

Diplomarbeit

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

Ausgeführt zum Zwecke der Erlangung
des akademischen Grades eines Diplom-Ingenieurs

am Institut für
Thermische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik
der Technischen Universität Graz

unter der Leitung von

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

Eingereicht von
Enes Aksamija

Graz, September 2009

Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Diplomarbeit selbständig angefertigt habe. Die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher weder in gleicher noch in ähnlicher Form einer andern Prüfungsbehörde vorgelegt und auch noch nicht veröffentlicht.

Graz am 20.10.2009

Enes Aksamija

Danksagung

Bei Prof. Dr. Matthäus Siebenhofer bedanke ich mich für die Vergabe und Betreuung dieser interessanten Diplomarbeit. Besonderen Dank schulde ich Herrn DI Gurker Thomas, der mich durch seine engagierte Betreuung und stete Diskussionsbereitschaft mit vielseitigen Denkipulsen bereicherte und bei der Erstellung dieser Arbeit intensiv unterstützt hat.

Des weiteren möchte ich mich bei DI Radl Stefan herzlichst für seine wertvolle Hilfe bei der Durchführung der Experimente und für die Bereitstellung der nötigen Ausrüstung bedanken.

Nicht zuletzt möchte ich meinen Eltern danken, die mir durch ihre fortwährende Unterstützung das Studium ermöglichten und die Entstehung der Arbeit mit Anteilnahme verfolgt haben.

Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde das einphasige Strömungsverhalten innerhalb einer *Rotating Disc Contactor* (RDC) Extraktionskolonne ($D_K = 150$ [mm]) untersucht. Hierfür wurden die Geschwindigkeits-Vektorfelder einer Ebene durch *Particle Image Velocimetry* (PIV) bei 12 verschiedenen Betriebszuständen erfasst. Die Drehzahl der Welle sowie der Volumenstrom der kontinuierlichen Phase wurden variiert. Es konnte gezeigt werden, dass sich das qualitative Strömungsbild (Wirbelanzahl, Wirbelzentren, etc.) kaum zwischen den Betriebszuständen unterscheidet. Es scheint nur von den geometrischen Abmessungen der Kolonne abzuhängen. Die gemittelten Vektorfelder wurden anschließend dazu verwendet, Turbulenzmodelle mit *Computational Fluid Dynamics* (CFD) zu evaluieren. Die in *Ansys Fluent 12* verfügbaren Turbulenzmodelle wurden in einer 2D-Simulation mit den experimentellen PIV-Daten verglichen, dabei konnte das *Reynolds Stress Model* (RSM) als einziges den beobachteten Strömungsverlauf zufrieden stellend abbilden. Alle anderen Turbulenzmodelle (S-k- ϵ , R-k- ϵ , RNG-k- ϵ , k- ω) lieferten völlig falsche Vorhersagen im achsennahen Bereich.

Das *Reynolds Stress Model* wurde folglich in einer 3D-Simulation verwendet, um den Einfluss der in bisherigen Arbeiten meist vernachlässigten Statorhülsen abzuschätzen. Hierfür lagen zusätzliche experimentelle Daten aus der LDA-Messung von WEIB (1995) vor. Es konnten erstaunliche Übereinstimmungen zwischen Simulation und dem damaligen Experiment erzielt werden, was in einer 2D-Simulation mit Axialsymmetrie nicht möglich war.

Abschließend konnte ein polyedrisches Rechennetz erfolgreich in die Geometrie implementiert, und seine Performance bei dreidimensionalen verdrallten Strömungen untersucht werden. Die Vernetzung mit *Enhanced Wall Treatment* erwies sich in *Ansys Gambit* jedoch als extrem mühsam, der Simulationsrechner stieß trotz 16GB RAM des Öfteren an seine Grenzen. Die Simulationsergebnisse brachten keine signifikanten Unterschiede zur 2D-Simulation mit Axialsymmetrie.

Abstract

The present work has investigated the single-phase flow of a *Rotating Disc Contactor* (RDC) extraction column ($D_K = 150 \text{ mm}$). By using *Particle Image Velocimetry* (PIV), twelve different operation conditions were recorded while varying the speed of shaft rotation and the volume flow of the continuous phase. The qualitative flow pattern (number of eddies, centers of the eddies, etc.) did not vary between the different operation conditions, and appears to be a function solely of geometric dimensions.

The mean velocity vector fields obtained from PIV were subsequently used to evaluate the most common turbulence models used in *Computational Fluid Dynamics* (CFD). By performing 2D simulations in *Ansys Fluent 12*, the *Reynolds Stress Model* proved best. The other models (S-k- ϵ , R-k- ϵ , RNG-k- ϵ , k- ω) failed in predicting the flow pattern in the inner area close to the rotor shaft.

Because of its strong performance, RSM was the only model used in a 3D simulation for investigating the effect of the stator pins. For this purpose, additional experimental data from a LDA measurement of WEIB (1995) was available. While there was a big deviation in the 2D simulation when the effect of the pins was neglected, the 3D simulation produced highly accurate agreement with WEIB'S experiment.

Finally, a fully polyhedral 3D mesh was tested for its performance. Meshing this complex geometry with *Enhanced Wall Treatment* turned out to be extremely challenging in *Ansys Gambit*, even with 16GB memory. The results of the simulation did not show any significant improvement to the axis symmetric 2D simulation.

Inhaltsverzeichnis

1	EINLEITUNG	1
1.1	MOTIVATION UND ZIELSETZUNG	1
1.2	LITERATURÜBERBLICK	2
1.2.1	<i>Stand der Technik</i>	2
1.2.2	<i>Übersicht über existierende Messverfahren</i>	3
1.2.2.1	Mechanische Messverfahren	4
1.2.2.2	Optische Messverfahren	4
1.2.2.3	Akustische Messverfahren	9
1.2.2.4	Elektrische Messverfahren	10
2	ALLGEMEINE GRUNDLAGEN	12
2.1	DIE FLÜSSIG/FLÜSSIG EXTRAKTION (SOLVENTEXTRAKTION)	12
2.2	BAUARTEN VON EXTRAKTIONSAPPARATEN	14
2.2.1	<i>Rotating Disc Contactor (RDC)</i>	16
2.2.2	<i>Asymmetric Rotating Disc Contactor (ARD)</i>	17
2.2.3	<i>Scheibel-Kolonne, Oldshue-Rushton-Kolonne</i>	18
2.2.4	<i>QVF-Rührzellen-Extraktor (RZE)</i>	19
2.2.5	<i>Kühni-Kolonne</i>	19
2.2.6	<i>EC (Enhanced Coalecence)-Extraktionskolonne</i>	20
2.2.7	<i>Selbststabilisierender Hochleistungs-Extraktor (SHE)</i>	21
3	EXPERIMENTELLER TEIL	22
3.1	BESCHREIBUNG DER UNTERSUCHTEN RDC-KOLONNE	22
3.2	VERSUCHSAUFBAU, PARTICLE-IMAGE-VELOCIMETRY (PIV)	23
3.2.1	<i>Beleuchtung</i>	23
3.2.2	<i>Kamera</i>	24
3.2.3	<i>Seeding-Partikel</i>	25
3.3	VERSUCHSDURCHFÜHRUNG	26
3.4	AUSWERTUNG DER BILDER	29
3.5	ERGEBNISSE	30
3.5.1	<i>Interpretation</i>	40
3.5.2	<i>Einfluss der Rührerdrehzahl / des Volumenstromes</i>	41
3.5.3	<i>Vergleich: PIV - LDA</i>	42
4	CFD SIMULATION	44
4.1	GRUNDLAGEN DER EINPHASIGEN STRÖMUNGSSIMULATION	44
4.1.1	<i>Erhaltungsgleichungen</i>	44
4.1.1.1	Kontinuitätsgleichung	45
4.1.1.2	Impulsgleichung	46
4.1.1.3	Energiegleichung	46

4.1.2	<i>Randbedingungen</i>	47
4.1.2.1	Zuläufe & Abflüsse	47
4.1.2.2	Wände	48
4.1.2.3	Symmetrien	48
4.1.2.4	Periodizitäten.....	48
4.1.3	<i>Numerische Methoden für einphasige Systeme</i>	49
4.1.3.1	Die Finite-Volumen-Methode (FVM)	49
4.1.3.2	Rechnernetze	50
4.1.4	<i>Turbulenzmodellierung</i>	52
4.1.4.1	Direct Numerical Simulation (DNS)	52
4.1.4.2	Large Eddy Simulation (LES)	53
4.1.4.3	Reynolds-gemittelte Ansätze (RANS Modelle).....	53
4.1.5	<i>Behandlung der Grenzschicht</i>	58
4.2	2D-SIMULATION	62
4.2.1	<i>Konvergenzkriterien</i>	62
4.2.2	<i>Rechnetz</i>	63
4.2.3	<i>Randbedingungen & Diskretisierung</i>	65
4.2.4	<i>Evaluierung der Turbulenzmodelle</i>	66
4.2.4.1	Standard-k- ϵ	66
4.2.4.2	Realizable-k- ϵ	68
4.2.4.3	RNG-k- ϵ	70
4.2.4.4	Standard-k- ω , k-kl- ω , Transition-SST.....	73
4.2.4.5	Reynolds Stress Model (RSM).....	74
4.2.5	<i>Vergleich der Tangentialgeschwindigkeit</i>	77
4.2.6	<i>Gitterfeinheit</i>	77
4.3	3D-SIMULATION	79
4.3.1	<i>Einfluss der Statorhülsen</i>	79
4.3.1.1	Hybrides Rechnetz.....	79
4.3.1.2	Axialgeschwindigkeit in Abhängigkeit der tangentialen Position	83
4.3.2	<i>Simulation auf einem polyedrischen Rechnetz</i>	87
	5 ZUSAMMENFASSUNG & AUSBLICK	90
	6 NOMENKLATUR	91
	7 REFERENZEN	93

1 Einleitung

1.1 Motivation und Zielsetzung

Die Flüssig-Flüssig-Extraktion ist seit Jahrzehnten ein wichtiger thermischer Trennprozess, der in der chemischen, biochemischen, petrochemischen oder pharmazeutischen Industrie breite Anwendung findet. Die konstruktiven Ausführungen von Extraktoren sind unterschiedlich, einer der industriell am weitesten verbreiteten Gegenstromextraktoren, der Rotating Disc Contactor (RDC), soll in dieser Arbeit untersucht werden.

Die Forschung zur Optimierung und Weiterentwicklung dieser Extraktionskolonnen stützt sich seit Jahren auf zwei fundamentale Vorgehensweisen. Dies sind einerseits Stoffaustauschversuche und andererseits hydrodynamische Untersuchungen. Letzteres soll Inhalt dieser Arbeit sein.

Im industriellen Alltag bedeutet Optimierung häufig die konstruktive Manipulation eines Apparates mit Umlenklechen, Strömungsbrechern oder anderen geometrischen Variationen. Oft ist es durch die Montage eines richtig platzierten Blechstückes möglich, eine gleichmäßigere Anströmung des Apparates zu erreichen und somit die Performance zu verbessern ohne die physikalischen Vorgänge im Apparat näher zu untersuchen. Für diese Herangehensweise gewinnt CFD (*Computational Fluid Dynamics*) stetig an Bedeutung, da durch die rasant wachsenden Rechnerkapazitäten auch die Möglichkeiten und die Verlässlichkeit von Simulations-Programmen steigen. CFD-Simulationen sind immer billiger als reale Experimente und daher höchst attraktiv für die Analyse des Strömungsverhaltens in Trennapparaten. Leider sind die Rechnerkapazitäten immer noch weit davon entfernt, das physikalische Verhalten bis in die kleinsten Raum- und Zeitskalen zu erfassen. Die bestimmenden Erhaltungsgleichungen (*Navier-Stokes-Gleichungen*) müssen manipuliert und vereinfacht werden, Modellannahmen müssen getroffen werden. Dadurch kann es in Strömungsregimen, bei denen die Vereinfachungen nicht zulässig sind, zu Abweichungen zwischen Simulation und Realität kommen. Die verschiedenen Modelle müssen für jede konkrete Problemstellung auf ihre Gültigkeit überprüft werden, dies geschieht nach wie vor experimentell.

In der vorliegenden Arbeit soll nun untersucht werden, inwieweit sich die komplex verdrallte Strömung innerhalb einer RDC-Kolonne mit CFD erfassen und voraussagen lässt. Die Arbeit soll sich nur mit dem einphasigen Betriebszustand befassen und als Grundlage für die darauf

aufbauenden zweiphasigen Untersuchungen von GURKER [32] dienen. Einphasige Strömungen sind physikalisch weit weniger komplex und daher einfacher zu beschreiben bzw. zu simulieren. Es soll also versucht werden, alle weiteren Vereinfachungen zu minimieren und das Strömungsbild der kontinuierlichen Phase so exakt wie möglich vorherzusagen. Des Weiteren soll die Berechtigung einer numerisch aufwändigen 3D-Simulation diskutiert werden. Bisweilen wurde in den meisten Arbeiten die axialsymmetrische Geometrie der RDC-Kolonnen auf ein zweidimensionales Problem reduziert und somit eine enorme Menge an Rechenzeit eingespart (Kapitel 1.2.1). Die Voraussetzungen für die Zulässigkeit dieser rationalen Annahme soll in dieser Arbeit eingehend überprüft werden.

Die experimentelle Validierung der Simulationsergebnisse soll mit *Particle Image Velocimetry* (PIV) erfolgen.

1.2 Literaturüberblick

1.2.1 Stand der Technik

Prinzipiell wird bei der numerischen Strömungssimulation von Extraktionskolonnen stets versucht, hydrodynamische Parameter (z.B. axiale Dispersionskoeffizienten, Hold-up) aus der Simulation herauszulesen, um sie für die klassische Kolonnenauslegung nach dem HTU-NTU-Konzept zu verwenden. Der Stoffübergang kann bei heutigen Rechnerkapazitäten noch nicht erfasst werden.

Einphasige Simulationen einer RDC-Kolonnen wurden bereits von MODES [28], FEI ET AL. [28], RIEGER ET AL., HADERER [19] und DRUMM & BART [17] durchgeführt. Abgesehen von DRUMM & BART haben bei allen Arbeiten punktuell messende Verfahren (LDA) für die Evaluierung der Simulationsergebnisse gedient. Dabei können nur die Geschwindigkeiten an konkreten Messpunkten verglichen werden. DRUMM & BART verwenden für die Validierung der Turbulenzmodelle ebenfalls PIV, allerdings werden die Statorhülsen in der Simulation vernachlässigt. Das Realizable-k- ϵ -Modell und das *Reynolds Stress Modell* haben sich bei HADERER und DRUMM & BART als am besten geeignet erwiesen. Diese Erkenntnisse sollen in dieser Arbeit überprüft und Dank höherer Rechnerkapazität erweitert werden.

Zweiphasige Simulationen wurden ebenfalls von HADERER und DRUMM & BART sowie von RIEGER ET AL. durchgeführt. VIKHANSKY & KRAFT [27] simulierten den zweiphasigen Betriebszustand unter Berücksichtigung von Tropfenpopulationsbilanzen und stochastischen

Monte Carlo Methoden. GHANIYARI-BENIS ET AL. [30] führten eine 3D-Simulation der gesamten Kolonne durch, um den Hold-up über die Kolonnenhöhe vorherzusagen.

Der zweiphasige Strömungszustand soll in dieser Arbeit nicht weiter untersucht werden.

1.2.2 Übersicht über existierende Messverfahren

Im folgenden Kapitel soll eine Übersicht über die wichtigsten etablierten Messverfahren, die für eine RDC-Kolonne von Bedeutung sind, gegeben werden. Da die Evaluierung der Turbulenzmodelle bzw. der Vergleich der experimentellen Daten mit der Simulation die vorrangigen Ziele dieser Arbeit sind, sollen Messverfahren behandelt werden, die für einen solchen Vergleich sinnvoll erscheinen.

Grundsätzlich können Messverfahren nach dem physikalischen Grundprinzip der Messung gegliedert werden:

- Mechanisch (Anemometer, Kapillarabsaugung)
- Optisch / Fotografisch (LDA, PDA, PIV, Kapillarabsaugung, etc.)
- Akustisch (UDV)
- Elektrisch (ECT, Coulter-Zähler, etc.)

Es ist nicht immer einfach die Messmethoden einer dieser Kategorien zuzuordnen, da viele Messverfahren eine Kombination dieser Grundprinzipien darstellen.

Ein weiteres Einteilungskriterium wäre die Beeinflussung der Messung auf das Strömungsbild. Man unterscheidet sowohl zwischen *intrusiven* und *nicht-intrusiven* als auch zwischen *invasiven* und *nicht-invasiven* Methoden. ASHER [1] gibt einen schematischen Überblick über diese Begriffe.

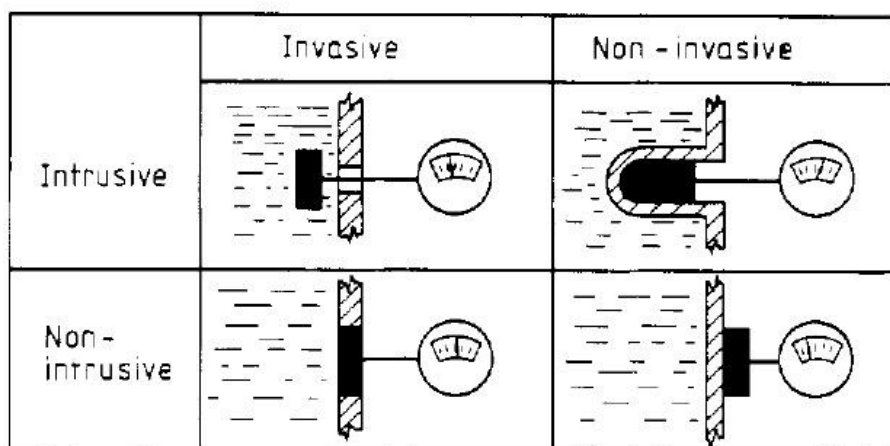


Abbildung 1.1: Einteilungsschema der Messverfahren, [1].

Als *intrusive* Messverfahren bezeichnet man jene Verfahren, die in die Strömung eindringen und das Strömungsbild damit mechanisch bzw. geometrisch beeinflussen (z.B. Hitzdraht-anemometrie, Prandtl'sches Staurohr). *Nicht-intrusive* Verfahren dringen nicht in die Strömung ein (alle optischen Verfahren), ihr Einfluss auf das Strömungsprofil kann beim heutigen Stand der Technik bzw. der Messgenauigkeit ohne weiteres vernachlässigt werden. Die Unterscheidung zwischen *invasiv* und *nicht-invasiv* bezieht sich auf den Kontakt der Messsonde mit dem Fluid. Bei *invasiven* Verfahren stehen die Messsonden in Berührung mit dem Fluid bzw. werden benetzt (Abbildung 1.1). Grundsätzlich ist es erwünscht die Beeinflussung durch die Messung so gering wie möglich zu halten, *nicht-intrusive* und *nicht-invasive* Methoden sind daher, wenn möglich, vorzuziehen.

