1 Stoffübergang

Ausgleichsprozesse zwischen zwei Phasen finden grundsätzlich dann statt, wenn sich ein System nicht im Gleichgewicht befindet. Diese sind so gerichtet, dass sich langfristig der angestrebte Gleichgewichtszustand erreichen lässt. Der Stofftransport zwischen zwei Phasen wird durch Konzentrationsgradienten ausgelöst und lässt sich mit Hilfe des Stoffübergangs beschreiben. Der Stoffübergang ist die Menge eines in einer Phase hin zur Phasengrenzfläche transportierten Stoffes. Somit lässt sich der zur Phasengrenzfläche übertragene Stoffmengenstrom einer Komponente A folgend beschreiben [16, 17]:

$$\dot{n}_A = \frac{\dot{N}_A}{A} = \beta * \Delta c_A \quad (2.12)$$

Dabei ist Δc_A der antreibende Konzentrationsgradient und β der Stoffübergangskoeffizient. Der Stoffübergangskoeffizient β ist von den Stoffeigenschaften, der Geometrie der Kolonne, der Art der Strömung welche sich in der Kolonne ausbildet und von der treibenden Konzentrationsdifferenz abhängig und lässt sich mit Hilfe der dimensionslosen Sherwood-Zahl beschreiben:

$$Sh = \frac{\beta * L}{D} \quad (2.13)$$

Hierbei ist D der Diffusionskoeffizient und L eine charakteristische Länge. Je nach Art der Grenzschicht zwischen den fluiden Phasen gibt es verschiedene Beziehungen zwischen Diffusionskoeffizienten und Stoffübergangskoeffizienten. Einfache Strömungsverhältnisse und Geometrien erlauben analytische oder numerische Lösungen des Stoffübergangskoeffizienten. In komplexeren Systemen wird der Stoffübergangskoeffizient mit Hilfe von Stoffübergangstheorien beschrieben [16, 18].

▪ Film-Theorie

Die Filmtheorie wurde von *Whitman* und *Lewis* entwickelt und ist eine der ältesten und einfachsten Modellvorstellungen zur Berechnung des Stoffübergangskoeffizienten. Die Filmtheorie geht davon aus, dass der Stoffübergang in einer dünnen, ruhenden Filmschicht mit der Dicke δ , die sich an der Phasengrenzfläche ausbildet, stattfindet (siehe Abbildung 2-5). Konzentrationen und Geschwindigkeiten ändern sich nur in y -Richtung, nicht mit der Zeit oder in Richtung der x -Achse. Das im Film ausgebildete Konzentrationsprofil ist eine Gerade. An der Phasengrenz herrscht Phasengleichgewicht, in der Bulkphase bleibt die Konzentration konstant. Die übergehende Komponente A wird in diesem Film einzig durch molekulare Diffusion transportiert. Aus diesen Annahmen ergibt sich somit ein konstanter Stoffmengenstrom der Komponente A in Richtung der y -Achse.

$$\frac{dn_A}{dy} = 0 \quad (2.14)$$

Entsprechend Abbildung 2-5 ist selbst in Systemen mit Konvektion diese Vereinfachung zulässig, wenn die Geschwindigkeitsgrenzschicht δ_w deutlich größer als die Konvektionsgrenzschicht δ_c ist, welches üblicherweise bei Flüssigkeiten ($Sc > 1$) auftritt [17, 18].

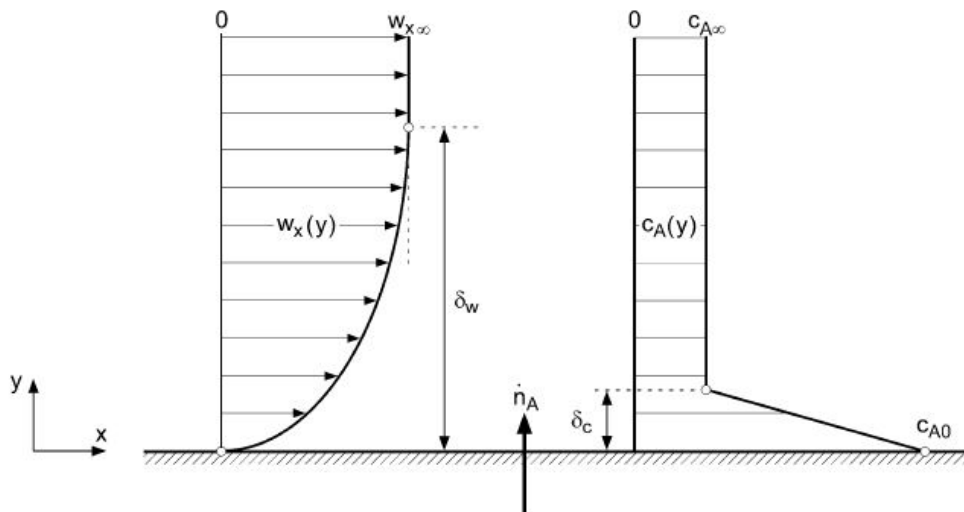


Abbildung 2-5 – Konzentrations- und Geschwindigkeitsprofil an einer überströmten Oberfläche nach der Filmtheorie [17]

▪ Grenzschichttheorie

Die Grenzschichttheorie basiert auf den gleichen Modellvorstellungen wie die Filmtheorie und hat große Bedeutung für Vorgänge bei festen, überströmten Grenzflächen. Auch hier erfolgt der Stoffübergang in einer dünnen, wandnahen Grenzschicht. Im Gegensatz zur Filmtheorie dürfen sich Konzentrationen und Geschwindigkeiten nun aber auch in Richtung der anderen Koordinatenachse ändern und es werden ebenso konvektive Stoffströme beachtet. Bei der Diffusion reicht es die Änderung des Konzentrationsprofils nur in Richtung der y -Achse zu berücksichtigen, da die Änderungen des Konzentrationsprofils innerhalb der Grenzschicht groß im Vergleich zu den Änderungen in andere Richtungen sind. Die Differentialgleichung für das Konzentrationsfeld wird dadurch vereinfacht. Da der Stoffübergangskoeffizient über die Länge L der Phasengrenzfläche bei der Grenzschichttheorie nicht mehr konstant ist, ist der Stoffübergangskoeffizient ortsabhängig. In technischen Anwendungen reicht es jedoch meist, mit mittleren Stoffübergangskoeffizienten β_m zu rechnen.

$$\beta_m = \frac{1}{L} * \int_{z=0}^L \beta * dz \quad (2.15)$$

Dieser kann über die mittlere Sherwood Zahl Sh_m , welche eine Funktion aus der Reynolds- und der Schmidt-Zahl ist, je nach Art der Strömung und der umströmten Körper aus verschiedenen Potenzansätzen ermittelt werden. Diese können beispielsweise aus dem VDI-Wärmeatlas entnommen werden [17].

$$Sh_m = \frac{\beta_m * L}{D} = f(Re, Sc) \quad (2.16)$$

▪ Penetrations- und Oberflächenerneuerungstheorie

Im Gegensatz zur Film- und Grenzschichttheorie wird bei der Penetrations- und Oberflächenerneuerungstheorie kein stationärer Stofftransport angenommen. Dies bedeutet dass eine endliche Kontaktzeit an der Phasengrenze berücksichtigt wird, da in vielen Stoffaustauschapparaten die Kontaktzeit zwischen den Phasen oft zu kurz ist, damit sich ein stationärer Zustand einstellen kann. (Es ändert sich somit die Konzentration in einem Volumenelement über die Zeit). Der Stoffübergangskoeffizient wird bestimmt durch die Länge der Kontaktzeit. Bei der Penetrationstheorie wird an allen Orten eines Apparates gleiche Kontaktzeit vorausgesetzt. Die Oberflächenerneuerungstheorie berücksichtigt jedoch die unterschiedlichen Verweilzeiten der in Kontakt geratenen Fluidelemente, die einer Verteilungsfunktion folgen. Dies bedeutet, dass nach Ablauf einer bestimmten Kontaktzeit, Fluidelemente von der Grenzfläche verdrängt und durch Neue ersetzt werden [17, 18].

2.3.2.2 Stoffdurchgang

Als Stoffdurchgang wird der Stofftransport über die Phasengrenzfläche bezeichnet. Der hierbei auftretende Stofftransportwiderstand setzt sich aus den Stoffübergangswiderständen in den beiden Phasen sowie den Widerstand an der Phasengrenze zusammen, wobei Letzterer auf Grund sehr schneller Vorgänge vernachlässigt werden kann. Meist wird zur Beschreibung des Stoffdurchgangs die Zweifilmtheorie verwendet (siehe Abbildung 2-6).

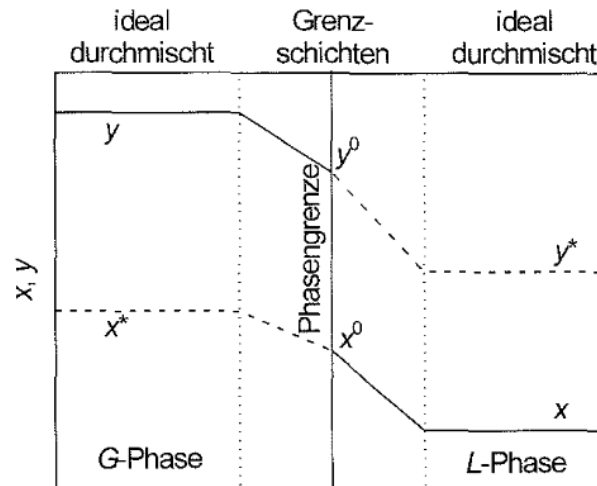


Abbildung 2-6 – Konzentrationsprofil an einer Phasengrenze für das Zweifilmmodell [16]

Hier bestimmen die Grenzschichten (gestrichelte Linie in Abbildung 2-6) der in Kontakt stehenden fluiden Phasen den Stoffdurchgang. An der Phasengrenzfläche herrscht zwischen x_0 und y_0 ein Gleichgewicht gemäß dem Nernst'schen Verteilungskoeffizienten für Flüssig/Flüssig – Gleichgewichte.

$$K = \frac{y_0}{x_0} \quad (2.17)$$

In den beiden Hauptphasen G und L wird eine ideale Durchmischung angenommen. Die Konzentrationen in den beiden Hauptphasen lassen sich ebenfalls mit dem Verteilungskoeffizienten K beschreiben:

$$y^* = K * x \quad (2.18)$$

und

$$y = K * x^* \quad (2.19)$$

Bei geringen Wertstoffkonzentrationen kann der Verteilungskoeffizient als konstant angenommen werden. Die über die Phasengrenze transportierte Stoffmenge \dot{n}_A kann entsprechend Gleichung 2.20 berechnet werden.

$$\dot{n}_A = k_G * (y - y^*) = k_L * (x^* - x) \quad (2.20)$$

Somit können die schwer messbaren Konzentrationen an der Phasengrenzfläche x^* und y^* eliminiert werden und es ergibt sich für die Stoffdurchgangskoeffizienten [16]:

$$\frac{1}{k_G} = \frac{1}{\beta_G} + \frac{K}{\beta_L} \quad (2.21)$$

$$\frac{1}{k_L} = \frac{1}{\beta_L} + \frac{1}{K * \beta_G} \quad (2.22)$$

2.3.3 Vermischungseffekte – die Axiale Dispersion

Vermischungseffekte in gerührten Extraktionsapparaten können Quervermischungen, Längsvermischungen oder Rückvermischungen sein. Vermischungen sind Abweichungen einer einheitlichen Verweilzeitverteilung der Fluidteilchen, welche sowohl in disperser wie auch in kontinuierlicher Phase auftreten können.

Bei der Flüssig/Flüssig-Extraktion ist die axiale Rückvermischung verglichen mit anderen thermischen Trennprozessen signifikant ausgeprägt. Grund hierfür sind die geringen Dichtedifferenzen zwischen den beiden flüssigen Phasen. Bei der axialen Rückvermischung gelangen Fluidelemente niedriger Konzentration in Gebiete mit hoher Konzentration. Das für den Stofftransport wichtige, treibende Konzentrationsgefälle längs der Kolonne wird dadurch vermindert, wodurch wiederum die Trennschärfe der Anlage verglichen mit dem Idealfall, verringert wird. Dieser Effekt kann, wie bereits erwähnt, sowohl in der dispersen, als auch in der kontinuierlichen Phase stattfinden. Vermischungseffekte in Extraktionsanlagen können die Trennleistung der Anlagen stark beeinflussen, daher ist es für die Auslegung von Anlagen von hoher Bedeutung diese zu berücksichtigen. In Abbildung 2-7 ist die Auswirkung der axialen Rückvermischung auf die Trennleistung der Kolonne dargestellt [4, 5].

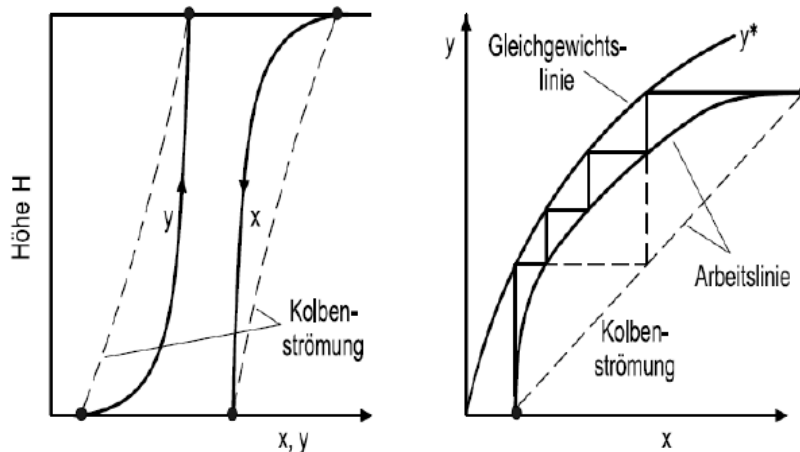


Abbildung 2-7 – Kolonneninterne Konzentrationsprofile und Trennstufenzahl [4]

Die gestrichelten Konzentrationsprofile über die Höhe der Anlage ergeben sich aus der Annahme des Idealfalls, d.h. einer Kolbenströmung in der Kolonne. Verglichen mit dem Fall der auftretenden axialen Rückvermischung ist zu erkennen, dass sich die Konzentrationsprofile in der Kolonne über die Höhe stark verändern. So ist besonders am Eintritt beider Phasen ein deutlicher Konzentrationssprung zu sehen. Das treibende Konzentrationsgefälle in der Kolonne wird deutlich vermindert wodurch sich im Arbeitsdiagramm die Arbeitslinie stark krümmt und dadurch näher an der Gleichgewichtskurve liegt. Folge davon ist, dass die Zahl der tatsächlichen Trennstufen stark ansteigt im Vergleich zum ideal Fall [4].

Experimentell wird die axiale Rückvermischung und somit auch die tatsächlichen Verhältnisse in der Kolonne, über Vermessen der Verweilzeitverteilung ermittelt. Hierfür wird eine Tracersubstanz in die Strömung gebracht und deren Aufenthaltszeit in der Kolonne ermittelt. Das Eingangssignal der Tracersubstanz kann eine Sprung- oder Stoßfunktion sein. Höhe und Breite der erhaltenen Kurve der Verweilzeitverteilung dienen als Maß für die Höhe der axialen Rückvermischung. Für die Auswertung werden im Wesentlichen zwei Modellvorstellungen angewendet, das Dispersionsmodell sowie das Zellenmodell. Letzteres wird in dieser Arbeit nicht berücksichtigt [19].

2.3.3.1 Dispersionsmodell

Zur theoretischen Erfassung der axialen Rückvermischung kann das Dispersionsmodell verwendet werden. Die Rückvermischung wird analog zur Diffusion formuliert und wird mit Hilfe des Dispersionskoeffizienten D_{ax} beschrieben. Dieser besitzt dieselbe Dimension wie der Diffusionskoeffizient, kann jedoch um einige Größenordnungen größer sein. Das Dispersionsmodell dient nur zur Beschreibung geringer Vermischungen und ist nicht in der Lage Toträume oder Kurzschlüsse im Apparat zu beschreiben. In Anlehnung an die Diffusion wird die Dispersion gleichartig modelliert, sodass das Dispersionsmodell von der Überlagerung des konvektiven Transportes mit dem dispersivem Transport ausgeht, wie in folgender Abbildung dargestellt ist.

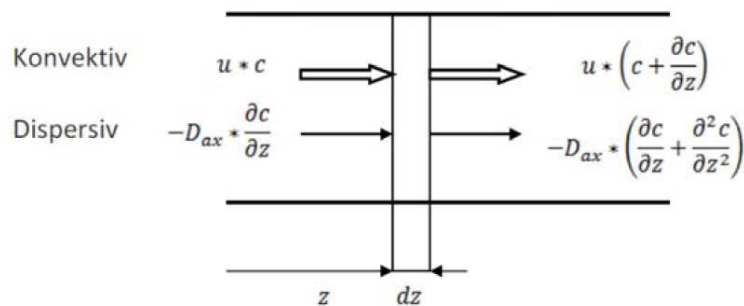


Abbildung 2-8 – Stoffbilanz eines Volumenelementes mit axialer Dispersion [20]

Ausgehend vom 2. Fick'schen Gesetz [19]

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_{ax} * \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (2.23)$$

und durch das Berücksichtigen der Überlagerung obiger Transporttherme, ergibt sich folgende Gleichung in welcher auch der Stofftransport durch axiale Dispersion berücksichtigt ist:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_{ax} * \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - u * \frac{\partial c}{\partial z} \quad (2.24)$$

Durch das Einführen der dimensionslosen Größen und der Bodensteinzahl B_o

$$Z = \frac{u * t + z}{L} \quad (2.25)$$

ergibt sich die partielle Differenzialgleichung die auch als Dispersionsmodell bekannt ist:

$$\frac{\partial c}{\partial \theta} = \frac{1}{Bo} * \frac{\partial^2 c}{\partial Z^2} - \frac{\partial c}{\partial Z} \quad (2.26)$$

Die Bodensteinzahl stellt den Grad der axialen Rückvermischung in jeder Phase dar und ist das Verhältnis des konvektiven Stofftransports zum Stofftransport durch Diffusion.

2.3.3.2 HTU-NTU Konzept

Das klassische HTU-NTU Konzept dient zur Ermittlung der erforderlichen Kolonnenhöhe bei Apparaten mit kontinuierlichem Phasenkontakt.

$$H = HTU * NTU = \frac{\dot{F}}{A_Q * k_R * a} * \int_{X_\omega}^{X_\alpha} \frac{dX}{X - X^*} \quad (2.27)$$

Das klassische Konzept kann jedoch nicht für die Apparateauslegung gerührter Extraktionskolonnen verwendet werden, da die stark ausgeprägt axiale Vermischung nicht berücksichtigt wird. Um diese zu berücksichtigen wird der HTU-Wert im klassischen Konzept mit dem HDU-Wert erweitert. Dieser stellt die Höhe einer Dispersionseinheit dar.

$$H_{Kolonne} = \overline{HTU} * NTU \quad (2.28)$$

$$\overline{HTU} = HTU + HDU \quad (2.29)$$

Der HDU-Wert korrigiert die Höhe der einzelnen theoretischen Stufen nach oben, sodass die axialen Vermischungen ausgeglichen werden können und ist folgend definiert [5, 20]:

$$HDU = \frac{D_{ax,c}}{v_c} + \frac{D_{ax,d}}{v_d} \quad (2.30)$$

3 Grundlagen Computational Fluid Dynamics

Unter Computational Fluid Dynamics (CFD) wird die numerische Simulation von Strömungen verstanden. CFD ist eine relativ junge Methode, auch wenn die theoretischen Hintergründe hinsichtlich Modellbildung und numerische Mathematik weiter in die Vergangenheit reichen. Erst mit der Verfügbarkeit leistungsstarker Rechner begann die rasante Entwicklung in diesem Gebiet. Die Strömungsgleichungen werden numerisch gelöst und reale Probleme aus der Praxis können genau, kostengünstig und schnell berechnet werden. CFD bietet somit eine Alternative zu aufwändigen, experimentellen Versuchen [21, 22]:

3.1 Grundlagen zu mathematischer Modellierung der Transportprozesse - Erhaltungsgleichungen

Erhaltungsgleichungen werden zur Modellierung von Transportprozessen benötigt. Die Namensgebung beruht auf der Erhaltung bestimmter physikalischer Größen wie Masse, Impuls und Energie. Aus diesen Größen ergeben sich die fünf wichtigen Erhaltungsgleichungen der Strömungsmechanik [22]:

- Massenerhaltung
- Impulserhaltung in x-Richtung
- Impulserhaltung in y-Richtung
- Impulserhaltung in z-Richtung
- Energieerhaltung

Die Erhaltungsgleichungen können in Differential- und in Integralform angegeben werden. Wird nun eine Erhaltungsgröße ϕ über ein differentielles Volumenelement bilanziert, ergibt sich daraus die allgemeinste Form der Bilanzgleichungen [21]:

$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{Speicherterm}} = - \underbrace{\nabla \cdot (\vec{v}\phi)}_{\text{Konvektionsterm}} - \underbrace{\nabla J_{\phi}}_{\text{Diffusionsterm}} + \underbrace{S_{\phi}}_{\text{Quellterm}} \quad (3.1)$$

Die Gleichung berücksichtigt die Änderung einer Größe hervorgerufen durch Konvektion, Diffusion und durch mögliche Quellen oder Senken. Mit Hilfe des Speicherterms wird die zeitliche Änderung der Transportgröße ϕ im Kontrollvolumen beschrieben. Der Konvektionsterm stellt den Transport der Größe ϕ über die Grenzen des Kontrollvolumens auf Grund der Relativgeschwindigkeit \vec{v} dar.

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

$$\nabla \cdot (\vec{v}\phi) = u * \frac{\partial \phi}{\partial x} + v * \frac{\partial \phi}{\partial y} + w * \frac{\partial \phi}{\partial z} \quad (3.3)$$

Mit dem Diffusionsterm wird der molekulare Transport über die Grenzen des Kontrollvolumens durch Diffusion beschrieben. Der molekulare Flussvektor folgt dem Fick'schen Gesetz und ist eine lineare Funktion des Gradienten der Transportgröße:

$$J_\phi = \Gamma_\phi * \nabla \phi = \Gamma_\phi * \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (3.4)$$

Mit Hilfe des Quellterms werden Quellen oder Senken im Inneren des Kontrollvolumens berücksichtigt [21, 22].

3.1.1 Kontinuitätsgleichung - Massenerhaltung

Die Masse zählt zu einer der essentiellsten Erhaltungsgrößen in der Fluidodynamik. Da in der industriellen Strömungsmechanik nur nichtrelativistische Systeme betrachtet werden, bleibt die Gesamtmasse konstant, auch wenn z.B. chemische Reaktionen zur Änderung von stofflichen Zusammensetzungen führen. Bei der Betrachtung der Gesamtmasse entfällt der molekulare Transport, da dieser eine Relativbewegung zur konvektiven Geschwindigkeit ausführt. Die konvektive Geschwindigkeit ist jedoch massenbezogen definiert, d.h. als Geschwindigkeit des Massenschwerpunktes eines infinitesimalen Volumenelements. Somit ist es nicht nötig den molekularen Transport zu berücksichtigen. Unter der Kontinuitätsgleichung wird nun die differenzielle Massenbilanz verstanden, welche folgende Form besitzt:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \left(\frac{\partial(\rho vx)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vy)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho vz)}{\partial z} \right) \quad (3.5)$$

Sie beinhaltet nur den Speicherterm und konvektive Terme und enthält somit im Vergleich zu den anderen Bilanzgleichungen nur Ableitungen erster Ordnung. In vektorieller Form kann die Kontinuitätsgleichung anschaulicher dargestellt werden:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\vec{v}\rho) \quad (3.6)$$

Bei konstanter Dichte, also inkompressiblen Strömungen, wird der Speicherterm vernachlässigt und die Kontinuitätsgleichung vereinfacht sich zu [21, 23]:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (3.7)$$

3.1.2 Impulserhaltungsgleichung

Die Impulserhaltungsgleichung muss bestimmt werden, da fluide Systeme meist nicht im ruhenden Zuständen auftreten und daher der Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes eine große Bedeutung zukommt. Sie beschreibt Konvektion, molekulare Reibung und berücksichtigt auf das System wirkende Kräfte. In Gleichung 3.8 ist die Impulserhaltung in vektorieller Schreibweise dargestellt. Sie enthält Komponenten für jede Raumrichtung, daher treten im kartesischen Koordinatensystem drei Gleichungen in x-, y- und z-Richtung auf. Die linke Seite der Gleichung stellt den Speicher- und Konvektionsterm dar. Des Weiteren müssen auch Kräfte die auf das Volumen wirken berücksichtigt werden. Dies können Oberflächenkräfte wie z.B. Druck, Scherspannung oder Oberflächenspannung und Körperkräfte wie z.B. Gravitation sein. Mit Hilfe des Spannungstensors τ wird der molekulare Impulsaustausch welcher durch Schub- und Normalspannung beschrieben wird zusammengefasst [21, 23]:

$$\frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\vec{v}) = -\nabla \cdot \bar{\tau} - \nabla p + \rho * \vec{g} + \vec{F} \quad (3.8)$$

Damit die Impulsbilanz zur Berechnung der Geschwindigkeit herangezogen werden kann, muss der Spannungstensor als Funktion der Geschwindigkeit und von Stoffwerten ausgedrückt werden. Wie auch bereits in der Kontinuitätsgleichung verwendeten Annahme eines inkompressiblen Fluides (ρ =konstant) mit konstanter Viskosität, vereinfacht sich die Impulserhaltungsgleichung zur Navier-Stokes-Gleichung [21, 24, 25]:

$$\rho * \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho \vec{v}(\nabla \cdot \vec{v}) = \mu * (\nabla^2 \cdot \vec{v}) - \nabla p + \rho * \vec{g} + \vec{F} \quad (3.9)$$

mit

$$\bar{\tau} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{yx} & \tau_{zx} \\ \tau_{xy} & \tau_{yy} & \tau_{zy} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \tau_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

3.1.3 Energiegleichung

Da die Energiegleichung in der Simulation nicht berücksichtigt wird, soll an Stelle des Kapitels auf folgende Literaturen verwiesen werden [21, 22, 23, 24]. Die Vernachlässigung der Energiegleichung ist gerechtfertigt, da:

- die Kolonne bei Umgebungstemperaturen ohne zusätzliche thermische Energie betrieben wird,
- der Energieeintrag durch Rotation vernachlässigbar ist,
- für inkompressible Fluide die Koppelung zwischen Impulsgleichung und Energiegleichung sehr schwach ist
- und das Gleichungssystem aus Kontinuitäts- und Impulsgleichung auch ohne Energiegleichung gelöst werden kann.

3.1.4 Lösen der Erhaltungsgleichungen

Die Strömungsverhältnisse können nun mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung und der Impulsgleichung in x-, y- und z- Richtung gelöst werden. Wie bereits erwähnt kann die Dichte und somit auch die Viskosität als konstant angenommen werden und somit verbleiben vier Gleichungen mit 13 Unbekannten (Geschwindigkeiten u , v , w , den Druck p und den 9 Komponenten des Spannungstensors $\bar{\tau}$). Um das Gleichungssystem lösen zu können werden zusätzlich Gleichungen benötigt, da es mehr Unbekannte als Gleichungen gibt. Hierfür wird die Stokes'sche Beziehung für Normal- und Schubspannung verwendet. Diese verknüpfen bei Newton'schen Fluiden ($\tau = \mu * \frac{du}{dy}$) die Spannungen mit den Geschwindigkeiten u , v , w [22, 25].

$$\tau_{xx} = -\frac{2}{3}\mu * \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\mu * \frac{\partial u}{\partial x} \quad (3.11)$$

$$\tau_{yy} = -\frac{2}{3}\mu * \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\mu * \frac{\partial v}{\partial y} \quad (3.12)$$

$$\tau_{xy} = \mu * \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (3.13)$$

$$\tau_{xz} = \mu * \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \quad (3.14)$$

$$\tau_{yz} = \mu * \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \quad (3.15)$$

$$\tau_{yx} = \tau_{xy} \quad (3.16)$$

$$\tau_{zx} = \tau_{xz} \quad (3.17)$$

$$\tau_{zy} = \tau_{yz} \quad (3.18)$$

Um diese Differenzialgleichungen lösen zu können müssen Rand- und Anfangsbedingungen angegeben werden. Mathematisch kann dies so begründet werden, dass die Differenzialgleichungen zum Lösen integriert werden müssen, um daraus die Integrationskonstanten bestimmen zu können. Diese ergeben sich aus Rand- und Anfangsbedingungen, welche sich mathematisch durch drei Formen definieren lassen [21]:

- Dirichlet-Bedingung: $\phi|_{RB} = C_{RB1}$
- Neumann-Bedingung: $\left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)|_{RB} = C_{RB2}$
- Cauchy-Bedingung: $\left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)|_{RB} + C_{(RB3\phi|RB)} = C_{RB4}$

Für eine genauere Interpretation der Randbedingungen wird auf [21] verwiesen. Im folgenden Unterkapitel werden die Randbedingungsarten vorgestellt.

3.1.5 Anfangsbedingung und Randbedingungen

3.1.5.1 Anfangsbedingung

Anfangsbedingungen sind Anfangswerte für Variablen. Sie haben grundsätzlich nur für instationäre Probleme eine große Bedeutung. Im instationären Fall sind

Anfangsbedingungen notwendig, um die Bilanzgleichung lösen zu können da sie als Integrationskonstanten dienen.

3.1.5.2 Randbedingungen

In der Realität wird durch Ränder die Bewegung des Fluides begrenzt. Im Modell werden Randbedingungen für das Lösen von Gleichungen benötigt.

3.1.5.2.1 Randbedingungen an Einlässen und Auslässen

Randbedingungen an Einlässen werden als *inlet boundary* bezeichnet. Einlässe werden grundsätzlich über Geschwindigkeiten (*velocity inlet*) oder Massenflüsse (*mass flow inlet*) definiert. Weiters besteht die Möglichkeit ein Geschwindigkeitsprofil einzulesen falls dieses bekannt ist. Falls die Geschwindigkeit an den Einlässen nicht bekannt ist, kann die Randbedingung durch Definieren des Druckes (*pressure inlet*) festgelegt werden. Randbedingungen müssen so gesetzt werden, dass die Strömung entweder in das Volumen eintritt oder es verlässt. Weiters ist die Lage der Randbedingung von großer Bedeutung. So sollen Randbedingungen nicht direkt vor Hindernissen platziert werden, da es ansonsten zu unphysikalischen Ergebnissen führen kann.

Auslässe können über statische Drücke (*pressure outlet*) oder über Massenflüsse (*outflow*) definiert werden. Letzteres wird verwendet wenn die Strömungsgeschwindigkeit und der Druck nicht bekannt sind. Bei der Verwendung des statischen Druckes als Auslassbedingung ist im Bezug auf das Konvergenzverhalten ein stabileres Ergebnis zu erwarten, besonders wenn Rückströmungen auftreten [26, 27].

3.1.5.2.2 Wände

Außenwände oder Einbauten werden in den meisten Modellsystemen als Wand-Randbedingung angegeben. Sie können entweder als *stationary wall*, wenn sie fest, oder *moving wall*, wenn sie als beweglich definiert werden. Normalerweise wird für die Haftbedingung des Mediums an den Wänden die sogenannte *no-slip-condition* definiert, wodurch die Geschwindigkeit des Mediums an den Wänden null wird. Diese Bedingung ist jedoch für nicht-Newtonsche Fluide nicht geeignet. Weitere Randbedingungen für Wände betreffen den Stofftransport und die Temperatur. Wände sind für den Stofftransport meist undurchlässig. Die Ausnahme bildet hier die Membran. Bezüglich der Temperatur können

Wände als adiabatisch, temperiert oder mit einem definierten Wärmestrom angeführt werden [21, 27].