1.2.2.1 Mechanische Messverfahren

Mechanische Messverfahren, beispielsweise mittels Anemometer, sind typischerweise sowohl *intrusiv* als auch *invasiv*. Zudem bestehen sie oft aus beweglichen Teilen, die eine weitere Beeinflussung des Strömungsverlaufes darstellen. Der Einbau von mechanischen Messsonden in die bestehende RDC Kolonne wäre zwar möglich, aber sehr umständlich und bezüglich der Genauigkeit wenig Erfolg versprechend. Mechanische Messverfahren sollen daher nicht weiter behandelt werden.

1.2.2.2 Optische Messverfahren

1.2.2.2.1 Kapillarabsaugung

1972 entwickeln PILHOFER & MILLER [2] ein Messverfahren zur Ermittlung der Tropfen-größenverteilung durch Kapillarabsaugung. Hierfür werden Proben aus dem zu untersuchenden Gemisch durch eine Kapillare isokinetisch¹ abgesaugt. Die Tropfen werden in der Kapillare gestreckt, Propfenströmung bildet sich aus. Die Propfen passieren eine Lichtschranke (Lampe & Phototransistor) und verändern die Intensität des Durchgangslichtes. Diese Sprünge der Lichtintensität werden vom Phototransistor registriert (Abbildung 1.2). Unter Annahme, der Unterdruck in der Kapillare und die Strömungsgeschwindigkeit der

¹ d.h. mit der lokalen Strömungsgeschwindigkeit.

Propfen seien konstant, ist das Volumen der Propfen proportional zur Dauer des gleich bleibenden Schrankensignals.

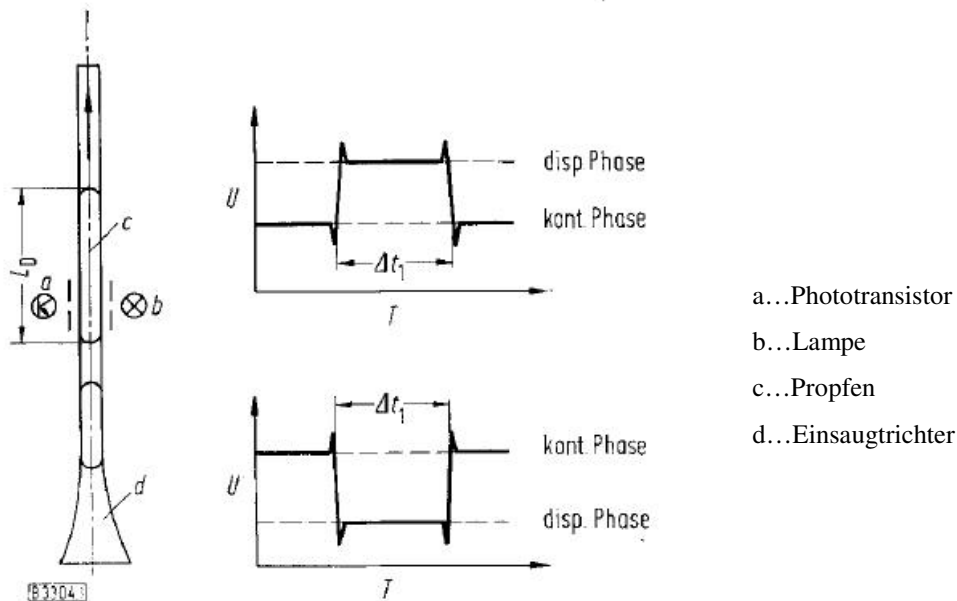


Abbildung 1.2: Absaugsonde (links); Intensität des Durchgangslichtes über der Zeit (rechts), [2].

Die Kapillarabsaugung ist sowohl *invasiv* als auch *intrusiv*. Es ist eine mechanisch-optische Messmethode, die sich sehr gut für die Bestimmung der Tropfengrößenverteilung eignet. Da sich diese Arbeit aber auf den einphasigen Strömungszustand beschränkt, soll für weitere Details auf die Arbeit von PILHOFER & MILLER [2] verwiesen werden.

1.2.2.2.2 Laser Doppler Anemometrie (LDA)

1964 stellen YEH & CUMMINS [3] ein optisches Messverfahren zur Strömungsmessung mittels Laser vor, die Laser Doppler Anemometrie. Heute zählt das Verfahren zu einem der am weitesten entwickelten Messverfahren im Bereich der Turbulenzforschung.

Zwei kohärente monochromatische Laserstrahlen werden zum Schnitt gebracht und bilden an der Schnittstelle ein Messvolumen, an dem ein Interferenzmuster entsteht und in dem die Geschwindigkeitsmessung vollzogen wird. Passiert nun ein Tracerpartikel das Messvolumen, so werden die beiden Laserstrahlen gestreut und bilden eine Schwebung. Die Frequenz dieser Schwebung (Dopplerfrequenz) ist gegenüber den ursprünglichen Lasersignalen verschoben und beinhaltet Information über die Geschwindigkeit des Tracerpartikels. Diese lässt sich schließlich wie folgt berechnen [4]:

$$U = d_f \cdot f_d = \frac{\lambda}{2 \sin(\Theta/2)} \cdot f_d$$

U...Geschwindigkeit des Tracerpartikels

d_f ...“fringe distance“, Distanz zwischen Bereichen hoher Lichtintensität am Interferenzmuster

f_d ...Dopplerfrequenz

λ ...Wellenlänge der Laserstrahlen

Θ ...Kreuzungswinkel der Laserstrahlen

Streng genommen handelt es sich um eine indirekte Messung der Strömungsgeschwindigkeit, denn es wird lediglich die Geschwindigkeit der mitgerissenen Tracerpartikel gemessen. Diese müssen also klein genug sein (d.h. die Massenkräfte müssen klein genug sein) um der Strömung zu folgen, dürfen aber gleichzeitig eine gewisse Größe nicht unterschreiten, da es sonst aufgrund der Brown'schen Molekularbewegung zu Verfälschungen der Ergebnisse kommen kann. Abbildung 1.3 zeigt den schematischen Aufbau einer LDA-Apparatur.

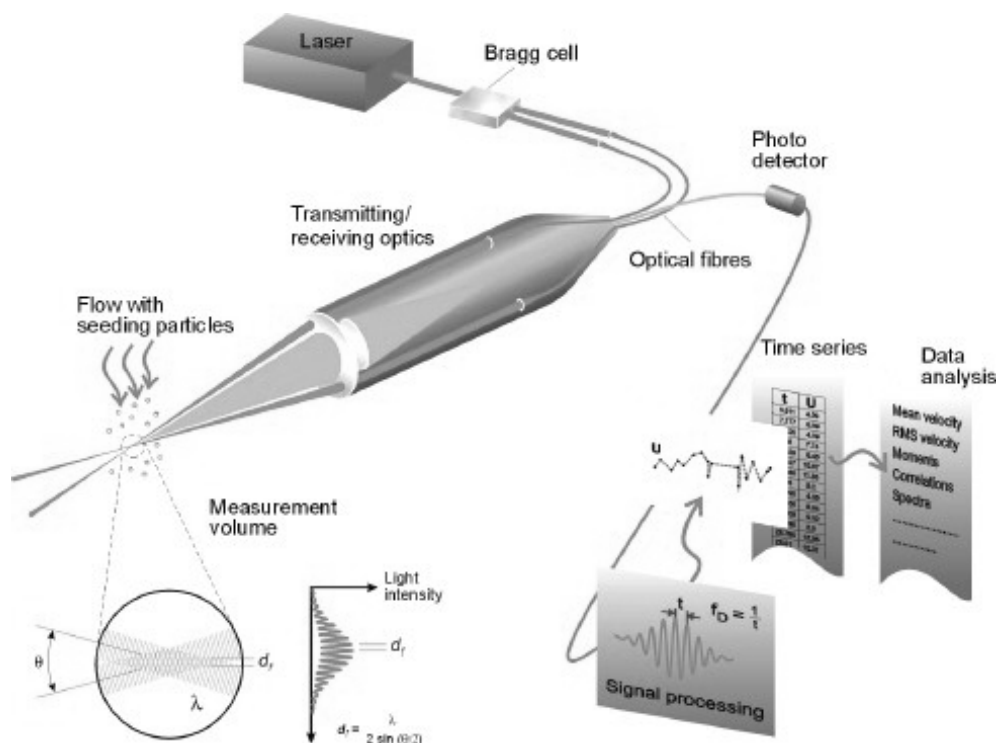


Abbildung 1.3: Schematischer Aufbau, LDA [4].

LDA ist ein *nicht-intrusives*, *nicht-invasives*, optisches Messverfahren mit einer sehr hohen räumlichen und zeitlichen Auflösung (sehr kleines Messvolumen). Es ist möglich, alle drei Geschwindigkeitskomponenten in Echtzeit oder zeitlich gemittelt und ohne Kalibrierung

darzustellen. Die Messdistanz kann von einigen Zentimetern bis zu einigen Metern betragen, weshalb die Methode bei Umströmungen von Schiffen oder Flugzeugen aber auch im industriellen Bereich (bei Kesseln, Rohren, Turbinen, etc.) Verwendung findet. Die Beschränkung auf optisch transparente Systeme stellt jedoch einen entscheidenden Nachteil dieser und anderer optischer Meßmethoden dar.

Eine RDC-Kolonne mit fast identischen Abmessungen¹ wurde bereits 1995 von WEIB [16] mit LDA untersucht. Es liegen also für die spätere Evaluierung von Turbulenzmodellen experimentelle Daten vor.

1.2.2.2.3 Phasen Doppler Anemometrie (PDA)

1974 erweitern DURST & ZARE [5] die LDA-Konfiguration und ermöglichen eine Aussage über den Durchmesser der gemessenen Partikel. Das Funktionsprinzip ist analog zur LDA, mit dem Unterschied, dass ein zusätzlicher Detektor benutzt wird. Die zwei Detektoren empfangen das Signal des gestreuten Lichtstrahles zeitverzögert, es kommt zu einer Phasenverschiebung, welche proportional zum Partikeldurchmesser ist.

Die Anwendbarkeit der PDA ist auf moderate Partikelkonzentrationen und auf annähernd kugelförmige Partikel bzw. Blasen beschränkt. Als *nicht-intrusives* und *nicht-invasives* Messverfahren eignet sich die *Phasen-Doppler-Anemometrie* für die Bestimmung von Hold-up Profilen einer Extraktionskolonne. Für weitere Details sei auf die Literatur verwiesen [6].

1.2.2.2.4 Particle-Image-Velocimetry (PIV)

Die schematische Funktionsweise der *Particle-Image-Velocimetry* soll der Vollständigkeit halber kurz erklärt werden. Eine detailliertere Beschreibung und die konkrete Versuchsdurchführung werden in Kapitel 3.2 behandelt.

Wie auch LDA oder PDA stellt die *Particle-Image-Velocimetry* ein *nicht-intrusives* und *nicht-invasives* Messverfahren dar. Zum Unterschied von LDA und PDA (beide sind punktuell messende Verfahren), ist die *Particle-Image-Velocimetry* in der Lage viele Geschwindigkeitsvektoren (einige 10.000) einer zweidimensionalen Messebene gleichzeitig zu erfassen.

¹ Die Dicke der Stator- und Rotorscheiben war bei WEIB um 0,5 [mm] geringer.

Wie bei den meisten optischen Verfahren werden zunächst Tracerpartikel in die Strömung eingebracht. Ein Laserstrahl wird durch eine Lichtschnittoptik geschickt um die gewünschte Messebene zu beleuchten. Dann werden mindestens zwei kurze Lichtimpulse ausgesandt und die Messebene wird zu diesen Zeitpunkten orthogonal fotografiert. Die Versetzung der beleuchteten Tracerpartikel wird anschließend am Computer ausgewertet und das Geschwindigkeitsfeld (Vektorfeld) kann erstellt werden. PIV erlaubt trotz des hohen Rechenaufwandes Echtzeitmessungen mittels hochauflösender CCD-Kameras und modernster Software. Abbildung 1.4 zeigt den schematischen Aufbau einer PIV-Messstation.

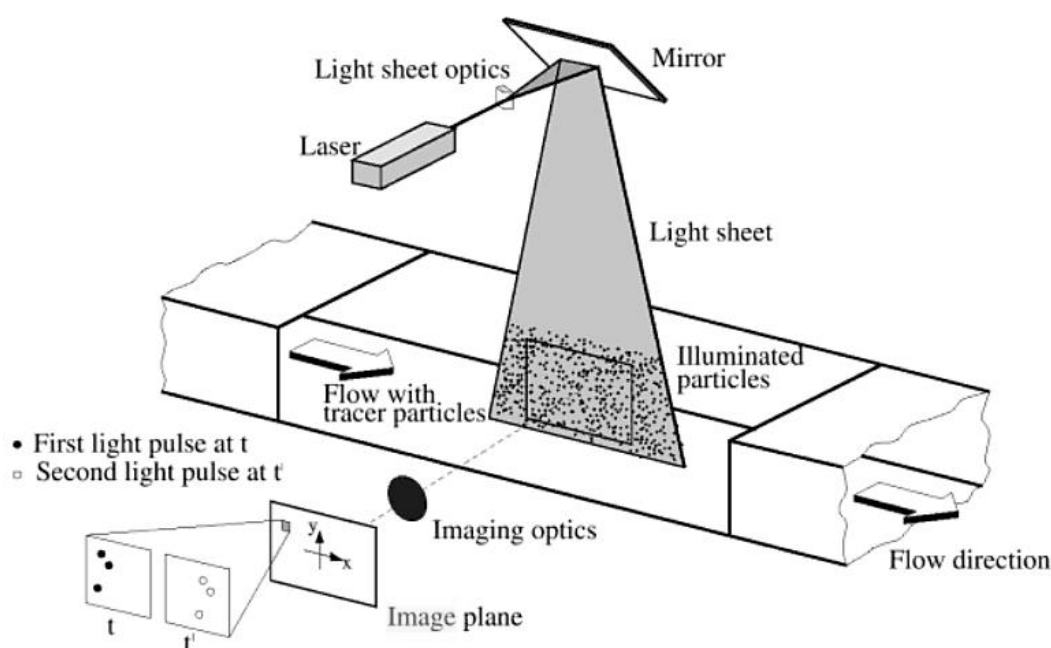


Abbildung 1.4: Funktionsprinzip der *Particle-Image-Velocimetry*, [7].

Entscheidend für eine brauchbare PIV-Messung sind einerseits die Belichtungszeit und andererseits das Zeitintervall zwischen den Lichtimpulsen. Die Belichtungszeit muss kurz genug sein, damit sich keine Strahlen bilden. Das Zeitintervall zwischen den Lichtimpulsen ist primär von der Strömungsgeschwindigkeit abhängig. Es muss aber sowohl lang genug sein um die räumliche Versetzung der Teilchen wahrnehmen zu können als auch kurz genug sein um die Teilchen zu erfassen bevor sie die Messebene in der dritten Raumrichtung verlassen.

Wie auch bei LDA und PDA ist die Größe der Tracerpartikel von entscheidender Bedeutung. Kleine Partikel können sich zwar nur schwer aus der Strömung lösen, reflektieren aber weniger Licht. Deshalb müssen z.B. bei gasförmigen Strömungen Lichtimpulse mit höherer Lichtintensität verwendet werden als bei der Strömung von Flüssigkeiten.

Schließlich spielt noch die Partikelkonzentration eine entscheidende Rolle. Es wird zwischen niedriger, mittlerer und hoher Partikelkonzentration unterschieden: (Abbildung 1.5)

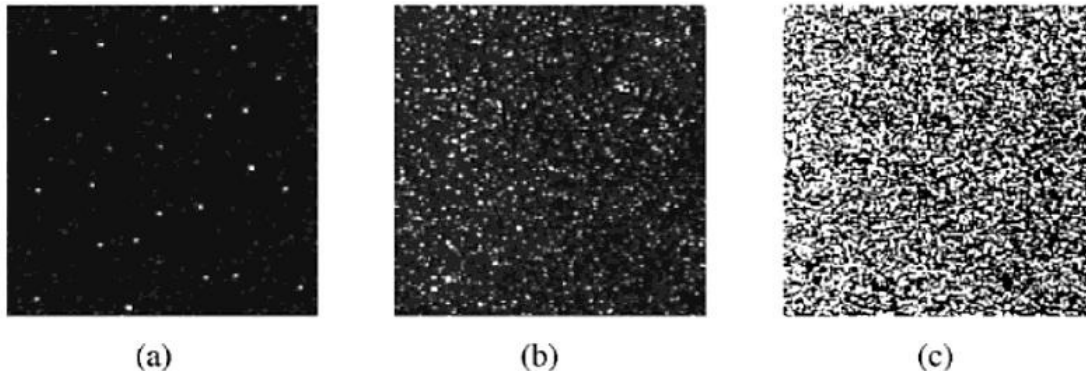


Abbildung 1.5: Verschiedene Tracerkonzentrationen einer PIV-Messung [7].

- a.) **Niedrige Konzentration:** Einzelne Partikel können erkannt und mit PTV (Particle Tracking Velocimetry) verfolgt werden.
- b.) **Mittlere Konzentration:** Einzelne Partikel können zwar erkannt aber nicht verfolgt werden. (Standard PIV Evaluierung)
- c.) **Hohe Konzentration:** Aufgrund von Überschneidungen sind keine einzelnen Partikel mehr erkennbar. Es müssen leistungsfähige und automatisierte Auswertungsalgorithmen (z.B. Kreuzkorrelationstechnik) verwendet werden.

Die PIV-Technologie wurde in den letzten Jahren stetig verbessert und erweitert. Neben der Standard PIV-Messung, die nur zwei Geschwindigkeitskomponenten einer Ebene darstellt (2C-2D), ist es durch stereoskopische Aufnahmen möglich, alle drei Geschwindigkeitskomponenten in der Ebene darzustellen (3C-2D). Moderne holografische Methoden können sogar alle drei Geschwindigkeitskomponenten eines Messvolumens darstellen (3C-3D). Hierfür sei auf die Arbeit von RAFFEL ET AL. [7] verwiesen.

1.2.2.3 Akustische Messverfahren

1.2.2.3.1 Ultrasonic Doppler Velocimetry (UDV)

Die Funktionsweise der UDV ist analog zu den punktuell messenden optischen Messverfahren (LDA, PDA). Anstatt einer Lichtwelle wird jedoch eine Ultraschallwelle ausgesandt. Die Dopplerverschiebung liefert dann die Geschwindigkeitskomponente in Strahlrichtung. Im Gegensatz zu LDA, das die Geschwindigkeit eines einzelnen Tracerpartikels misst, liefert UDV einen gemittelten Wert aller im Messvolumen befindlichen Partikel. UDV kann zudem bei sehr hohen Partikelkonzentrationen und opaken Systemen angewandt werden. Bei Gasströmungen und sehr hohen Geschwindigkeiten kann UDV allerdings nicht verwendet werden. Für weitere Details sei auf die Arbeit von WANG ET AL. [26] verwiesen.