3.1.5.2.3 Symmetrische Randbedingungen

Symmetrische Randbedingungen werden verwendet, um den Rechenaufwand zu minimieren. Hierfür müssen das Strömungsfeld und die Geometrie symmetrisch sein. Dies bedeutet, dass keine Normalgeschwindigkeiten auf den Symmetrieebenen und keine normalen Gradienten vorhanden sein dürfen. Es gibt die Möglichkeit der Spiegelsymmetrie und der Rotationssymmetrie. Bei der Spiegelsymmetrie kann das Rechengebiet halbiert werden; bei der Rotationssymmetrie können 3D-Modelle auf 2D-Modelle reduziert werden. Wichtig hierbei ist, dass als Rotationsachse immer die x-Achse verwendet wird. Daher muss das zuvor konstruierte Modell so designt werden, dass es sich um die x-Achse rotieren lässt [27, 21].

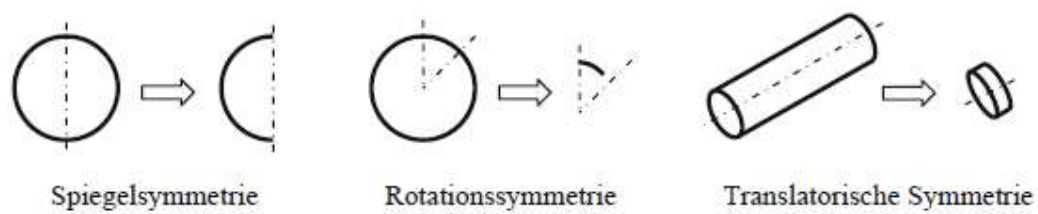


Abbildung 3-1 – Symmetrieebenen [22]

3.1.5.2.4 Periodische Randbedingungen

Bei periodischem Strömungsverhalten und bei physikalisch periodischen Geometrien können periodische Randbedingungen gesetzt werden. Auch hier wird dadurch der Rechenaufwand reduziert, da die Lösung am Austritt als neue Eintrittsbedingung übertragen wird. Periodische Randbedingungen müssen immer an die Grenzen des Modelles gesetzt werden. Sie können entweder rotatorisch oder translatorisch sein. Bei rotatorisch periodischen Randbedingungen ist es notwendig eine Rotationsachse zu definieren [21, 27].

3.1.5.3 Richtlinien für Randbedingungen

Die Wahl der Position der Randbedingungen ist von großer Entscheidung. So dürfen direkt vor Hindernissen keine Randbedingungen gesetzt werden, sondern in einem Abstand, sodass sich die Strömung bis hin zum Hindernis gut entwickeln kann. Des Weiteren sollen

hohe Gradienten normal zur Strömungsrichtung vermieden werden. Sie dienen als Indikator für die korrekte Positionierung der Randbedingungen. Eine hohe Gitterqualität an den Rändern sorgt für die Verminderung numerischer Fehler schon am Einlass [26].

3.1.6 Numerische Methoden – Diskretisierung

Für die zuvor beschriebenen Erhaltungsgleichungen gibt es, bis auf die Ausnahme der ebenen Platte, noch keine analytischen Lösungen. Daher müssen die Differenzialgleichungen für technisch relevante Probleme numerische mit Hilfe von Computerprogrammen gelöst werden. Eine numerische Lösung fordert eine Umformung der räumlichen und zeitlichen Ableitungen. Hierfür werden die partiellen Differentiale in finite Differenzen umgewandelt, was auch unter Diskretisierung bekannt ist. Diskrete Punkte werden im Lösungsgebiet festgelegt; das Modell wird vernetzt. An den Netzpunkten liegen dann Zahlenwerte zur Berechnung der Strömung zur Verfügung. Numerisches Lösen bedeutet immer eine Näherungslösung für die diskreten Punkte des Lösungsgebiets, daher muss bei der Interpretation der Ergebnisse der durch die Diskretisierung hervorgerufenen Fehler beachtet werden [22, 21].

Es gibt folgende Diskretisierungsmethoden:

- Finite Differenzen-Methode (FDM)
- Finite-Volumen-Methode (FVM)
- Finite-Elemente-Methode (FEM)

Die Finite-Volumen-Methode ist bei kommerziellen CFD Berechnungen die am weitesten verbreitete Methode und soll in folgendem Kapitel näher erläutert werden.

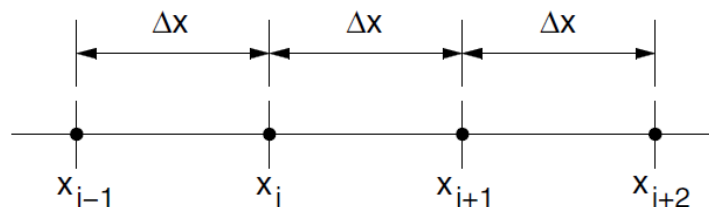


Abbildung 3-2 – Beispiel für die Gitterstruktur bei der Methode der Finiten Differenzen [21]

3.1.6.1 Finite-Volumen-Methode (FVM)

Bei der FVM wird das zu simulierende Modellgebiet in kleine, finite Kontrollvolumina unterteilt. Diese werden häufig auch als Zellen bezeichnet. Die Unterteilung erfolgt mit Hilfe eines Rechnetzes, wobei jeder Gitterpunkt von einem eindeutigen Kontrollvolumen, ohne Lücken und Überschneidungen umgeben ist. Die partiellen Differentialgleichungen werden über jede Zelle integriert, um sie zu diskretisieren. Anschließend werden die Flüsse über die Grenzen der Zellen ermittelt. Die integrale Bilanz bleibt in den Zellen erfüllt, da jede Zellfläche eindeutig auf jeder Seite zu einer Zelle gehört. Es kann bei dieser Methode durch numerische Fehler zu lokalen Abweichungen in der Lösung kommen, jedoch ist die Erhaltung von Masse, Impuls und Energie über das gesamte Gebiet gegeben. Mit kleiner werdender Zellgröße verkleinert sich der numerische Fehler und geht gegen Null, wenn die Zellgröße gegen Null geht. Es ist dabei aber zu beachten, dass mit kleiner werdender Zellgröße die Anzahl der Zellen im Modellgebiet steigt und dadurch die Rechenzeit steigt, da für jede Zelle ein Satz von Gleichungen gelöst werden muss [27, 21, 22].

3.1.7 Geometrie und Gitter

Wie bereits erwähnt, muss das Modellgebiet zur Diskretisierung mit Hilfe eines Rechnetzes bzw. Gitters in finite Kontrollvolumina unterteilt werden. Die dabei entstehenden Zellen füllen das zu simulierende Modell nichtüberlappend vollständig aus. Grundsätzlich wird zwischen strukturierten und unstrukturierten Gittern unterschieden. Strukturierte Gitter bestehen aus Vierecken im 2D-Fall und aus Hexaedern im 3D-Fall. Sie können orthogonal oder schiefwinkelig sein. Die Zellen liegen in einem regelmäßigen Raster vor und lassen sich eindeutig durch ganzzahlige Zahlen indizieren, wodurch sich Nachbarzellen ohne rechnerischen Aufwand leicht ermitteln lassen. Sie sind die einfachste Gitterstruktur und weisen starke Regelmäßigkeit auf, wodurch sie wenig Arbeitsspeicher erfordern und die Berechnung stabiler laufen kann. Allerdings können mit strukturierten Gittern komplexe Geometrien nicht erfasst werden. Unstrukturierte Gitter haben keine gleichmäßige Gitterzellgeometrie. Die Zellen können beliebige Formen haben und es besteht keine Beschränkung bei der Anzahl der Nachbarelemente. Sie sind sehr flexibel und daher gut einsetzbar für komplexe Geometrien, jedoch laufen sie numerisch unstabiler

als strukturierte Gitter. In Abbildung 3-3 sind jeweils ein strukturiertes und ein unstrukturiertes Gitter dargestellt [21, 22, 24].

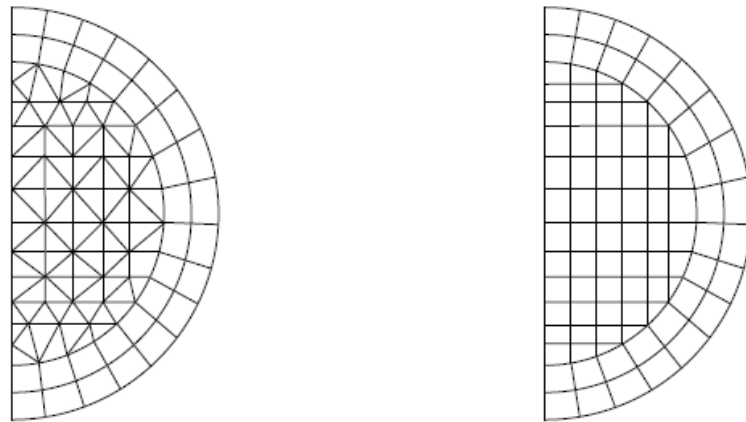


Abbildung 3-3 – a) unstrukturiertes Gitter im Innenbereich; b) strukturiertes Gitter im Innenbereich
[21]

Das Konvergenzverhalten und die Genauigkeit der Lösung hängen sehr stark von der Qualität des Rechennetzes ab. Es muss ein Mittelweg zwischen akzeptabler Rechenzeit und Genauigkeit der Strömungsdetails gefunden werden. Um die Qualität eines Rechennetzes zu ermitteln, bieten viele CFD Programme sogenannte Netzanalysen an, wie das in dieser Arbeit verwendete ANSYS Meshing-Tool. Hierbei wird die Qualität des Netzes anhand der Schiefe und des Seitenverhältnisses ermittelt.

3.1.7.1.1 Schiefe

Mit Hilfe der Schiefe wird ein Wert für die Abweichung von einer idealen Zelle zu einer verformten Zelle ermittelt. Die Werte reichen von 0 bis 1, wobei der Wert von 0,8 nicht überschritten werden sollte, da dieser bereits für eine schlechte Netzqualität spricht.

3.1.7.1.2 Seitenverhältnis

Das Seitenverhältnis einer Zelle sollte den Wert 5 nicht überschreiten. Jedoch können in Grenzschichten größere Verhältnisse akzeptiert werden.

3.1.7.2 Grenzschichtbehandlung – Netzverdichtung

In Abbildung 3-4 ist das Geschwindigkeitsprofil einer reibungsbehafteten Strömung in Wandnähe dargestellt. Auf Grund der Haftbedingung ist die Geschwindigkeit am Festkörperwand Null, wodurch sich ein Grenzschichtprofil für die Geschwindigkeit u mit

hohen Gradienten am Festkörperwand einstellt. Wände sind die Hauptquelle für Turbulenzen und Wirbel, daher ist eine spezielle Behandlung in Wandnähe notwendig. Damit Kräfte, Momente und eventuelle Ablösungen in diesem Bereich richtig berechnet werden, muss das Rechenetz bei reibungsbehafteter Strömung zum Festkörperwand hin verdichtet werden (Abbildung 3-4, rechts) [22].

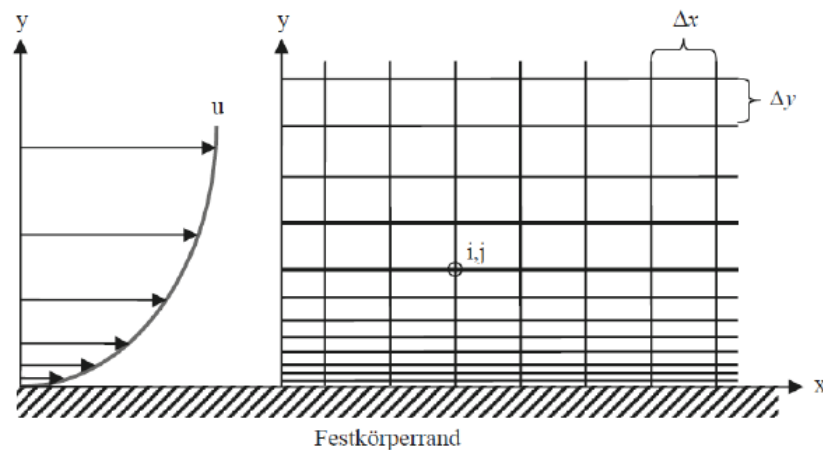


Abbildung 3-4 – Netzverdichtung am Festkörperwand [22]

Die turbulente Grenzschicht wird nach dem ANSYS Theory Guide in drei Regionen eingeteilt:

- Viskose Unterschicht (molare Viskosität hat den größten Einfluss)
- Übergangsschicht (gleicher Einfluss von Viskosität und Turbulenz)
- Voll-turbulente Schicht (Turbulenz hat den größten Einfluss)

In der viskosen Unterschicht ist die Strömung laminar und bildet sich mit größer werdendem Wandabstand zu einer voll-turbulenten Strömung aus. In Abbildung 3-5 sind die soeben erwähnten Regionen der turbulenten Grenzschicht dargestellt [24].

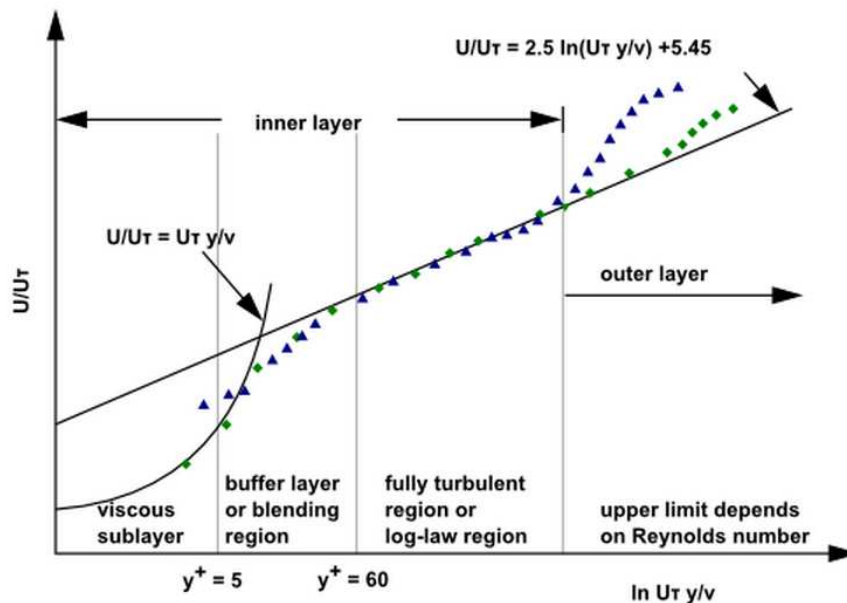


Abbildung 3-5 – Grenzschichteinteilung [24]

Damit die Lösungen im wandnahen Bereich d.h. in der Grenzschicht nicht verfälscht werden, bedarf dieser einer zusätzlichen Behandlung. ANSYS bietet einerseits die Möglichkeit von Wandfunktionen und andererseits die Möglichkeit der Behandlung der Grenzschicht (*Near-wall Modelling*) an. Bei der ersten Möglichkeit werden die viskose Unterschicht und die Übergangsschicht mit Hilfe von semi-empirischen Beziehungen (*Wall Funktion*) berücksichtigt. Die zwei Schichten müssen in einer wandnächsten Zellschicht untergebracht werden. Durch die Wahl der Dicke der Schicht kann dies bewerkstelligt werden. Das Rechenetz muss bei dieser Methode in Wandnähe nicht aufgelöst werden.

Die zweite Möglichkeit zur Behandlung der Grenzschicht bietet die Funktion *Enhanced Wall Treatment*. Hier wird die viskose Unterschicht durch eine hohe Dichte von feinen Rechenzellen aufgelöst. Die Transportgleichungen werden für jede Zelle in Wandnähe einzeln gelöst. Mit Hilfe des y^+ Wertes wird der Abstand der ersten Rechenzelle beschrieben. Er sollte ungefähr den Wert 1 haben. Der y^+ Wert kann nach Ermittlung des Strömungsfeld durch folgende Zusammenhänge beschrieben werden [24]

$$y^+ = \frac{\rho * u_\tau * y}{\mu} \tag{3.19}$$

mit

u_τ ...Wandschubspannungsgeschwindigkeit

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (3.20)$$

3.1.8 Turbulenzmodellierung

Prinzipiell wird zwischen laminarer und turbulenter Strömung unterschieden. Ob eine Strömung turbulent ist, kann über die Reynolds-Zahl ermittelt werden. Sie lässt sich folgendermaßen berechnen:

$$Re = \frac{\rho * v * L}{\mu} \quad (3.21)$$

L stellt dabei eine charakteristische Länge dar und kann sowohl ein Längenmaß als auch für Rohrströmungen die Größe des Durchmessers sein. Je größer die Zähigkeit einer Flüssigkeit, desto weniger turbulent ist die Strömung; je höher die Geschwindigkeit desto turbulenter die Strömung.

Der Umschlag von laminarer zu turbulenter Strömung erfolgt bei:

Umströmungen:

$$Re_x \geq 5 * 10^5 \quad (3.22)$$

Durchströmungen:

$$Re_D \geq 2300 \quad (3.23)$$

Auftriebsströmungen:

$$Ra \geq 10^8 \div 10^{10} \quad (3.24)$$

Ein früheres Umschlagen kann durch die Oberflächenbeschaffenheit ausgelöst werden und muss berücksichtigt werden [26].

In der Praxis treten meistens turbulente Strömungen auf und müssen daher bei der Simulation anders behandelt werden als laminare Strömungen. Turbulente Strömungen sind stark instationär, dreidimensional und weisen viele Wirbel auf. Um turbulente

Strömungen beschreiben zu können sind große Mengen an Informationen erforderlich und können auch heute trotz starker Rechenleistungen selten exakt beschrieben werden. Daher werden die Transportgleichungen für turbulente Strömungen modifiziert und mit Hilfe von Turbulenzmodellen neu beschrieben. Dies führt zur Verringerung der Exaktheit der Lösung, jedoch wird die Rechenzeit dadurch stark reduziert. Es muss ein Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenaufwand gefunden werden. Folgende Turbulenzmodelle stehen zur Beschreibung der turbulenten Strömung zur Verfügung:

- Direkte numerische Simulation (DNS)
- Large Eddy Simulation (LES)
- Reynolds Averaged Navier-Stokes Modelle (RANS-Modelle)

Bei der DNS Simulation werden die Navier-Stokes-Gleichungen direkt gelöst und nicht manipuliert. Sie lösen das Strömungsfeld bis in die kleinsten Raum- und Zeitskalen und erfordern daher den höchsten Rechenaufwand. Bei LES Simulation werden kleine Wirbel herausgefiltert und nur große Wirbelstrukturen betrachtet [23].

Welche Modelle bei der Simulation von RDC-Kolonnen verwendet werden können zeigen GURKER [25] und AKSAMJIA [28]. Aus deren Arbeit erschließt sich, dass mit Hilfe von RANS-Modelle die beste Beschreibung der Turbulenz in RDC-Kolonnen gelingt. Aus diesem Grund wird nur das RANS-Modell detaillierter beschrieben. Nähere Informationen zu den anderen Modellen finden sich in [21, 22, 23, 24].

3.1.8.1 RANS-Modelle

Beim RANS-Modell wird die gesamte Instationarität der turbulenten Strömung, gemittelt. Die Strömungsgrößen werden durch die Summe ihrer niederfrequenten Mittelwerte und ihrer turbulenten Schwankungsgrößen ersetzt. Die Turbulenzen werden nicht aufgelöst sondern durch Turbulenzmodelle ersetzt. Als Beispiel hierfür soll die Strömungsgröße ρ dargestellt werden.

$$\rho = \bar{\rho} + \rho' \quad (3.25)$$

Der zeitliche Mittelwert der Strömungsgröße ρ wird mit $\bar{\rho}$ bezeichnet und die turbulente Strömungsbewegung als ρ' definiert. Dieser Vorgang wird als Reynolds-Mittelung bezeichnet und setzt sich also aus gemittelten und turbulenten Anteilen zusammen. Wird

dieses Verfahren bei der Kontinuitäts- und Impulsgleichung angewendet, ergeben sich daraus die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes Gleichungen.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.26)$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j + \underbrace{\rho \overline{u'_i u'_j}}_{\text{Reynolds-Spannung}} \right)}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} \quad (3.27)$$

Zur Ermittlung der in Gleichung 3.24 vorkommenden Reynolds-Spannungen stehen Wirbelviskositätsmodelle (*k-ε-Modell*, *k-ω-Modell*, *Shear-Stress-Transport-Modell*) und das Reynolds-Spannungs-Modell (*RSM-Modell*) zur Verfügung. Das RSM-Modell ist physikalisch das fundierteste RANS-Modell. Es werden hierbei auch anisotrope Turbulenzen berücksichtigt und ist daher bei Strömungen mit starker Stromlinienkrümmung und starkem Drall anwendbar. Detaillierte Informationen finden sich in [21, 22, 23, 24].

In folgender Abbildung sind die Unterschiede zwischen vollständigen und Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben.

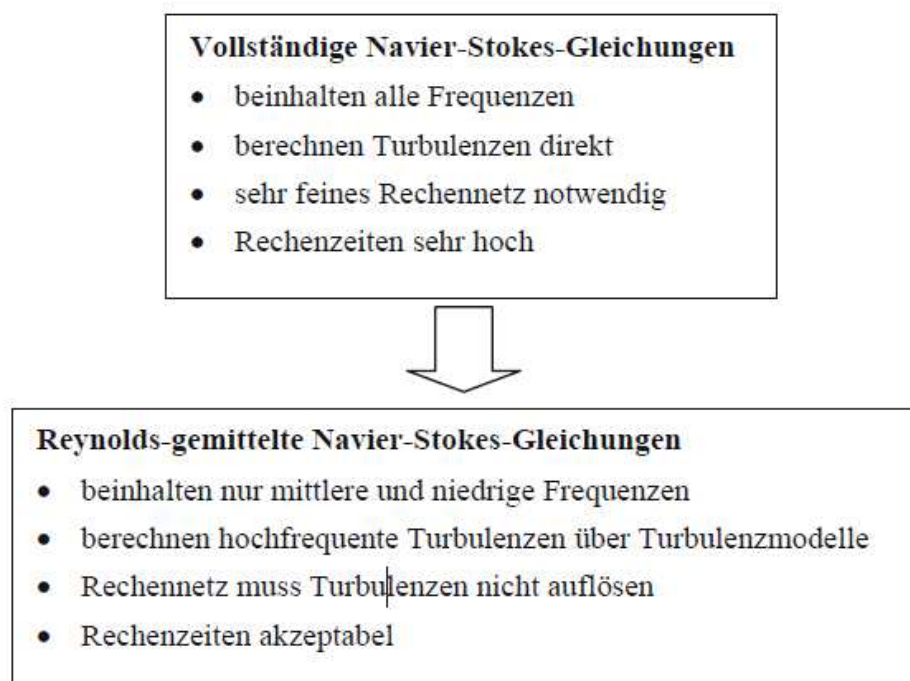


Abbildung 3-6 – Vollständige und Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen [22]

3.1.9 Transport in mehrphasigen Systemen

Mehrphasenströmungen können überall in der Natur gefunden werden. So ist allein das fließen von Blut in unseren Venen ein mehrphasiges System, bestehend aus Flüssigkeit und mikroskopisch kleinen Partikel. Aber nicht nur in der Natur, sondern vor allem in verfahrenstechnischen Anwendungen gibt es Unmengen an Mehrphasenströmungen. Beginnend von der Pharmaindustrie, über chemische verfahrenstechnische Anwendungen, bis hin zur Nuklearindustrie. In Tabelle 3-1 sind einige Beispiele für industrielle Anwendungen von Zweiphasenströmungen aufgelistet und sollen einen kleinen Überblick über die zahlreichen Einsatzgebiete geben [27].

Tabelle 3-1 – Zusammenfassung von Zweiphasenströmungen und Beispiele für industrielle Anwendungen [27]

Kontinuierliche Phase - Disperse Phase	Industrielle Anwendung
Gas - Feststoff	pneumatische Förderung, Feststofftrennung (Zyklon)
Flüssig – Feststoff	Gerührte Kessel, Flüssig-Feststoff Trennung, hydraulische Förderung
Gas – Flüssigtropfen	Sprühtrocknung, Sprühkühlung
Flüssig – Flüssigtropfen	Extrahieren, Mischen, Trennen
Flüssig – Gasblasen	Flotation, Blasensäule

Mehrphasige Systeme sind Systeme bestehend aus mehreren, nicht mischbaren Fluiden oder aus Fluiden und Feststoffen. Gekennzeichnet sind sie durch die Ausbildung zweidimensionaler Phasengrenzen zwischen den Phasen. Als Phase wird der Anteil des strömenden Mediums, der mit einem bestimmten Aggregatzustand vorliegt, bezeichnet. So kann eine Phase als flüssig, gasförmig oder fest vorhanden sein. Eine Mehrphasenströmung ist somit ein Gemisch aus Phasen wie zum Beispiel Gasblasen in Flüssigkeit, Flüssigtropfen in Gasen oder Flüssigkeiten und Partikeln in Gasen oder Flüssigkeiten [21].

Mehrphasenströmungen werden unter anderem an der Art des Kontaktes der einzelnen Phasen zueinander klassifiziert. Sie können entweder voneinander separiert sein oder eine Phase kann in disperser Form in der anderen Phase vorliegen. In Abbildung 3-7 sind beide Arten dargestellt [27].

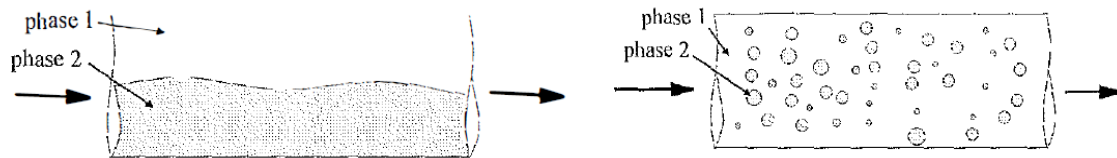


Abbildung 3-7 – links: separierte Mehrphasenströmung; b) dispergierte Mehrphasenströmung [27]

3.1.9.1 Typische charakteristische Größen zur Beschreibung von Mehrphasenströmungen

Die für Mehrphasenströmungen wichtigste Art der Charakterisierung ist die Definition des Phasenanteils α_i der Phase i . Er ist definiert als das Verhältnis aus dem Volumen der Phase V_i zum Gesamtvolumen V . Die Summe aller Phasenanteile muss 1 ergeben. Somit ist der Phasenanteil der dispersen Phase

$$\alpha_d = \frac{V_d}{V} \quad (3.28)$$

und der Volumenanteil der kontinuierlichen

$$\alpha_k = 1 - \alpha_d \quad (3.29)$$

Eine weitere Größe zur Charakterisierung der dispersen Phase ist die Definition des Volumens welches durch eine kugelförmige Blase oder eines Partikels eingenommen wird.

$$D_{d,i} = 6 * \frac{V^{1/3}}{\pi} \quad (3.30)$$

Weichen die Blasen und Partikeln von den kugelförmigen Zuständen ab, so kann mit Hilfe eines Sphärizitätsfaktors diese Abweichung beschrieben werden. Als weitere charakteristische Größe wird der Abstand zwischen den einzelnen Blasen und Partikeln verwendet. Er dient zur Beschreibung von Wechselwirkungen zwischen ihnen [27].

Ausgehend von einer homogenen Verteilung wird er definiert durch:

$$L = D_d * \left(\frac{\pi}{6 * \alpha_d} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.31)$$

3.1.9.2 Wechselwirkungen zwischen kontinuierlicher und disperser Phase

Abhängig vom Volumenanteil der dispersen Phase können Wechselwirkungen zwischen den Phasen auftreten. Grundsätzlich können drei verschiedene Wechselwirkungsarten vorkommen welche in folgender Tabelle aufgelistet sind:

Tabelle 3-2 – Arten von Wechselwirkungen zwischen kontinuierlicher und disperser Phase [27, 29]

Art der Wechselwirkung	Volumenanteil	Wirkung
One-way	<1%	-disperse Phase bewegt sich mit Geschwindigkeitsfeld der kontinuierlichen Phase – beeinflusst diese aber nicht; -Partikel beeinflussen sich gegenseitig nicht; -nur Einfluss der kontinuierlichen Phase auf Partikel
Two-way	1%-10%	-Partikel beeinflussen Turbulenz der kontinuierlichen Phase
Four-way	>10%	-starke Beeinflussung der kontinuierlichen Phase durch Partikel; -Partikel beeinflussen sich gegenseitig durch Kollision

3.1.10 Ansätze zur Mehrphasenmodellierung

Gegenwärtig gibt es für die Simulation von Mehrphasensystemen zwei Modellierungsverfahren. Diese sind das Euler/Lagrange-Verfahren und das Euler/Euler-Verfahren. Da eine detaillierte Analyse dieser Verfahren den Rahmen der Arbeit sprengen würde, werden in den nächsten Kapiteln nur ein kurzer Einblick und die theoretische Idee zu den Verfahren erläutert. Wechselwirkung und Deformationen der dispersen Phasen werden nicht behandelt. Es wird auf folgenden Literaturen verwiesen [21, 22, 23, 24].

3.1.10.1 Euler/Lagrange Verfahren (Discrete Phase Model-DPM)

Beim Euler/Lagrange-Verfahren werden für die kontinuierliche und disperse Phase zwei unterschiedliche Ansätze zur Beschreibung verwendet. Die kontinuierliche Phase wird mit Hilfe von Bilanzgleichungen beschrieben (Euler'sche-Ansatz). Zusätzlich werden die Bilanzgleichungen mit Phasenwechselwirkungstermen erweitert. Sie beschreiben die Wechselwirkungen zwischen kontinuierlicher und disperser Phase und resultieren aus der Simulation der dispersen Phase. Somit werden die Lösungen der dispersen Phase mit den Lösungen der kontinuierlichen Phase gekoppelt. Die disperse Phase wird statistisch beschrieben. Hierfür werden die Partikel als Punktmasse mit bestimmten Eigenschaften betrachtet. Partikel mit selben Eigenschaften werden zu Partikelpakete zusammengefasst (Abbildung 3-8). Diese Partikelpakete bewegen sich auf Bahnlinien, resultierend aus dem Geschwindigkeitsfeld der kontinuierlichen Phase (lagrangscher Ansatz). Die Bahnlinien werden korrigiert indem die auf die Partikel wirkenden Kräfte lokal bestimmt und mitberücksichtigt werden. Aus denen leitet sich auch die Größe der Wechselwirkungsterme für die kontinuierliche Phase ab [21].

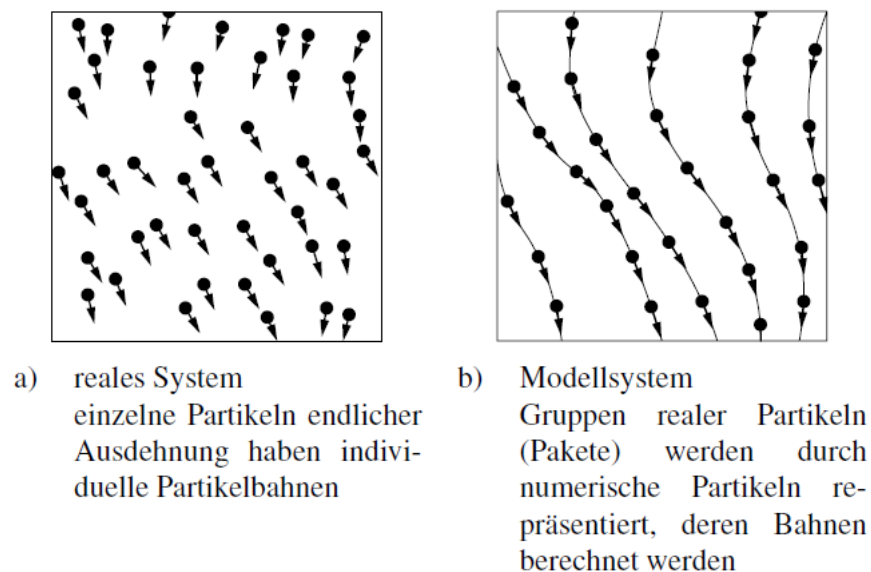


Abbildung 3-8 – Repräsentation von physikalischen Partikeln durch Partikel-Pakete beim Euler/Lagrange – Verfahren [21]

Die Bahnlinien werden mit gewöhnlichen Differentialgleichungen beschrieben, welche einfach zu lösen sind. Ein weiterer Vorteil dieser Methode ist, dass die Partikel der

Partikelpakete unterschiedliche Eigenschaften besitzen können. Die Methode ist jedoch bezüglich des dispersen Anteils beschränkt, welcher bei ca. bei 5% liegt.