1.2.2.4 Elektrische Messverfahren

1.2.2.4.1 Hitzdrahtanemometrie (CTA, Constant Temperature Anemometry)

Die Hitzdrahtanemometrie stellt ein *intrusives, invasives*, elektrisches Messverfahren dar. Das Messprinzip beruht auf der kühlenden Wirkung des umströmenden Mediums um einen elektrisch beheizten Draht. Der Draht¹ (üblicherweise aus Nickel, Platin oder Wolfram) wird zwischen zwei Stahlspitzen gespannt und unter Spannung versetzt. Er wird durch den durchfließenden elektrischen Strom erhitzt, während er gleichzeitig vom umströmenden Medium abgekühlt wird. Es stellt sich ein thermisches Gleichgewicht ein, bei dem die vom Draht erzeugte Wärme von der Konvektionsströmung abtransportiert wird. Abbildung 1.6 zeigt den schematischen Aufbau einer CTA-Messung.

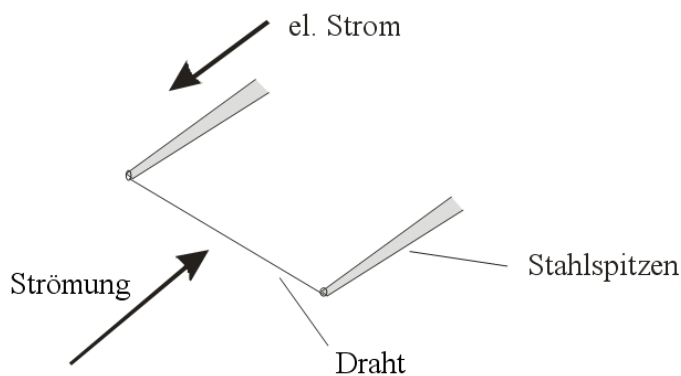


Abbildung 1.6: Schema der Hitzdrahtanemometrie.

L. V. KING [9] stellt 1914 einen Zusammenhang zwischen Strömungsgeschwindigkeit und elektrischer Leistung her:

$$P = R \cdot I^2 = (T_S - T_F) \cdot (A + B \cdot U^{0,5})$$

R...Ohm'scher Widerstand des Drahtes

I...Strom durch den Sensor

T_S...Temperatur des Sensors

T_F...Temperatur des Fluids

U...Strömungsgeschwindigkeit

A,B...Konstanten, abhängig von physikalischen Randbedingungen

¹ Typische Dimensionen: ~ 1 [mm] Länge, ~5 [µm] Durchmesser

CTA kann einen Geschwindigkeitsbereich von einigen cm/s bis zum Überschall erfassen. Des Weiteren zeichnet sich dieses Messverfahren durch die hohe räumliche und zeitliche Auflösung aus, weshalb es in der Turbulenzforschung weit verbreitet ist. Kleinste Turbulenzwirbel von bis zu einem Millimeter können bei hohen Frequenzen von mehreren 100 [kHz] erfasst werden. Außerdem ist es möglich instantane Geschwindigkeits-Informationen aller drei Raumrichtungen zu erhalten [10].

1.2.2.4.2 Electrical Capacitance Tomography (ECT)

ECT stellt ein robustes, nicht-*invasives* und nicht-*intrusives* Werkzeug zum Erfassen von Mehrphasenströmungen dar. Zudem hat es sich unter industriellen Bedingungen (hohe Druck- und Temperaturschwankungen, Vibrationen, etc.) bestens bewährt. Das Funktionsprinzip basiert auf den unterschiedlichen elektrischen Leitfähigkeiten verschiedener Phasen einer Mehrphasenströmung. Es wird versucht die Verteilung der Leitfähigkeit aus Kapazitätsmessungen am Rand eines nicht leitenden Objektes (z.B. Rohres) zu rekonstruieren. Dazu wird ein System aus Elektroden außen an das Objekt angebracht (Abbildung 1.7). Abwechselnd ist eine Elektrode aktiv, während alle anderen geerdet sind und als Empfänger fungieren. Aus der so erhaltenen Leitfähigkeitsverteilung des Dielektrikums (d.h. der Mehrphasenströmung) soll eine grafische Verteilung der Phasen rekonstruiert werden. Hierfür stehen eine Reihe von mathematischen Algorithmen mit

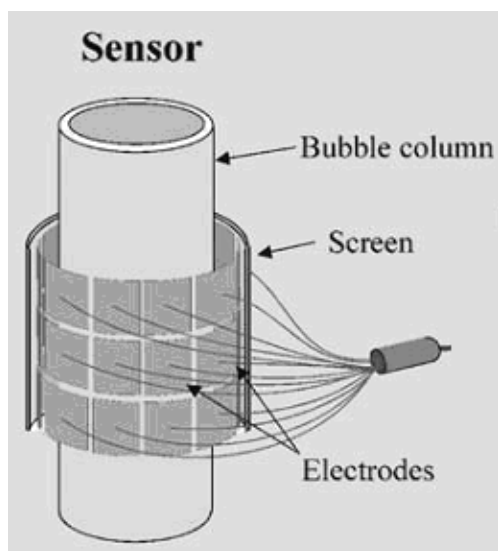


Abbildung 1.7: Schema ECT.

unterschiedlichen Genauigkeiten und unterschiedlichem Rechenaufwand zur Verfügung. Die gewonnenen Erkenntnisse eignen sich nicht für mikroskopische Untersuchung von Tropfenschwärmen oder Ähnlichem, sehr wohl aber für die Bestimmung von Hold-up Profilen über die Kolonnenhöhe. Für weitere Details sei auf die Arbeit von WARSITO & FAN [25] verwiesen.

2 Allgemeine Grundlagen

In diesem Kapitel sollen die physikalischen Grundlagen der Extraktion kurz besprochen werden. Die folgende Zusammenfassung ist bewusst kurz gehalten und ist im Wesentlichen an übersichtliche Lehrbuchinhalte angelehnt [13][14]. Für eine detaillierte Einführung sei auf die entsprechende Literatur verwiesen.

Extraktion bezeichnet ein thermisches Trennverfahren, bei dem ein Wertstoff aus einem festen oder flüssigen Gemisch mit Hilfe eines Lösemittels herausgelöst wird. Der Wertstoff ist in der Aufnehmerphase (Extraktionsmittel, Solvens) besser löslich und geht beim Kontakt der beiden Phasen ohne zusätzlichen Eintrag von thermischer Energie in das Lösemittel über. Die an Wertstoff verarmte Phase wird als *Raffinat*phase bezeichnet, die mit Wertstoff beladene Phase als *Extrakt*phase.

Im Gegensatz zur Rektifikation werden bei der Extraktion nachgeschaltete Prozesse benötigt um den reinen Wertstoff zu erhalten. Das regenerierte Lösemittel wird dann wieder in den Extraktionsprozess zurückgeführt.

Die Extraktion kann zunächst nach dem vorliegenden Stoffsystem eingeteilt werden:

- Fest/Flüssig-Extraktion: Feste oder flüssige Wertstoffe sind in festen Extraktionsgütern eingeschlossen.
- Flüssig/Flüssig-Extraktion: Der Wertstoff ist in einem flüssigen Trägerstoff gelöst.
- Gas/Flüssig-Extraktion: Der Wertstoff (oder Schadstoff) und der Trägerstoff liegen gasförmig vor.
- Hochdruckextraktion (*Destraktion*): In den festen oder flüssigen Extraktionsgütern sind schwerflüchtige oder thermisch instabile Naturstoffe eingeschlossen. Diese werden mit überkritischen Gasen *extrahiert* bzw. *destraktiert*.

Da in dieser Arbeit nur die Flüssig/Flüssig-Extraktion von Bedeutung ist, soll diese näher behandelt werden.

2.1 Die Flüssig/Flüssig Extraktion (Solventextraktion)

Bei der Flüssig/Flüssig-Extraktion müssen Aufnehmer- und Abgeberphase idealerweise ineinander vollständig unlöslich sein, sie müssen eine Mischungslücke bilden. Die Dichte der Phasen muss sich unterscheiden damit sie nach erfolgter Extraktion wieder getrennt werden

können. Entscheidend für die Flüssig/Flüssig-Extraktion ist die intensive Durchmischung der beiden flüssigen Phasen. Nur so kann bei kurzer Kontaktzeit eine große Stoffaustauschfläche zur Verfügung gestellt werden. Entsprechend dem Phasengleichgewicht wird der Wertstoff zwischen den beiden Phasen aufgeteilt.

Da in dieser Arbeit nur der einphasige Betriebszustand ohne Stoffaustausch untersucht und simuliert wird und der Schwerpunkt der Arbeit auf hydrodynamischen Untersuchungen liegt, soll die Berechnung und Beschreibung von Flüssig/Flüssig-Gleichgewichten nicht weiter behandelt werden. Es sei auf die Literatur verwiesen [13][14][15].

Die Flüssig/Flüssig-Extraktion findet als Alternative und Ergänzung zur Rektifikation immer weitere Verbreitung, da sie einerseits bei Umgebungsbedingungen und andererseits mit relativ geringem Energieeinsatz durchgeführt werden kann. Die Solventextraktion ist der Rektifikation vorzuziehen, wenn:

- die Siedepunktdifferenz der beiden zu trennenden Komponenten gering ist (bzw. die relative Flüchtigkeit $\alpha_{ij} \approx 1$) und damit eine sehr große Zahl theoretischer Trennstufen nötig wäre;
- ein azeotropes Gemisch vorliegt ($\alpha_{ij} = 1$) und eine destillative Trennung nicht möglich ist;
- die Komponenten thermisch empfindlich sind (z.B: Naturstoffe) oder unter höheren Temperaturen chemisch reagieren und störende Nebenprodukte bilden;
- die Komponenten bei sehr hohen oder sehr tiefen Temperaturen sieden;
- mehrere Komponenten unterschiedlicher Siedepunkte gleichzeitig abgesondert werden sollen (z.B: Aromatenextraktion);
- der zu trennende Wert- bzw. Schadstoff in sehr geringen Konzentrationen vorliegt (z.B: Phenolextraktion aus Abwässern);

Neben der Wahl des geeigneten Lösungsmittels ist die Durchmischung der Phasen der vielleicht wichtigste Aspekt der Solventextraktion. Die Durchmischung stellt ein hydrodynamisches Problem dar, bei dessen Lösung der Kreativität des Konstrukteurs keine Grenzen gesetzt sind. Die Funktionsweise und die konstruktiven Merkmale einiger industriell weit verbreiteter Extraktoren soll im folgenden Kapitel beschrieben werden.

2.2 Bauarten von Extraktionsapparaten

Verglichen mit einem Gas/Flüssig-System ist das Vermischen und Trennen zweier Flüssigkeiten, auf Grund von Rückvermischungseffekten, sehr viel schwieriger. Der Trennaufwand für eine theoretische Trennstufe ist folglich wesentlich höher als beispielsweise bei der Rektifikation. Daher werden industrielle Extraktoren typischerweise mit nur 10 -15 Trennstufen konstruiert.

Das Ziel bei der Konstruktion eines Extraktionsapparates ist, den Stoffaustausch zu maximieren. Der von der Raffinatphase in die Extraktphase übergehende Wertstoff kann wie folgt berechnet werden [13]:

$$\Delta N_{WS} = A \cdot k^R \cdot (x^R - x^{*R}) \cdot \Delta t,$$

mit

ΔN_{WS} ...Stoffmenge des ausgetauschten Wertstoffes WS, [kmol];

A...Grenzfläche, Stoffaustauschfläche, [m^2];

k^R ...Stoffdurchgangskoeffizient bezogen auf die Raffinatphase, [kmol/(s m^2)];

x^R ...Molenbruch des Wertstoffes WS in der Raffinatphase, [-];

x^{*R} ...Molenbruch des Wertstoffes WS in der Raffinatphase bei Phasengleichgewicht, [-];

Δt ...Kontaktzeit zwischen den Phasen, [s].

Aus obiger Gleichung können folgende Anforderungen an einen Extraktor gestellt werden:

- **möglichst große Phasengrenzfläche A:** Erwünscht ist die schnelle Bildung möglichst kleiner Tropfen, die möglichst homogen in der kontinuierlichen Phase verteilt sein sollten. Die turbulente Grenzfläche sollte ständig erneuert werden (Tropfenzerfall), beispielsweise durch rotierende Einbauten, Pulsation oder Vibration;
- **möglichst hoher Stoffdurchgangskoeffizient k^R :** Dies ist bei hohen Relativgeschwindigkeiten (bzw. starker Turbulenz) der Phasen möglich;
- **möglichst große Triebkraft ($x^R - x^{*R}$):** Sie kann durch die Phasenführung (Gegenstrom) und das Verhindern von Rückvermischungen (Statorscheiben) realisiert werden. Ebenso ist die optimale Rührintensität entscheidend, bei zu hoher Rührerleistung nimmt die Rückvermischung zu;
- **möglichst lange Kontaktzeit Δt** bei intensivem Kontakt,
- **möglichst vollständige Phasentrennung** nach dem Kontakt durch Gravitation oder Zentrifugalkraft.

Die obigen Anforderungen werden in den zahlreichen Ausführungen von Extraktionskolonnen unterschiedlich gut erfüllt. Grundsätzlich können diese nach der Art des Energieeintrags eingeteilt werden:

- **Statisch** (kein mechanischer Energieeintrag): Füllkörper-, Siebboden-, Packungskolonne;
- **Pulsierend**: Füllkörper-, Siebboden-, Packungs-, Karr-Kolonne;
- **Gerührt**: RDC, ARD, QVF-Rührzellenextraktor, Kühni-Kolonne.

Aufgrund ihrer Ähnlichkeit¹ zur RDC-Kolonne sollen einige industriell weit verbreitete Gegenstrom-Extraktionskolonnen mit rotierenden Einbauten näher beschrieben werden. Auf statische und pulsierende Kolonnen soll nicht weiter eingegangen werden.

Charakteristisch für gerührte Gegenstromkolonnen sind eine hohe Trennwirkung und große Durchsätze. Der Energieeintrag (Dispergierleistung) erfolgt durch Rührorgane (Scheiben-, Blattrührer, etc.) die üblicherweise alle an einer gemeinsamen zentralen Rotorwelle angebracht sind. Die auf diese Weise zugeführte Energie dient nicht zur Förderung des Phasengegenstroms sondern zur verbesserten Tropfenneubildung, zur Oberflächenenergieerneuerung und folglich zu einem besseren Stofftransport (insbesondere bei Systemen mit hoher Grenzflächenspannung).

Statorelemente (Scheiben, Packungen, gelochte Bleche) unterteilen die Kolonne in Kammern (*Compartments*). Sie sollen dabei nicht, wie bei einer Packungskolonne, die Austauschoberfläche zur Verfügung stellen sondern die axiale Rückvermischung minimieren, welche sich wiederum negativ auf die Triebkraft ($x^R - x^{*R}$) und somit auf die Trennwirkung auswirkt. Des Weiteren sollen die Einbauten die Rotation einer stehenden Flüssigkeitssäule in der Kolonne weitgehend minimieren.

In den folgenden Unterkapiteln sollen die technischen Eigenschaften und die konkreten konstruktiven Unterschiede von gängigen gerührten Gegenstrom-Extraktionskolonnen behandelt werden.

¹ im Bezug auf die in dieser Arbeit durchgeführte Simulationsrechnung.

2.2.1 Rotating Disc Contactor (RDC)

Das Funktionsprinzip und der Aufbau einer RDC-Kolonne sollen kurz vorgestellt werden, bevor das komplexe Strömungsverhalten in den späteren Kapiteln ausführlich behandelt wird.

Der Energieeintrag bzw. die Phasendurchmischung erfolgt durch Scheibenrührer.

Sie beschleunigen die beiden axial strömenden Phasen radial nach außen. Es bilden sich Wirbel aus, in denen die beiden Phasen durchmischt werden. Ringförmige Statorscheiben unterteilen die Kolonne in einzelne Kammern (*Compartments*) und verringern die axiale Rückvermischung.

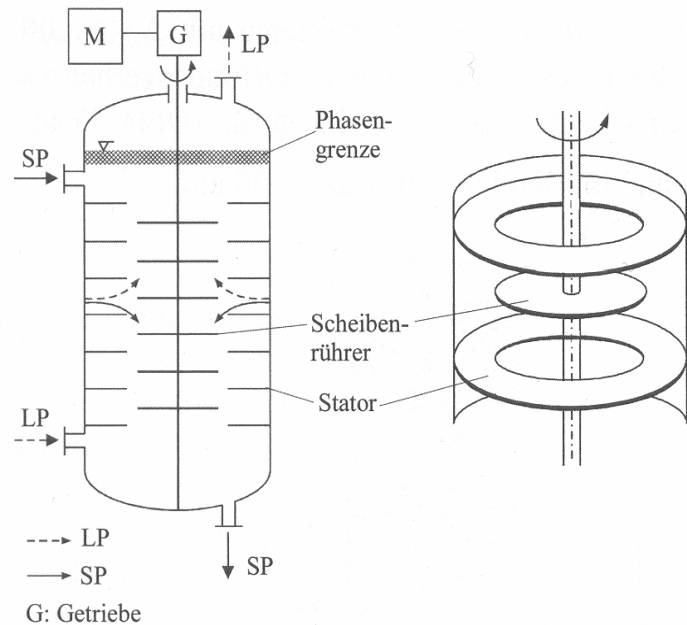


Abbildung 2.1: Schema einer RDC-Kolonne, [13].

Aufgrund der einfachen Bauweise, der einfachen Wartung und der hohen Durchsätze ist die RDC-Kolonne heute noch industriell weit verbreitet (Erdölindustrie, Phenolextraktion aus Abwässern, Lösungsmittelrückgewinnung, etc.). Verglichen mit den übrigen Bauformen ist die Trennwirkung einer RDC-Kolonne jedoch eher gering.

Tabelle 2.1: Technische Daten - RDC, [13].

Kolonnen Durchmesser:	$\leq 8 [m]$
Bauhöhe:	$\leq 12 [m]$
Max. Querschnittsbelastung:	$\approx 40 [m^3/(m^2 h)]$
Trennwirkung ¹ :	$0,5 - 1 [m^{-1}]$
Dichtedifferenz:	$\geq 50 [kg/m^3]$
max. Durchsatz:	$\approx 2000 [m^3/h]$

¹ Anzahl der theoretischen Böden pro Meter Kolonnenhöhe.