3.1.10.2 Euler/Euler-Verfahren

Beim Euler/Euler-Verfahren werden alle Phasen als Kontinuum betrachtet, welche miteinander in Wechselwirkung stehen. Sie können über Kontinuums-Bilanzgleichungen beschrieben und gelöst werden. Die Wechselwirkungsterme werden für jede Phase und nicht, wie im Euler/Lagrange- Ansatz, für Partikelpakete aus einer Phase formuliert. Daher muss beachtet werden, dass die disperse Phase nur monodispers betrachtet wird. Für die Betrachtung verschieden großer Partikel müssen neue Phasen definiert werden. Bei dieser Methode muss der in Kapitel 3.1.9.1 erwähnte Phasenanteil α_i eingeführt werden. Grund hierfür ist, dass eine Rechenzelle nicht von beiden Phasen eingenommen werden kann. Die Erhaltungsgleichungen werden mit dem Phasenanteil α_i für beide Phasen erweitert und können damit und über die Wechselwirkungsterme miteinander gekoppelt werden. Der Phasenanteil wird als kontinuierliche Funktion über den Ort und die Zeit angenommen. Die Summe aller Phasenanteile entspricht eins. Mit dieser Methode lassen sich Berechnungen mit hohem Anteil der dispersen Phase durchführen. Des Weiteren gibt es keine Einschränkung bezüglich der Anzahl der dispersen Phasen. Der Nachteil dieser Methode ist, dass die Größenverteilungen in der dispersen Phase nur sehr schwer und mit hohem Aufwand beschreibbar sind [21, 27].

In ANSYS Fluent stehen drei verschiedene Euler/Euler-Ansätze zur Verfügung [24].

- VOF Model (Volume of Fluid Model)
- Mixture Model
- Eulerian Model

3.1.11 Modellierung von Mehrphasenströmungen

3.1.11.1 Massenerhaltung

Für eine Phase i lautet die Massenerhaltungsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i) + \nabla * (\alpha_i \rho_i \vec{u}_i) = 0 \quad (3.32)$$

Die Volumsanteile α_i der sich im System befindenden Phasen wird summiert und geben in Summe eins.

3.1.11.2 Impulserhaltung

Die Impulserhaltungsgleichung in Vektorschreibweise für eine Phase i lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i \vec{u}_i) + \nabla * (\alpha_i \rho_i \vec{u}_i \vec{u}_i) = -\alpha_i \nabla p + \nabla \tau_i + \alpha_i \rho_i \vec{g} + \vec{F} \quad (3.33)$$

Es ist zu erkennen, dass diese Gleichung zusätzliche den Quellterm F besitzt. Dieser beschreibt die Wechselwirkungen zwischen den Phasen und beinhaltet alle Kräfte welche auf die Tropfen wirken. In dieser Arbeit soll nur die Schleppkraft näher erklärt werden, weitere Details zu den anderen, auf den Tropfen wirkenden Kräften finden sich in [20, 26, 21].

Die Schleppkraft wird als Funktion der Phasengeschwindigkeiten u_d und u_c und des Impulsaustauschkoeffizienten $K_{d,c}$ zwischen den Phasen beschrieben [26]:

$$F_{Drag} = K_{d,c} * (\vec{u}_d - \vec{u}_c) \quad (3.34)$$

Die allgemeine Formulierung des Impulsaustauschkoeffizienten $K_{d,c}$, mit der *Drag Function* f und der Verweilzeit der Partikel τ_d , lautet:

$$K_{d,c} = \frac{\rho_d * \alpha_d * \alpha_c * f}{\tau_d} \quad (3.35)$$

Zur Berechnung der *Drag Function* f wird der Widerstandbeiwert C_D mit dem Modell von SCHILLER & NAUMANN berechnet. Hierbei ist der Widerstandbeiwert C_D abhängig von der Reynoldszahl Re [1, 28].

$$f = C_D * \frac{Re}{24} \quad (3.36)$$

$$C_D = \begin{cases} 24(1 + 0,15Re^{0,687}) & Re \leq 1000 \\ 0,44 & Re > 1000 \end{cases} \quad (3.37)$$

4 Experimenteller Teil

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Verhalten vereinfachter und optimierter Rührergeometrien im Scale-Down von RDC-Extraktionsanlagen, basierend auf den Ergebnissen von AKSAMİJA [1], experimentell untersucht. Hierfür wurden unterschiedliche Rührerdesigns erstellt und hinsichtlich der Hydrodynamik und des Stoffaustausches untereinander verglichen. Das vereinfachte und optimierte Design der Einbauten verzichtet auf die im klassischen RDC verwendeten Statorscheiben. Die Funktion dieser Statorscheiben wird durch vergrößerte Rotorscheiben übernommen. So bilden sich trotz fehlender Statorscheiben die für den RDC typischen Hauptwirbel in den Compartments aus. Des Weiteren wird bei diesen Geometrien der Wellendurchmesser erhöht, wodurch der Extraktor zu einem Hybrid aus RDC- und Taylor-Couette-Reaktor verschmilzt. Dieser wird von AKSAMİJA, basierend auf dessen Erkenntnissen, auch als Taylor-Couette-Disc-Contactor (TCDC) bezeichnet [1]. In Abbildung 4-1 sind die Wirbelausbildungen und der Unterschied zwischen klassischem RDC und dem optimierten TCDC dargestellt.

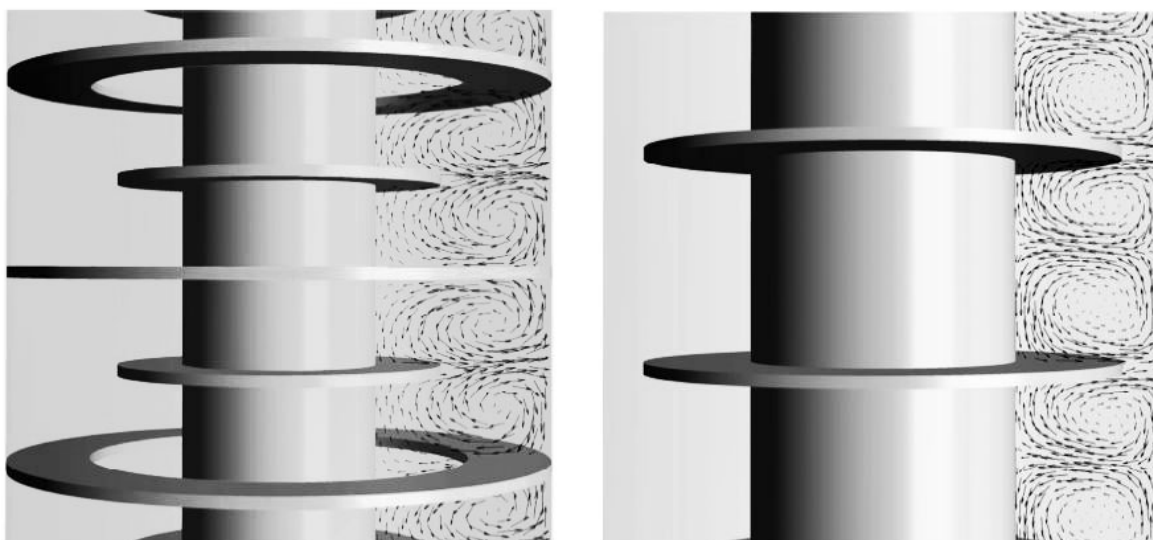


Abbildung 4-1 – links: klassischer RDC-Extraktor; rechts: TCDC-Extraktor [1]

Mit Hilfe empirischer Designregeln können die Einbauten von Extraktionskolonnen geometrisch ausgelegt werden. Die Designregeln AKSAMIJAS für den TCDC lauten:

$$\text{vergrößerter Rotordurchmesser: } D_r = (0,85 \dots 0,9) * D_K \quad (4.1)$$

$$\text{Compartmenthöhe: } H_C = (1,3 \dots 2) * B_C \quad (4.2)$$

$$\text{Wellendurchmesser: } D_W \approx 0,5 * D_K \quad (4.3)$$

Die Abmessungen werden über den Kolonnendurchmesser D_K und die Compartmentbreite B_C berechnet. Detaillierte Hintergründe zu den TCDC-Designregeln finden sich in [1] und sollen in dieser Arbeit nicht näher erläutert werden.

4.1 Anfertigung der TCDC – Rührerdesigns

Für die Berechnung der Größe des Rotordurchmesser D_R nach Gleichung 4.1, wurde der Wert 0,85 gewählt. Der Durchmesser der verwendeten Kolonne D_K betrug 0,03 [m]. Die Höhe der Compartments wurde mit dem Wert 1,5 ermittelt. Die Erkenntnisse nach AKSAMIJAS zeigen, dass der Wellendurchmesser D_W im Bereich von ca. $0,5 * D_K$ die höchsten Werte bezüglich der Wirbel-Flächenausnutzung und der Wirbelzirkulation im Compartment ergeben. Im Rahmen dieser Arbeit wurde jedoch der Wellendurchmesser D_W mit $0,27 * D_K$ und mit $0,6 * D_K$ berechnet und im Scale-Down untersucht. Aus den Design-Regeln und den gewählten Kennzahlen ergaben sich die Abmessungen für die neuen Rührerdesigns. Auf Grund der in Kapitel 4.3.1 erläuterten Gründe, wurden die TCDC – Rührerdesigns modifiziert. Die Nummerierung der Designs erfolgt nach der Reihenfolge der während dieser Arbeit erstellten Geometrien. Als Material zur Erstellung der unterschiedlichen Designs wurde Edelstahl 1.4301 verwendet. Dieser Stahl ist resistent gegen schwache organische und anorganische Säuren. Die Welle von Geometrie 5 wurde aus Gewichtsgründen als Hohlwelle ausgeführt. Die Distanzhülsen von Geometrie 1, 2, 3, 4 und 6 wurden in der Institutswerkstatt auf die Länge von 14,7 [mm] zuge dreht.

Folgende Rührerdesigns wurden für die Versuchsdurchführungen verwendet:

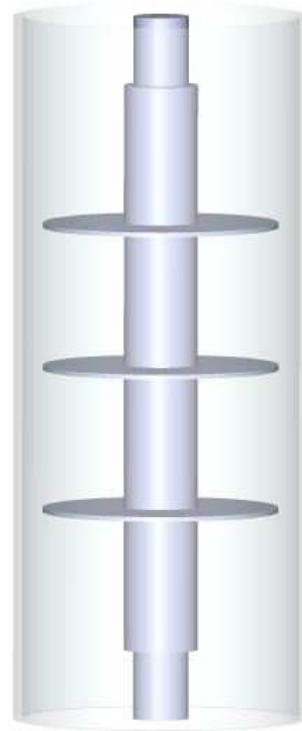
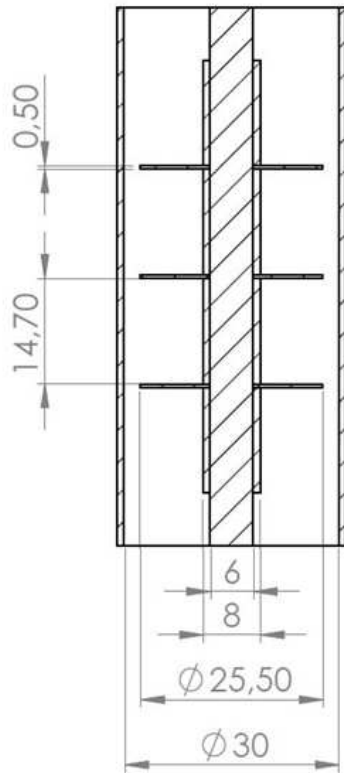


Abbildung 4-2 – Rührerdesign 1

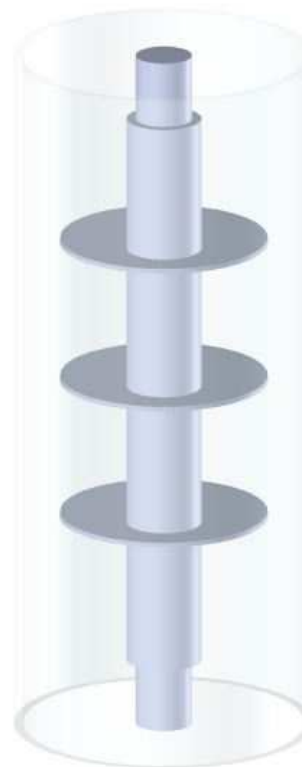
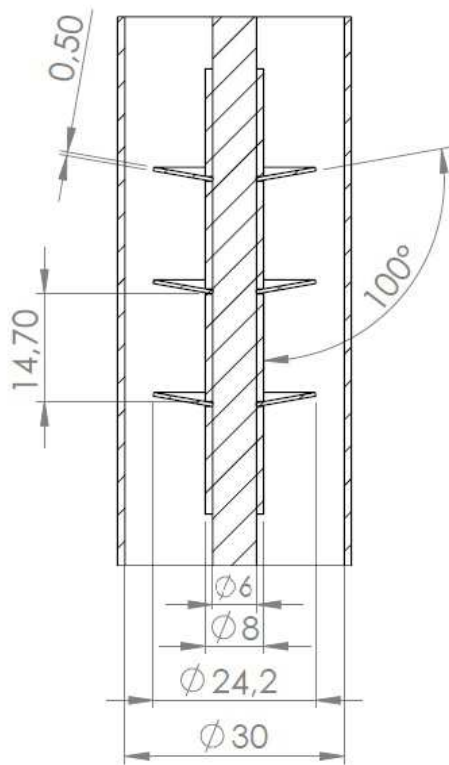


Abbildung 4-3 – Rührerdesign 2

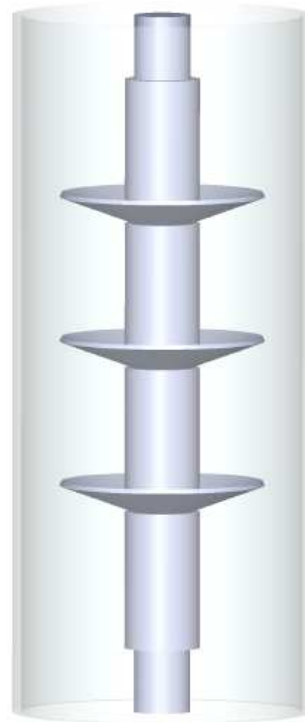
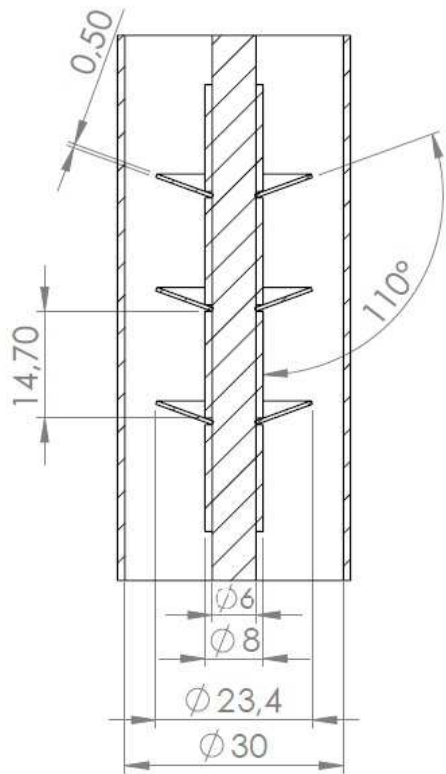


Abbildung 4-4 – Rührerdesign 3

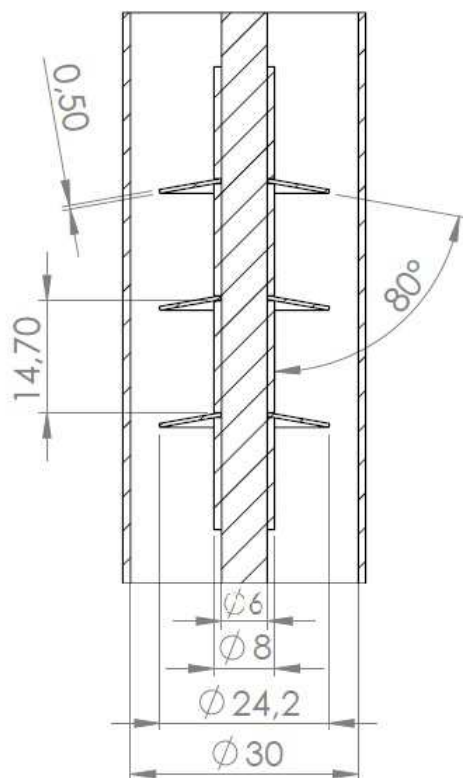


Abbildung 4-5 – Rührerdesign 4

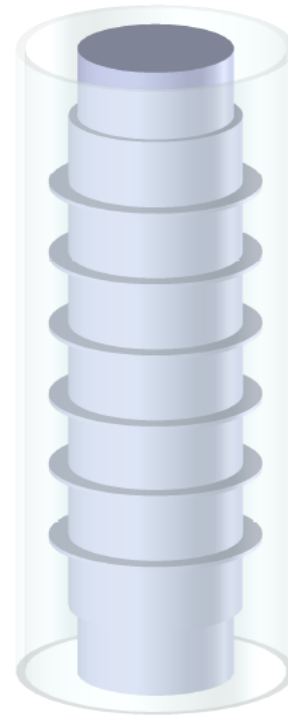
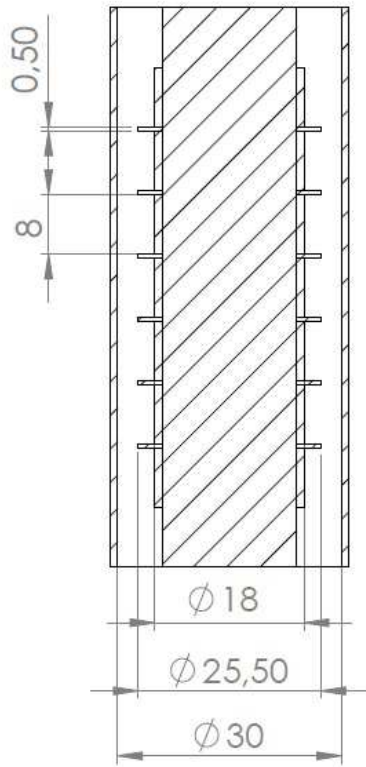


Abbildung 4-6 – Rührerdesign 5

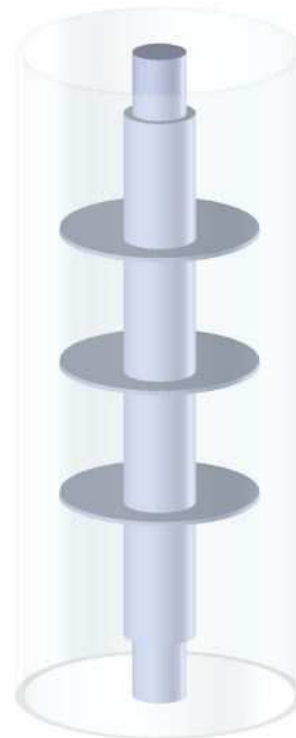
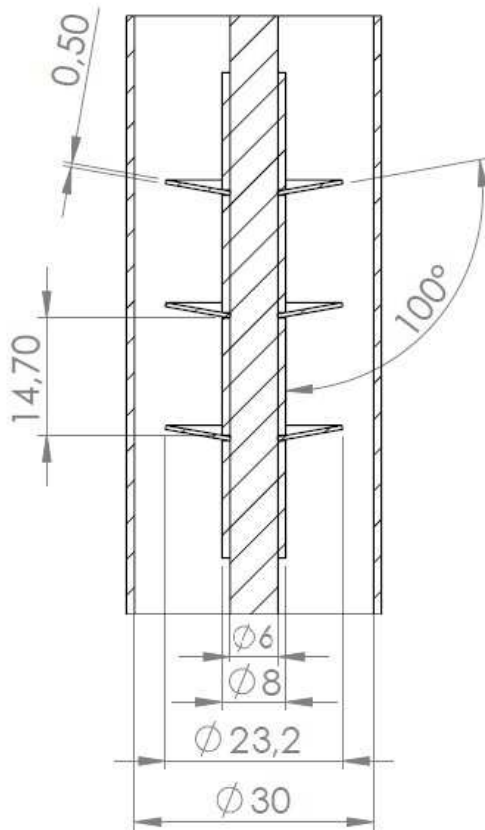


Abbildung 4-7 – Rührerdesign 6

4.2 Aufbau der Versuchsanlage

Für die Versuche wurde eine kontinuierliche Flüssig/Flüssig-Extraktionsanlage von NORMAG LABOR- UND PROZESSTECHNIK GmbH verwendet, wie sie in Abbildung 4-8 dargestellt ist. Die destillative Reinigung des Lösungsmittels wurde bei den Versuchen nicht verwendet, sondern das verunreinigte Lösungsmittel wurde in einem Vorlagebehälter gesammelt. Die Kolonne besaß eine Aktivhöhe von 1 [m] und einen Kolonnendurchmesser von 0,03 [m]. Der kleine Maßstab der Anlage ermöglichte eine einfache Handhabung. So konnten der Ein- und Ausbau der verschiedenen Rührelemente durch eine Person in kurzer Zeit durchgeführt werden. Weiters ermöglichte der niedrige Durchmesser der Kolonne einen geringen Chemikalienverbrauch.



Abbildung 4-8 – Flüssig/Flüssig-Extraktionsanlage NORMAG [30]

4.3 Hydrodynamische Versuche

Bevor die Stoffaustauschversuche starteten, wurden die Rührerdesigns hydrodynamisch untersucht. Dieser Schritt war notwendig um das Verhalten der Anlage zu testen und zu untersuchen, ob die Anlage mit den eingebauten Geometrien bei technisch relevanten Bedingungen betrieben werden kann. Hierfür wurde der Hold-Up² für unterschiedliche Drehzahlen und Kolonnenbelastungen beim Einsatz der Rührerdesigns 1, 2, 5 und 6 ermittelt. Als Testsystem wurde ShellSol-T als organische, disperse Phase und entionisiertes Wasser als kontinuierliche Phase verwendet. Zur Bestimmung des Hold-Up wurde von einem statischen Druckgleichgewicht in der Kolonne ausgegangen. Somit konnte mit Hilfe der in Abbildung 4-17 gekennzeichneten Spiegelhöhen h und durch Ansetzen des Druckgleichgewichts der Hold-Up berechnet werden:

$$\varepsilon_{org} = \frac{h_2 * \rho_{org} - (h_2 - h_1) * \rho_{aq}}{(h_3 - h_2) * (\rho_{aq} - \rho_{org})} \quad (4.4)$$

Die axiale Lage der Phasengrenze änderte sich beim Variieren der Kolonnenbelastung und der Drehzahl. Zur Bestimmung des Flutpunktes wurden die Volumenströme der beiden Phasen im Phasenverhältnis $\varphi=1$ schrittweise so lange erhöht, bis die Kolonne ihre obere Betriebsgrenze, den Flutpunkt, erreichte. Es sollte hier noch erwähnt werden, dass es sich bei der Messung des Hold-Up über das statische Druckgleichgewicht um den aktiven und nicht den absoluten Hold-Up-Wert handelt. Der aktive Hold-Up erfasst nur jenen Dispersphasenanteil in der Kolonne, welcher vollständig von der kontinuierlichen Phase umgeben ist. Gestaute Tropfen oder koaleszierte Zonen die im Kontakt mit Einbauten oder der Kolonnenwand stehen, können dadurch nicht erfasst werden. Der absolute Hold-Up ist im Vergleich zum aktiven aus diesen Gründen immer höher. Es ist daher essentiell, die niedrigeren aktiven Hold-Up-Ergebnisse, um den Bereich von max. 20 [%], in dieser Arbeit nicht fehlzuinterpretieren. RDC-Extraktoren können durchaus höhere absolute Hold-Up-Werte erzielen. Weiters soll darauf hingewiesen werden, dass die Ermittlung des Hold-Up über die Höhendifferenzen keine qualitative Methode darstellt. So können durch das Reinigen der Anlage mit Ethanol oder Aceton, Rückstände in der Anlage die Dichte der Phasen verändern und die Ergebnisse des Hold-Up, besonders bei Kleinanlagen, stark

² Volumenanteil der dispersen Phase zum Gesamtvolumen

beeinflussen. Diese Methode ist jedoch ausreichend, um Aussagen über die möglichen maximalen Kolonnenbelastungen, sowie eine Abschätzung über den Dispersphasenanteil in der Kolonne, zu treffen.

4.3.1 Hold-Up und Flutpunkt - Rührerdesign 1

Zu Beginn wurde Rührerdesign 1 hydrodynamisch untersucht. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4-10 veranschaulicht. Bei einer Drehzahl von 600 [1/min] reichte der Betriebsbereich der Kolonne bis zur Kolonnenbelastung von 3,5 [m³/m²h]. Bei 700 [1/min] konnte die Anlage bis zu einer Kolonnenbelastung von 5,3 [m³/m²h] betrieben werden. Es konnte beobachtet werden, dass sich bei größer werdender Drehzahl ebenso der Betriebsbereich und der Hold-Up vergrößerten.

Aus dem Versuch zeigte sich, dass mit dem verwendeten Rührerdesign nur sehr geringe Kolonnenbelastungen möglich waren, weil der Abstand zwischen Rotorblättern und Kolonnenwand lediglich 0,5 [mm] betrug. Im Scale-Down wird dies zum Problem, da Stoffeigenschaften wie Oberflächenspannung und die daraus resultierende Tropfengröße nicht beliebig reduzierbar sind. Die Auftriebskraft der organischen Phase war in diesem Fall geringer als die Oberflächenkräfte, welche zwischen Rotor und Kolonnenwand wirkten. Ein Aufstauen der dispersen Phase unter den Rotorblättern, mit intensiver Koaleszenz an nicht vorhersehbaren Stellen, war zu beobachten. Mehrere einzelne Compartments wurden vollständig von der dispersen Phase aufgefüllt und die Kolonne flutete. Auf Grund der geringen Flutgrenze wurde kein Stoffaustauschversuch mit dieser Geometrie durchgeführt, sondern Rührerdesign 1 wurde zu Design 2 modifiziert. In Abbildung 4-9 ist die Phaseninversion eines Compartments schematisch dargestellt.

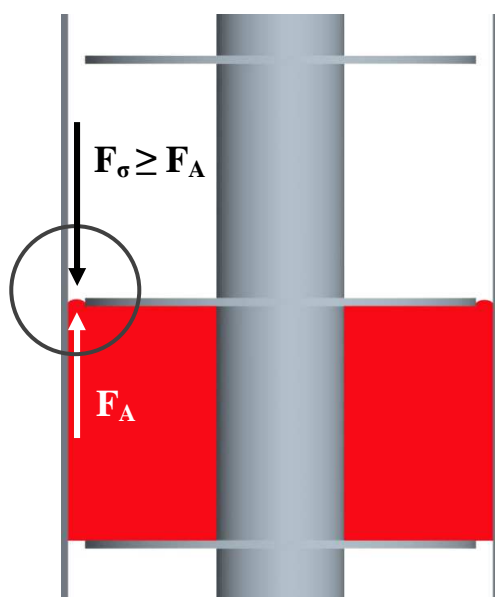


Abbildung 4-9 – Phaseninversion eines Compartments des Rührerdesigns 1

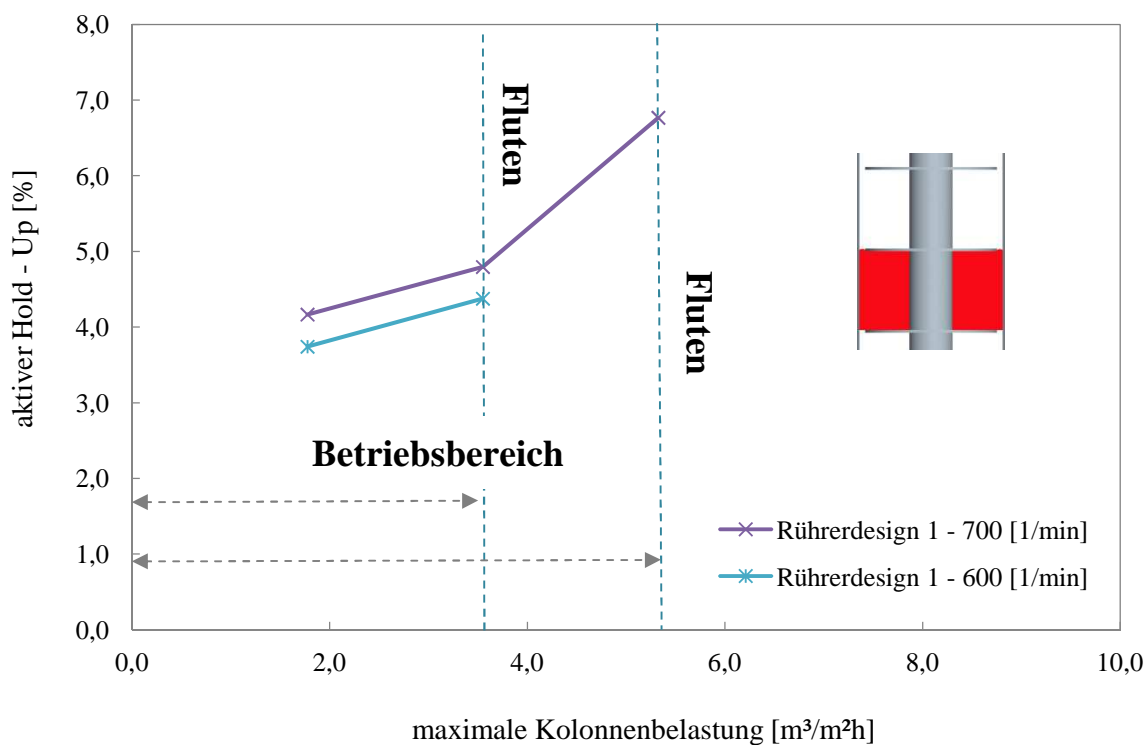


Abbildung 4-10 – maximale Kolonnenbelastung (Flutpunkt) des Rührerdesigns 1

4.3.2 Hold-Up und Flutpunkt - Rührerdesign 2

Bei Design 2 wurde der Durchmesser der Rotorblätter auf 24,5 [mm] verringert, um den Abstand zwischen Kolonnenwand und Rotorscheibe zu erhöhen. Weiters wurden die Rotorscheiben um 10° nach oben angewinkelt um ein besseres Abfließen der organischen Phasen unter den Rotorblättern zu gewährleisten. Die Versuche wurden mit den Drehzahlen 600, 700 und 750 [1/min] durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4-11 dargestellt. Im Vergleich zu Rührerdesign 1 lag die maximale Kolonnenbelastung der modifizierten Geometrie sehr viel höher. Der Betriebsbereich der Kolonne stieg auf etwa 19,5 [m³/m²h] an. Bei der geringeren Drehzahl von 600 [1/min] reduzierte sich der Betriebsbereich nur minimal. Es konnte ebenso eine Erhöhung des Hold-Up bei höheren Drehzahlen festgestellt werden. Kurz vor Erreichen der Flutgrenze stieg der Hold-Up sprunghaft an.

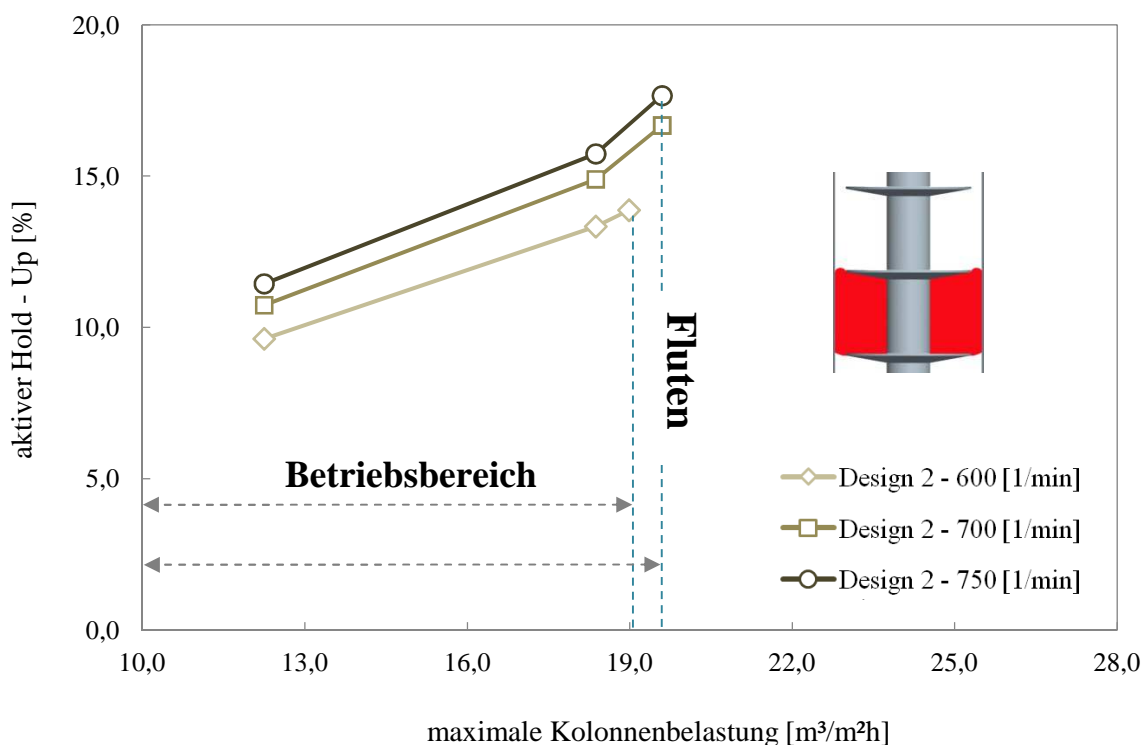


Abbildung 4-11 – maximale Kolonnenbelastung (Flutpunkt) des Rührerdesigns 2

4.3.3 Vergleich Hold-Up und Flutpunkt - Rührerdesign 1 und 2

Anfänglich sollten in dieser Arbeit verschiedene TCDC-Rührerdesigns untersucht werden. Da jedoch auf Grund der Erkenntnis aus dem ersten hydrodynamischen Versuch eine modifizierte TCDC-Rührergeometrie entstand, sollen in diesem Unterkapitel das Rührerdesign 1 (TCDC) und das Rührerdesign 2 (modifizierter TCDC) miteinander verglichen werden (Abbildung 4-12). Durch die hydrodynamischen Versuchsdurchführungen wurde ersichtlich, dass sich der Scale-Down des TCDC als schwierig erwies. Die erreichbaren Kolonnenbelastungen waren mit diesem Design zu gering, um Versuche mit der Anlage in vernünftigen Betriebsbereichen durchzuführen. Durch das Modifizieren des TCDC-Rührerdesigns wurden die maximal erreichbare Kolonnenbelastung und der Dispersphasenanteil in der Kolonne signifikant erhöht.

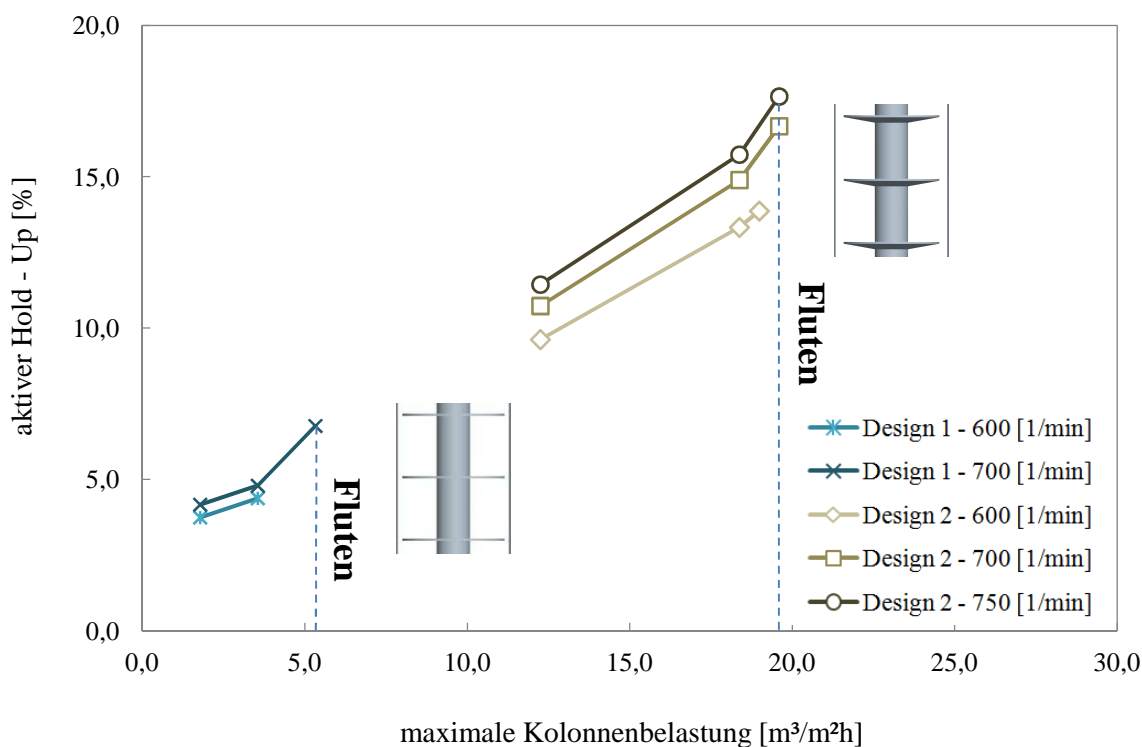


Abbildung 4-12 – Vergleich der maximal erreichbaren Kolonnenbelastung Design 1 und Design 2 (TCDC und modifizierter TCDC)

4.3.4 Vergleich Hold-Up und Flutpunkt – Rührerdesign 1 und 5 (TCDC)

Ein weiterer Vergleich zweier nicht modifizierter TCDCs wurde durchgeführt und in Abbildung 4-13 dargestellt. Design 5, mit dem Verhältnis D_W/D_K von 0,6 erreichte eine niedrigere maximale Kolonnenbelastung als Design 1 mit dem Verhältnis D_W/D_K von 0,27 bei 700 [1/min]. Auch die Hold-Up Ergebnisse bei Design 5 lagen unter den Werten von Design 1. Durch diesen Versuch wurde das Problem des Scale-Down mit den TCDC Designs ein weiteres Mal bestätigt. Auch hier wurde aus den genannten Gründen auf einen Stoffaustauschversuch mit Rührerdesign 5 verzichtet.

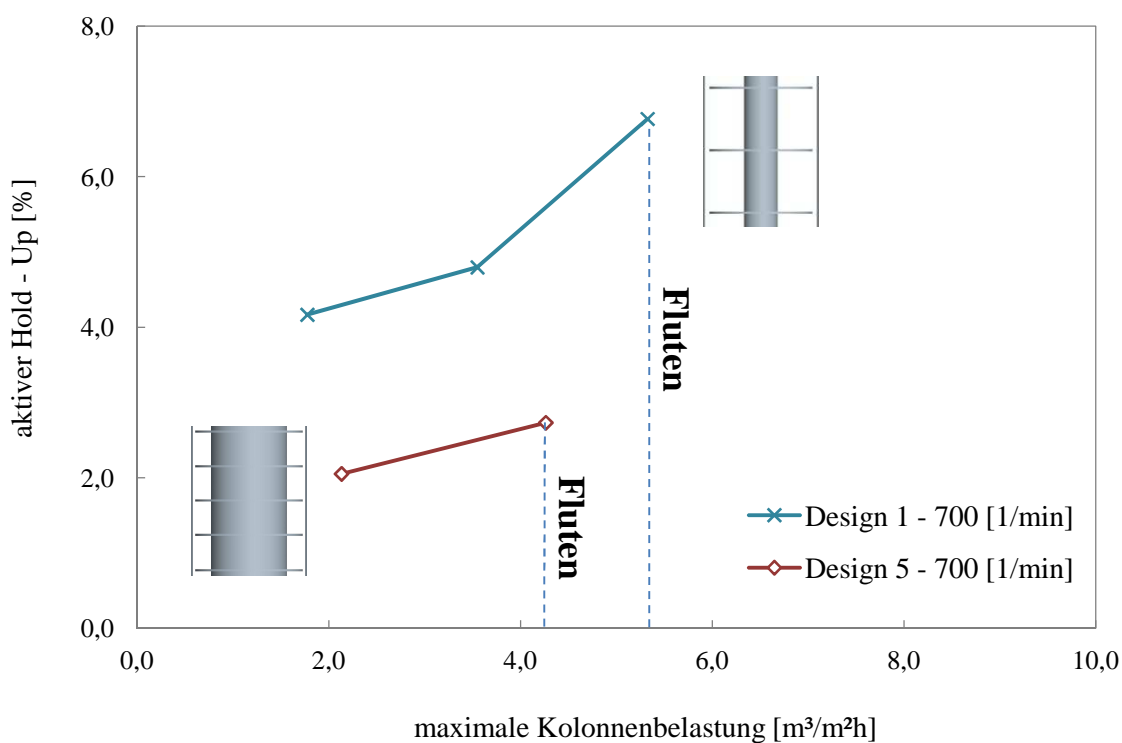


Abbildung 4-13 – Vergleich der maximal erreichbaren Kolonnenbelastung bei Rührerdesign 1 und 5 (TCDC – Designs)

4.3.5 Vergleich Hold-Up und Flutpunkt – Rührerdesign 2 und 6 (modifizierter TCDC)

Weiters wurden die modifizierten Designs 2 und 6 hydrodynamisch untersucht und verglichen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4-14 dargestellt. Design 6 wurde insofern verändert, als dass der Rotordurchmesser auf 23,5 [mm] reduziert und ebenso wie bei Design 2 um 10° nach oben angewinkelt wurde.

Bei Rührerdesign 6 war kein steileres Ansteigen des Hold - Up vor Erreichen der Flutgrenze zu erkennen. Der Grund hierfür war, dass mit den verwendeten Schlauchquetschpumpen die maximal einstellbare Kolonnenbelastung bei 21 [m³/m²h] lag und somit die obere Belastungsgrenze für das Rührerdesign 6 gar nicht erreicht werden konnte. Daher ist in Abbildung 4-14 der Betriebsbereich dieses Designs nicht markiert worden. Durch das Reduzieren des Rotordurchmessers konnte eine Erhöhung der Kolonnenbelastung beobachtet werden, jedoch sank dadurch der aktive Hold-Up in der Kolonne.

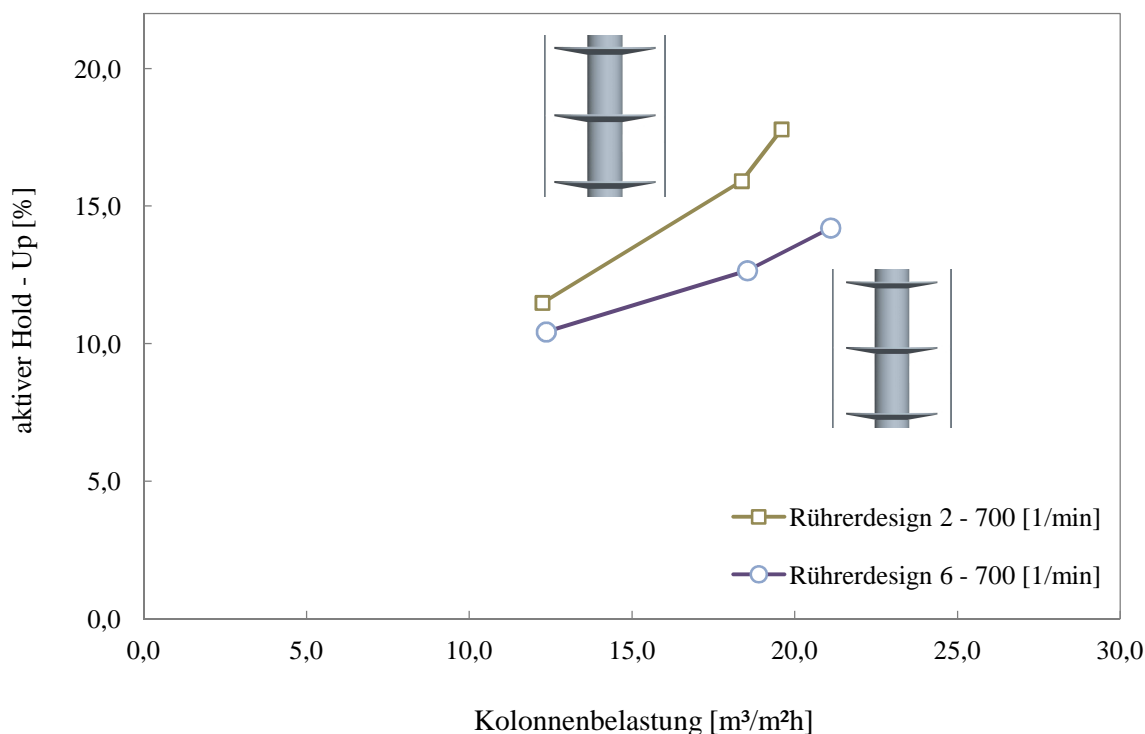


Abbildung 4-14 – Vergleich der modifizierten Designs 2 und 6 bei 700 [1/min]

4.3.6 Gegenüberstellung aller hydrodynamisch vermessener Designs

Anhand der oben beschriebenen Versuchsreihen soll ein Vergleich bezüglich der Betriebsgrenzen der verschiedenen Rührerdesigns präsentiert werden. Hierfür sind in Abbildung 4-15 alle Ergebnisse bei 700 [1/min] dargestellt. In Tabelle 4-1 sind die exakten Werte zu entnehmen. Der Betriebsbereich der TCDCs im Scale-Down lag sehr viel niedriger als vergleichsweise bei den modifizierten TCDCs. Durch das Anwinkeln der Rotorscheiben konnte die disperse Phase leichter durch den Spalt zwischen Kolonnenwand und Rotorscheiben schlüpfen und dispergiert werden. Durch das Verringern des Rotordurchmessers stieg die maximale Kolonnenbelastung weiter an, jedoch sank dabei der disperse Phasenanteil in der Kolonne. Aufgrund dieser Erkenntnisse wurden die Stoffaustauschversuche nur mit den modifizierten TCDCs durchgeführt.

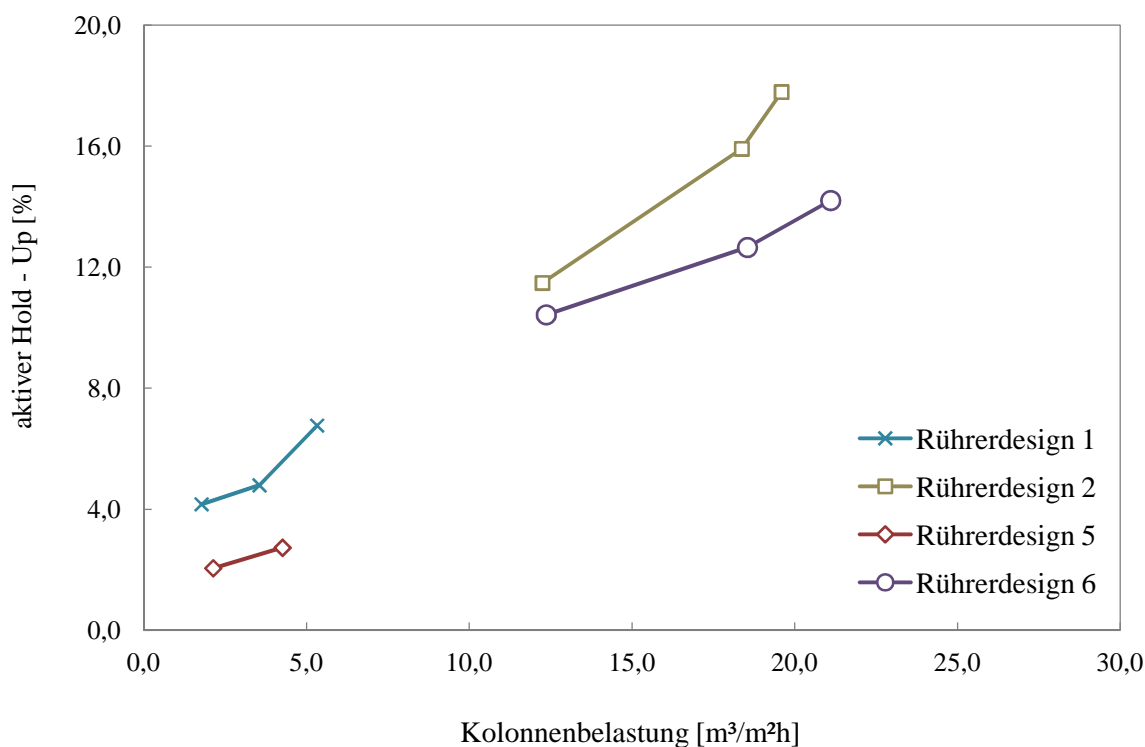
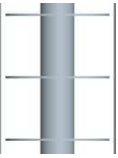
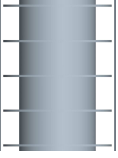
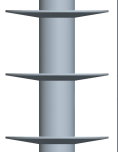
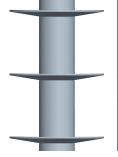


Abbildung 4-15 – Vergleich aller hydrodynamisch vermessenen Designs bei 700 [1/min]

Tabelle 4-1 – Vergleich Betriebsbereiche der TCDC und der modifizierte TCDC bei 700 [1/min]

Rührerdesigns		Typ	max. Kolonnenbelastung [m ³ /m ² h]	aktiver Hold-Up [%]
	Design 1	TCDC $D_w/D_K=0,27$	5,3	7,2
	Design 5	TCDC $D_w/D_K=0,6$	4,3	2,7
	Design 2	modifizierter TCDC $D_w/D_K=0,27$	19,6	17,8
	Design 6	modifizierter TCDC $D_w/D_K=0,27$	21,1	12,9

4.4 Stoffaustauschversuche

Die Stoffaustauschversuche wurden mit den Rührerdesigns 2, 3 und 4 durchgeführt. Die Durchführung aller Versuche fand bei der Drehzahl von 650 [1/min] und der Kolonnenbelastung von 12,5 [m³/m²h] statt. Das Phasenverhältnis φ der Volumenströme betrug $\varphi=1$.

4.4.1 Stoffsystem

Für die Stoffaustauschversuche in dieser Arbeit wurde das Testsystem ShellSol-T – n-Butanol – Wasser verwendet. Als kontinuierliches Lösungsmittel diente entionisiertes Wasser. Als Übergangskomponente wurde n-Butanol verwendet, welches in bestimmter Menge in der organischen Phase ShellSol-T vorlag. Dieses System zeichnet sich vor allem dadurch aus, dass es keine giftigen Komponenten besitzt und ShellSol-T und Wasser gegenseitig unlöslich sind. Die Stoffdaten zu diesem System sind aus dem Anhang zu entnehmen. Das Flüssig/Flüssig-Gleichgewicht wurde aus bereits vorliegenden Daten aus Laborversuchen erstellt und ist in folgender Abbildung dargestellt.

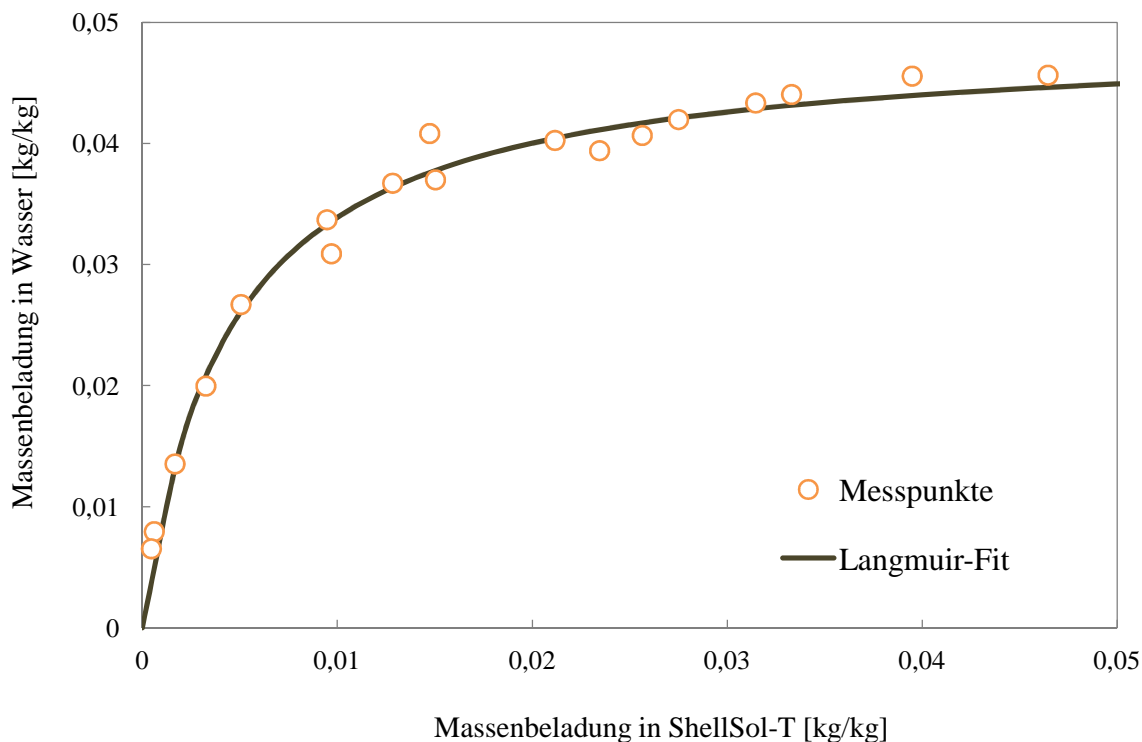


Abbildung 4-16 – Gleichgewichts-Beladungsdiagramm ShellSol-T – n-Butanol – Wasser

Als Kurvenfit für die experimentellen Datenpunkte diente eine Langmuir-Isotherme

$$Y = \omega * \frac{X}{K + X} \quad (4.5)$$

mit den Konstanten $K=4,424E-03$ und $\omega=4,888E-02$. Y und X stellen die Beladungen an n-Butanol in den beiden Phasen dar.

4.4.2 Versuchsdurchführung

Im Vorlagebehälter B01 (Abbildung 4-17) wurde das Ausgangsgemisch für die Extraktionsversuche, bestehend aus 10 [l] SST und 0,41 [kg] n-Butanol, mit Hilfe eines Rührers ~30 Minuten lang durchmischt. Dieser Schritt war notwendig, um eine homogene Feedzusammensetzung zu gewährleisten. Die Pumpe P01 förderte den leichteren Feed in den Sumpf der Kolonne K01. Als konstante Versuchsparameter wurden die Volumenströme der beiden Phasen mit 4 [l/h] festgelegt. Über den Kopf der Kolonne wurde das schwerere Lösungsmittel (Wasser) mittels der Pumpe P02 ausgehend vom Vorlagebehälter B02 beigefügt. Mit Hilfe des Rotors R01 wurden die Rührer bei einer konstanten Drehzahl von 650 [1/min] angetrieben. Das Raffinat trat am Kopf der Kolonne aus und wurde im Behälter B03 gesammelt, während das beladene Extraktionsmittel im Sumpf der Kolonne abgeführt und im Behälter B04 gesammelt wurde. Die Lage der Phasengrenze wurde über das Hosenrohr H01 geregelt. Die Größe der Behälter war auf 10 [l] beschränkt und limitierte daher die Versuchsdauer auf max. 150 Minuten. Die erste Probenentnahme fand nach 60 Minuten statt, die restlichen im Abstand von 20 Minuten. Es wurden jeweils vier Proben von jeder Phase entnommen. Die Probenentnahme erfolgte vor dem Einlaufen in den Sammelbehälter B03 der organischen, und B04 der wässrigen Phase. Als Annahme galt, dass 60 Minuten als Dauer für das Einstellen eines stationären Betriebszustands³ ausreichten. Mittels Gaschromatographie erfolgte die Analyse der Proben. Hierfür wurden diese zuvor mit Tetrahydrofuran (THF) im Verhältnis 1:10 verdünnt. Als variable Parameter für die Versuchsdurchführung dienten die in Kapitel 4.1 vorgestellten Rührerdesigns.

³ Bei kleinen Laboranlagen erweist sich die Bestimmung des stationären Zustands als schwierig

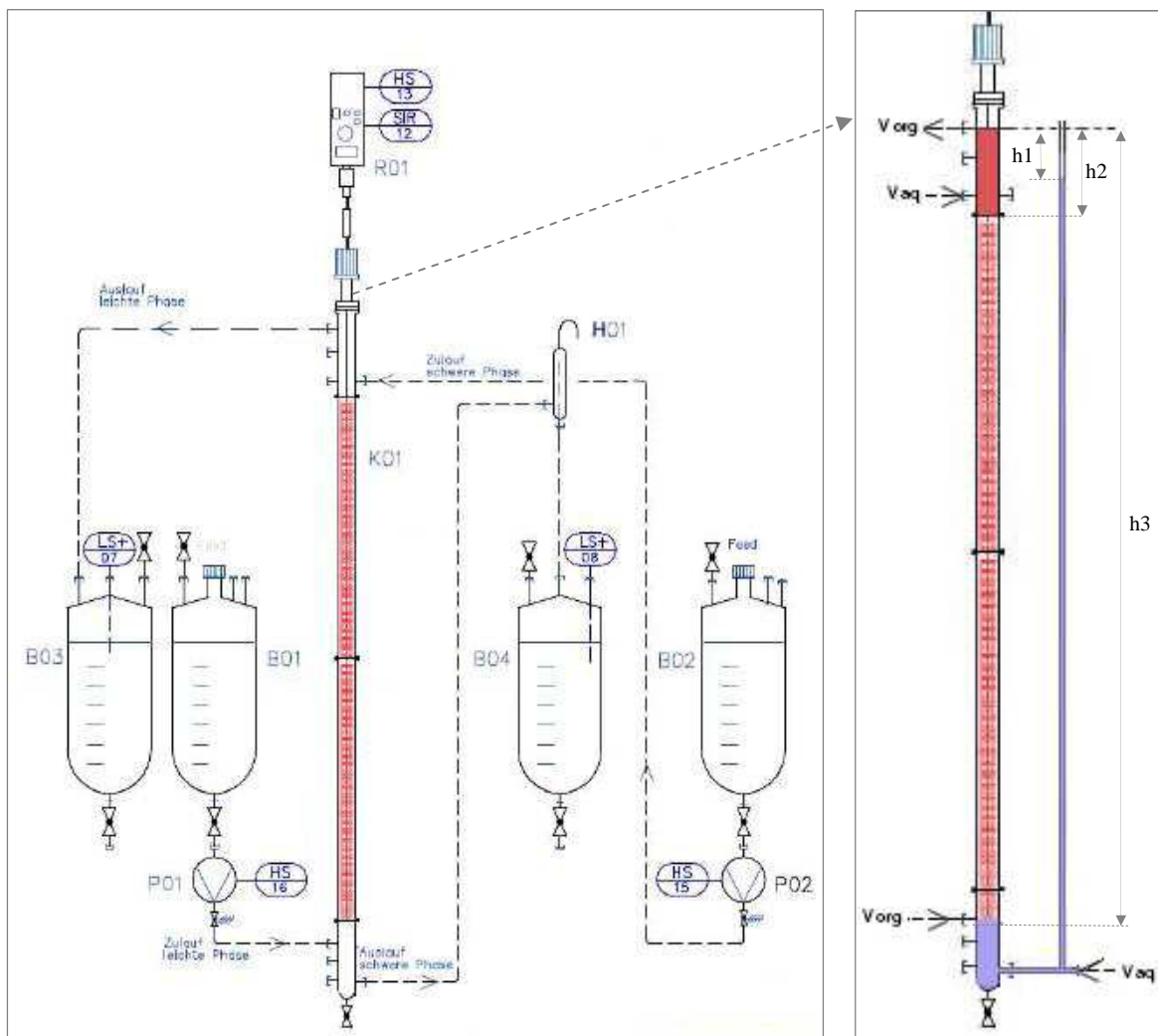


Abbildung 4-17 –links: Fließbild der Extraktionskolonne; rechts: Spiegelhöhen; modifiziert aus [30]

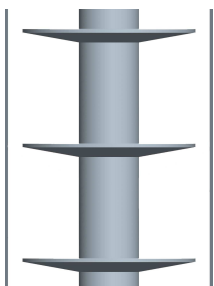
4.4.3 Ergebnisse Stoffaustausch

4.4.3.1 Stoffaustauschversuch 1 mit Rührerdesign 2

In Abbildung 4-18 sind die Betriebsgeraden aller Proben des ersten Versuchs mit Rührerdesign 2 dargestellt. In Abbildung 4-19 ist der Mittelwert daraus als Bilanzgerade aufgetragen und ausgewertet. Der Mittelwert der Anfangsbeladung an n-Butanol in der organischen Phase lag bei $0,0727 \text{ [kg}_{\text{n-But}}/\text{kg}_{\text{sst}}]$ und die Endbeladung betrug $0,00174 \text{ [kg}_{\text{n-But}}/\text{kg}_{\text{sst}}]$. Somit ergab sich eine Abtrennung des n-Butanols von $97,6 \text{ [\%]}$. Die Anzahl der theoretischen Stufen $NTU = 1,77$ und die Höhe jeder Stufen $HTU = 0,56 \text{ [m]}$ wurden nach Gleichung 2.27 mit einer aktiven Kolonnenhöhe von 1 [m] berechnet. Für jede Probe wurde eine Komponentenbilanz von n-Butanol erstellt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4-2

aufgelistet. Die prozentuellen Fehler schwanken um den Wert von 26 %. Ein Grund für die hohe Abweichung könnten Fehler in der Analytik der Proben sein. Die Ergebnisse einer mehrmals vermessenen Probe wichen stark voneinander ab. Ein weiterer Grund für den hohen Fehler in der Komponentenbilanz könnte eine falsche Kalibration der verwendeten Schlauchquetschpumpen sein bzw. eine ungenaue volumetrische Förderung mit den Schlauchquetschpumpen. Die Volumenströme lagen im kleinen Bereich und minimale Abweichungen von konstanten Eingangsströmen können bei kleinen Laboranlagen zu großen Auswirkungen führen. Für die Auswertung der Versuche wurden daher nur jene Ergebnisse verwendet, welche die niedrigsten prozentuellen Fehler aufwiesen.