2.2.2 Asymmetric Rotating Disc Contactor (ARD)

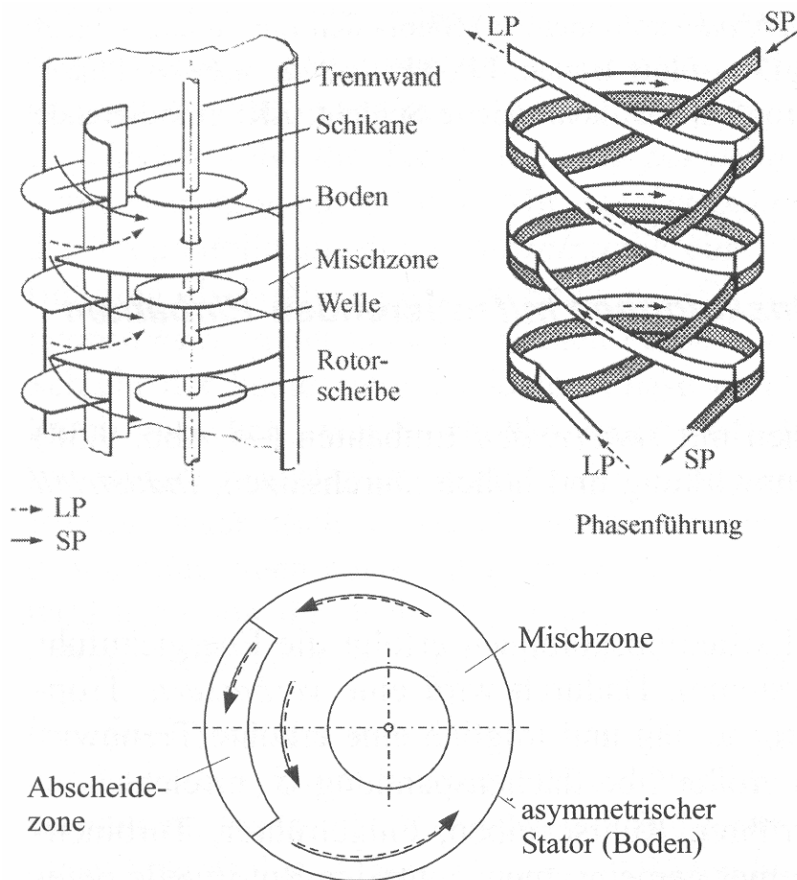


Abbildung 2.2: Schema eines Asymmetric Rotating Disc Contactors, [13].

Die Energiezufuhr erfolgt beim ARD, analog zum RDC, über Scheibenrührer. Der asymmetrische Statorteil unterscheidet sich aber wesentlich: Die eingebauten vertikalen Schikanen (Abbildung 2.2) trennen den Extraktionsraum in Misch- und Absetzbereiche.

In den Absetzbereichen findet der Phasentransport und die Abscheidung statt.

Verglichen mit dem RDC weist der ARD kleinere Durchsätze, dafür aber eine bessere Trennwirkung auf.

Tabelle 2.2: Technische Daten - ARD, [13].

Kolonnendurchmesser:	$\leq 4 [m]$
Max. Querschnittsbelastung:	$\approx 20 [m^3/(m^2 h)]$
Trennwirkung:	$1 - 3 [m^{-1}]$
Dichtedifferenz:	$\geq 10 [kg/m^3]$
max. Durchsatz:	$\approx 250 [m^3/h]$

2.2.3 Scheibel-Kolonnen, Oldshue-Rushton-Kolonnen

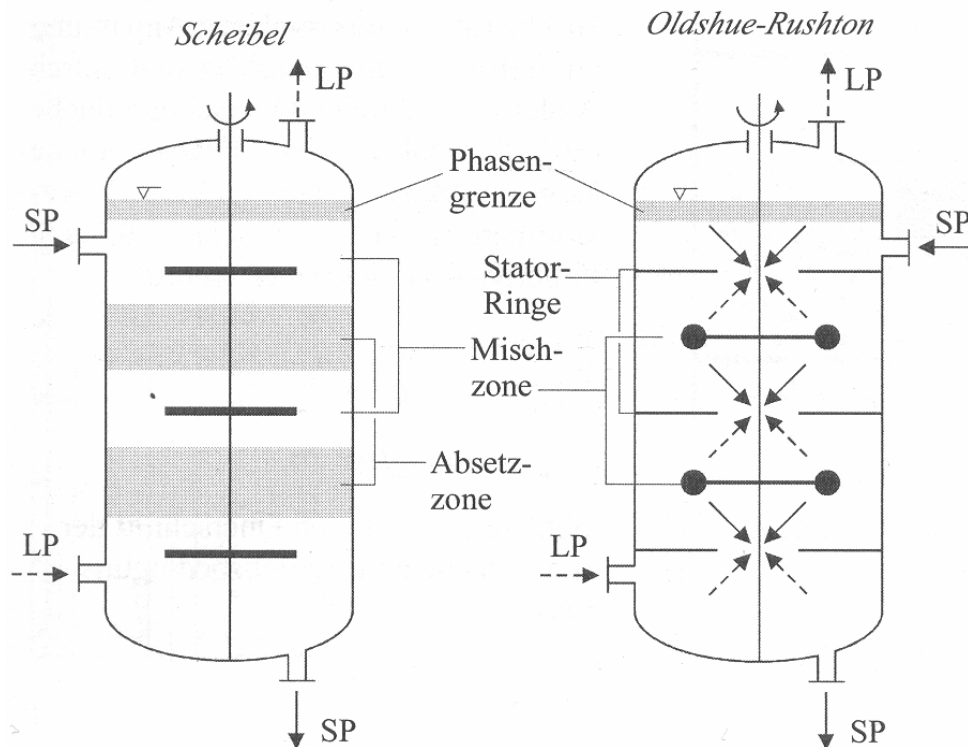


Abbildung 2.3: Scheibel-Kolonnen (links), Oldshue-Rushton-Kolonnen (rechts), [13].

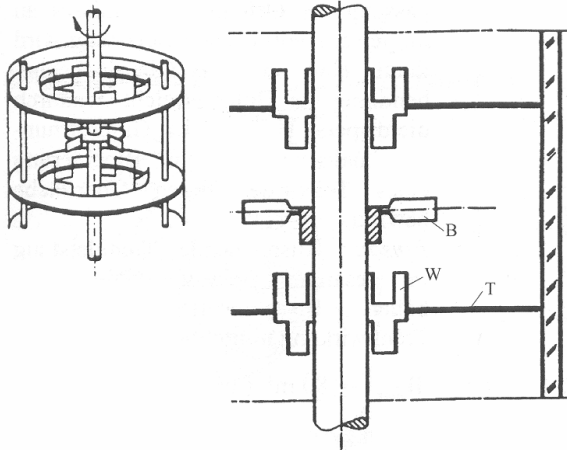
Scheibel-Kolonnen:

Die Phasendurchmischung erfolgt wie beim RDC mittels Blattrührern. Zwischen den Mischzonen fungieren Füllkörper- oder Drahtgewebepackungen als Beruhigungszonen. Die Trennwirkung liegt bei $3-5 [m^{-1}]$ [13].

Oldshue-Rushton-Kolonnen:

Anstatt von Scheibenrührern werden bei der *Oldshue-Rushton*-Kolonne Turbinenrührer verwendet. Diese beschleunigen das Fluid zur Kolonnenachse und erlauben somit engere Durchtrittsöffnungen zwischen den *Compartments*. Dies führt zu geringeren Rückvermischungen und damit zu einer erhöhten Trennwirkung. Bei engen Durchtrittsöffnungen liegt diese bei $1 - 3 [m^{-1}]$, bei weiten Öffnungen in den Statorringen ist die Trennwirkung ähnlich jener der RDC-Kolonnen ($0,8 - 1 [m^{-1}]$). Die Höhe der *Compartments* ist in etwa so groß wie der Kolonnendurchmesser, also deutlich größer als beim RDC.

2.2.4 QVF-Rührzellen-Extraktor (RZE)



B : Blattrührer mit 4 Elementen
T : Trennscheibe
W: mäanderförmiges Wehr

Beim RZE sind an den Innenseiten der Statorscheiben Wehre angebracht. Diese begünstigen die Kanalisierung der beiden Phasen. Die Bereiche hinter dem Wehr fungieren als Beruhigungs- bzw. Entmischungszonen. Die schwere Phase fließt durch die Öffnung im oberen Wehrteil nach unten während die leichte Phase durch die Öffnung im unteren Wehrteil nach oben fließt. Diese Trennung der Phasen verringert die Rückvermischung und erlaubt höhere Durchsätze.

Abbildung 2.4: Rührzellen-Extraktor, [13].

Tabelle 2.3: Technische Daten - RZE, [13].

Kolonnendurchmesser:	$\leq 1 [m]$
Max. Querschnittsbelastung:	$\approx 15 [m^3/(m^2 h)]$
Trennwirkung:	$5 - 8 [m^{-1}]$

2.2.5 Kühni-Kolonne

Die *Compartments* werden von Zentrifugalrührern durchmischt, während gelochte Statorscheiben die einzelnen Rührzonen (*Compartments*) von einander abgrenzen. Die freie Querschnittsfläche der gelochten Bleche wird an den Betriebszustand angepasst. Durch diese Konfiguration werden Mischzone und Absetzzone im gleichen *Compartment* realisiert, was eine höhere Trennwirkung zur Folge hat.

Tabelle 2.4: Technische Daten - Kühni-Kolonne, [13].

Kolonnendurchmesser:	$\leq 3 [m]$
Max. Querschnittsbelastung:	$\approx 50 [m^3/(m^2 h)]$
Trennwirkung:	$\leq 10 [m^{-1}]$
max. Durchsatz:	$\approx 350 [m^3/h]$

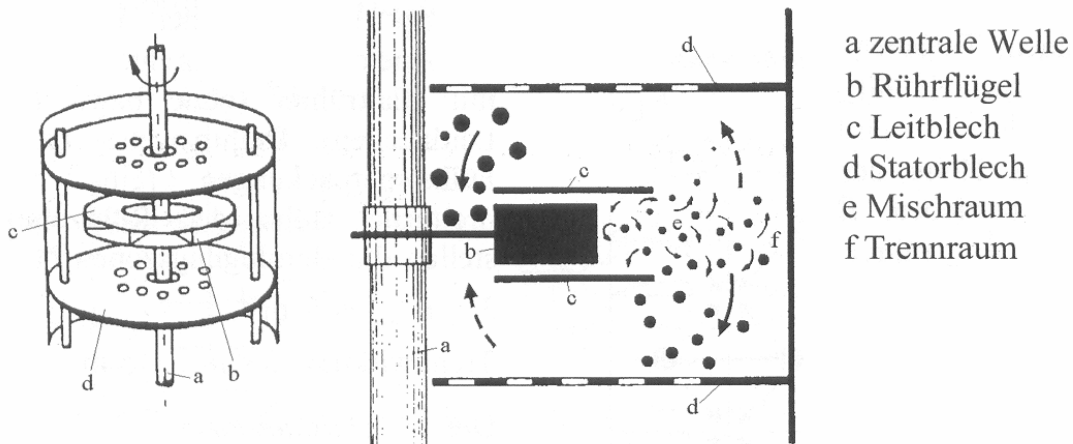


Abbildung 2.5: Kühni-Kolonne, [13].

2.2.6 EC (Enhanced Coalescence)-Extraktionskolonne

(System *Hartland, Steiner*)

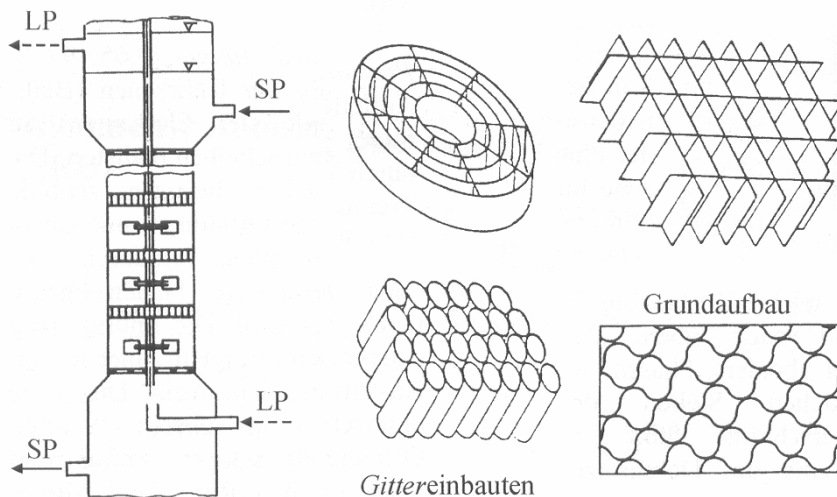


Abbildung 2.6: EC-Kolonne, [13].

Die von Schaufelelementen durchrührten Mischzonen sind durch Gittereinbauten von einander getrennt. Diese Einbauten aus Dünoblechen begünstigen die Koaleszenz und fördern die Axialströmung, sie wirken als Beruhigungszonen. EC-Kolonnen sind bezüglich der Querschnittsbelastung sehr flexibel und weisen im gesamten Belastungsbereich gute Trennleistungen auf.

Tabelle 2.5: Technische Daten - EC-Kolonne, [13].

Max. Querschnittsbelastung:	$\approx 80 [m^3/(m^2 h)]$
Trennwirkung:	$2 - 6 [m^{-1}]$

2.2.7 Selbststabilisierender Hochleistungs-Extraktor (SHE)

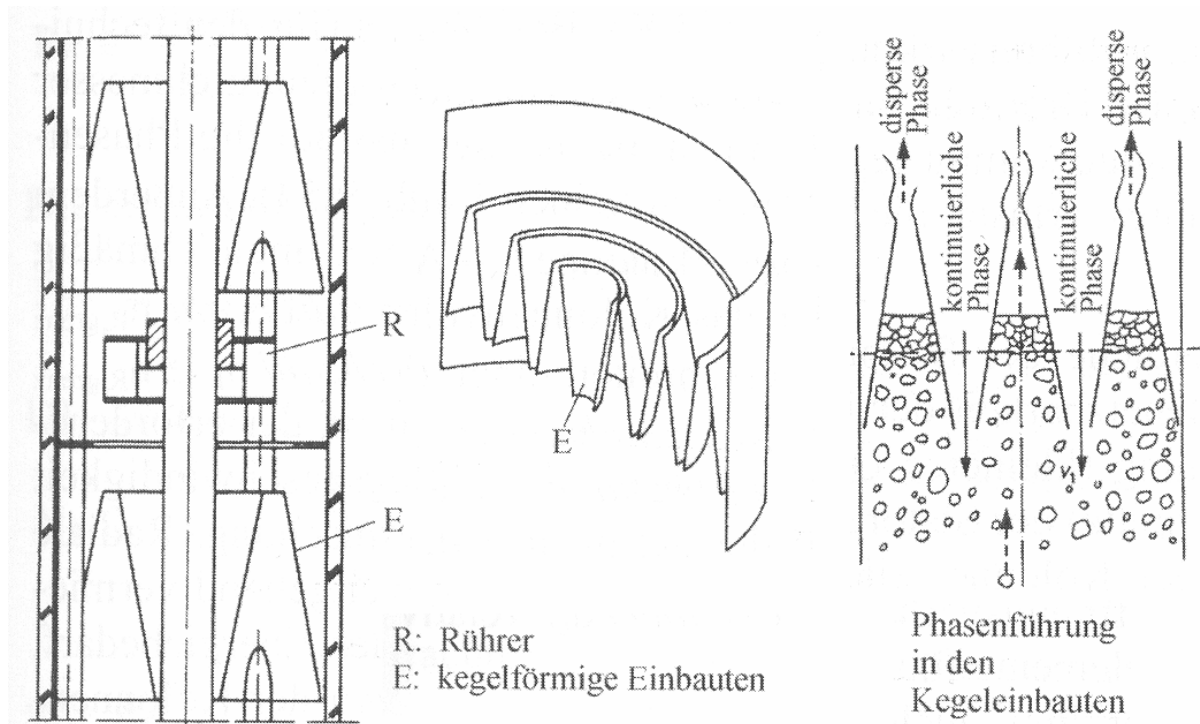


Abbildung 2.7: SHE-Extraktor, [13].

Beim SHE-Extraktor werden die Rührzonen (Turbinenrührer) von rotationssymmetrischen kegelförmigen Blechen abgegrenzt. Beiden Phasen werden dadurch eigene Kanäle zur Durchströmung geschaffen (Abbildung 2.7), für beide Phasen werden die Kanäle in Strömungsrichtung enger und wirken wie Trichter. Die Drehzahl und der Durchsatz müssen so eingestellt werden, dass sich die disperse Phase nicht über den unteren Trichterrand aufstaut und in die Eintrittsöffnungen der kontinuierlichen Phase eindringt.

Der SHE-Extraktor war für hohe Querschnittsbelastungen (bis zu $\approx 100 \text{ [m}^3/(\text{m}^2 \text{ h})]$) vorgesehen, die Trennwirkung liegt bei $\approx 3 \text{ [m}^{-1}]$.

3 Experimenteller Teil

3.1 Beschreibung der untersuchten RDC-Kolonnen

Für die hydrodynamische Untersuchung mit *Particle-Image-Velocimetry* wurde eine Laborkolonnen mit 150 [mm] Durchmesser und einer aktiven Höhe von 2940 [mm] verwendet. Die Kolonnen wurde in der parallel zu dieser Arbeit entstandenen Diplomarbeit von PREISACK neu aufgebaut und für die ausführliche Vermessung der Verweilzeitverteilung, sowie die Messung mit PIV optimiert. Die Rotor- und die Statorscheiben bestehen aus Edelstahl, die Außenwand aus Glas. Die Statorscheiben werden von jeweils 4 Abstandshülsen mit 6 [mm] Durchmesser getragen. Die Gesamthöhe der Kolonnen beträgt etwa 6 [m]. Alle übrigen Abmessungen sind in Abbildung 3.1 dargestellt, nähere Angaben zum Aufbau sind der Arbeit von PREISACK [31] zu entnehmen.