Tabelle 4-2 – Fehler der Komponentenbilanz n-Butanol und Trenngrad, Design 2

Rührerdesign 2	Versuch 1	Fehler [%]	Trenngrad [%]
	Probe 1	27,5	97,9
	Probe 2	24,5	97,3
	Probe 3	26,2	97,8
	Probe 4	26,9	97,4
	Mittelwert	26,3	97,6

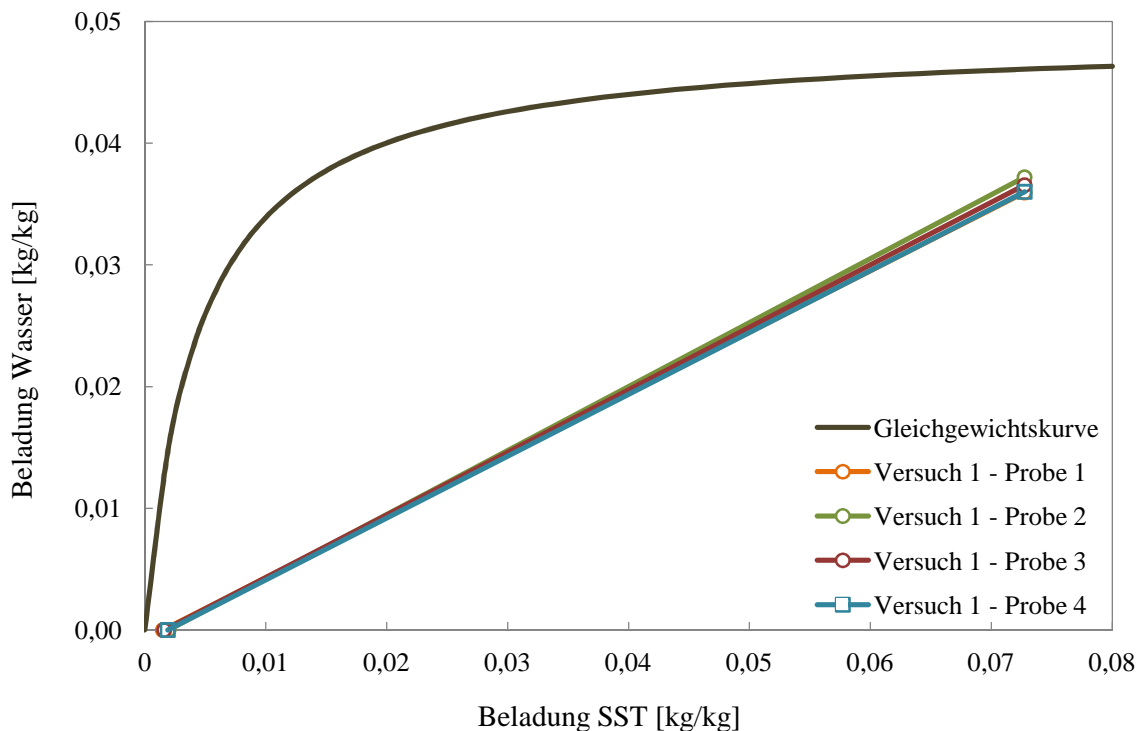


Abbildung 4-18 – Stoffaustausch Versuch 1 – Design 2 bei 650 [1/min] und einer Kolonnenbelastung von 12,5 [m³/m²h]

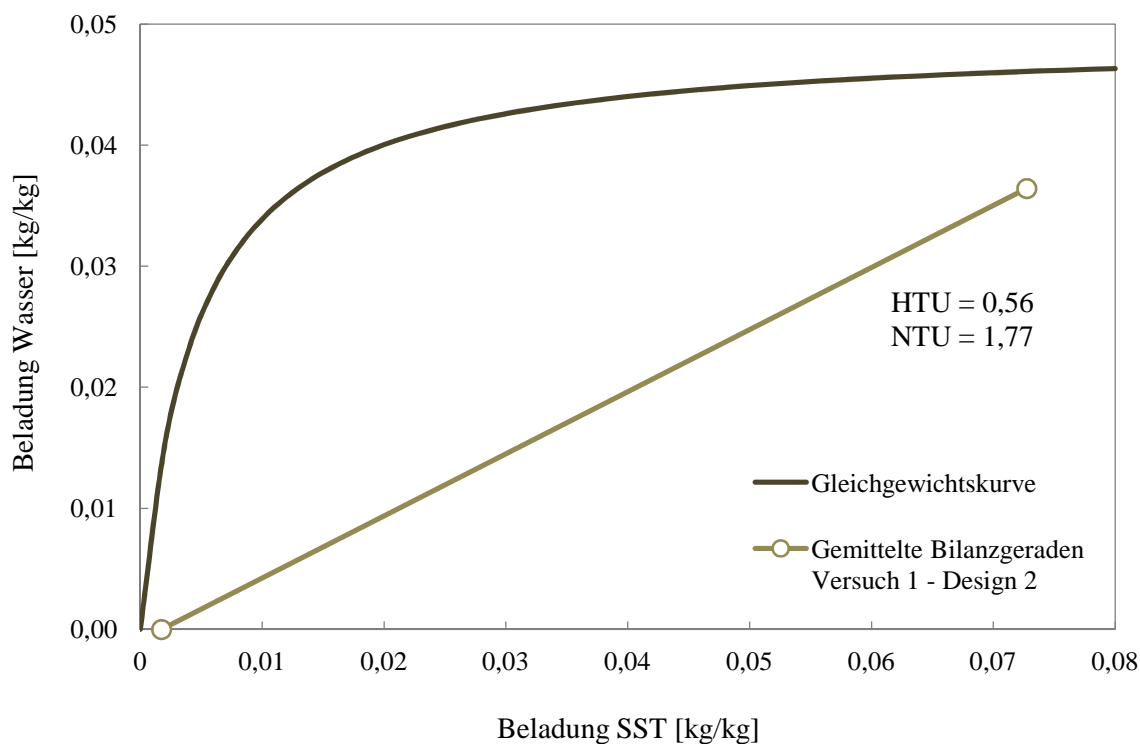
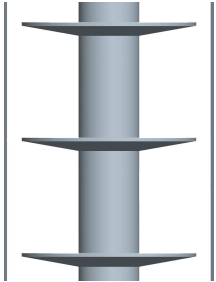


Abbildung 4-19 – Gemittelte Bilanzgerade Versuch 1 – Design 2 bei 650 [1/min] und einer Kolonnenbelastung von 12,5 [m³/m²h]

4.4.3.2 Stoffaustauschversuch 2 mit Rührerdesign 2

Der zweite Stoffaustauschversuch wurde ebenso mit dem Rührerdesign 2 durchgeführt und diente dazu, Kontrollergebnisse zu Versuch 1 zu erhalten. In Abbildung 4-20 sind die einzelnen Betriebsgeraden der gezogenen Proben dargestellt, in Abbildung 4-21 ist die gemittelte Betriebsgerade abgebildet. Der Mittelwert der Anfangsbeladung an n-Butanol in der organischen Phase lag bei $0,0695 \text{ [kg}_{\text{n-But}}/\text{kg}_{\text{sst}}]$ und die Endbeladung bei $0,00179 \text{ [kg}_{\text{n-But}}/\text{kg}_{\text{sst}}]$. Der Trenngrad der Anlage lag somit bei 97,4 %. Die Anzahl der theoretischen Stufen ergab $\text{NTU} = 2,35$ und die Höhe jeder Stufen wurde mit $\text{HTU} = 0,43 \text{ [m]}$ errechnet. Die Auswertung der Komponentenbilanz des zweiten Versuchs (Tabelle 4-3) ergab eine geringere prozentuelle Abweichung im Vergleich zu Versuch 1. Für die Gegenüberstellung der Stoffaustauschergebnisse aller Rührerdesigns in Kapitel 4.4.3.5 wurden aus diesem Grund die Ergebnisse des Versuchs 2 verwendet.

Tabelle 4-3 – Fehler der Komponentenbilanz n-Butanol und Trenngrad, Design 2

Rührerdesign 2	Versuch 2	Fehler [%]	Trenngrad [%]
	Probe 1	23,2	97,5
	Probe 2	24,9	97,5
	Probe 3	25,7	97,2
	Probe 4	19,9	97,5
	Mittelwert	23,4	97,4

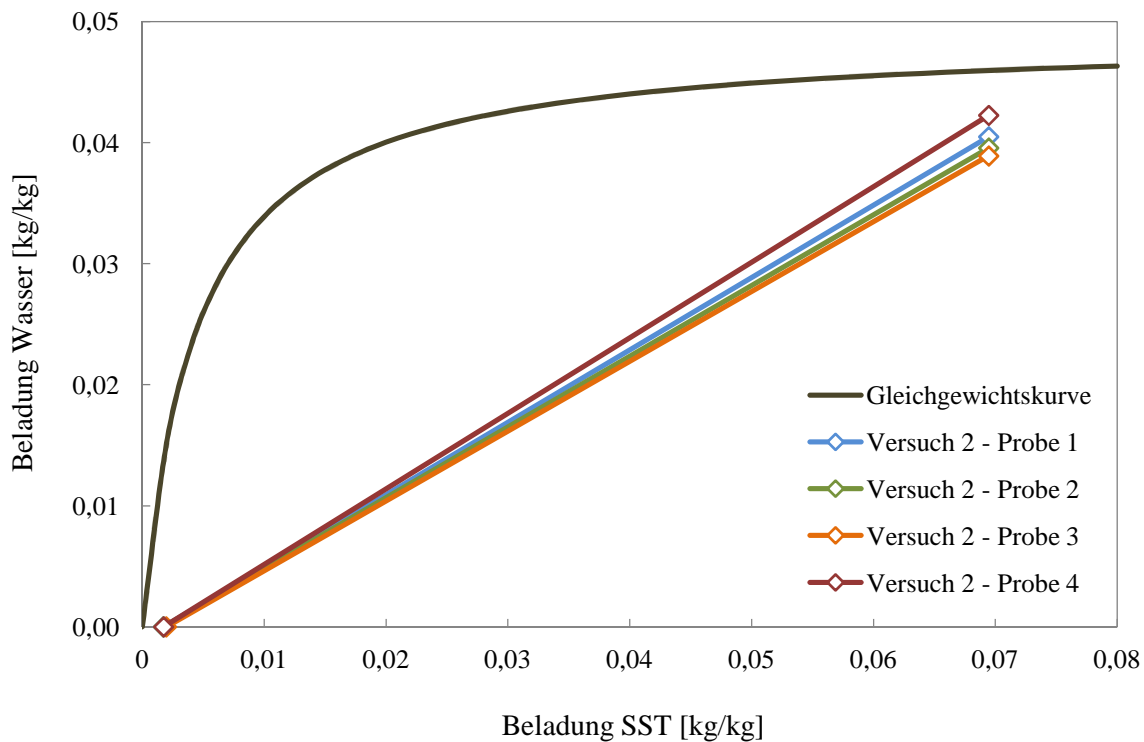


Abbildung 4-20 - Stoffaustausch Versuch 2 – Design 2 bei 650 [1/min] und einer Kolonnenbelastung von 12,5 [m³/m²h]

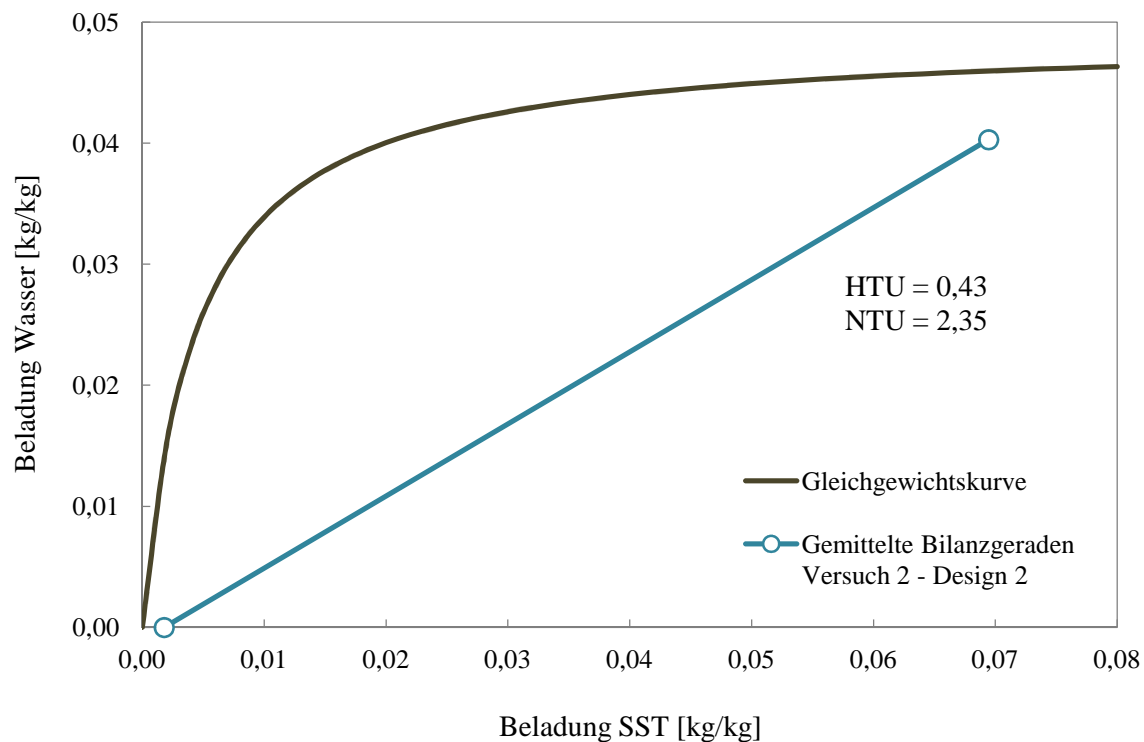
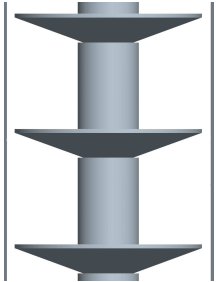


Abbildung 4-21 - Gemittelte Bilanzgerade Versuch 2 – Design 2 bei 650 [1/min] und einer Kolonnenbelastung von 12,5 [m³/m²h]

4.4.3.3 Stoffaustauschversuch 3 mit Rührerdesign 3

Der dritte Stoffaustauschversuch wurde mit Rührerdesign 3 durchgeführt, wobei bei diesem Design die Rotorscheiben um 20° nach oben angewinkelt waren. Die Ergebnisse der Betriebsgeraden der einzelnen Proben sind in Abbildung 4-22, die gemittelte Betriebsgerade ist in Abbildung 4-23, dargestellt. In Tabelle 4-4 sind die prozentuellen Fehler der Komponentenbilanz pro gezogener Probe aufgelistet, sowie der Trenngrad dieses Designs. Aufgrund zu starker Abweichungen der Werte von Versuchsprobe 4 wurde diese beim Mitteln der Fehleranalyse und der Auswertung des Trenngrades nicht miteinbezogen. Der Mittelwert der Anfangsbeladung an n-Butanol in der organischen Phase lag bei $0,0516 \text{ [kg}_{\text{n-But}}/\text{kg}_{\text{sst}}]$ und die Endbeladung bei $0,0049 \text{ [kg}_{\text{n-But}}/\text{kg}_{\text{sst}}]$. Es ergab sich somit ein Trenngrad von $90,5 \text{ [%]}$. Die Anzahl der theoretischen Stufen betrug $\text{NTU} = 1,09$ und die Höhe jeder Stufe lag bei $\text{HTU} = 0,92 \text{ [m]}$.

Tabelle 4-4 - Fehler der Komponentenbilanz n-Butanol und Trenngrad, Design 3

Rührerdesign 3	Versuch 1	Fehler [%]	Trenngrad [%]
	Probe 1	19,4	90,4
	Probe 2	21,1	90,9
	Probe 3	23,4	90,2
	<i>Probe 4</i>	<i>30,6</i>	<i>90,1</i>
	Mittelwert	21,3	90,5

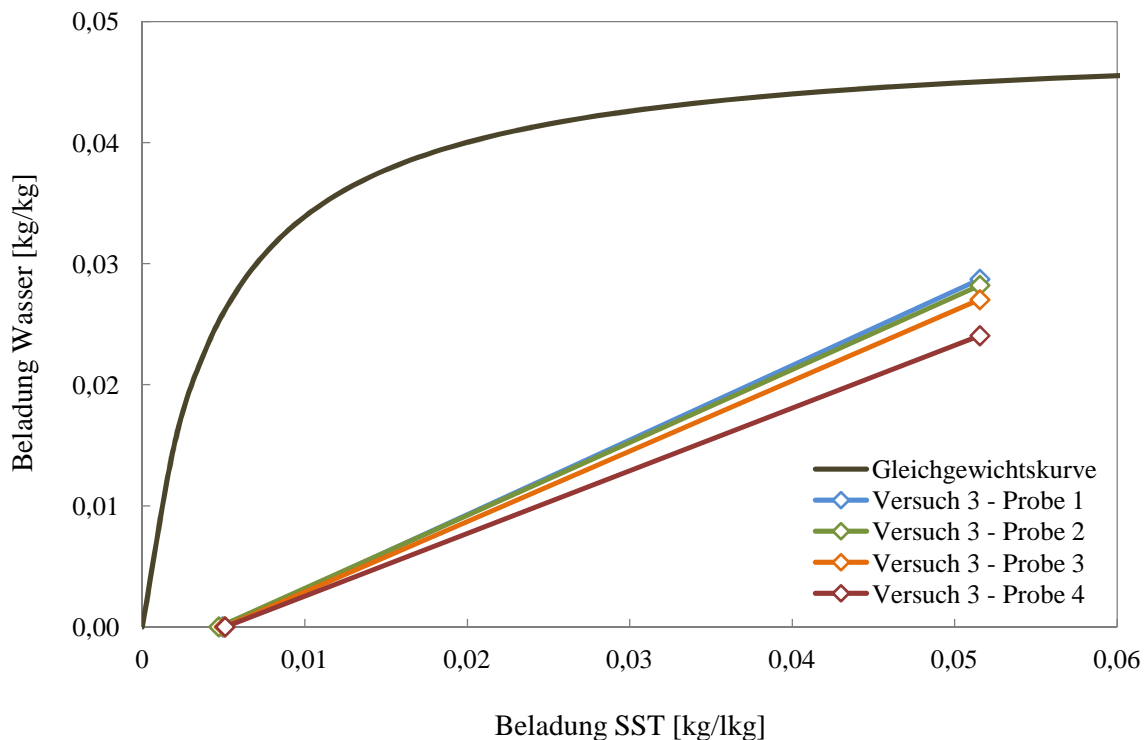


Abbildung 4-22 - Stoffaustausch Versuch 3 – Design 3 bei 650 [1/min] und einer Kolonnenbelastung von 12,5 [m³/m²h]

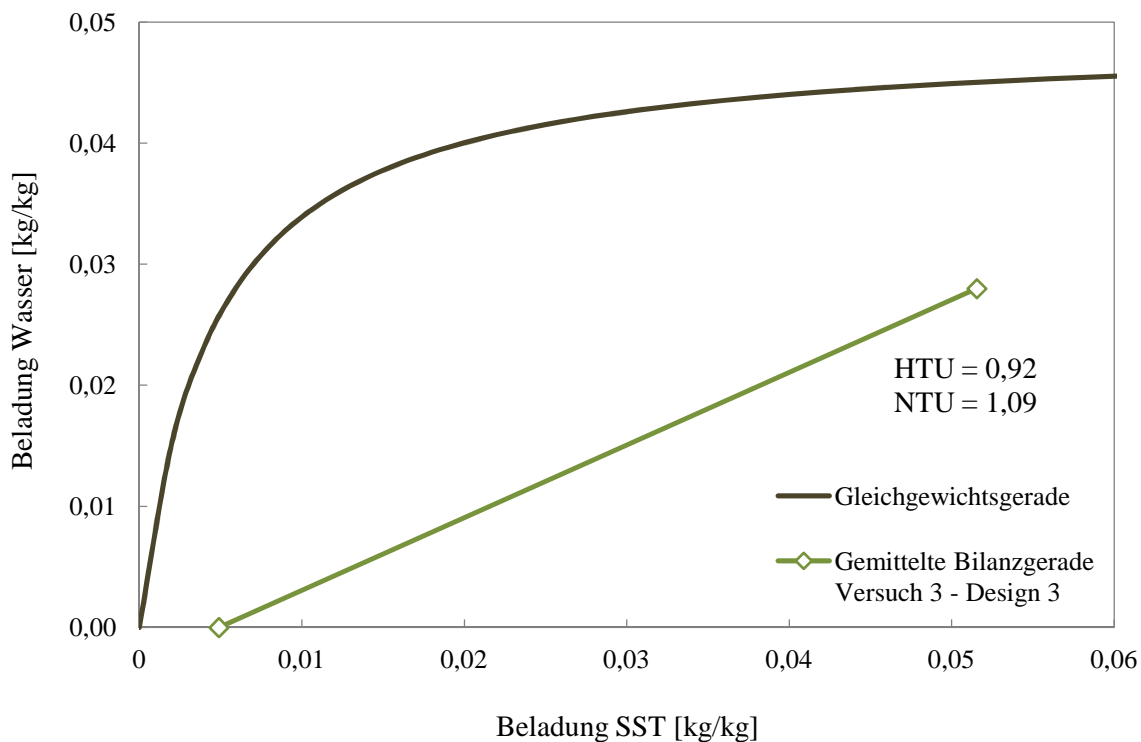
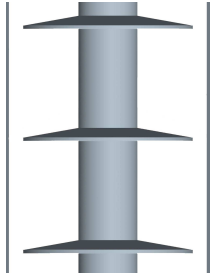


Abbildung 4-23 - Gemittelte Bilanzgerade Versuch 3 – Design 3 bei 650 [1/min] und einer Kolonnenbelastung von 12,5 [m³/m²h]

4.4.3.4 Stoffaustauschversuch 4 mit Rührerdesign 4

Rührerdesign 4 wurde insofern modifiziert, als dass die Rotorscheiben um 10° nach unten angewinkelt wurden. Die Fehleranalyse und der Trenngrad der Proben sind in Tabelle 4-5 aufgelistet. Aufgrund der zu hohen Abweichung des Ergebnisses bei Versuchsprobe 3, wurde dieser bei der Auswertung der Mittelwerte nicht mit einbezogen. Ein verunreinigtes Probenglas könnte der Grund hierfür gewesen sein. Die Ergebnisse der einzelnen Proben dieses Versuches sind in Abbildung 4-24 als Betriebsgeraden dargestellt, die gemittelte Betriebsgerade wird in Abbildung 4-25 veranschaulicht. Der Mittelwert der Anfangsbeladung an n-Butanol in der organischen Phase lag bei $0,0497 \text{ [kg}_{\text{n-But}}/\text{kg}_{\text{sst}}]$ und die Endbeladung bei $0,000478 \text{ [kg}_{\text{n-But}}/\text{kg}_{\text{sst}}]$. Mit dieser Geometrie konnte ein Trenngrad von 99 [%] erreicht werden. Die Anzahl der theoretischen Stufen war $\text{NTU} = 1,26$ und die Höhe jeder Stufen ergab $\text{HTU} = 0,79 \text{ [m]}$.

Tabelle 4-5 - Fehler der Komponentenbilanz n-Butanol und Trenngrad, Design 4

Rührerdesign 4	Versuch 1	Fehler [%]	Trenngrad [%]
	Probe 1	25,3	99,0
	Probe 2	25,3	99,1
	<i>Probe 3</i>	<i>-0,18</i>	<i>94,0</i>
	Probe 4	16,9	99,0
	Mittelwert	22,5	99,0

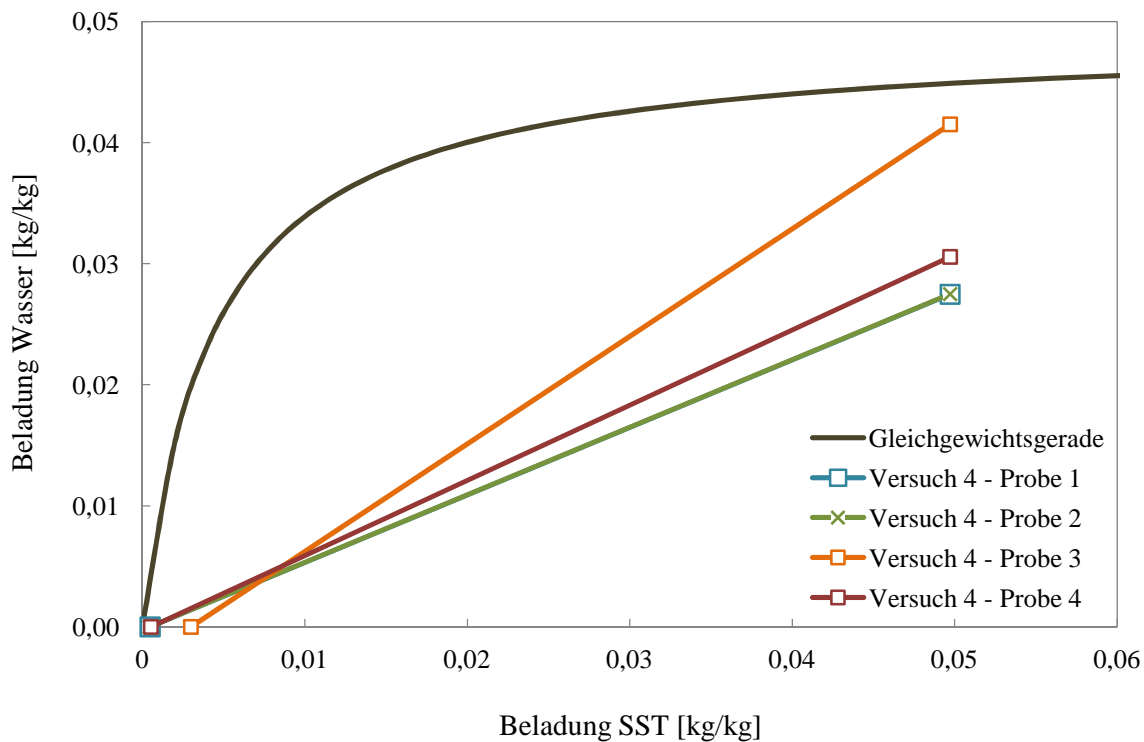


Abbildung 4-24 - Stoffaustausch Versuch 4 – Design 4 bei 650 [1/min] und einer Kolonnenbelastung von 12,5 [m³/m²h]

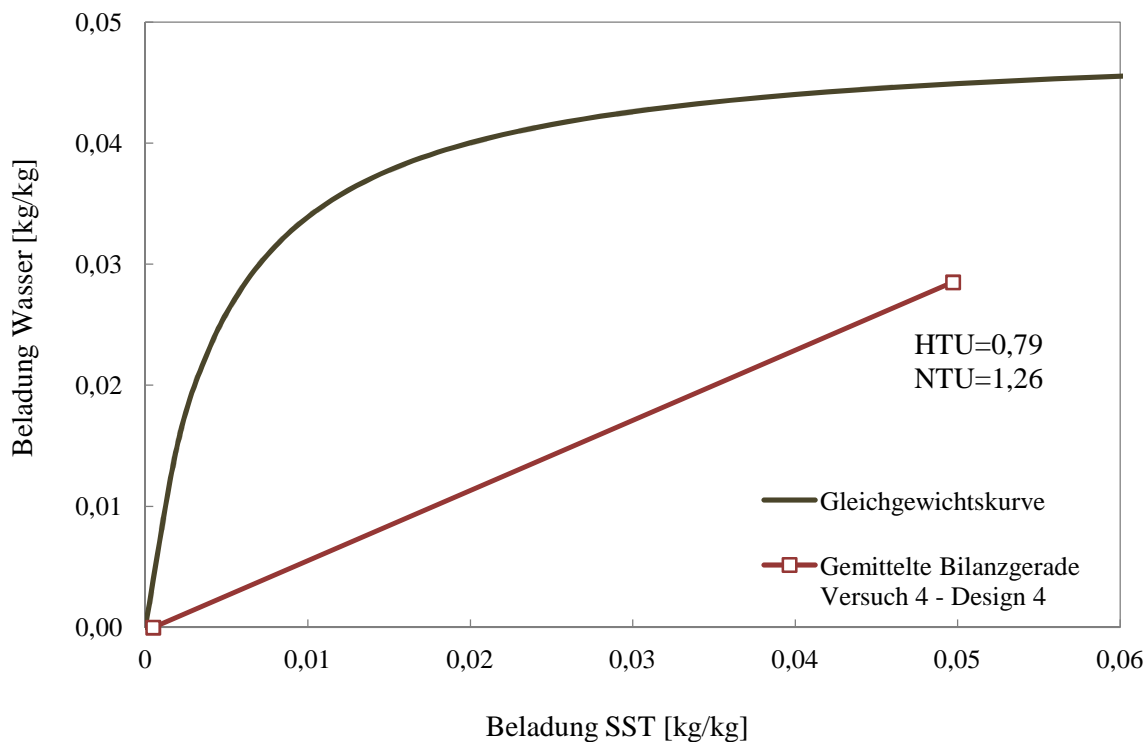


Abbildung 4-25 - Gemittelte Bilanzgerade Versuch 4 – Design 4 bei 650 [1/min] und einer Kolonnenbelastung von 12,5 [m³/m²h]

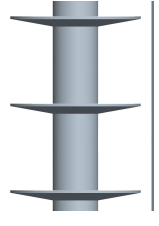
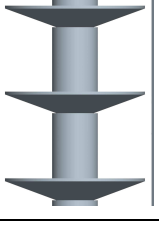
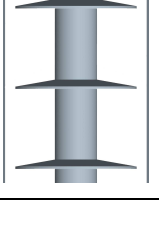
4.4.3.5 Gegenüberstellung der Stoffaustauschversuche

Anhand der oben beschriebenen Versuchsreihen soll ein Vergleich bezüglich der Trennleistung der Stoffaustauschversuche präsentiert werden. Hierfür sind in Abbildung 4-26 die Ergebnisse der gemittelten Betriebsgeraden der Stoffaustauschversuche mit den unterschiedlichen Rührerdesigns dargestellt. Die Steigungen der Geraden sind nahezu parallel, da bei jedem Versuch dieselben Volumenströme verwendet wurden. Das rechte Ende der Geraden zeigt die Zusammensetzung der Eingangsbeladung, sowie die Sumpfbeladung. Da für die Versuche aufgrund der begrenzten Vorlagebehälter jeweils ein neuer Feed zusammengestellt werden musste, gibt es Abweichungen im Bezug auf die Eingangsbeladung an n-Butanol im Kerosin. Um einen Vergleich der Ergebnisse der unterschiedlichen Geometrien mit dem HTU/NTU-Konzept zu ermöglichen, wurden die Eingangsbeladungen des Feed auf die geringste Massenbeladung normiert. Das Ergebnis der Trennleistung wird durch die Normierung nicht beeinflusst, jedoch korrigiert sich der Wert der theoretischen Stufen nach unten, da die Betriebsgeraden verkürzt werden. Durch die Position der Betriebsgeraden im Beladungsdiagramm kann der Trenngrad der unterschiedlichen Geometrien abgelesen werden. In Abbildung 4-26 liegt die Betriebsgerade des Design 3 am weitesten von der Gleichgewichtskurve entfernt. Somit wurde veranschaulicht, dass mit diesem Design eine schlechtere Abtrennung der Übergangskomponente möglich war, als im Vergleich mit den Designs 2 und 4.

Eine Gegenüberstellung der Trennleistung, sowie der HTU/NTU-Werte sind in Tabelle 4-6 aufgelistet. Die höchste Trennleistung konnte mit Rührerdesign 4 erreicht werden. Hier lag der Trenngrad bei 99 [%] was gleichbedeutend mit einer fast vollständigen Extraktion des n-Butanols ist. Für Design 2 ergab sich ein niedrigerer Trenngrad von 97,4 [%], Design 3 erreichte 90,5 [%].

Während der Versuche wurde der Hold-Up der verschiedenen Designs aufgezeichnet. Die Ergebnisse sind ebenso in Tabelle 4-6 aufgelistet und zeigen, dass der Hold-Up bei Rührerdesign 4, trotz besserer Trennperformance dieses Designs, unerwarteter Weise geringer war, als bei Design 2. Als Grund hierfür kann die unterschiedliche Eingangsbeladung an n-Butanol gesehen werden. Je höher die Beladung, desto geringer wird die Grenzflächenspannung. Dadurch werden kleinere Tropfen in der Kolonne gebildet, wodurch es einen Anstieg des Hold-Up gibt.

Tabelle 4-6 – Vergleich der Trennleistung und HTU/NTU – Werte zwischen den Rührerdesigns

Rührerdesigns	Trennleistung	tatsächliche Eingangsbelastung		normierte Eingangsbelastung		Hold-Up	
		HTU [m]	NTU	HTU [m]	NTU		
	Design 2	97,4 %	0,43	2,35	0,83	1,2	10,3 %
	Design 3	90,5 %	0,92	1,09	1,03	0,97	5,7 %
	Design 4	99 %	0,79	1,26	0,79	1,26	7,1 %

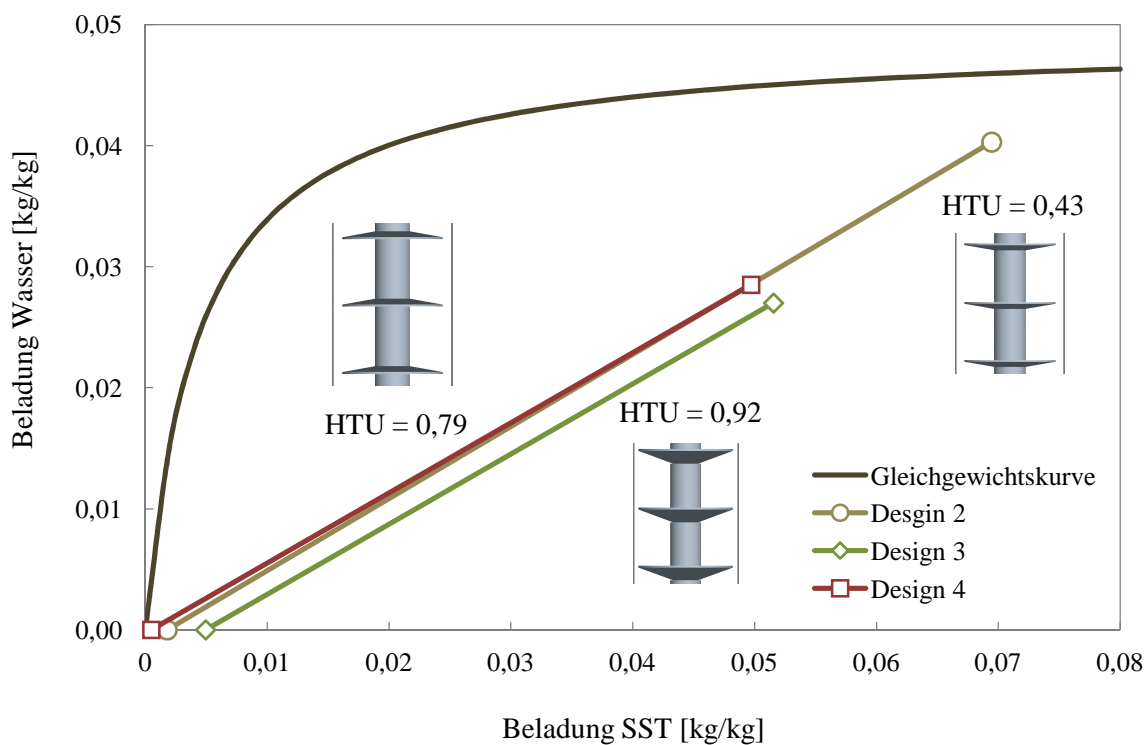


Abbildung 4-26 –Gegenüberstellung der Stoffaustauschergebnisse der Designs 2, 3 und 4

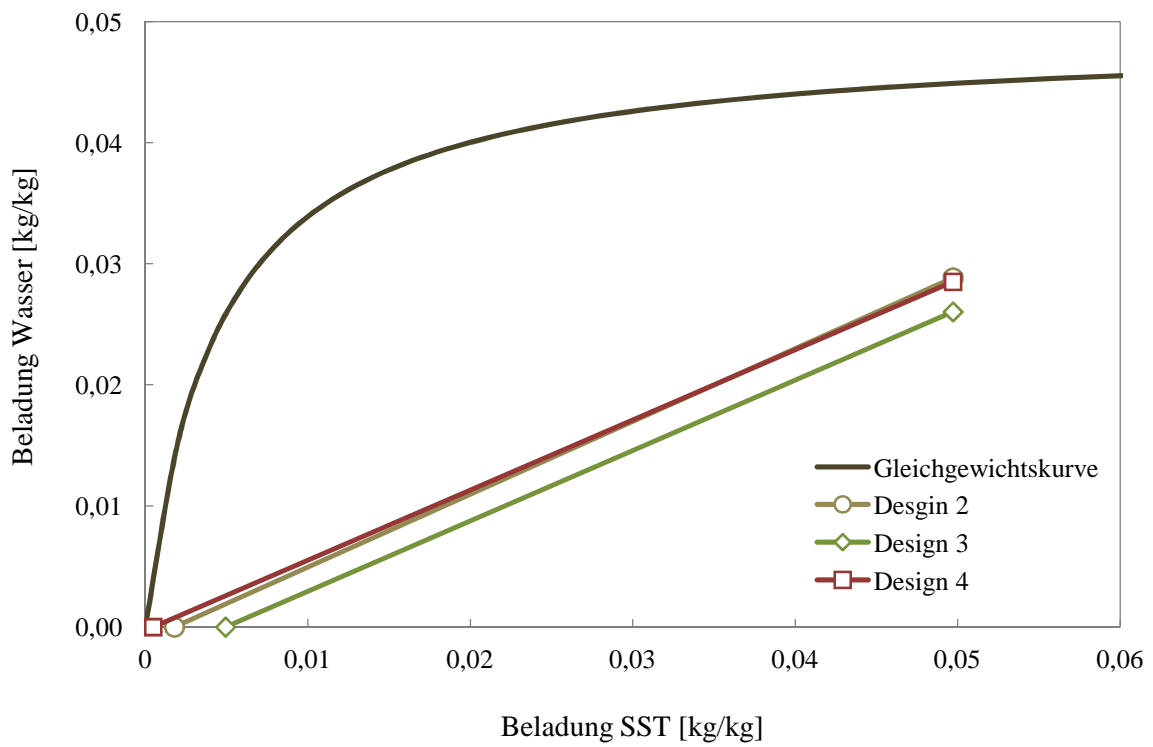


Abbildung 4-27 – Beladungsdiagramm: Gegenüberstellung der Stoffaustauschergebnisse mit normierter Eingangsbeladung

4.5 Photographische Auswertung

Um die Entwicklung der Strömung bzw. die Ausbildung und Verteilung der dispersen Phase in der Kolonne zu dokumentieren, wurden photographische Aufzeichnungen verschiedener Rührerdesigns durchgeführt. Im Vordergrund soll der Vergleich zwischen den Rührerdesigns, welche für die Stoffaustauschversuche verwendet wurden, stehen. Durch die Auswertung der Tropfenbildung und deren Verteilung im Apparat, können Rückschlüsse auf die Ergebnisse der Stoffaustauschversuche getroffen werden. Ein weiterer Punkt dieses Kapitels ist der Vergleich zwischen TCDC100 und den modifizierten TCDC30⁴. Hierfür soll eine kurze Erklärung zur Tropfenausbildung- und Verteilung im TCDC100 gegeben werden.

In Abbildung 4-28 ist der Ausschnitt eines Compartments des TCDC100 bei 300 [1/min] dargestellt. Unter den Rotorscheiben bilden sich auf Grund des erhöhten Durchmessers der Welle dynamische Settlerzonen, bestehend aus einer rekoaleszierten dispersen Phase, aus. Im dynamischen Bereich wird der gesamte Tropfenschwarm rehomogenisiert und an den Rotorkanten neu dispergiert. In der Mixer-Zone vermischen sich die neugebildeten Tropfen in den turbulenten Toruswirbeln und gelangen anschließend wieder in die dynamische Settler-Zone. Durch diesen Vorgang kann ab einer kritischen Drehzahl von ~200 [1/min], was einer Umfangsgeschwindigkeit von 0,9 [m/s] an den Rotorspitzen entspricht, das Mixer-Settler-Prinzip in jedem Compartment erfüllt werden.



Abbildung 4-28 – TCDC bei 300 [1/min]; [1]

⁴ 30 bezeichnet den Durchmesser der Kolonnenwand in [mm]

4.5.1 Vergleich der Rührerdesigns 2, 3 und 4

Die Kolonnenbelastung für den Vergleich der Designs lag bei 12,5 [m³/m²h] und die Drehzahl wurde mit 650 [1/min] festgelegt. Es fand kein Stoffaustausch statt, es wurde das System ShellSol-T - Wasser verwendet. In Abbildung 4-29 sind das Tropfenbild, sowie die Verteilung der dispersen Phase in mehreren Compartments der Rührerdesign 2, 3 und 4 dargestellt. Abbildung 4-30 veranschaulicht je ein Compartment der soeben erwähnten Designs.

Das regelmäßigste Strömungsbild konnte mit Design 1 erreicht werden. Die organische Phase wurde in jedem Compartment gleichmäßig dispergiert und verteilte sich in der Kolonne dementsprechend regelmäßig. Das Mixer-Settler-Prinzip konnte annäherungsweise umgesetzt werden. Unter den Rotorscheiben war ein Ansammeln bzw. Anstauen der Tropfen zu beobachten. Im Gegensatz zur dynamischen Settler-Zone beim TCDC100, koaleszierten die Tropfen in diesen Bereichen jedoch nicht, sondern lagen als dichter Tropfenschwarm vor. Dieser umgab die Welle der gesamten Compartmenthöhe. Gegensätzlich wird beim TCDC100 nur ein Teil der Welle belegt. Die Ausbildung der Settler-Zone beim modifizierten TCDC im Scale-Down konnte bereits bei ~550 [1/min], was einer Umfangsgeschwindigkeit von 0,71 [m/s] entspricht, beobachtet werden. Dies bedeutet, dass im Scale-Down geringere Umfangsgeschwindigkeiten zur Ausbildung des Mixer-Settler-Prinzips notwendig sind.

Im Vergleich zu Design 1 waren bei Rührerdesign 4 koaleszierte Zonen unter den Rührerscheiben zu erkennen und nicht ein dichter Tropfenschwarm. Dies könnte eine Erklärung dafür sein, dass die beste Stoffaustauschperformance mit Design 4 erzielt wurde. Es kann die Annahme getroffen werden, dass das Mixer-Settler Prinzip, aufgrund der koaleszierten Zonen unter den Rotorscheiben bei diesem Design am besten umgesetzt werden konnte. In Abbildung 4-30 (c) sind im Compartment des Design 4 Kleinsttropfen zu erkennen. Die Ausbildung von Kleinsttropfen widerspricht jedoch dem Mixer-Settler-Prinzip, da durch das Koaleszieren in der dynamischen Zone und durch die Neubildung der Tropfen, eine enge Tropfengrößenverteilung stattfinden sollte. Vermutlich befanden sich während der photographischen Dokumentation noch Reste von Waschacetone oder n-Butanol in der Anlage, wodurch die Grenzflächenspannung des ShellSolT reduziert worden sein könnte. Dies kann zur Förderung der Ausbildung von sehr kleinen Tropfen führen.

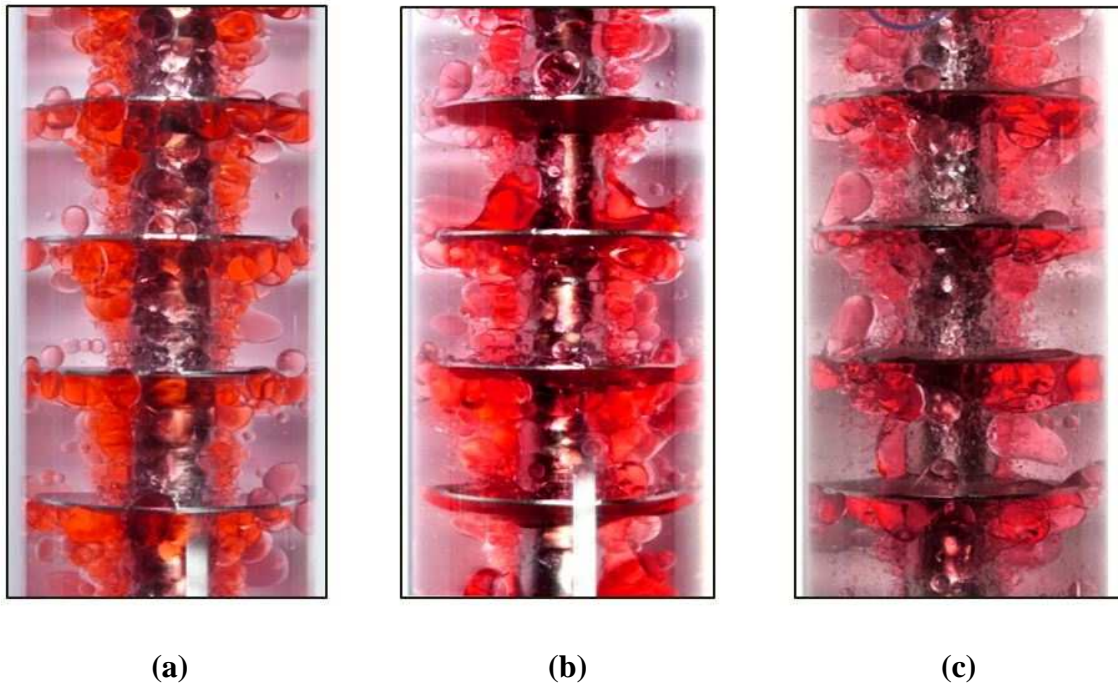


Abbildung 4-29 – Vergleich ; (a) Design 2; (b) Design 3; (c) Design 4; Kolonnenbelastung $12,5 \text{ [m}^3/\text{m}^2\text{h]}$ mit Phasenverhältnis 1 bei 650 [1/min]

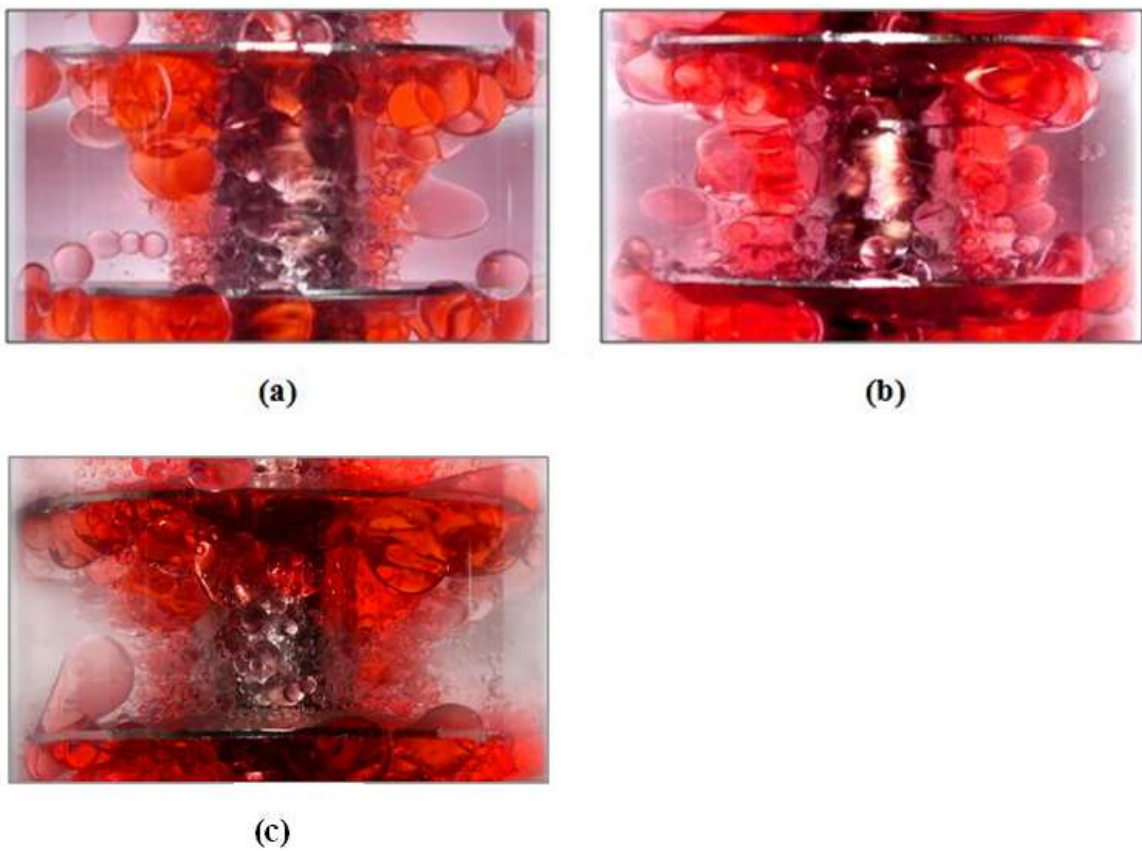


Abbildung 4-30 – Vergleich einzelne Compartments; (a) Design 2; (b) Design 3; (c) Design 4; Kolonnenbelastung $12,5 \text{ [m}^3/\text{m}^2\text{h]}$ mit Phasenverhältnis $\varphi=1$ bei 650 [1/min]

Bei Rührerdesign 3 stellte das Dispergieren allgemein ein großes Problem dar. In der gesamten Kolonne konnte kein regelmäßiges Strömungsbild erzeugt werden. Weiters wurden teilweise Rotorscheiben an deren Oberseite benetzt, wodurch sich stark koaleszierte Zonen in diesen Bereichen ausbildeten. Teilvolumina der dispersen Phase konnten von dort nicht mehr entweichen und wurden demzufolge nicht weiter dispergiert. Dadurch entstanden Totzonen im Apparat, welche die Stoffaustauschperformance stark beeinflussten. Die Größe der Phasengrenzfläche reduzierte sich ebenso durch schlechtes Dispergieren und der Bildung stark ausgeprägter Koaleszenzonen. Ein weiterer Grund, warum mit diesem Design die Trennleistung der Anlage am niedrigsten war. In Abbildung 4-31 ist dieser Effekt dargestellt.

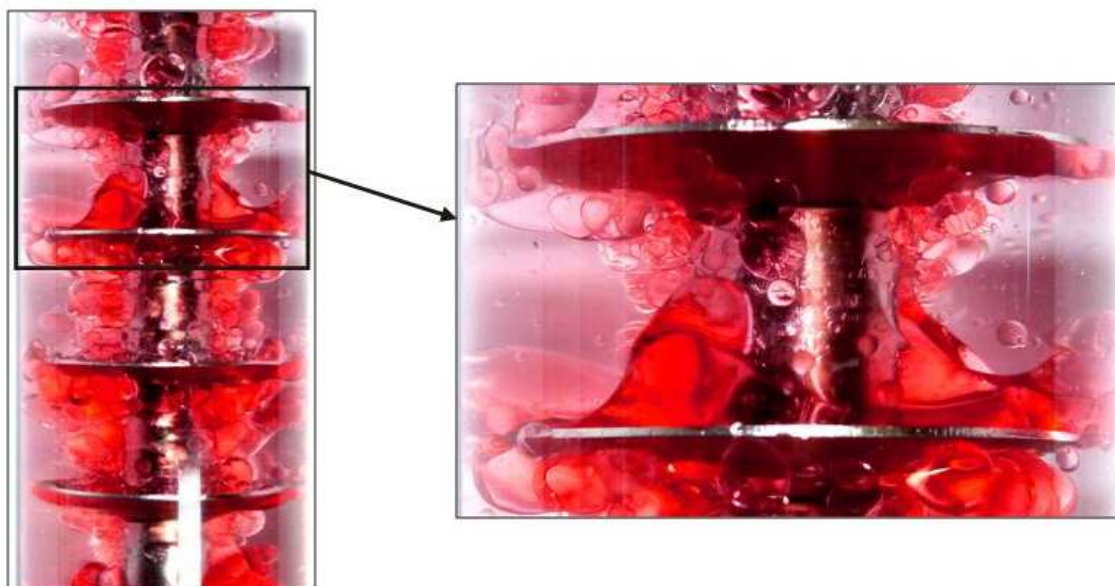


Abbildung 4-31 – Ausschnitt eines Compartments – Rührerdesign 3

Wie bereits erwähnt, findet die optimalste Wirbel-Flächenausnutzung und Wirbelzirkulation bei TCDCs im Bereich von $D_w/D_K \sim 0,5$, statt. Während des Betriebes der Designs mit dem Verhältnis $D_w/D_K = 0,27$ konnte festgestellt werden, dass die disperse Phase den niedrigeren Wellendurchmesser korrigierte, sodass die ideale Wirbel-Flächenausnutzung und Wirbelzirkulation im Compartment stattfinden konnte. Die Wellendicke wurde korrigiert, indem die disperse Phase die Welle vollständig umhüllte. Mit steigender Kolonnenbelastung wurde dieses Verhalten stärker ausgeprägt, sodass die Welle auf Grund des nicht reduzierbaren Tropfendurchmessers der dispersen Phase, überkorrigiert wurde. In Abbildung 4-32 ist die Korrektur des Wellendurchmessers

schematisch (links) und bildlich (rechts) veranschaulicht. Der Effekt des Überkorrigierens des Wellendurchmessers ist in Abbildung 4-33 dargestellt.

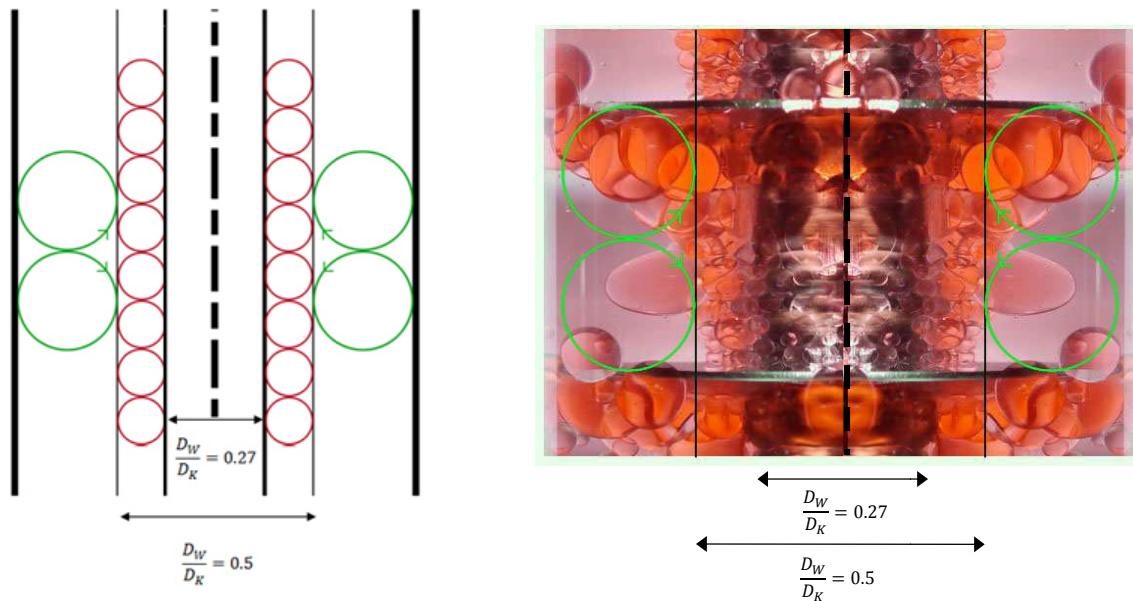


Abbildung 4-32 – Korrektur des Wellendurchmessers; links: schematische Darstellung; rechts: photographische Darstellung

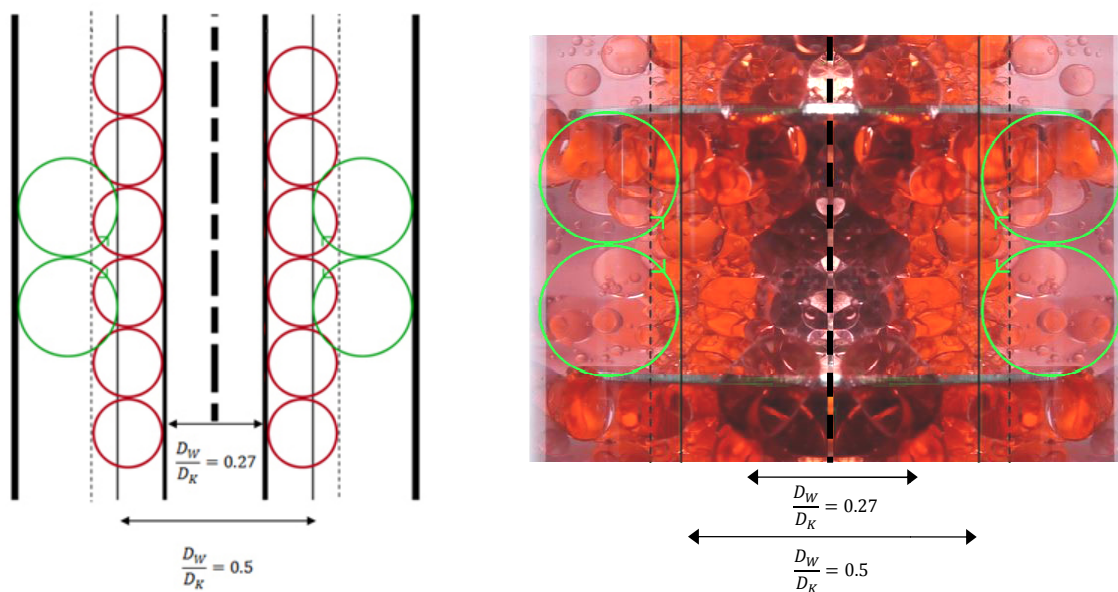


Abbildung 4-33 – Überkorrektur des Wellendurchmessers; links: schematische Darstellung; rechts: photographische Darstellung

Die Änderung der Strömung in der Kolonne beim Variieren der Volumenströme sowie der Drehzahlen, werden in den nächsten Kapiteln bildlich dargestellt.

4.5.2 Strömungsverhalten bei Rührerdesign 2

4.5.2.1 Vergleich bei steigendem Volumenstrom

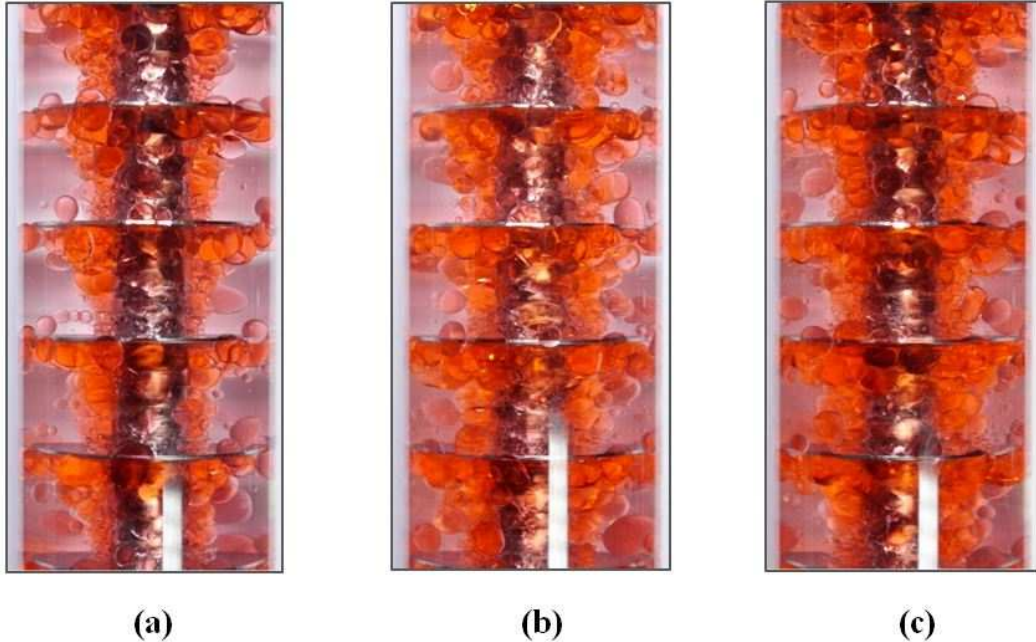


Abbildung 4-34 – Ausbildung der dispersen Phase bei 650 [1/min]; (a) Volumenstrom 4 [l/h]; (b) Volumenstrom 5 [l/h]; Volumenstrom 6 [l/h]

4.5.2.2 Vergleich bei steigender Drehzahl



Abbildung 4-35 – Ausbildung der dispersen Phase bei 6[l/h] organischer und kontinuierlicher Phase und links: 650 [1/min]; rechts: 700 [1/min]

4.5.3 Strömungsverhalten bei Rührerdesign 3

4.5.3.1 Vergleich bei steigendem Volumenstrom



Abbildung 4-36 - Ausbildung der dispersen Phase bei 800 [1/min]; links: Volumenstrom 4 [l/h]; rechts: Volumenstrom 6 [l/h]

4.5.3.2 Vergleich bei steigender Drehzahl



Abbildung 4-37 - Ausbildung der dispersen Phase bei 4[l/h] organischer und kontinuierlicher Phase und links: 650 [1/min]; rechts: 700 [1/min]

4.5.4 Strömungsverhalten bei Rührerdesign 4

4.5.4.1 Vergleich bei steigendem Volumenstrom



Abbildung 4-38 - Ausbildung der dispersen Phase bei 800 [1/min]; links: Volumenstrom 4 [l/h]; rechts: Volumenstrom 5 [l/h]

4.5.4.2 Vergleich bei steigender Drehzahl



Abbildung 4-39 - Ausbildung der dispersen Phase bei 4 [l/h] organischer und kontinuierlicher Phase und links: 650 [1/min]; rechts: 700 [1/min]

4.5.5 Strömungsverhalten bei Rührerdesign 6

In Abbildung 4-40 ist die Ausbildung der dispersen Phase mit steigendem Volumenstrom bis hin zum Flutpunkt der Kolonne dargestellt. Wie bereits in Kapitel 4.3.5 erläutert, flutete die Kolonne mit diesem Design bei sehr niedriger Kolonnenbelastung. Während des Betriebes sammelte sich die disperse Phase als koaleszierter Bereich unter den Rotorscheiben an und füllte die Compartments zur Hälfte auf. Mit dem Erhöhen des Volumenstromes füllten sich einzelne Compartments vollständig auf und entleerten sich danach schlagartig, wodurch das nächst liegende Compartment aufgefüllt wurde. Die disperse Phase „durchwanderte“ somit als koaleszierte Phase die Kolonne. Das Dispergieren bei höherem Volumenstrom war aufgrund nicht höher einstellbarer Drehzahlen, nicht möglich.