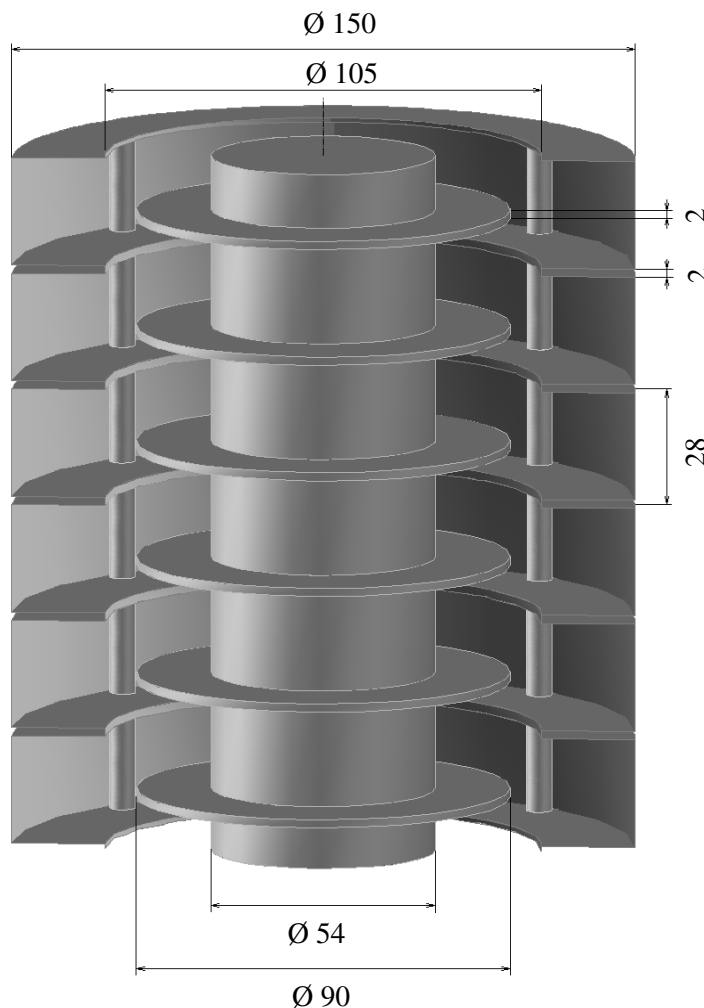


Abbildung 3.1: Abmessungen der verwendeten RDC-Kolonnen in [mm].

3.2 Versuchsaufbau, Particle-Image-Velocimetry (PIV)

Wie bereits in Kapitel 1.2.2.2.4 erwähnt, besteht eine kommerzielle PIV-Apparatur typischerweise aus folgenden Komponenten:

- Hochgeschwindigkeitskamera (CCD Chip)
- Laser (z.B. Nd:YAG oder Nd:YLF)
- Linse (streut den Lichtstrahl, um die gewünschte Ebene zu beleuchten)
- Trigger (koordiniert die Beleuchtung mit der Kamera)
- Seeding-Partikel
- Software zur Auswertung der Bilderpaare

Kommerzielle PIV Systeme, die zur hochauflösenden Darstellung von turbulenten Vorgängen benutzt werden (z.B.: Einspritzvorgang im Motor), müssen mit extrem kurzen Belichtungszeiten arbeiten und benutzen daher gepulste Laser als Lichtquelle. Solche Laser/Trigger-Meßsysteme bewegen sich in der Preisklasse vom einigen 10.000 Euro. Da für die untersuchten Strömungszustände im RDC eine Auflösung von 1000 Bildern/s ausreichend ist kann eine Kaltlichtquelle verwendet werden. Die für diese PIV-Messung verwendeten Komponenten sollen näher behandelt werden.

3.2.1 Beleuchtung

Eine Kaltlichtquelle mit sehr starker Lichtleistung wurde in Kombination mit einer schmalen Schlitzblende (Kapitel 3.3) verwendet. Die untersuchte Ebene wurde kontinuierlich beleuchtet, es war also nicht nötig die Kamera mit der Belichtung über einen *Trigger* zu koppeln.



Abbildung 3.2: Metall-Halid Kaltlichtquelle, [11].

Tabelle 3.1: Technische Daten – Beleuchtung, [11].

Typ:	Kaltlichtquelle
Leistung:	270 [W] Metall-Halid
Farbtemperatur:	5600 [K]
Verbindung:	250 [cm] Flüssigkeitslichtleiter mit Lichtbündelungslinse
Abmessungen:	440 x 210 x 390 [mm], 1,7 [kg]
Betriebsspannung:	230 [V] Wechselspannung

3.2.2 Kamera

Zur Aufnahme der Bilderpaare wurde die Hochgeschwindigkeitskamera *Motionscope M-3* (Abbildung 3.3) der Firma *IS – Imaging Solutions* verwendet. Die aufgezeichneten Bilddaten wurden über ein *CameraLink*-Kabel direkt in den Arbeitsspeicher des Kontrollrechners abgelegt, da die Kamera über keine eigenen Speicherchips verfügt.

**Abbildung 3.3: Kamera – Motionscope M-3, [11].****Tabelle 3.2: Technische Daten - Kamera**

Bezeichnung:	Motionscope M-3
Sensorauflösung:	1.280 x 1.024 Pixel @ 520 fps, 1,3 Megapixel
Pixelgröße:	12 [μm]
Farbtiefe:	10-bit
Objektiv-Anschluss:	C-Mount
Abmessungen:	75 x 55 x 55 [mm], 320 [g]
Lichtempfindlichkeit:	3000 [ASA] (mono), 1000 [ASA] (color) ¹

¹ Die verwendete Kamera konnte keine Farben aufzeichnen.

Tabelle 3.3: Technische Daten - Optik

Brennweite:	35 [mm]
Blende:	F 1.4-16
Bildwinkel:	20.9° x 15.8°
Abmessungen:	Ø 42 x 43 [mm], 130 [g]

3.2.3 Seeding-Partikel

Die Wahl geeigneter *Seeding*-Partikel ist ein fundamentaler Bestandteil jedes PIV-Experimentes. Die Dichte der Partikel soll möglichst der Dichte des zu untersuchenden Mediums (Wasser) entsprechen, da sonst der Einfluss von Auftriebskräften verfälschte Ergebnisse liefert. Außerdem ist die mittlere Größe (eigentlich Masse) der Partikel von zentraler Bedeutung. Nur wenn die Partikel „klein“ (leicht) genug sind können sie dem Strömungsverlauf folgen ohne auf Grund von Massenkraften (bzw. Trägheitskräften) aus der Strömung gerissen zu werden. Der dritte wesentliche Faktor ist die Lichtreflexion der Partikel. Je stärker die Partikel das Licht reflektieren, um so kleiner dürfen diese sein.

Es ist außerdem selbsterklärend, dass die Partikel chemisch inert sein sollten.

Erfahrungsgemäß sind Polyamid-Partikel (PSP, *Polyamid Seeding Particles*) sehr gut für Anwendungen mit Wasser geeignet [12]. Tabelle 3.4 gibt eine Übersicht über einige wichtige Eigenschaften der verwendeten Partikel.

Tabelle 3.4: Technische Daten – Seeding-Partikel.

Bezeichnung:	Nylon 12, Polyamid 12
CAS No.:	24937-16-4
Synonyme:	Poly[amino(1-oxo-1,12-dodecanediyl)]; Polylauryllactam
Dichte:	1,03 [g/cm ³] bei Raumtemperatur
Mittlerer Partikeldurchmesser:	50 [µm]
Korngrößenverteilung:	30 [µm] – 70 [µm]
Schmelzpunkt:	175°[C]
Brechzahl:	1,5
Form:	nicht exakt kugelförmig, aber rund

3.3 Versuchsdurchführung

Die Anwendung von optischen Messverfahren auf zylindrische, mit Flüssigkeit gefüllte Gefäße ist nicht trivial. Die unterschiedlichen Brechungsindices der beiden gekrümmten optischen Grenzflächen (Glas-Wasser an der Kolonnen-Innenseite, Glass-Luft an der Außenseite) führen zwangsweise zu einem verzerrten Bild. Aus diesem Grund wurde ein Schauglas an die Außenwand der Kolonne geklebt und mit Wasser gefüllt (Abbildung 3.4).

Die beiden gekrümmten Grenzflächen haben dadurch den gleichen Brechungsindex, die „neue Außenwand“ der Kolonne ist eben. Es kommt also zu keinen Verzerrungen wenn man orthogonal auf das Schauglas blickt bzw. fotografiert. Das zu untersuchende *Compartment* wurde nach zwei Gesichtspunkten ausgesucht: Das Strömungsprofil soll einerseits im untersuchten *Compartment* bereits völlig ausgebildet sein, um in der anschließend durchgeführten Simulation mit periodischen Randbedingungen vergleichbar zu sein (Kapitel



Abbildung 3.4: Versuchsanordnung – PIV.

4.1.2.4). Das *Compartment* soll sich also möglichst in der Mitte der Kolonne bzw. in der Mitte des mit Anschlussflanschen versehenen Glasschusses befinden. Letzteres Kriterium schließt vor allem den Einfluss von Totzonen auf das lokale Strömungsprofil aus. Das zweite Kriterium war die radiale Oszillation der Welle. Es wurde ein *Compartment* gewählt bei dem die Schwingung der Welle mit freiem Auge am geringsten schien¹. Rund um das Schauglas

¹ Die radiale Schwingung der Welle betrug im untersuchten *Compartment* etwa 1 [mm].

wurde die Kolonne mit schwarzem opakem Karton abgedunkelt, um Lichtreflexionen an der Welle und an den Statorringen möglichst gering zu halten. An dieser Stelle wurden die Nachteile einer Kaltlichtquelle gegenüber einem Laser deutlich. Der Lichtschlitz darf nicht beliebig schmal gewählt werden, da sonst die Partikel nicht genug Licht reflektieren um brauchbare Bilderpaare zu erhalten. Wird der Schlitz verbreitert, werden auch die Lichtreflexionen an der Welle und der Abstandshülse größer und führen zum Informationsverlust in den Bildern. Eine Kompromisslösung von 1,5 [mm] Schlitzbreite wurde schließlich gewählt. Es wurde also genau genommen ein sehr dünnes Volumen, das zur Welle hin etwas breiter wurde, belichtet. Abbildung 3.5 zeigt den Blick auf das untersuchte *Compartment*¹.

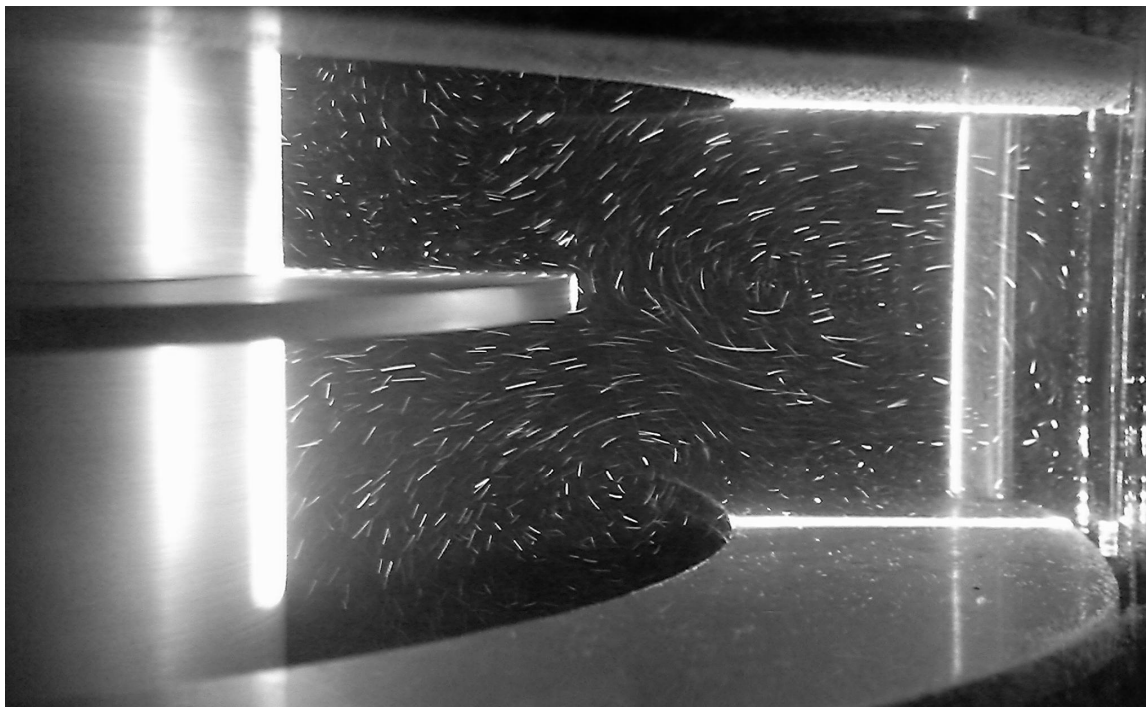


Abbildung 3.5: Blick durch das Schauglas auf die beleuchtete Ebene im *Compartment*.

Wie in Abbildung 3.5 ersichtlich ist, wurde die Lage der Lichtebene so gewählt, dass der Einfluss der Statorhülse möglichst klein wird. Bezogen auf die Drehrichtung der Welle (gegen den Uhrzeigersinn), kommt es direkt hinter der Statorhülse zu Verwirbelungen in tangentialer Richtung. Wie später in der Simulation ersichtlich (Kapitel 4.3.1), sind diese Wirbel vor der nächsten Statorhülse wieder abgeklungen. Die Ergebnisse dieser Messebene sind daher besser mit 2D-Simulationen vergleichbar, bei der die störungsfreie Strömung

¹ Die Aufnahme stammt nicht von der Hochgeschwindigkeitskamera sondern von einer 5MP-Handykamera. Die lange Belichtungszeit lässt die später erhaltenen Strömungsvektoren vermuten.

völlig rotationssymmetrisch ist. Nachteilig an der Wahl dieser Position war jedoch die starke Lichtreflexion im Bereich der Abstandshülse. Diese überstrahlte die Lichtreflexion der Tracerpartikel, sodass an dieser Stelle keine Informationen über die Geschwindigkeit herausgelesen werden konnten.

Bevor die Aufnahme der Bilderpaare mit der Hochgeschwindigkeitskamera erfolgen konnte, mussten die Tracerpartikel in die Strömung eingebracht werden. Diese wurden zunächst in einem Becherglas in Wasser dispergiert bevor sie mit einer handelsüblichen Spritze in den Wasser-Tank der Kolonne injiziert wurden¹. Für den Versuch wurde der Volumenstrom der kontinuierlichen Phase in Kreis geführt, die Tracerpartikel verteilten sich also nach kurzer Zeit auf den gesamten Wasserkreislauf der Kolonne. Es hat sich gezeigt, dass die Partikelkonzentration in der beleuchteten Bildebene kontinuierlich mit Fortdauer des Experimentes, aufgrund von schwachen Absetzeffekten, sinkt. Es musste also zwischen den Aufnahmen immer wieder nachinjiziert werden um eine gleich bleibende Partikelkonzentration zu gewährleisten.

Die Bilderpaare wurden bei drei verschiedenen Volumenströmen mit jeweils vier Drehzahlen durchgeführt. Pro Einstellung wurden 5000 Bilder bei einer Frequenz von 1000 [Hz] aufgenommen. Es wurde also das Strömungsverhalten von insgesamt 5 Sekunden untersucht. Um mögliche niederfrequente Schwingungen der Strömung auszugleichen, wurden die 5 Sekunden Versuchszeit nicht in einer Serie erfasst. Es wurden 10 Bilderserien zu je 500 Bildern (0,5 Sekunden) gemacht, dazwischen wurden Pausen von einigen Minuten eingelegt². Eine solche Serie von 500 Bildern kann demnach als zufällige Stichprobe verstanden werden. Nach Änderung des Volumenstromes bzw. der Wellendrehzahl wurde jeweils 15 Minuten gewartet bis sich ein stationärer Strömungszustand in der Kolonne einstellen konnte und die oben beschriebene Prozedur wurde wiederholt bis alle 12 Einstellungen aufgezeichnet waren.

Tabelle 3.5: Versuchsmatrix, PIV.

	130 [rpm]	200 [rpm]	300 [rpm]	400 [rpm]
100 [l/h]	10 x 500 Bilder	10 x 500 Bilder	10 x 500 Bilder	10 x 500 Bilder
120 [l/h]	10 x 500 Bilder	10 x 500 Bilder	10 x 500 Bilder	10 x 500 Bilder
190 [l/h]	10 x 500 Bilder	10 x 500 Bilder	10 x 500 Bilder	10 x 500 Bilder

¹ Etwa 5 [g] an Tracerpartikel waren für den gesamten Versuch ausreichend.

² Die Pausen zwischen den Bilderserien einer Einstellung waren bewusst von unterschiedlicher Länge.

3.4 Auswertung der Bilder

Die Auswertung der 60.000 Bilder erfolgte mit dem *Open-Source* Paket *MatPIV*. Es ist ein plattformunabhängiges Modul für *Matlab* und erlaubt deshalb, im Gegensatz zu kommerzieller Software, viele Veränderungen und Modifikationen.

Vor der Berechnung mit *MatPIV* muss den jeweiligen Bilderpaaren ein einheitliches Koordinatensystem zugeordnet werden. Hierfür können markante Punkte bekannten Abstandes als Bezugspunkte verwendet werden. Auf ein beliebiges Bild der PIV-Aufnahme wurden drei weiße Punkte in den Ecken des *Compartments* eingezeichnet (Abbildung 3.6). Die Koordinaten dieser drei Punkte sind aber nur theoretisch bekannt. Einerseits ist das Bild meist leicht verzerrt und andererseits ist der rechte Rand des *Compartments* auf dem Bild durch die Krümmung des Glasschusses nicht eindeutig erkennbar. Deshalb wurde die Länge der Rotorscheibe als Bezugslänge gewählt. Die Höhe und Breite des *Compartments* bzw. die Abstände der markierten weißen Punkte konnten schließlich mit 25,9 [mm] und 48 [mm]¹ bestimmt werden.

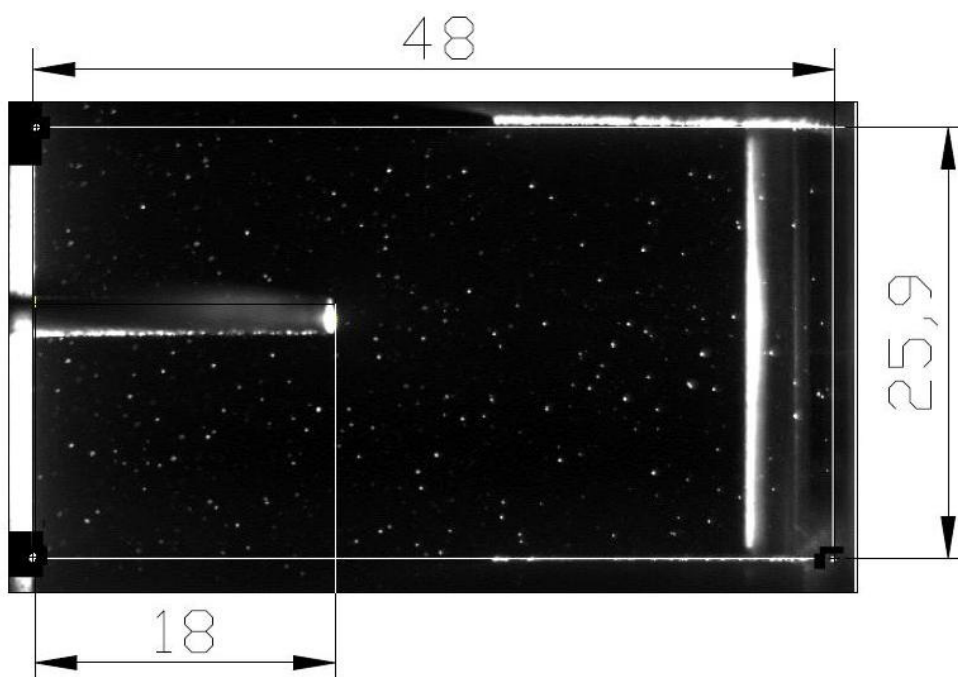


Abbildung 3.6: Definition des Koordinatensystems in *MatPIV*.