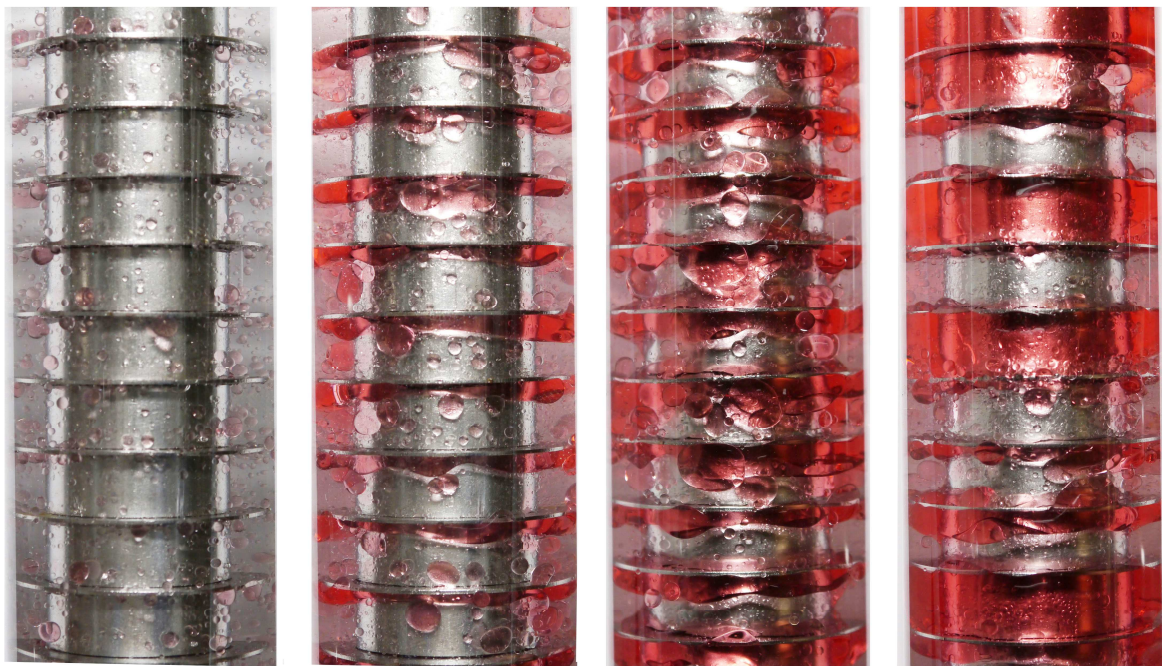
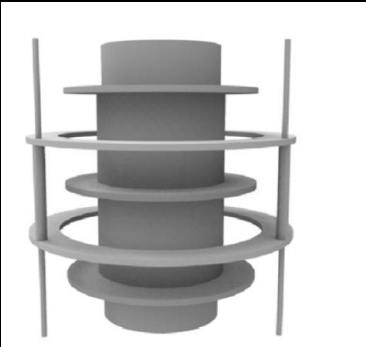


Abbildung 4-40 – Erhöhung der Volumenströme bis zum Flutpunkt bei 650 [1/min]

5 CFD Simulation

Ziel dieses Kapitels war es eine mehrphasige Strömungssimulation der im Institutslabor aufgebauten klassischen RDC-Kolonne zu modellieren und anschließend mit Hilfe von bereits experimentell ermittelten Daten zu validieren. Als Vergleich wurde der axiale Dispersionskoeffizient der kontinuierlichen Phase $D_{ax,c}$ aus den Versuchen von PRIELER [31] herangezogen. Bei der klassischen Geometrie entsteht zwischen Statorscheibe und Kolonnenwand ein Spalt, welcher bei der Simulation mit berücksichtigt werden muss. Durch variieren der Spaltgröße konnten die Ergebnisse des $D_{ax,c}$ aus der Simulation, an die Ergebnisse der Versuche angepasst werden. Grund hierfür ist, dass der Spalt eine Möglichkeit zur Abkürzung der Partikel beim Durchwandern der Kolonne darstellt. Der Weg jener Partikel, welche zufällig durch den Spalt schlüpfen wird deutlich kürzer, da sie nicht von jedem Wirbel in den Compartments mitgerissen werden. Abkürzungen und Totzonen führen zur Erhöhung der axialen Dispersion. Daher wurde zuerst eine einphasige Strömungssimulation der Geometrie mit 1 [mm] Spalt durchgeführt. Da die Ergebnisse des axialen Dispersionskoeffizienten der Simulation bei 1 [mm] Spalt nicht mit den Versuchsergebnissen übereinstimmten, wurde der Spalt auf 1,25 [mm] vergrößert und erneut einphasig simuliert. In Tabelle 5-1 sind die Abmessungen eines Compartments der klassischen Geometrie aufgelistet.

Tabelle 5-1 – Abmessung eines Compartments der simulierten klassischen Geometrie; Bild []

	Klassische Geometrie	[mm]
	Durchmesser Rotor D_R	60
	Durchmesser Welle D_W	38
	Compartmenthöhe	34
	Innendurchmesser Statorscheibe	70

In folgenden Kapiteln werden die Gitterstrukturen der Geometrie sowie die Solvereinstellungen, welche zur Simulation in ANSYS Fluent verwendet wurden, dargestellt. Die theoretischen Hintergründe sind aus dem Kapiteln 3 in dieser Arbeit zu entnehmen und werden hier nicht mehr erläutert.

5.1 Geometrie und Gitter

Die Geometrieezeugung sowie die Randflächenerzeugung erfolgten mit dem integrierten Design Modeler in ANSYS Fluent. Damit sich ein charakteristisches Strömungsbild in den Compartments entwickeln konnte, wurde eine Geometrie bestehend aus 16 Compartments simuliert. Die Compartments wurden am Einlauf und am Auslauf verlängert um ein Aufstauen der dispersen Phase in diesen Bereichen zu verhindern (siehe Abbildung 5-1). Zur Einsparung von Rechenkapazität und Rechenzeit, wurde das Simulationsgebiet der Extraktionskolonne auf eine 2D-axialsymmetrische-Geometrie reduziert. Mit Hilfe des ANSYS-Meshing Tools gelang die Erzeugung des Rechennetzes. In Gebieten mit großen Geschwindigkeitsgradienten wurde das Rechennetz durch Erzeugen von Prismenschichten höher aufgelöst. Zu diesem Zweck musste die Höhe der ersten Schicht, sowie die Anzahl der Schichten und deren Wachstumsrate definiert werden. Die Werte hierfür finden sich in Tabelle 5-2 und Tabelle 5-3. Des Weiteren wurde zur Optimierung des Rechennetzes die Kolonnenwand sowie die Stirnseite der Rotorscheiben, in Abschnitte unterteilt. In Abbildung 5-1 sind das Simulationsgebiet der Kolonne sowie der Ausschnitt eines Compartments mit dem verwendeten Rechengitter dargestellt.

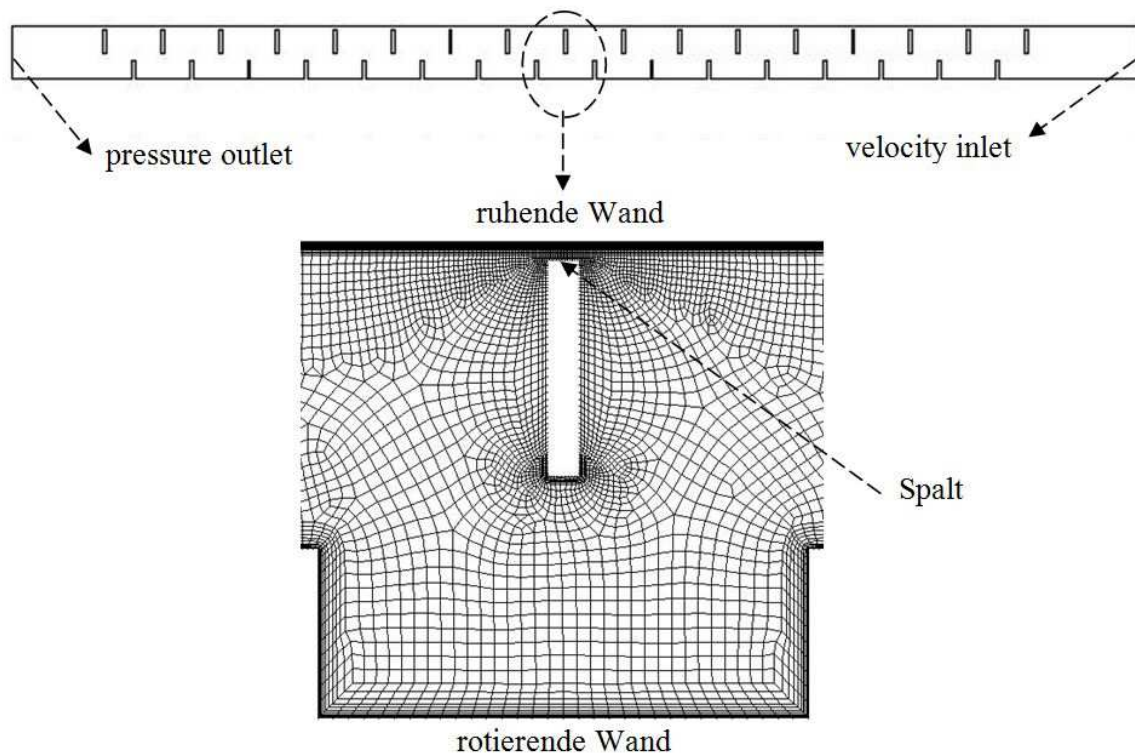


Abbildung 5-1 – Simulierte Geometrie und Ausschnitt eines Compartments mit Gitterstruktur

Das Rechengitter im Spalt zwischen Kolonnenwand und Statorscheiben musste ebenso mittels Prismenschichten so fein als möglichst aufgelöst werden, da in diesem Bereich die höchsten Geschwindigkeitsgradienten vorhanden waren. In Abbildung 5-2 ist die Netzauflösung zwischen Kolonnenwand und Statorscheiben bei 1 [mm] Spalt und bei 1,25 [mm] Spalt dargestellt. Zwischen dem Spalt befinden sich fast ausschließlich rechteckige Rechenzellen. Nur im Bereich des Rotors sind vereinzelt schiefe Rechenzellen zu erkennen.

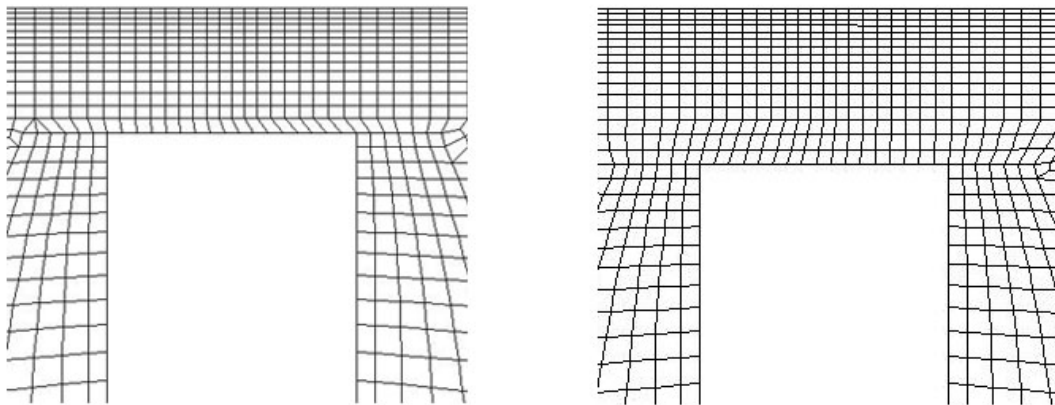


Abbildung 5-2 – links: Rechengitter im 1 [mm] Spalt; rechts: Rechengitter im 1,25 [mm] Spalt

Tabelle 5-2 – 1 [mm] Spalt

Prismenschicht	Rotor	Stator	Kolonnenwand
Höhe der ersten Schicht	0,04 [mm]	0,15 [mm]	0,04 [mm]
Max. Anzahl der Schichten	11	6	13
Wachstumsrate	1,3	1,4	1,085

Tabelle 5-3 – 1,25 [mm] Spalt

Prismenschicht	Rotor	Stator	Kolonnenwand
Dicke der ersten Schicht	0,04 [mm]	0,15 [mm]	0,04 [mm]
Max. Anzahl der Schichten	11	6	13
Wachstumsrate	1,3	1,4	1,085

5.1.1 Netzqualität

Da die Netzqualität direkten Einfluss auf die Konvergenz und Qualität der Lösung hat, wurde die Schiefe der Netzelemente untersucht und eine Netzqualitätsanalyse durchgeführt. In Tabelle 5-4 sind die Ergebnisse dazu aufgelistet. Da die Werte der maximalen Schiefen unter dem Wert von 0,8 lagen, konnten die erzeugten Netze verwendet werden.

Tabelle 5-4 – Qualität der verwendeten Netze

	1 [mm] Spalt		1,25 [mm] Spalt	
	Durchschnitt	Maximum	Durchschnitt	Maximum
Schiefe	0,122	0,689	0,130	0,775
Seitenverhältnis	3,193	25,425	3,160	25,425
Knoten	97674		97374	
Elemente	94954		97374	

5.2 Simulationseinstellungen und Modelle

Als Diskretisierungsalgorithmus für den Druck bei der einphasigen Simulation wurde PRESTO! verwendet. Für alle übrigen Transportgleichungen wurde QUICK, eine quadratische Approximation 3ter Ordnung benützt. Diese Approximation eignet sich sehr gut bei der Berechnung von rotierenden und stark verdrallten Strömungen. Die Simulation der Turbulenz erfolgte anhand des *Reynolds-Stress-Models* (RSM). Dass dieses Modell sehr gut zur Simulation turbulenter Strömungen in Extraktionskolonnen eingesetzt werden kann, zeigten bereits GURKER [25] und AKSAMIIJA [28].

Auf Grund der Erkenntnisse von GURKER [25] und HADERER [29] wurde die Mehrphasensimulation mit dem Euler/Euler-Verfahren berechnet. Da die Einstellungen für die Mehrphasenströmung etwas komplexer sind, wurde eine Tabelle mit allen in ANSYS Fluent ausgewählten Einstellungen erstellt:

Tabelle 5-5 – Verwendete Einstellungen für die Mehrphasensimulation der Extraktionskolonne

Problem Setup	
General	<ul style="list-style-type: none"> • Pressure-Based • Absolute-Velocity • Transient • Axisymmetric Swirl
Models	<ul style="list-style-type: none"> • Multiphase flow model: Eulerian, 2 – Phases, Implicit • Turbulence model: Reynolds-Stress Model, Enhanced Wall Treatment, Mixture
Material – Fluid (Phases)	<ul style="list-style-type: none"> • Water (liquid) – Primary Phase • Kersosin (liquid) – Secondary Phase
Phase Interaction – Drag Funktion	<ul style="list-style-type: none"> • Schiller-Neumann
Boundary Conditions	<ul style="list-style-type: none"> • Inlet type – velocity inlet • Outlet type – pressure outlet
Solution Methods	
Pressure-Velocity Coupling	Phase Coupled Simple
Gradient	Least Squares Cell Based
Momentum	First Order Upwind
Swirl Velocity	QUICK
Volume Fraction	First Order Upwind
Turbulent Kinetic Energy	QUICK
Turbulent Dissipation Rate	QUICK
Reynolds Stresses	QUICK
Transient Formulation	Bounded Second Order Implicit

5.2.1 Modellierung der axialen Dispersion

Um die axiale Dispersion experimentell ermitteln zu können, muss die Verweilzeitverteilung gemessen werden. Hierfür wird eine Tracer-Substanz am Kolonnenkopf injiziert, welche der Strömung der wässrigen Phase folgt, ohne diese zu beeinflussen. Um diesen Vorgang in ANSYS Fluent modellieren zu können, wird eine zweite Phase benötigt, welche als Ersatz zum Tracer dient. Als Lösung für dieses Problem findet sich das Euler-Lagrange-Modell, welches in ANSYS Fluent mit dem Discrete Phase Model (DPM) durchgeführt wird. Als zweite Phase dienen in diesem Fall, masselose Partikel. Die Turbulenz wird mit dem Stochastic Tracking Model (Random Walk Model) berücksichtigt.

Die Injektion der masselosen Partikel wurde anfangs als Punktinjektion definiert und in späterer Folge auf eine Gruppeninjektion umgestellt. Die Platzierung von Detektionsebenen erfolgte in einem definierten Abstand. Durch die Injektion und der anschließenden Detektion im definiertem Abstand konnten die Verweilzeitverteilungskurven und damit die axiale Dispersion ermittelt werden. In Abbildung 5-3 sind die Anordnungen der Injektions- und Detektionsebenen dargestellt. Des Weiteren ist der Verlauf der Partikel in der Kolonne veranschaulicht. Für die Erstellung dieser Abbildung wurden 8 Partikel injiziert und mittels „*Particle Track*“ dargestellt. Der Ausschnitt zweier Compartments zeigt die Wirbelausbildung in den Compartments und den Verlauf einzelner Partikel in diesen. In dieser Abbildung ist ebenso zu erkennen, dass durch den Spalt zwischen Kolonnenwand und Rotorscheiben, einzelne Partikel durchschlüpfen können. Für die Injektion der Partikel wurden die Einstellungen in Tabelle 5-6 verwendet.

Tabelle 5-6 – Einstellungen zur DPM - Iteration

Max. Number of Steps	10 ⁸
Anzahl der Partikel	25.000
Length Scale	0,0001 [m]
Time Scale Constant	0,3
Random Eddy Lifetime	aus

Mit einer bereits vorhandenen LabView Routine wurden die Verweilzeitverteilungen der DPM Iteration ausgewertet und der axiale Dispersionskoeffizient berechnet.

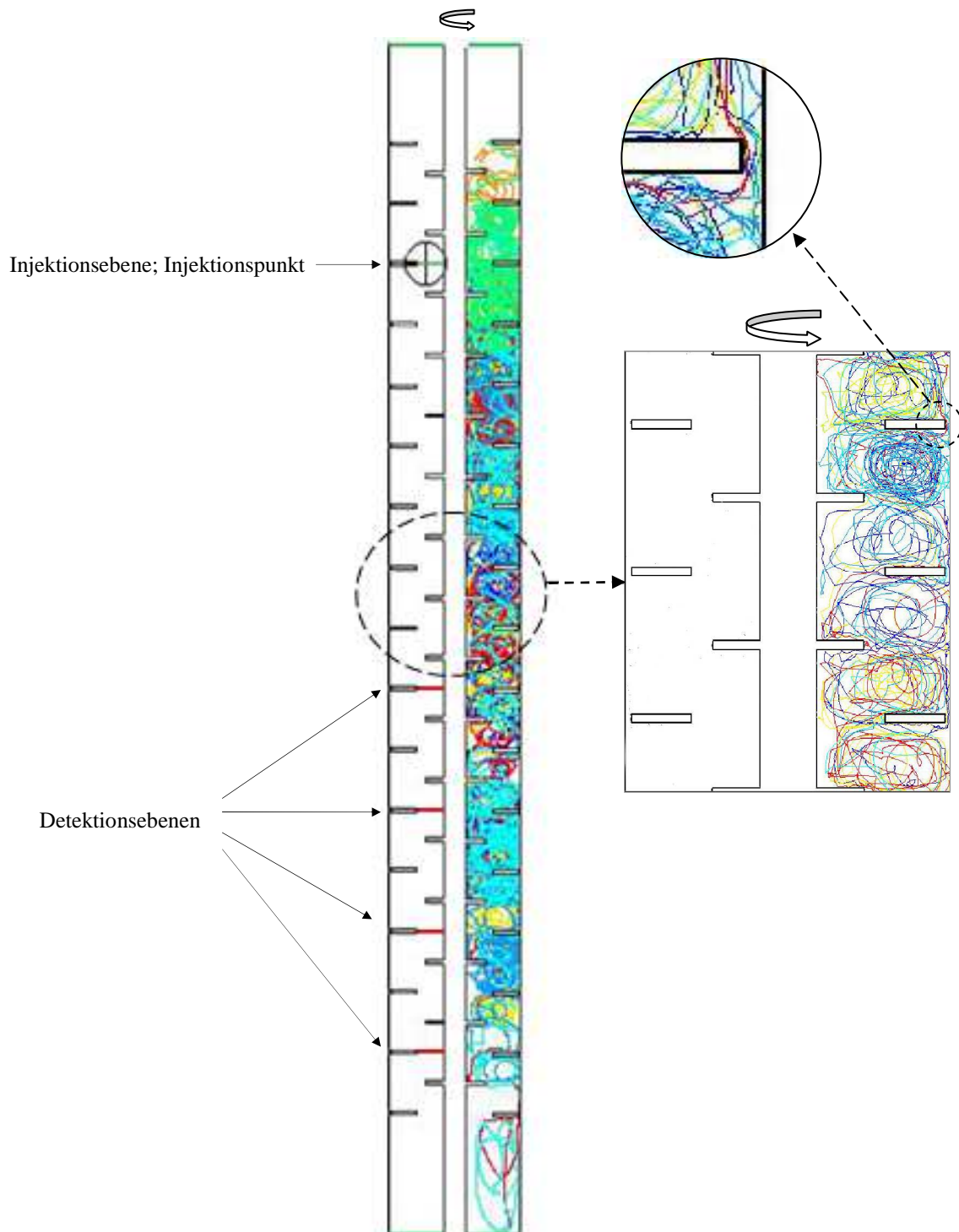


Abbildung 5-3 – Darstellung der Injektions- und Detektionsebenen im Modell, sowie der Verlauf von 8 Partikeln in der Kolonne (Partikel ID: unterschiedliche Färbung)

5.2.2 Konvergenzkriterien

Da bei numerischen Berechnungen der Transportgleichungen nie eine exakte Lösung geliefert werden kann, sondern die Lösung immer mit Fehlern behaftet ist, muss die Qualität der Lösung kontrolliert werden. Werden die Fehler minimal und ändert sich die Lösung der Simulation nicht mehr signifikant, so spricht man von Konvergenz. Grundsätzlich wird die Beurteilung der Konvergenz mit Hilfe von Residuen der Transportgleichung bewerkstelligt. Liegen jene Werte im Bereich von 10^{-3} für die einphasige Simulation und im Bereich von 10^{-2} für die mehrphasige Simulation und sind sie über mehrere 1000 Iterationsschritte nahezu konstant, kann von einer konvergierten Lösung ausgegangen werden.

Bei der mehrphasigen Simulation wurde zusätzlich zu den Residuen ein Variablenmonitor angelegt, welcher den absoluten Hold-Up in der Kolonne über die Iterationsschritte verfolgte. Nachdem der Hold-Up über längerem Zeitraum konstant verlief und sich nicht signifikant änderte, wurde die Lösung als konvergiert betrachtet.

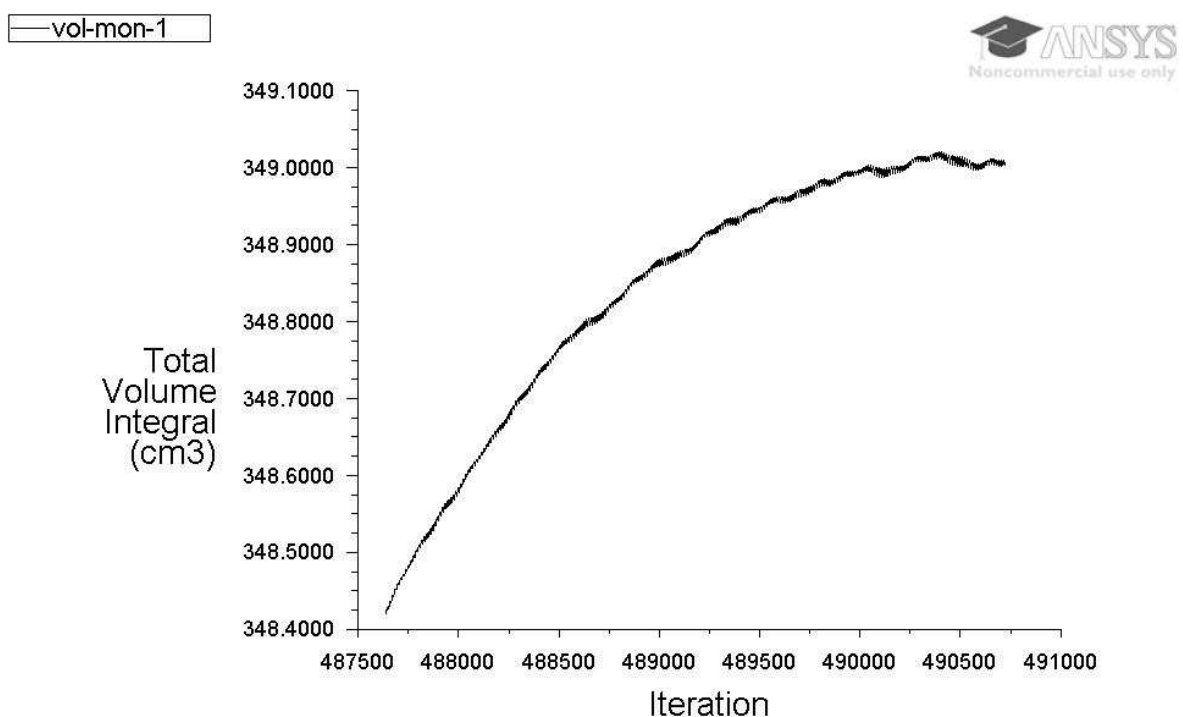


Abbildung 5-4 – ANSYS Fluent - Variablenmonitor

5.3 Ergebnisse

In folgenden Kapiteln werden die Ergebnisse der Simulationsversuche dargestellt.

5.3.1 Einphasige Simulation

Um die passende Spaltbreite zwischen Kolonnenwand und Statorscheiben bei der klassischen Geometrie zu ermitteln, wurden zuerst einphasige Simulationen mit Spaltbreiten von 1 [mm] durchgeführt. Aufgrund der einfacheren und vor allem schnelleren Durchführung, wurde zur Ermittlung der Spaltbreite auf eine mehrphasige Simulation verzichtet. Die Simulationen wurden für verschiedene Rührerdrehzahlen bei gleichbleibenden Volumenströmen von 88 [l/h] durchgeführt. Nach dem Erreichen der Konvergenz wurde via DPM - Iteration die Verweilzeit der Partikel in der Kolonne ermittelt und daraus der axiale Dispersionskoeffizient der kontinuierlichen Phase $D_{ax,c}$ berechnet. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5-5 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass bei 1 [mm] Spaltbreite die experimentell ermittelten Werte für den axialen Dispersionskoeffizienten nicht genau getroffen wurden. Aus diesem Grund wurde die Spaltbreite auf 1,25 [mm] erhöht und mit denselben Betriebsparametern neu simuliert. Durch die Vergrößerung des Spalts konnte der axiale Dispersionskoeffizient erhöht werden, und die Ergebnisse der Simulation stimmten nun mit den Versuchswerten überein. Die experimentell ermittelten Werte des axialen Dispersionskoeffizienten zeigen einen Anstieg bei größer werdender Drehzahl. Dieses Verhalten konnte auch mit Hilfe der einphasigen Simulation modelliert werden, jedoch weichen die Simulationsergebnisse mit steigender Drehzahl mehr von den experimentellen Daten ab.

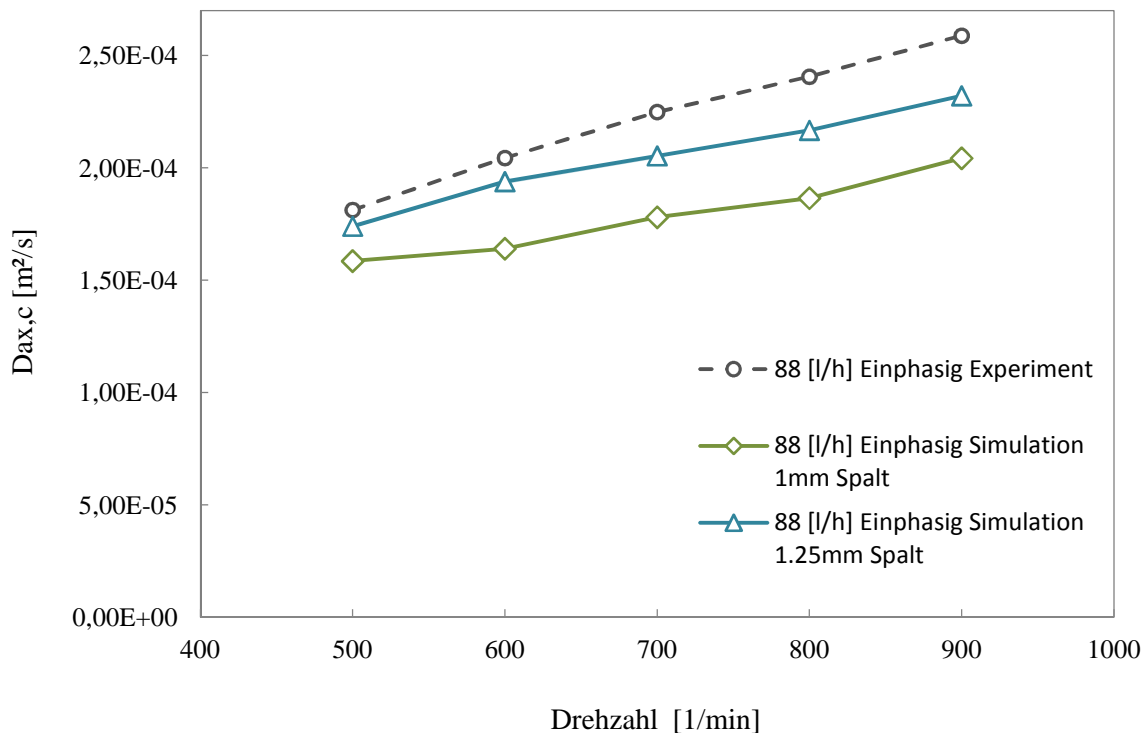


Abbildung 5-5 – Vergleich axiale Dispersion der kontinuierlichen Phase zwischen Experiment und Simulation mit unterschiedlicher Spaltbreite

5.3.2 Mehrphasige Simulation

Auf Grund der Ergebnisse der einphasigen Simulation wurde für die mehrphasige Strömungssimulation die Geometrie mit 1,25 [mm] Spalt verwendet, Gitter und Netzqualität waren ident. Die Strömungssimulation wurde bei gleichbleibender Drehzahl von 500 [1/min] und variablen Volumenströmen der organischen Phase, durchgeführt. Die Ergebnisse der experimentell ermittelten Daten, sowie die Ergebnisse der Simulationen sind in Abbildung 5-7 dargestellt.

Bei der Simulation der Mehrphasenströmungen wurde zur Vereinfachung eine monodisperse Tropfengrößenverteilung der dispersen Phase angenommen. Die Wahl der Tropfengröße der dispersen Phase, wirkt sich auf die Größe der axialen Dispersion der kontinuierlichen Phase aus. Mit kleiner werdendem Tropfendurchmesser steigt der axiale Dispersionskoeffizient. Für die Modellierung der Mehrphasenströmung wurden daher verschiedene Tropfengrößen bei gleich bleibenden Betriebsbedingungen simuliert und der axiale Dispersionskoeffizient der kontinuierlichen Phase ermittelt. Das Ergebnis hierzu ist in Abbildung 5-6 dargestellt. Ein deutlicher Sprung der axialen Dispersion wurde bei der

Änderung des Tropfendurchmessers von 1,5 [mm] auf 1,6 [mm] festgestellt. In Abbildung 5-7 ist ein Vergleich der axialen Dispersionskoeffizienten zwischen experimentellen und den mit unterschiedlichen Tropfendurchmesser simulierten Ergebnissen, dargestellt. Das Ergebnis mit 1,6 [mm] Tropfendurchmesser wich stark von den experimentellen Daten ab. Entgegen der theoretischen Erwartung korrelierte der axiale Dispersionskoeffizient negativ mit dem Volumenstrom. Bei der Simulation mit 1,5 [mm] als Tropfendurchmesser war ein Ansteigen der axialen Dispersion mit höher werdendem, organischem Volumenstrom wahrzunehmen und der Trend aus den Experimenten konnte reproduziert werden. Lediglich im Bereich von 100 [l/h] organischer Phase gab es größere Abweichungen zu den experimentellen Daten. Grund hierfür war, dass Phasenwechselwirkungskräfte sowie alle auf den Tropfen wirkenden Kräfte bei erhöhtem Dispersphasenanteil größer werden. Dadurch wurde auch der Fehler, welcher durch die numerische Modellierung entstand, größer. Weiters erwies sich das Erreichen der Konvergenz bei höherem Dispersphasenanteil als schwieriger. Da auch mit 1,3 [mm] Tropfendurchmesser ein ansteigender Trend der axialen Dispersion wahrzunehmen war, wurde die Annahme getroffen, dass unter einem kritischen Tropfendurchmesser von 1,6 [mm], der tatsächliche Verlauf der axialen Dispersion in Abhängigkeit des Volumenstroms, reproduzierbar ist.

Bei der Auswertung der axialen Dispersion mit Hilfe der Partikelinjektion wurden die Prismenschichten des Netzes unterdrückt, um ein Ansammeln von Partikeln in diesen Bereichen zu verhindern. Bei der Verwendung eines Netzes mit fein aufgelösten Wandbereichen, können einzelne, zufällige Partikel unendlich lange in diesen Bereichen verweilen und die Detektionsebenen nicht erreichen. Dadurch wird das Ergebnis der axialen Dispersion verfälscht.

In Abbildung 5-7 ist neben den Ergebnissen der mehrphasigen, ebenso ein Ergebnis der einphasigen Simulation abgebildet. Der axiale Dispersionskoeffizient der einphasigen Experimente wird dabei sehr genau wiedergegeben.

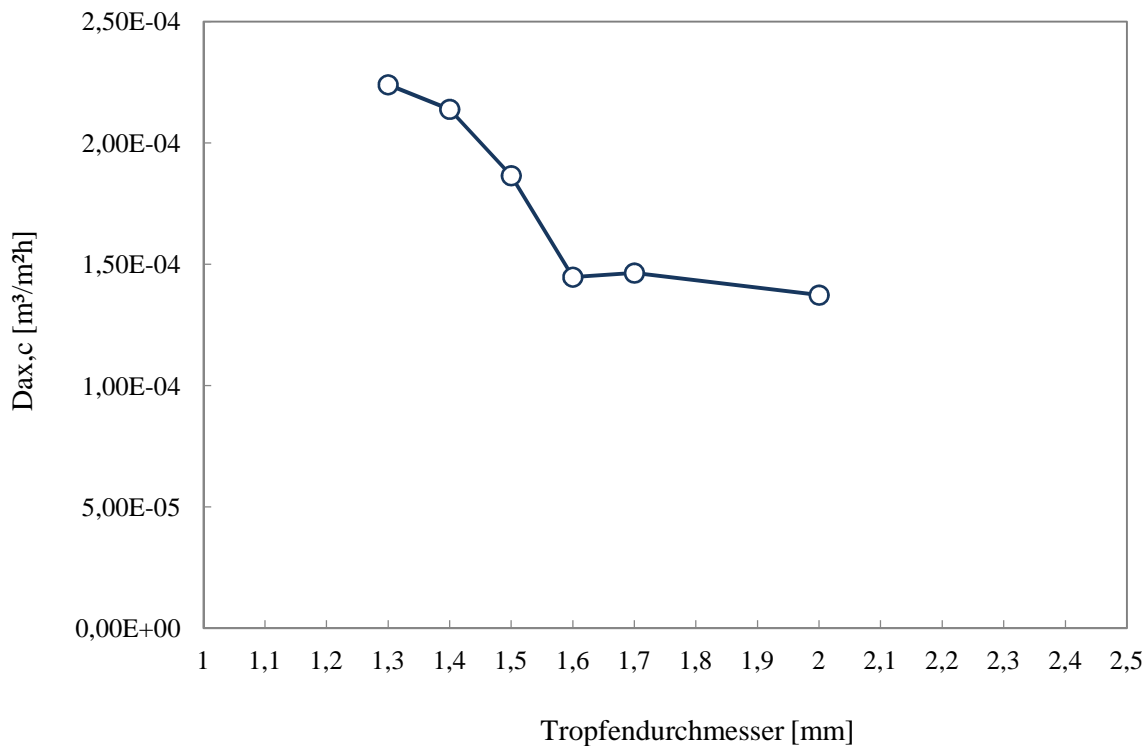


Abbildung 5-6 – Einfluss auf die axiale Dispersion der kontinuierlichen Phase bei der Änderung der dispersen Tropfengröße bei 500 [1/min] und 30 [l/h] Organik

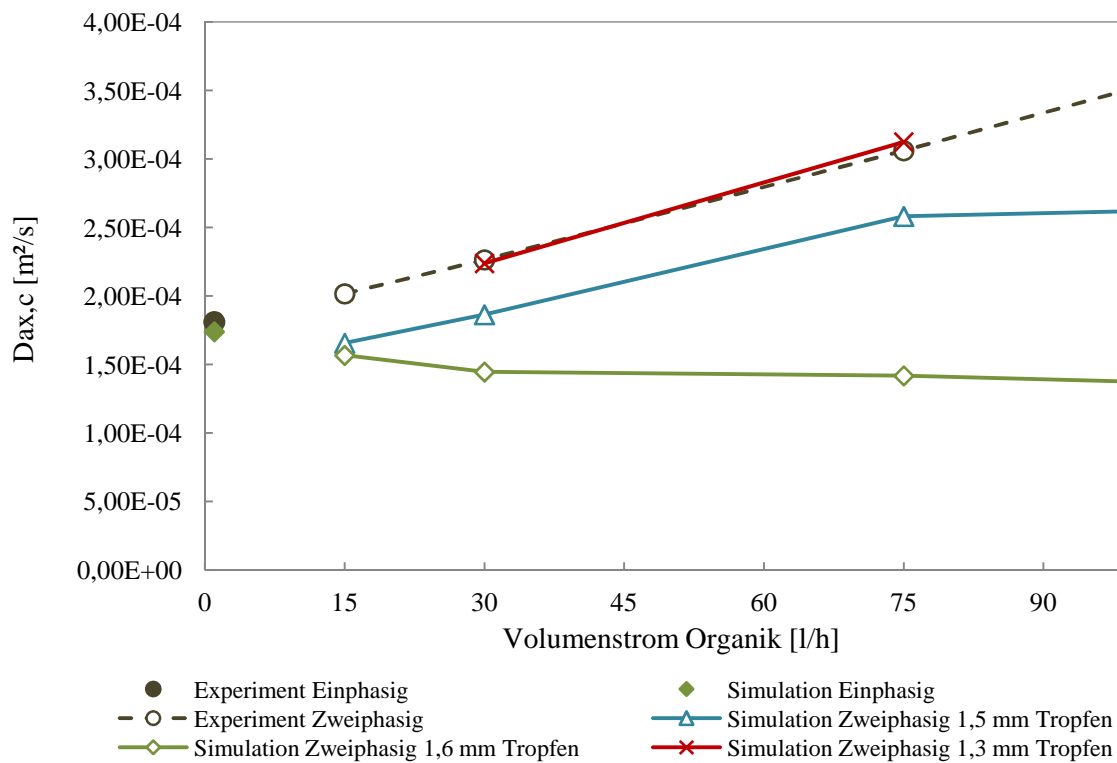


Abbildung 5-7 – Vergleich des axialen Dispersionskoeffizient zwischen experimentellen und simulierten Ergebnissen, bei 500 [1/min]

5.3.3 Zusammenfassung der Ergebnisse

Aus den Simulationsergebnissen wird ersichtlich, dass durch einphasige Simulationen der axiale Dispersionskoeffizient sehr gut modelliert werden kann und eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten erzielt wird. Bei der mehrphasigen Simulation mit dem Euler/Euler-Verfahrens muss bei der Annahme einer monodispersen Tropfengrößenverteilung der für das Anwendungsbeispiel richtige Tropfendurchmesser ermittelt werden. Es darf jedoch nicht davon ausgegangen werden, dass es sich dabei um die tatsächliche Größe des in der Kolonne ausbildenden Tropfendurchmessers handelt. Grundsätzlich ist zu erwähnen, dass eine Mehrphasensimulation mit einem größeren Zeitaufwand einhergeht als eine einphasige Simulation. Beginnend von Konvergenzschwierigkeiten bis hin zur Ermittlung passender Parameter, wie zum Beispiel der Tropfengröße, kann diese Art der Modellierung sehr viel mehr Zeit beanspruchen. Werden jedoch die richtigen Parameter ermittelt, kann mit Hilfe der Mehrphasensimulation die Komplexität der Strömung in gerührten Extraktionskolonnen gut modelliert werden.

6 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde eine gerührte Flüssig/Flüssig-Extraktionsanlage im Labormaßstab bezüglich ihrer Trennleistung und Hydrodynamik unter dem Einsatz verschiedener Rührerdesigns experimentell untersucht. Zu diesem Zweck wurden die Einbauten eines gewöhnlichen RDC - Extraktors nach den Erkenntnissen und Designregeln von AKSAMIA [1] insofern modifiziert, als sich ein Hybrid aus RDC und Taylor-Couette-Reaktor ergab. Hierfür wurden die bei der klassischen Geometrie verwendeten Statorscheiben entfernt, der Durchmesser der Welle erhöht und die Funktion der Statorscheiben durch vergrößerte Rotorscheiben übernommen. Dieser Reaktor wird von AKSAMIA aus diesen Gründen auch als Taylor-Couette-Disc-Contactor (TCDC) bezeichnet.

Durch Ermittlung der maximalen Kolonnenbelastungen bzw. der Flutgrenzen beim Einsatz verschiedener Rührerdesigns, konnten die Designregeln des TCDC im Scale-Down untersucht werden. Die Flüssig/Flüssig-Extraktionsanlage hatte einen Kolonnendurchmesser von 0,03 [m] und eine aktive Höhe von 1 [m]. Durch hydrodynamische Versuchsreihen wurde gezeigt, dass die Auslegungsregeln des TCDC im Scale-Down nicht anwendbar waren. Der Grund hierfür war, dass nicht reduzierbare Stoffeigenschaften, wie Oberflächenspannung und die daraus resultierende Tropfengröße, die Kolonne bereits bei niedrigen Kolonnenbelastungen zum Fluten brachten. Die TCDC-Rührerdesigns wurden daraufhin modifiziert, indem die Rotorscheiben im Durchmesser verkleinert und angewinkelt wurden. Die Flutgrenze erhöhte sich dadurch signifikant.

Mit den modifizierten TCDC-Designs wurde die Trennleistung mittels Stoffaustauschversuchen mit dem Stoffsystem Wasser–n-Butanol–ShellSol-T ermittelt. Als Übergangskomponente diente n-Butanol und als disperse Phase wurde ShellSol-T verwendet. Die beste Trennleistung von 99 [%] konnte Rührerdesign 4 erzielen. Bei diesem Design waren die Rotorscheiben um 10° nach unten angewinkelt und um 1 [mm] im Durchmesser verkleinert. Der ursprüngliche Durchmesser der mit den Designregeln AKSAMIAs berechneten Rotorscheiben betrug 25,5 [mm]. Rührerdesign 2, mit um 10° nach oben angewinkelt Rotorscheiben und demselben Durchmesser, folgte mit einer Trennleistung von 97,4 [%].

Neben den hydrodynamischen Versuchen und den Stoffaustauschversuchen wurden ebenso photographische Aufzeichnungen der Strömungsentwicklung in der Kolonne durchgeführt. Durch die Aufnahmen konnte gezeigt werden, dass mit Rührerdesign 4, das im TCDC100 ab einer kritischen Drehzahl entstehende, wichtige Mixer-Settler-Prinzip, am besten umgesetzt wurde. Das über die gesamte Kolonne regelmäßige Strömungsbild ermöglichte Rührerdesign 2. Die disperse Phase verteilte sich in jedem Compartment gleichmäßig.

Ein weiterer Teil dieser Arbeit beschäftigte sich mit der mehrphasigen Strömungssimulation einer klassischen RDC-Extraktionskolonne. Für die Simulation der mehrphasigen Strömung wurde das Euler/Euler-Verfahren verwendet. Mit Hilfe von experimentell ermittelten Daten der axialen Dispersion wurden die Simulationsergebnisse validiert. Die Auswertung der axialen Dispersion erfolgte über die Anwendung des Discrete Phase Models. Als Grundlage hierfür dienten die durch die Simulation erhaltenen Strömungsprofile. Es wurde der Einfluss verschiedener Tropfendurchmesser der in der Simulation angenommenen monodispersen Phase auf die axiale Dispersion der kontinuierlichen Phase, untersucht. Ein deutlicher Anstieg des axialen Dispersionskoeffizienten wurde beim Reduzieren des Tropfendurchmessers von 1,6 [mm] auf 1,5 [mm] festgestellt. Mit 1,3 [mm] und 1,5 [mm] konnte der Verlauf der axialen Dispersion aus den Experimenten in Abhängigkeit des organischen Volumenstroms reproduziert werden. Ab einer Tropfengröße von 1,6 [mm] korrelierte der axiale Dispersionskoeffizient entgegen der theoretischen Erwartung negativ mit steigendem Volumenstrom. Aus diesen Gründen wurde die Annahme getroffen, dass unter einem kritischen Tropfendurchmesser von 1,6 [mm] der tatsächliche Verlauf der axialen Dispersion reproduzierbar ist. In dieser Arbeit konnte mit Hilfe des Euler/Euler-Verfahrens der Mehrphasensimulation die Komplexität der Strömung in der gerührten RDC-Extraktionskolonne mit ausreichender Genauigkeit modelliert und eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten erzielt werden. Durch die virtuellen Versuche wurde ebenso gezeigt, dass eine mehrphasige Simulation mit einem weitaus größeren Zeitaufwand einhergeht als einphasige Simulationen. Ausschlaggebend hierfür waren Konvergenzschwierigkeiten, sowie die Ermittlung der für die mehrphasige Simulation wichtigen Parameter, wie zum Beispiel der Tropfengröße. Zusammenfassend benötigt eine Mehrphasensimulation viel mehr Zeit, modelliert jedoch die komplexen Strömungen in gerührten Extraktionskolonnen mit ausreichender Genauigkeit.

7 Symbolverzeichnis

A	Stoffaustauschfläche	[m ²]
A_Q	Querschnittsfläche der Kolonne	[m ²]
a	Spezifische Stoffaustauschfläche	[m ² /m ³]
Bo	Bodenstein-Zahl	
c	Konzentration	[mol/l]
c^*	Gleichgewichtskonzentration	[mol/l]
D	Diffusionskoeffizient	[m ² /s]
$D_{ax,c}$	Axialer Dispersionskoeffizient der kontinuierlichen Phase	[m ² /s]
d_K	Kolonnendurchmesser	[m]
d_R	Rotordurchmesser	[m]
d_W	Wellendurchmesser	[m]
\dot{V}	Volumenstrom des Feed	[m ³ /s]
\vec{F}	Kraftvektor	[N]
f, f_i	Fugazität bzw. Fugazität der Komponente i	[bar]
g	Molare Gibbs'sche Enthalpie	[J/mol]
\vec{g}	Gravitation (9,81)	[m/s ²]
G_M	Molare freie Enthalpie	[J/mol]
H	Höhe des Apparates	[m]
HTU	Höhe einer theoretischen Stufe	[m]
h_c	Compartmenthöhe	[m]
J_ϕ	Molekularer Fluss der Größe ϕ	
k	Stoffdurchgangskoeffizient	[m/s]

K^*	Verteilungskoeffizient	
L	Länge bzw. Abstand	[m]
\dot{N}, \dot{n}	Stoffmengenstrom bzw. spez. Stoffmengenstrom	[mol], [mol/s]
n_i	Stoffmenge der Komponente i	[mol]
NTU	Anzahl der theoretischen Stufen	
p	Druck	[bar]
Q	Wärme	[J]
R	Gaskonstante	[J/(mol*K)]
Re	Reynolds-Zahl	
S	Entropie	J/K
Sh_m	Mittlere Sherwood-Zahl	
S_ϕ	Quelle oder Senke der Größe ϕ	
T	Temperatur	[K]
t	Zeit	[s]
U	Innere Energie	[J]
u, v, w	Geschwindigkeiten bzw. Lehrrohrgeschwindigkeiten	[m/s]
\bar{u}	Mittlere bzw. reale Geschwindigkeit	[m/s]
u'	Schwankung der Geschwindigkeit	[m/s]
u_τ	Wandschubspannungsgeschwindigkeit	[m/s]
V, \dot{V}	Volumen bzw. Volumenstrom	[m], [m ³ /s]
W	Arbeit	[J]
x, y, z	Koordinatenrichtungen	
x^*, y^*	Konzentration an Phasengrenzfläche	[mol/l]
X, X^*	Molbeladung im Raffinat bzw. Gleichgewichtsbeladung	[mol/mol]
Y	Molbeladung im Extrakt	[mol/mol]
y^+	Dimensionsloser Abstand	

Griechische Symbole, Sonderzeichen und sonstige Indizes

β	Stoffübergangskoeffizient	[m/s]
Γ	Diffusionskoeffizient	[m ² /s]
Δ	Differenz	
θ	Dimensionslose Zeit	
μ	Dynamische Viskosität	[Pa s]
μ_i	Chemisches Potential	[J/mol]
ρ	Dichte	[kg/m ³]
τ	Mittler Verweilzeit	[s]
τ_w	Wandschubspannung	[N/m ²]
$\bar{\tau}$	Spannungstensor	[N/m ²]
φ_d	Hold Up der dispersen Phase	
∇	Nabla-Operator	
$c, d,$	Indizes für kontinuierliche und disperse Phase	

8 Literaturverzeichnis

- [1] E. Aksamija, *Ein vereinfachtes und optimiertes Design von Drehscheibenextraktoren; der Taylor-Couette Disc Contactor (TCDC)*, Graz: Technische Universität Graz, 2014.
- [2] P. Kolb, *Hydrodynamik und Stoffaustausch in einem gerührten Miniplantextraktor der Bauart Kühni*, Kaiserslautern: Technische Universität Kaiserslautern, 2004.
- [3] A. Pfennig, *Kleiner!Flexibler!Schneller - Miniplant und Mikroplant als Bausteine zukünftiger Verfahrensentwicklung*, Berlin: Springer, 1999.
- [4] A. Mersmann, M. Kind und J. Stichlmair, *Thermische Verfahrenstechnik - Grundlagen und Methoden*, Berlin; Heidelberg; New York: Springer Verlag, 2005.
- [5] K. Sattler und H. J. Feindt, *Thermal Separation Processes - Principles and Design*, Weinheim; NewYork; Basel; Cambridge; Tokyo: VCH Verlagsgesellschaft mbH, 1995.
- [6] T. Lo, M. Baird und C. Hanson, *Handbook of Solvent Extraction*, John Wiley & Sons, 1983.
- [7] M. Siebenhofer, *Thermische Verfahrenstechnik I*, Graz: Technische Universität Graz, 2008.
- [8] S. K. I. Klinger, *Messung und Modellierung des Spaltungs- und Koaleszenzverhaltens von Tropfen bei der Extraktion*, Aachen: Technische Hochschule Aachen, 2008.
- [9] A. Schönbacher, *Thermische Verfahrenstechnik - Grundlagen und Berechnungsmethoden für Ausrüstungen und Prozesse*, Berlin [u.a.]: Springer, 2002.
- [10] S. Körfer, *Der Einfluss von laminaren Strömungen und Sekundärströmungen im Taylor-Couette-System auf die Thrombozyten*, Aachen: RWTH Aachen, 2002.

-
- [11] A. Behr, D. W. Agar und J. Jörissen, Einführung in die Technische Chemie, S. A. Verlag, Hrsg., Heidelberg: Springer, 2010.
- [12] H. D. Baehr und K. Stephan, Wärme- und Stoffübertragung, Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2006.
- [13] C. Lüdecke und D. Lüdecke, Thermodynamik, Berlin Heidelberg: Springer Verlag, 2000.
- [14] J. Gmehling und B. Kolbe, Thermodynamik, Stuttgart: Georg Thieme Verlag, 1988.
- [15] R. Goedecke, Fluidverfahrenstechnik - Grundlagen, Methodik, Technik, Praxis, R. Goedecke, Hrsg., Weinheim: Wiley-VCH, 2011.
- [16] M. Kraume, Transportvorgänge in der Verfahrenstechnik, Berlin: Springer, 2003.
- [17] D. S. Christen, Praxiswissen der chemischen Verfahrenstechnik - Handbuch für Chemiker und Verfahreningenieure, Berlin [u.a.]: Springer, 2010.
- [18] O. Levenspiel, Chemical Reaction Engineering, New York: John Wiley & Sons, 1999.
- [19] E. Aksamija, *Extraktion*, Graz: Technische Universität Graz, 2012.
- [20] A. Paschedag, CFD in der Verfahrenstechnik - Allgemeine Grundlagen und mehrphasige Anwendungen, Wiley-VCH Verlag.
- [21] S. Lecheler, Numerische Strömungsberechnung, Bad Tölz: Vieweg + Teubner, 2011.
- [22] J. Ferziger und M. Peric, Numerische Strömungsmechanik, Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2008.
- [23] ANSYS Inc., „ANSYS FLUENT Theory Guide,“ Canonsburg, 2014.
- [24] T. Gurker, *Experimentelle Charakterisierung einer gerührten Extraktionskolonne und Vergleich mittels Computational Fluid Dynamics*, Graz: Technische Universität Graz, 2010.
- [25] S. Martens, *Strömungsmechanik und Stoffaustausch*, Graz: Technische Universität Graz (Institut für Thermische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik), 2010.

-
- [26] B. Andersson, R. Andersson, M. Mortensen, L. Hakansson, R. Sudiyo und B. v. Wachem, *Computational Fluid Dynamics for Chemical Engineers*, Cambridge: Cambridge University Press, 2011.
- [27] E. Aksamija, *Einphasige PIV-Untersuchungen einer gerührten Extraktionskolonne und die Evaluierung von Turbulenzmodellen in CFD*, Graz: Technische Universität Graz, 2009.
- [28] T. Haderer, *CFD-Simulation der Hydrodynamik einer gerührten Extraktionskolonne und Vergleich mit experimentell ermittelten hydrodynamischen Kenngrößen*, Graz: Technische Universität Graz, 2004.
- [29] NORMAG, „Labor- und Prozesstechnik,“ [Online]. Available: http://www.normag-glas.de/download/FLYER_continuous_liquid_liquid_extraction_unit.pdf. [Zugriff am 09 November 2014].
- [30] R. Prieler, *Optimierung der Hydrodynamik in einer RDC-Kolonne*, Graz: Technische Universität Graz, 2012.
- [31] VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen, *VDI-Wärmeatlas*, Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 2006.
- [32] T. Grebe, *Simulation und Modellierung des Mischverhaltens von Taylor-Couette-Reaktoren*, Paderborn, 2004.
- [33] „http://www.shell.com/home/content/chemicals/products_services/our_products/solvents/hydrocarbon_solvents/isoparaffins/product_data/,“ Shell. [Online].

9 Anhang

9.1 Stoffdaten

Tabelle 9-1: Stoffwerte Wasser [32]

Molare Masse	18,015 [g/mol]
Dichte (bei 20 [°C])	998,21 [kg/m ³]
Dyn. Viskosität (bei 20 [°C])	1,0016 * 10 ⁻³ [Pa*s]

Tabelle 9-2: Stoffwerte n-Butanol [32]

Molare Masse	74,12 [g/mol]
Dichte (bei 20 [°C])	810,6 [kg/m ³]

Tabelle 9-3: Stoffwerte Shellsol T (SST)

CAS-Nummer	64741-65-7
Molare Masse	171 [g/mol]
Dichte (bei 15 [°C])	761 [kg/m ³]
Kin. Viskosität (bei 25 [°C])	1,9 [mm ² /s]

9.2 Flüssig/Flüssig-Gleichgewichtsdaten

Tabelle 9-4 – Daten zur Erstellung des Flüssig/Flüssig-Gleichgewichtes

Wässrige Phase [mg/l]	Organische Phase [mg/l]	Beladung wässrige Phase [kg/kg]	Beladung organische Phase [kg/kg]
460	7930	0,00060481	0,00794873
350	6520	0,00046012	0,00653451
1270	13500	0,00167148	0,01354543
2470	19880	0,00325565	0,01997652
3830	26540	0,00505674	0,02671381
7310	30570	0,0096932	0,03090351
7140	33360	0,00946577	0,03371681
11060	40210	0,01473455	0,04083933
17460	38500	0,02344857	0,03941809
19050	39650	0,02563531	0,04067706
23250	42040	0,03145409	0,04335903
9650	36230	0,01283346	0,03673226
11280	36430	0,01503178	0,03701035
15790	39410	0,02116122	0,04026501
20400	40860	0,02749888	0,04199001
24570	42650	0,03329569	0,04406204
28970	43870	0,03947928	0,04557756
33870	43670	0,046448	0,04565599
36540	43070	0,05028238	0,04518403

9.3 Ergebnisse der Stoffaustauschversuche

Tabelle 9-5 – GC-Ergebnisse des 1.Stoffaustauschversuch mit Rührerdesign 2

Stoffaustauschversuch 1 – Rührerdesign 2						
	EIN	AUS		EIN	AUS	
	Organische Phase	Organische Phase	Wässrige Phase	Beladung Organische Phase	Beladung Organische Phase	Beladung Wässrige Phase
	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[kg/kg]	[kg/kg]	[kg/kg]
Probe 1	51816,19	1135,63	34368,05	0,07274	0,00149	0,03595
Probe 2	51816,19	1486,49	35510,34	0,07274	0,00196	0,03720
Probe 3	51816,19	1216,34	34916,36	0,07274	0,00160	0,03655
Probe 4	51816,19	1436,30	34411,10	0,07274	0,00189	0,03600

Tabelle 9-6 - GC-Ergebnisse des 2.Stoffaustauschversuch mit Rührerdesign 2

Stoffaustauschversuch 2 – Rührerdesign 2						
	EIN	AUS		EIN	AUS	
	Organische Phase	Organische Phase	Wässrige Phase	Beladung Organische Phase	Beladung Organische Phase	Beladung Wässrige Phase
	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[kg/kg]	[kg/kg]	[kg/kg]
Probe 1	49615,02	1309,33	38488,29	0,06945	0,00172	0,04048
Probe 2	49615,02	1486,49	37647,34	0,06945	0,00173	0,03955
Probe 3	49615,02	1494,86	37055,09	0,06945	0,00197	0,03890
Probe 4	49615,02	1321,20	40083,20	0,06945	0,00174	0,04224

Tabelle 9-7 - GC-Ergebnisse des 3.Stoffaustauschversuch mit Rührerdesign 3 (rote Werte nicht für Mittelung)

Stoffaustauschversuch 3 – Rührerdesign 3						
	EIN	AUS		EIN	AUS	
	Organische Phase	Organische Phase	Wässrige Phase	Beladung Organische Phase	Beladung Organische Phase	Beladung Wässrige Phase
	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[kg/kg]	[kg/kg]	[kg/kg]

Probe 1	37418,24	3736,95	27683,66	0,05155	0,00493	0,02871
Probe 2	37418,24	3565,34	27221,25	0,05155	0,00471	0,02822
Probe 3	37418,24	3812,52	26110,97	0,05155	0,00503	0,02703
Probe 4	37418,24	3854,20	23315,62	0,05155	0,00509	0,02405

Tabelle 9-8 - GC-Ergebnisse des 4.Stoffaustauschversuch mit Rührerdesign 4 (rote Werte nicht für Mittelung)

	Stoffaustauschversuch 4 – Rührerdesign 4					
	EIN	AUS		Ein	AUS	
	Organische Phase	Organische Phase	Wässrige Phase	Beladung Organische Phase	Beladung Organische Phase	Beladung Wässrige Phase
	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[kg/kg]	[kg/kg]	[kg/kg]
Probe 1	36142,05	362,15	26527,40	0,04971	0,00048	0,02747
Probe 2	36142,05	333,16	26542,68	0,04971	0,00044	0,02749
Probe 3	36142,05	2264,00	39420,31	0,04971	0,00298	0,04151
Probe 4	36142,05	395,56	29406,36	0,04971	0,00052	0,03057

9.4 Ergebnisse der CFD-Simulation

Tabelle 9-9 – Ergebnisse der axialen Dispersion der kontinuierlichen Phase bei einphasiger Simulation

Spalt	Volumenstrom Wässrig	Drehzahl	Dax,c bei Det_1 - $\Delta 255$	Dax,c bei Det_2 - $\Delta 323$	Dax,c bei Det_3 - $\Delta 391$	Dax,c bei Det_4 - $\Delta 459$	Dax,c Mittelwert
[mm]	[l/h]	[1/min]	[m ² /s]	[m ² /s]	[m ² /s]	[m ² /s]	[m ² /s]
1	87,56	500	1,57E-04	1,63E-04	1,59E-04	1,55E-04	1,59E-04
1	87,56	600	1,70E-04	1,69E-04	1,55E-04	1,62E-04	1,64E-04
1	87,56	700	1,84E-04	1,83E-04	1,72E-04	1,73E-04	1,78E-04
1	87,56	800	1,98E-04	1,88E-04	1,82E-04	1,78E-04	1,87E-04
1	87,56	900	2,10E-04	2,00E-04	2,01E-04	2,06E-04	2,04E-04
1,25	87,56	500	1,76E-04	1,81E-04	1,69E-04	1,70E-04	1,74E-04
1,25	87,56	600	1,97E-04	1,96E-04	1,95E-04	1,87E-04	1,94E-04
1,25	87,56	700	2,12E-04	2,11E-04	1,99E-04	2,00E-04	2,05E-04
1,25	87,56	800	2,24E-04	2,27E-04	2,09E-04	2,06E-04	2,17E-04
1,25	87,56	900	2,35E-04	2,30E-04	2,43E-04	2,21E-04	2,32E-04

Tabelle 9-10 – Einfluss der Tropfengröße auf die axiale Dispersion

Tropfen	Volumenstrom Wässrig-Organik		Drehzahl	Dax,c bei Det_1 - $\Delta 255$	Dax,c bei Det_2 - $\Delta 323$	Dax,c bei Det_3 - $\Delta 391$	Dax,c bei Det_4 - $\Delta 459$	Dax,c Mittelwert
	[l/h]	[l/h]		[1/min]	[m ² /s]	[m ² /s]	[m ² /s]	
1,3	87,56	30	500	2,26E-04	2,20E-04	2,22E-04	2,28E-04	2,24E-04
1,4	87,56	30	500	2,13E-04	2,23E-04	2,07E-04	2,14E-04	2,14E-04
1,5	87,56	30	500	1,94E-04	1,92E-04	1,80E-04	1,80E-04	1,86E-04
1,6	87,56	30	500	1,53E-04	1,45E-04	1,45E-04	1,37E-04	1,45E-04
1,7	87,56	30	500	1,47E-04	1,48E-04	1,48E-04	1,43E-04	1,46E-04
2	87,56	30	500	1,38E-04	1,41E-04	1,36E-04	1,33E-04	1,37E-04

Tabelle 9-11 – Verlauf der axialen Dispersion bei steigenden Volumenströmen und unterschiedlichen Tropfengrößen

Tropfen	Volumenstrom Wässrig-Organik		Drehzahl	Dax,c bei Det_1 - $\Delta 255$	Dax,c bei Det_2 - $\Delta 323$	Dax,c bei Det_3 - $\Delta 391$	Dax,c bei Det_4 - $\Delta 459$	Dax,c Mittelwert
	[l/h]	[l/h]		[1/min]	[m ² /s]	[m ² /s]	[m ² /s]	
1,6	87,56	-	500	1,76E-04	1,81E-04	1,69E-04	1,70E-04	1,74E-04
	87,56	15	500	1,61E-04	1,59E-04	1,51E-04	1,56E-04	1,57E-04
	87,56	30	500	1,53E-04	1,45E-04	1,45E-04	1,37E-04	1,45E-04
	87,56	75	500	1,42E-04	1,49E-04	1,45E-04	1,32E-04	1,42E-04
	87,56	100	500	1,41E-04	1,37E-04	1,34E-04	1,37E-04	1,38E-04
1,5	87,56	-	500	1,76E-04	1,81E-04	1,69E-04	1,70E-04	1,74E-04
	87,56	15	500	1,65E-04	1,71E-04	1,60E-04	1,67E-04	1,66E-04
	87,56	30	500	1,94E-04	1,92E-04	1,80E-04	1,80E-04	1,86E-04
	87,56	75	500	2,46E-04	2,73E-04	2,64E-04	2,49E-04	2,58E-04
	87,56	100	500	2,65E-04	2,66E-04	2,58E-04	2,59E-04	2,62E-04
1,3	87,56	-	500	1,76E-04	1,81E-04	1,69E-04	1,70E-04	1,74E-04
	87,56	15	500	-	-	-	-	-
	87,56	30	500	2,26E-04	2,20E-04	2,22E-04	2,28E-04	2,24E-04
	87,56	75	500	3,12E-04	3,20E-04	3,05E-04	3,13E-04	3,13E-04
	87,56	100	500	-	-	-	-	-