¹ Die genaue Übereinstimmung mit dem exakten Wert ist ein glücklicher Zufall.

Jedes Bild wurde bei der Auswertung in kleine Kästchen (*Interrogation windows*) unterteilt. Die Graustufen jedes Fensters wurden zwischen den Bilderpaaren verglichen und mittels Kreuzkorrelation konnten die Geschwindigkeitsvektoren erstellt werden. Je kleiner die *Interrogation windows* gewählt werden, desto mehr Geschwindigkeitsvektoren werden erstellt (1 Vektor pro Kästchen) und desto länger dauert die Berechnung der Vektoren. Bei 60.000 Bildern ist diese Einstellung entscheidend für die Dauer¹ der Auswertung und kann deshalb nicht beliebig klein gewählt werden.

Sieht man sich das Vektorfeld **eines** Bilderpaares an, so erkennt man eine Momentaufnahme einer zufälligen turbulenten Fluktuation des Geschwindigkeitsfeldes. Erst durch die Mittelung einiger Tausend Bilderpaare ergibt sich ein glattes Vektorfeld, das mit der Simulation mittels *RANS*-Modellen (Kapitel 4.1.4.3) vergleichbar ist. Diese Mittelungsfunktion ist nicht in *MatPIV* enthalten und musste daher eigenständig programmiert werden. Ebenso wurde ein Modul programmiert, das die axialen Geschwindigkeitskomponenten auf Rotorniveau aus den gemittelten Vektorfeldern interpoliert.

Tabelle 3.6: Verwendete Einstellungen für *MatPIV*.

Time Delay:	1 [<i>ms</i>]
Interrogation Size:	32 [<i>Pixel</i>]
Overlap:	0,5
Processing Mode:	<i>multi</i>
Signal / Noise:	1,2
Global-, Local-, Peak High Filter ² :	4

3.5 Ergebnisse

In den folgenden Abbildungen sollen die Ergebnisse der PIV-Auswertung präsentiert werden. Die Abbildungen 3.7 bis 3.9 zeigen die axialen Geschwindigkeitskomponenten auf Rotorniveau, diese werden anschließend mit der LDA-Messung von WEIß [16] verglichen. In den Abbildungen 3.10 bis 3.15 sind die gemittelten Geschwindigkeitsvektorfelder bei den oben genannten Drehzahlen und Volumenströmen ersichtlich.

¹ Die Auswertung von 5000 Bildern dauerte bei einer *InterrogationSize* von 32 Pixeln etwa 30 Stunden. (AMD Sempron 1,99 Ghz, 2GB RAM)

² Die Filterparameter spielten nur eine untergeordnete Rolle, da sich durch die Mittelung die gefilterten Vektorfelder kaum von den ungefilterten unterschieden.

Axialgeschwindigkeit auf Rotorniveau bei 100 [l/h]

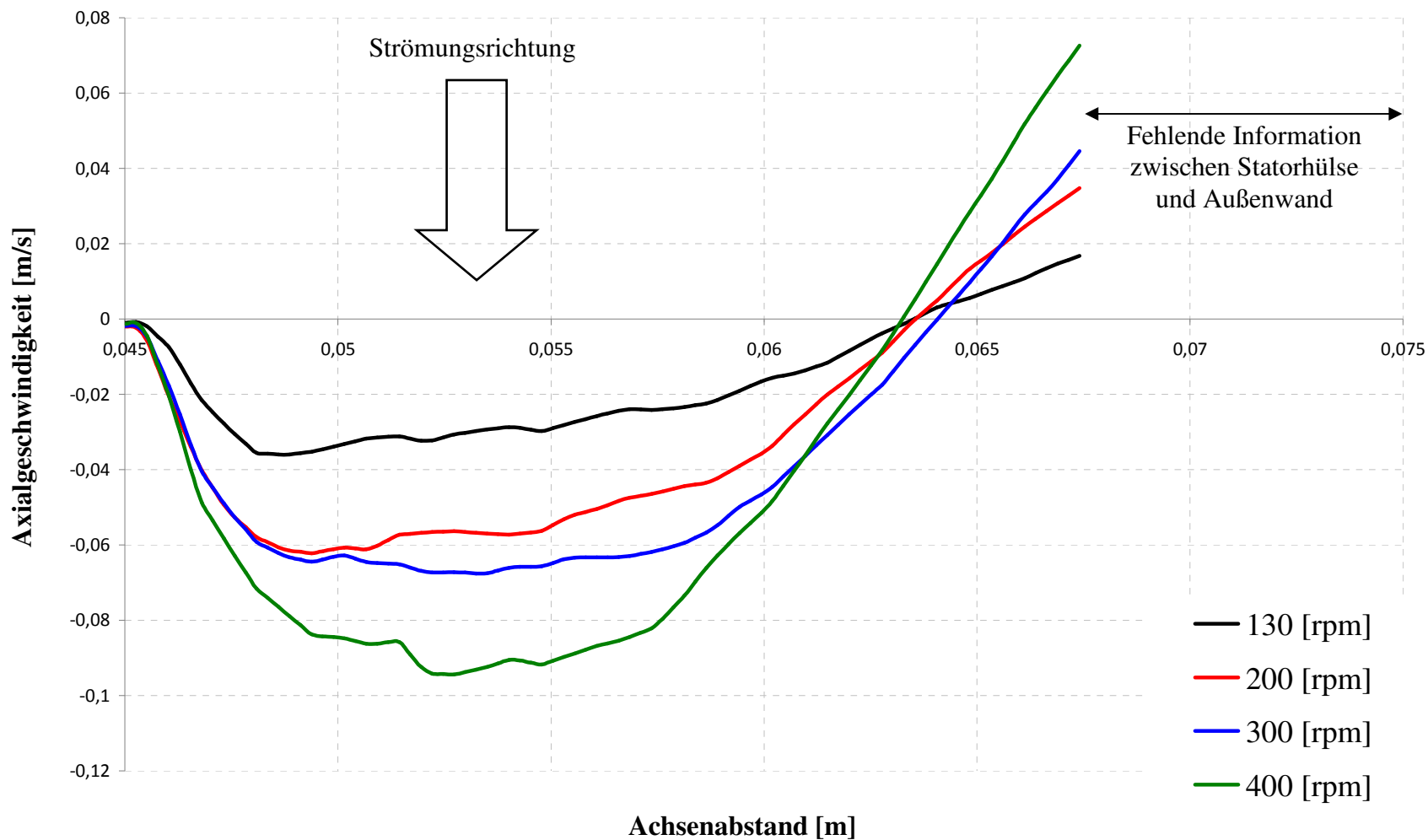


Abbildung 3.7: Axialgeschwindigkeit auf Rotorniveau bei 100 [l/h] und verschiedenen Drehzahlen.

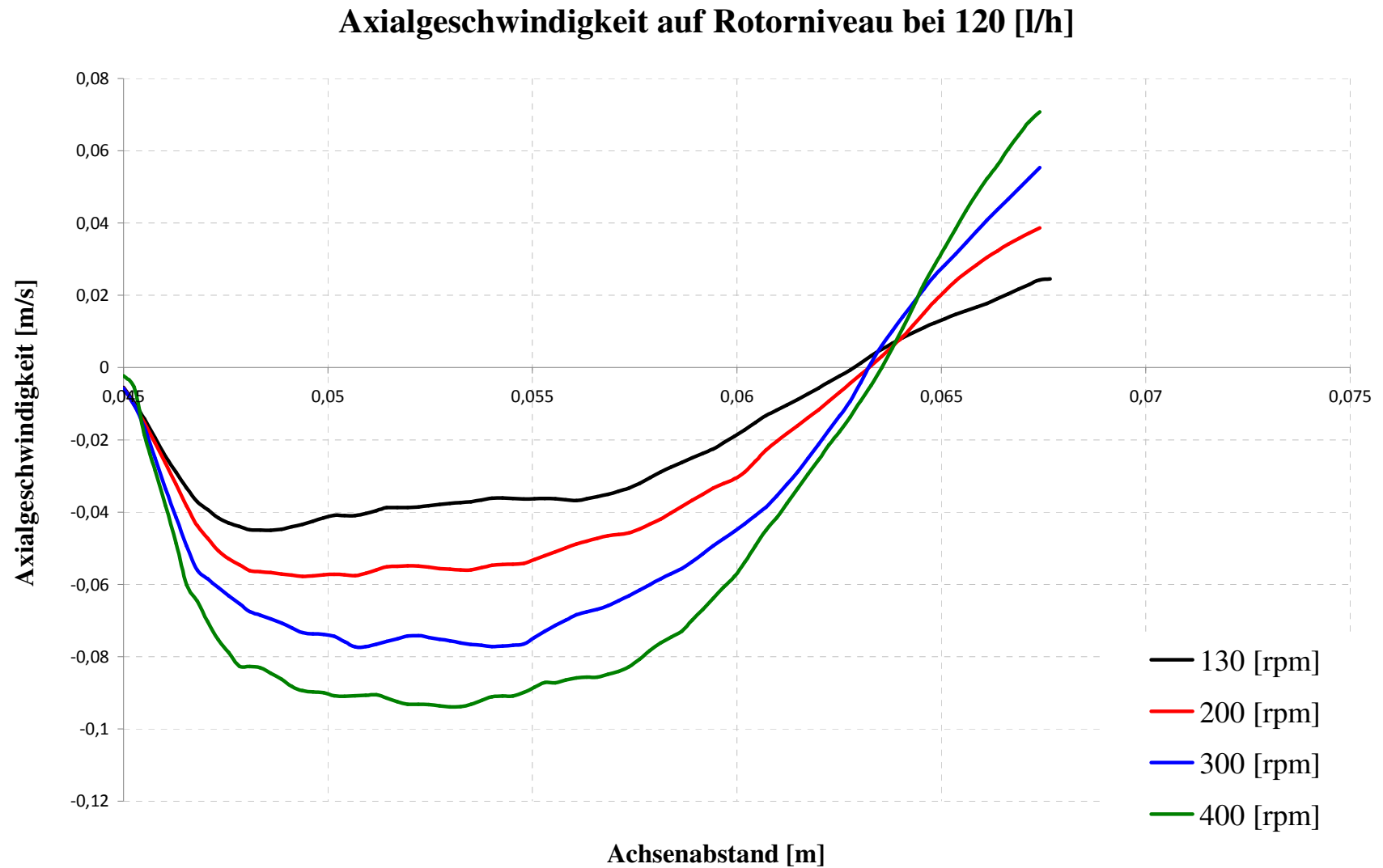


Abbildung 3.8: Axialgeschwindigkeit auf Rotorniveau bei 120 [l/h] und verschiedenen Drehzahlen.

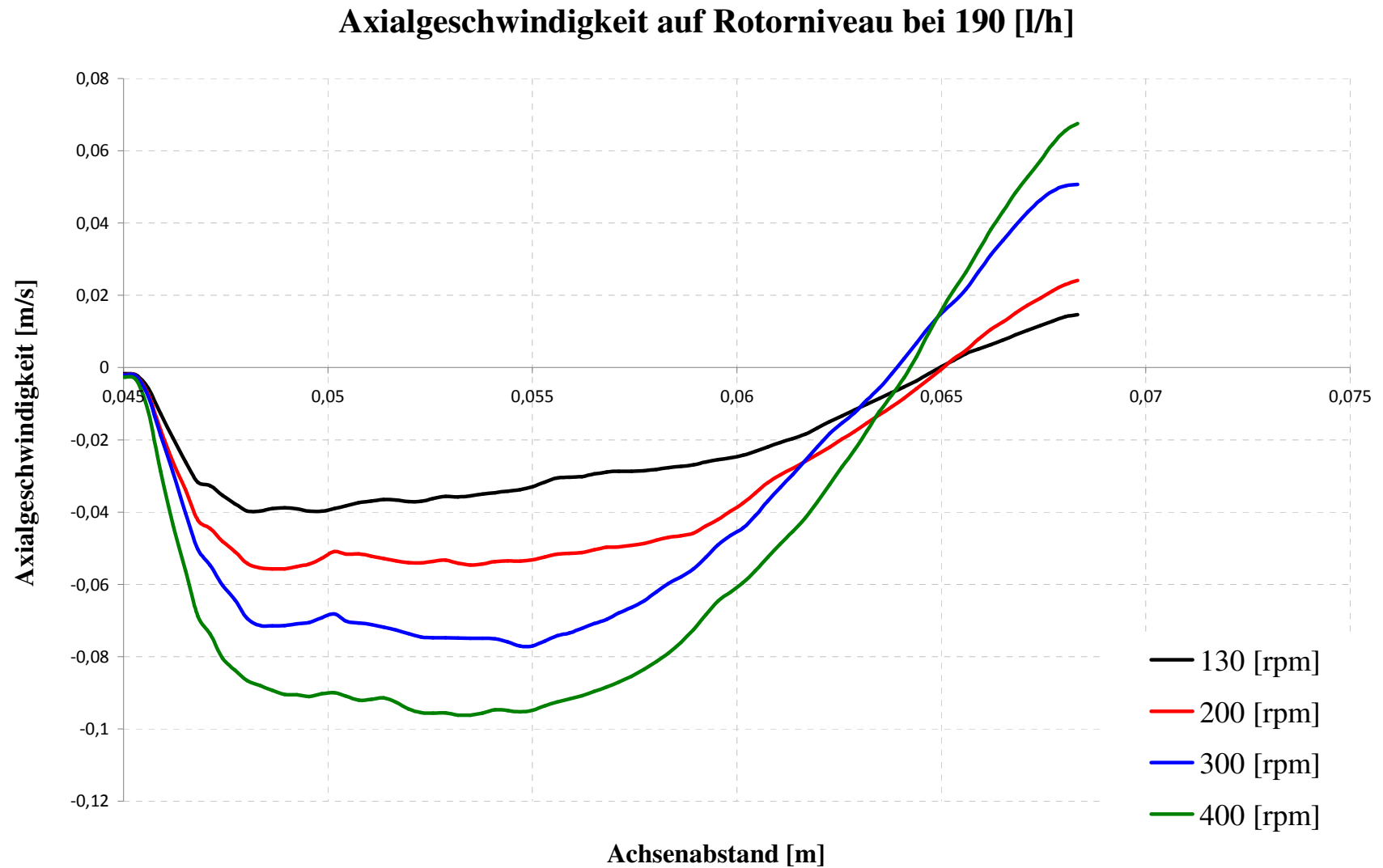


Abbildung 3.9: Axialgeschwindigkeit auf Rotorniveau bei 190 [l/h] und verschiedenen Drehzahlen.

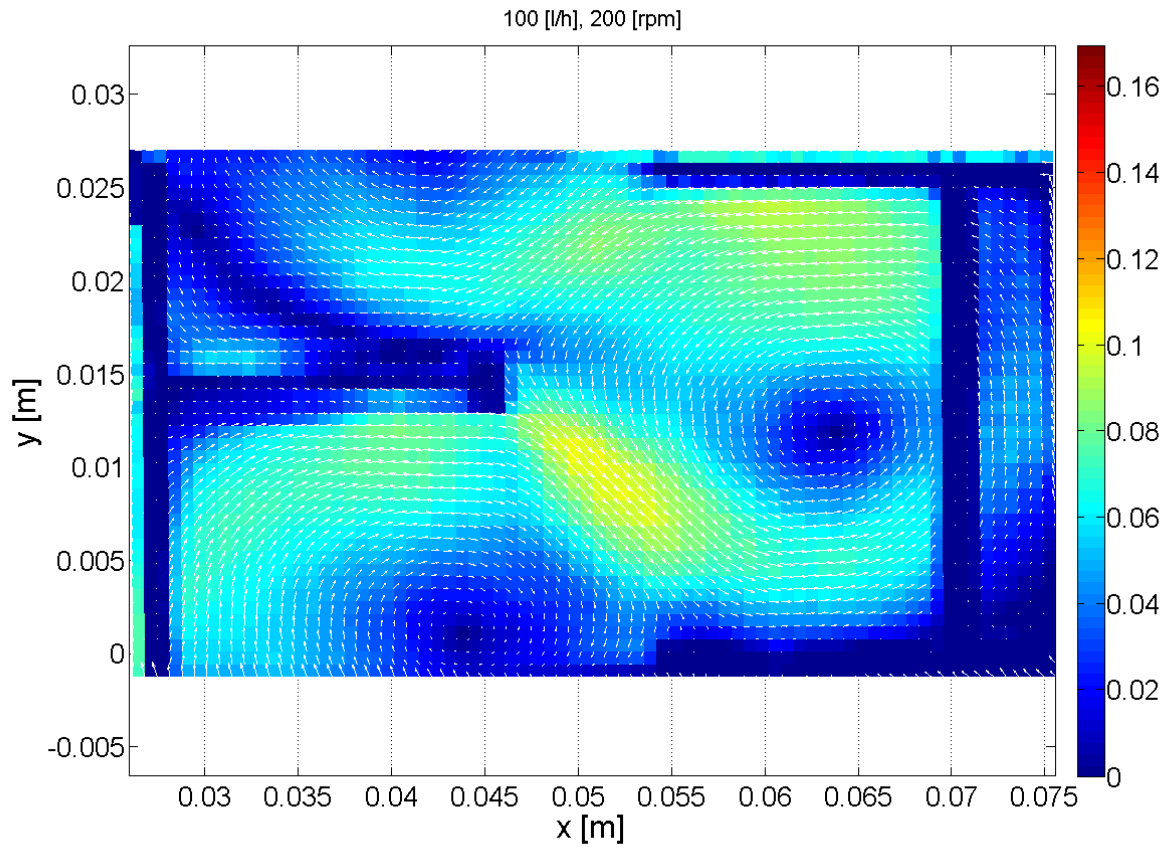
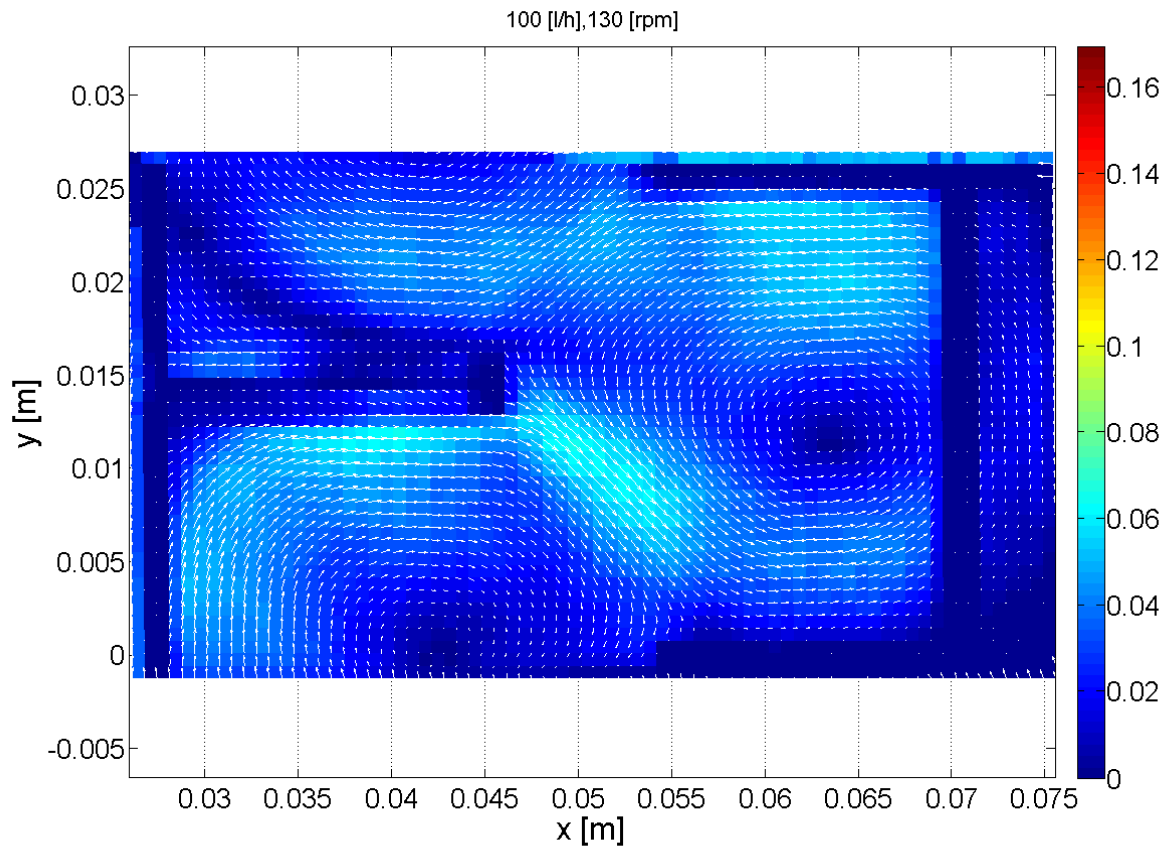


Abbildung 3.10: Gemittetes Geschwindigkeitsfeld mit Farbskalierung in [m/s], 130 [rpm] und 200 [rpm].

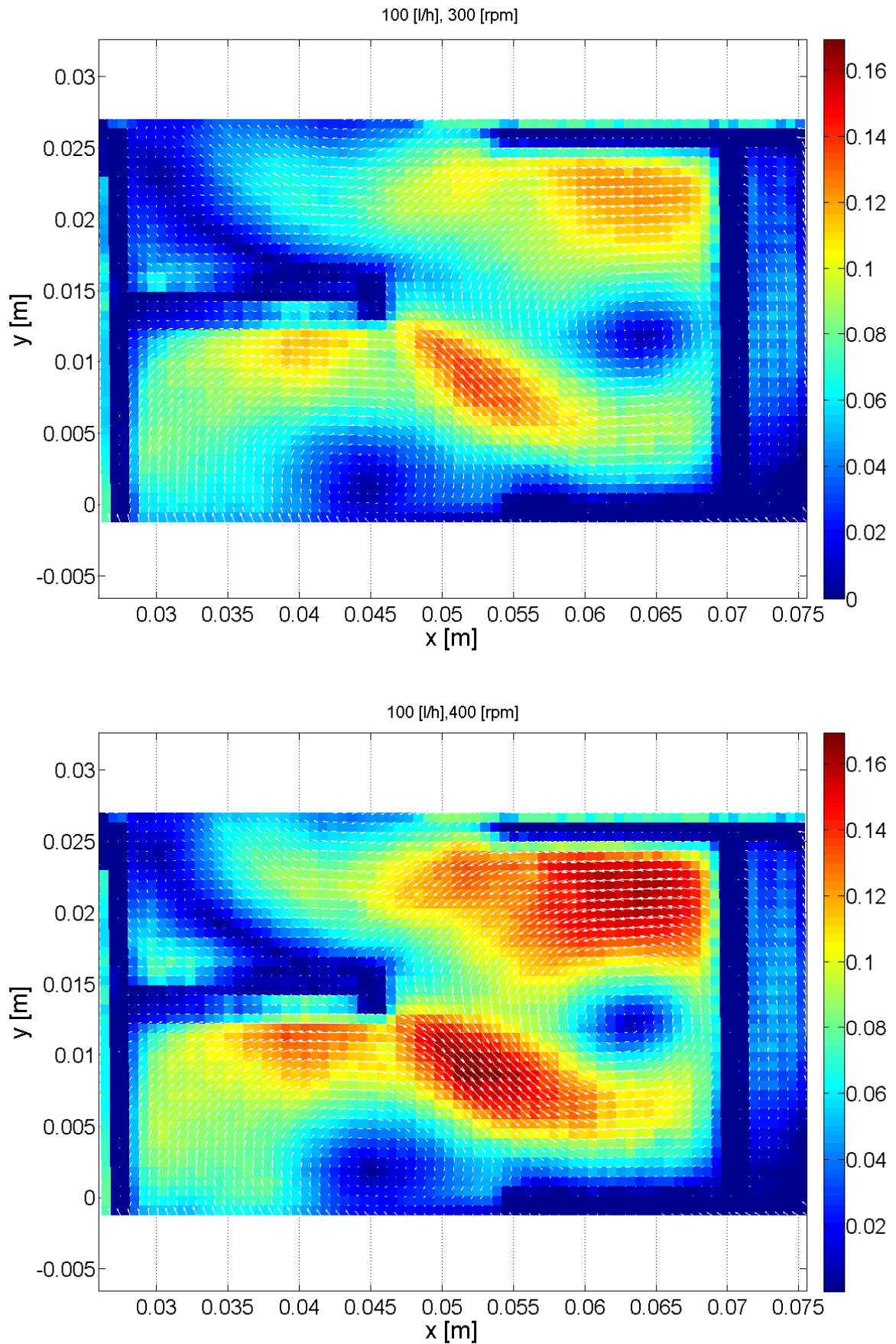


Abbildung 3.11: Gemittetes Geschwindigkeitsfeld mit Farbskalierung in [m/s], 300 [rpm] und 400 [rpm].

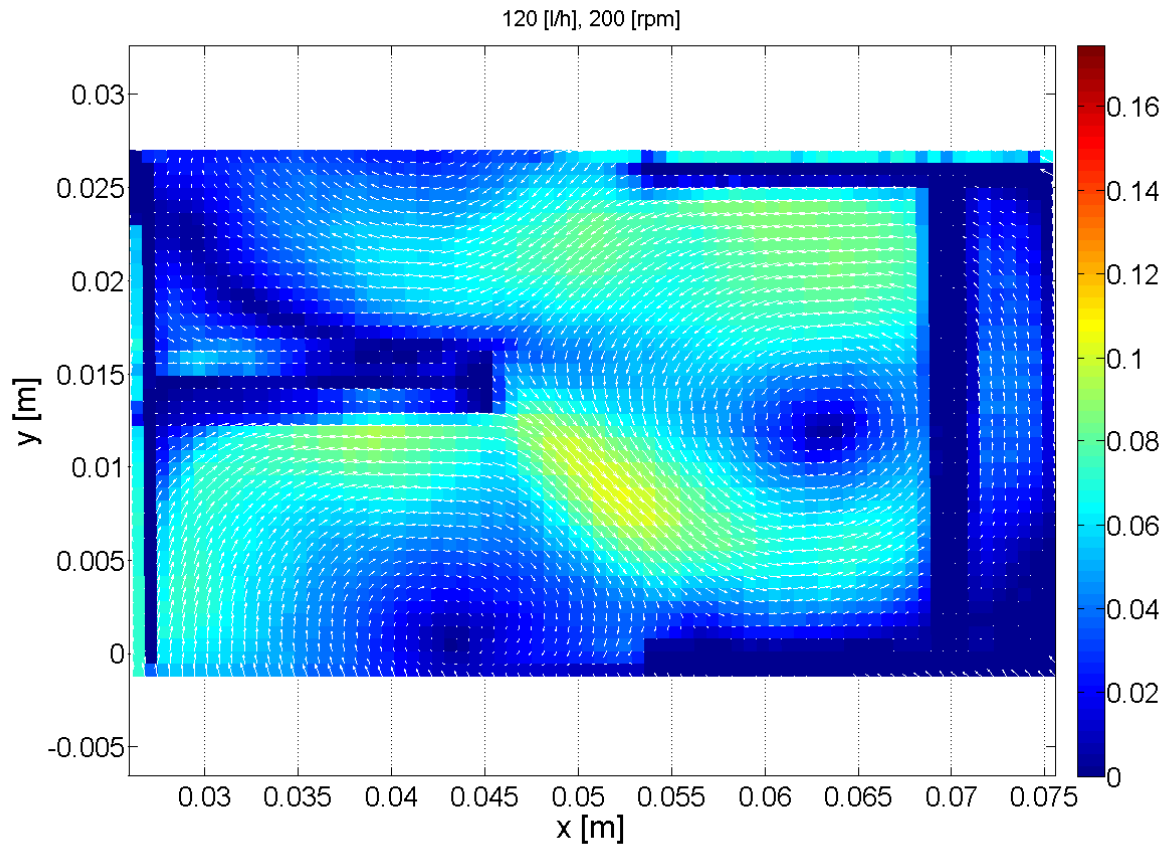
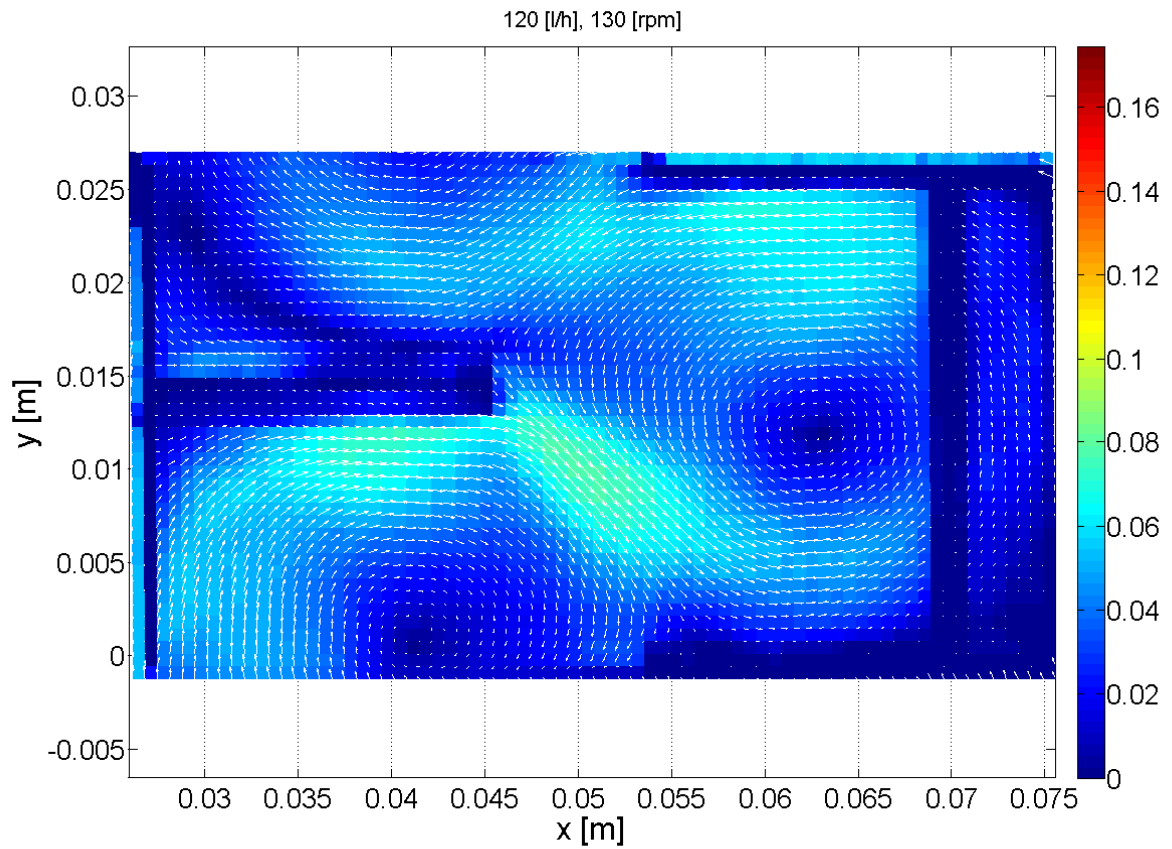


Abbildung 3.12: Gemittetes Geschwindigkeitsfeld mit Farbskalierung in $[m/s]$, 130 [rpm] und 200 [rpm].

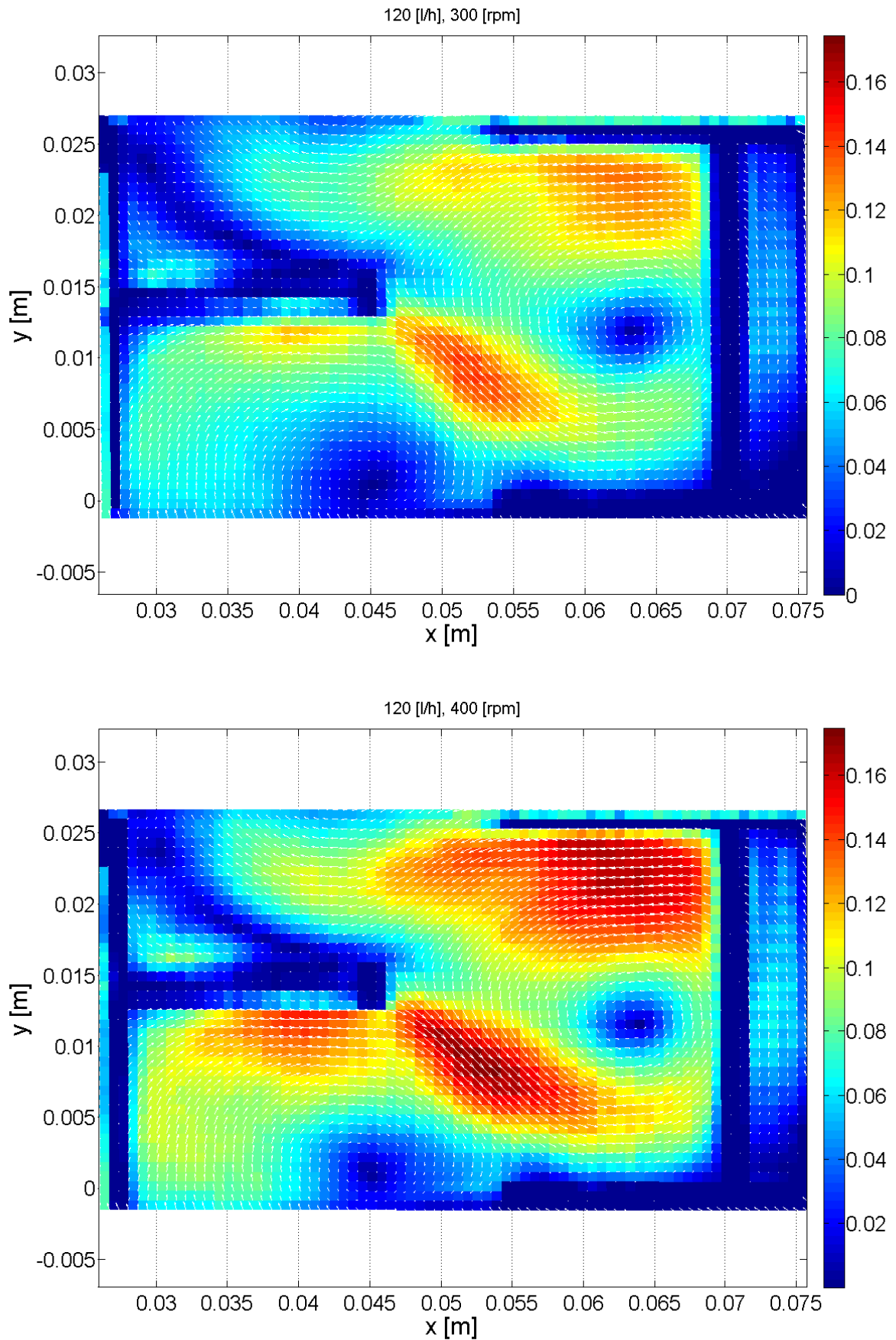


Abbildung 3.13: Gemittetes Geschwindigkeitsfeld mit Farbskalierung in [m/s], 300 [rpm] und 400 [rpm].

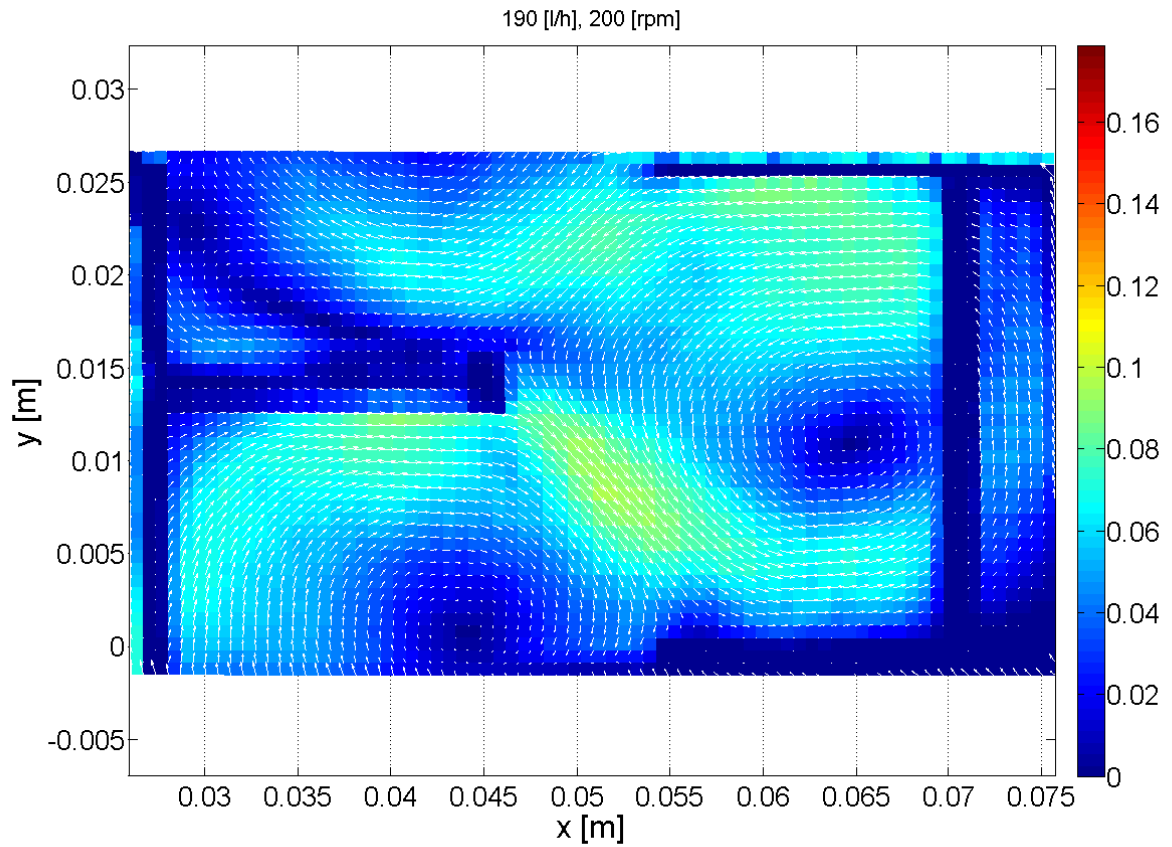
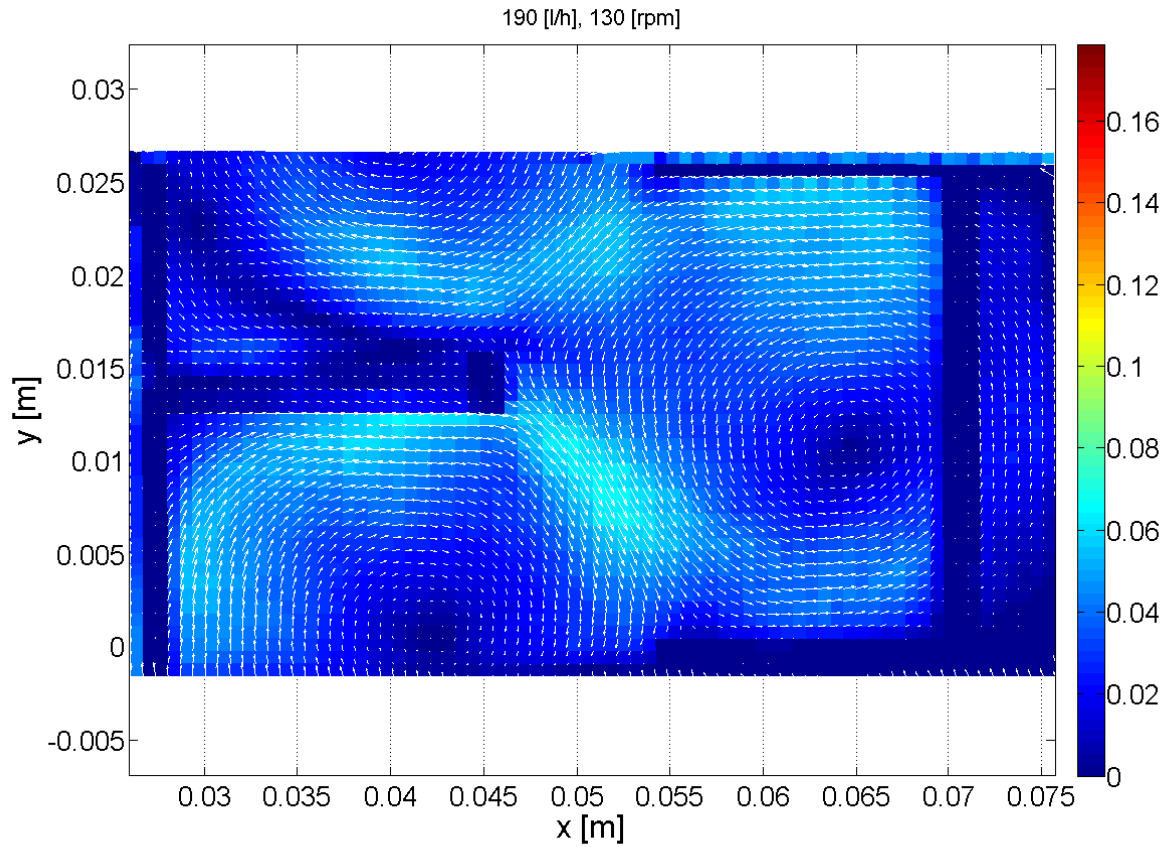


Abbildung 3.14: Gemittetes Geschwindigkeitsfeld mit Farbskalierung in [m/s], 130 [rpm] und 200 [rpm].

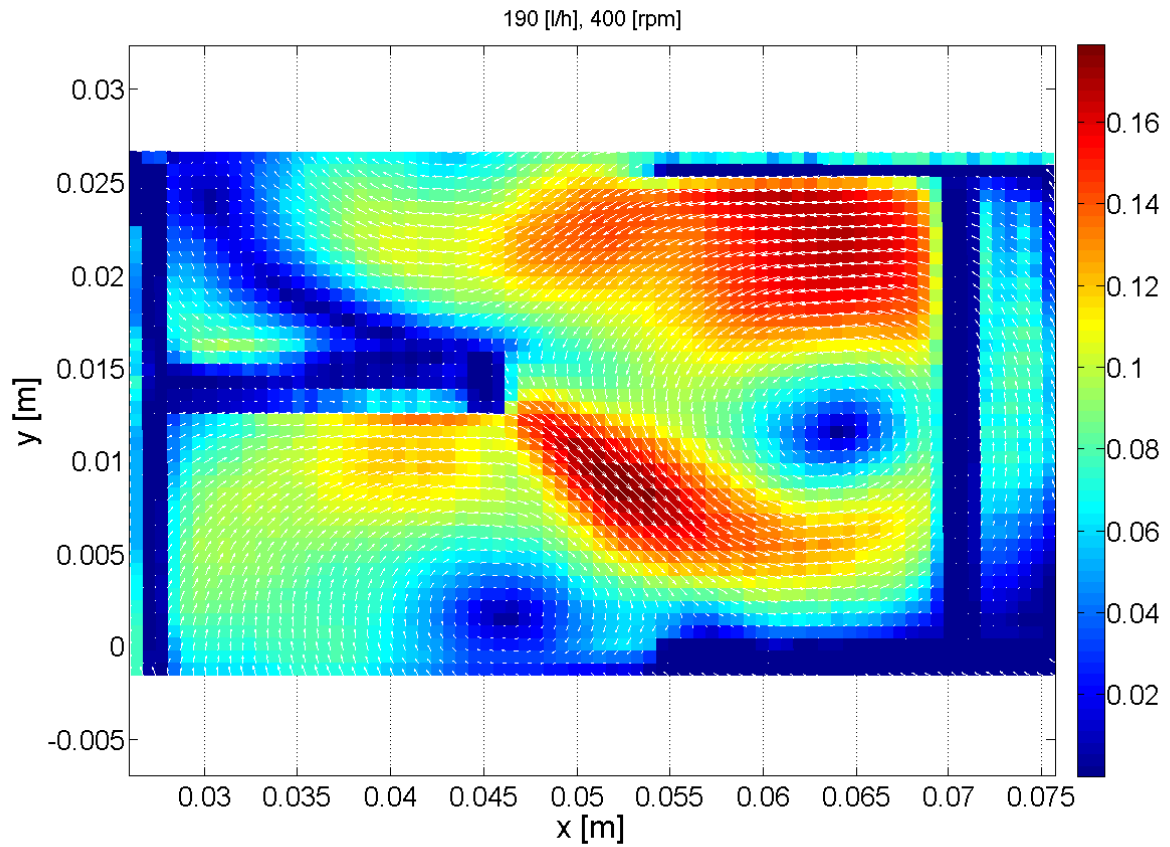
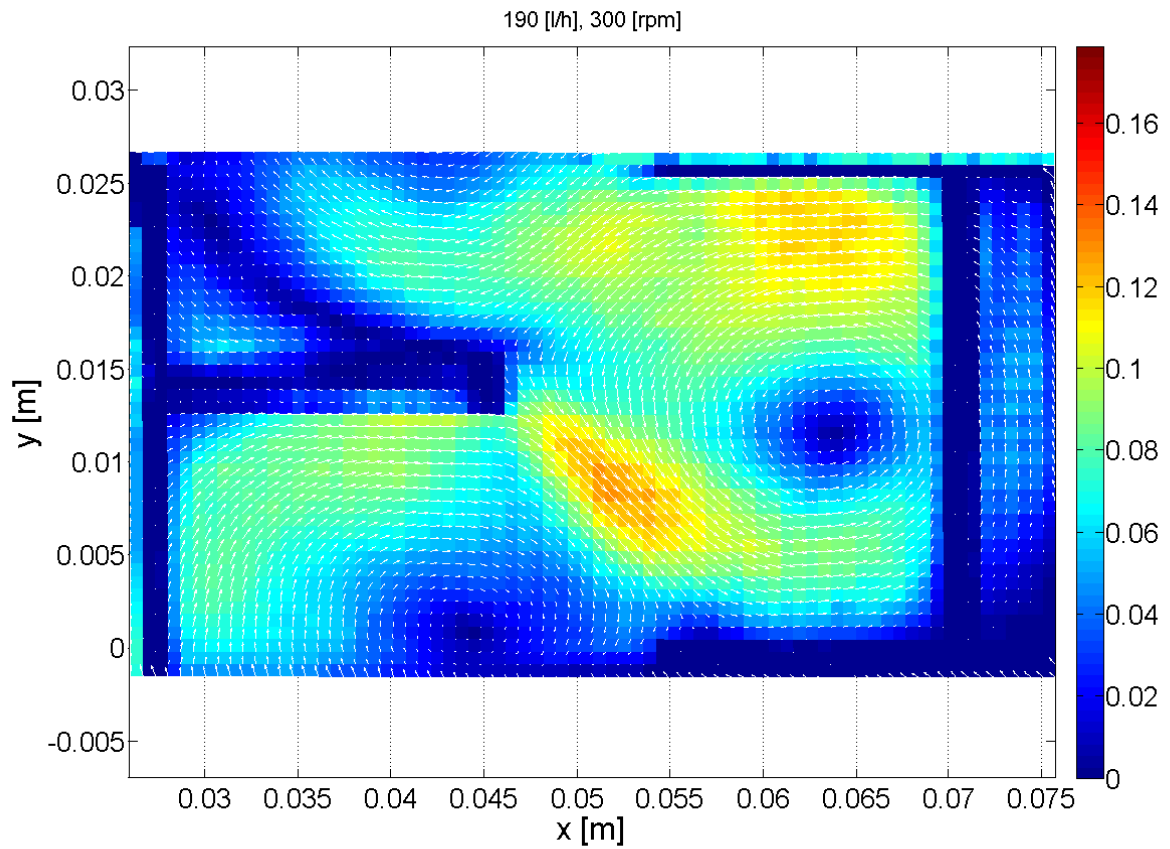


Abbildung 3.15: Gemittetes Geschwindigkeitsfeld mit Farbskalierung in [m/s], 300 [rpm] und 400 [rpm].

3.5.1 Interpretation

In den Abbildungen 3.10 bis 3.15 wird das komplexe Strömungsverhalten einer RDC-Kolonne eindrucksvoll wiedergegeben. Das axial von oben nach unten strömende Wasser wird an der Rotorscheibe radial nach außen beschleunigt. Neben der Rotorscheibe bildet sich ein Schweif hoher Geschwindigkeit aus, der vom herabströmenden Fluid nach unten gedrückt wird. Zwei große Hauptwirbel sind erkennbar. Oberhalb der Rotorscheibe bildet sich zudem noch ein "Halbwirbel" aus. Ein Teil des herabfließenden Fluids wird auf Grund der Kontinuität zunächst in Richtung Welle beschleunigt, bevor er dann von der Rotorscheibe radial nach außen getragen wird. Interessant scheint die Beobachtung, dass sich das qualitative Strömungsbild (Lage und Anzahl der Wirbelzentren, Neigung des Schweifes, etc.) kaum zwischen den einzelnen Betriebszuständen unterscheidet. Der Strömungsverlauf scheint (zumindest im untersuchten Bereich) nur von der Geometrie abzuhängen. Laut HUSUNG [8] ist die Anzahl der Wirbel und die Ausbildung einer Torusströmung (Abbildung 3.16) abhängig vom Verhältnis *Compartmenthöhe* H_z zu Kolonnendurchmesser D_K . Das vorliegende Strömungsbild bei einem Längenverhältnis von $H_z / D_K = 0,186$ deckt sich also mit der Aussage von HUSUNG [8] für $H_z / D_K = 0,115$.

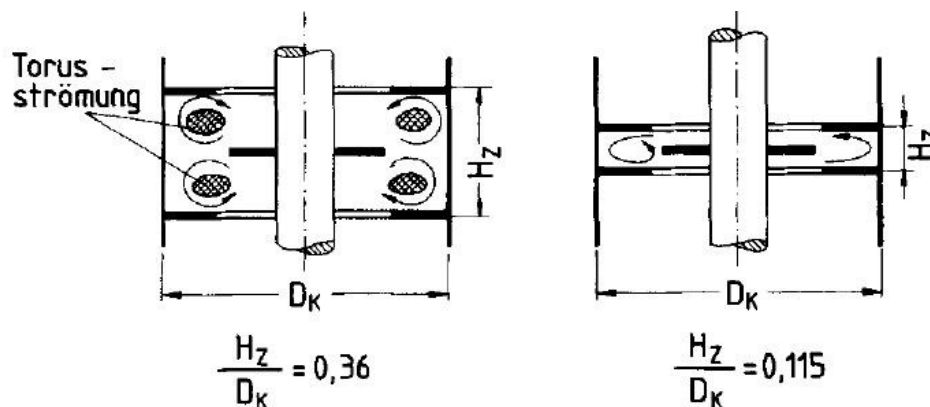


Abbildung 3.16: Strömungsverlauf in einem RDC-Compartment bei verschiedenen Abmessungen, [8].

Bevor der Einfluss der Rührerdrehzahl bzw. des Volumenstromes untersucht wird, sei noch auf einige Ungenauigkeiten der Auswertung hingewiesen. Wie in Abbildung 3.6 ersichtlich ist, sind die Lichtreflexionen an der Spitze der Rührscheibe und insbesondere an der Abstandshülse besonders stark. An diesen Stellen wurden die Tracerpartikel überstrahlt und es fehlt für diesen Bereich jegliche Information über den Geschwindigkeitsverlauf. Des Weiteren sind die ausgewerteten Bilder auf Grund der Versuchsanordnung in radialer Richtung leicht verzerrt. Die radialen Geschwindigkeitskomponenten werden daher leicht überbetont.

3.5.2 Einfluss der Rührerdrehzahl / des Volumenstromes

Um den Einfluss der Rührerdrehzahl bzw. des Volumenstromes zu quantifizieren wurde die maximale Geschwindigkeit in der untersuchten Ebene als Bemessungsparameter herangezogen. In Abbildung 3.17 sind die Absolutwerte der Höchstgeschwindigkeiten bei verschiedenen Drehzahlen gegen den Volumenstrom aufgetragen.

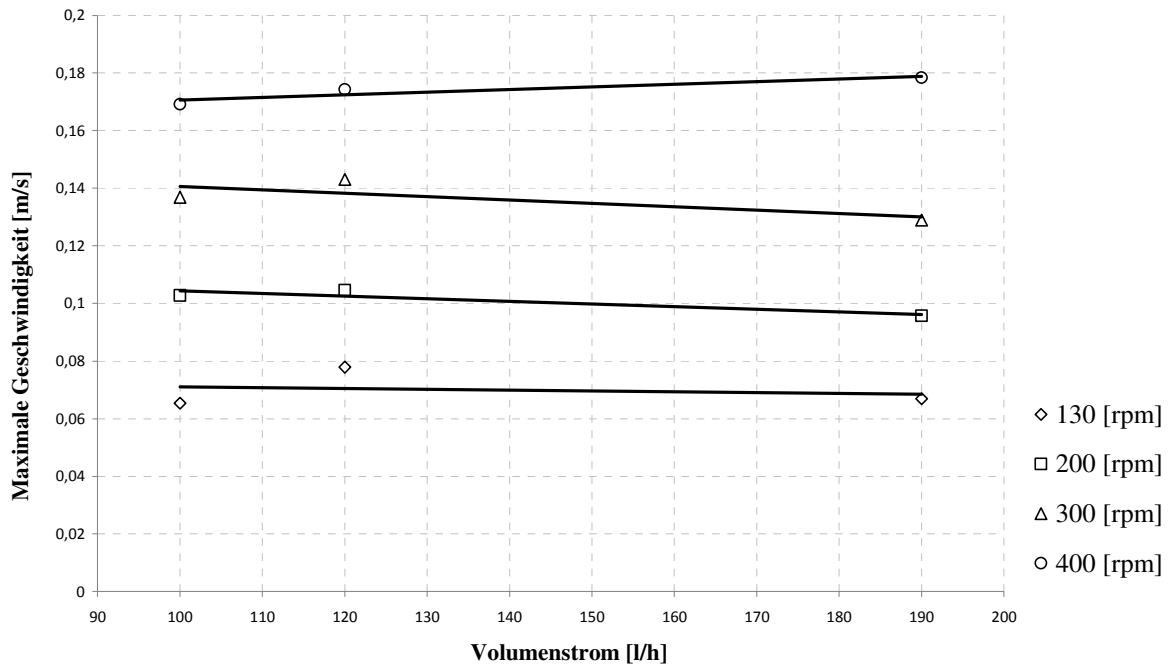


Abbildung 3.17: Maximalgeschwindigkeiten bei verschiedenen Rührerdrehzahlen.

Wie im Diagramm (Abbildung 3.17) ersichtlich ist, ist der Einfluss des Volumenstromes verschwindend gering. Die Maximalgeschwindigkeiten nehmen laut Experiment bei 190 [l/h] sogar teilweise leicht ab. Dies macht phänomenologisch keinen Sinn und ist mit Sicherheit auf die Messungenauigkeit zurückzuführen. Die Ungenauigkeit der Messung scheint also größer zu sein als der Einfluss des Volumenstromes im untersuchten Betriebsbereich¹.

Trägt man die Axialgeschwindigkeit auf Rotorniveau bei verschiedenen Volumenströmen (Rührerdrehzahl = 200 [rpm]) in einem Diagramm auf (Abbildung 3.18), liegen die Profile sehr eng übereinander. Auch dieser Vergleich unterstreicht den geringen Einfluss des Volumenstromes der kontinuierlichen Phase auf das ausgebildete Strömungsprofil.

¹ 100 [l/h] bzw. 190 [l/h] entsprechen einer Querschnittsbelastung von etwa 6,5 [$m^3/(m^2 h)$] bzw. 10,7 [$m^3/(m^2 h)$].

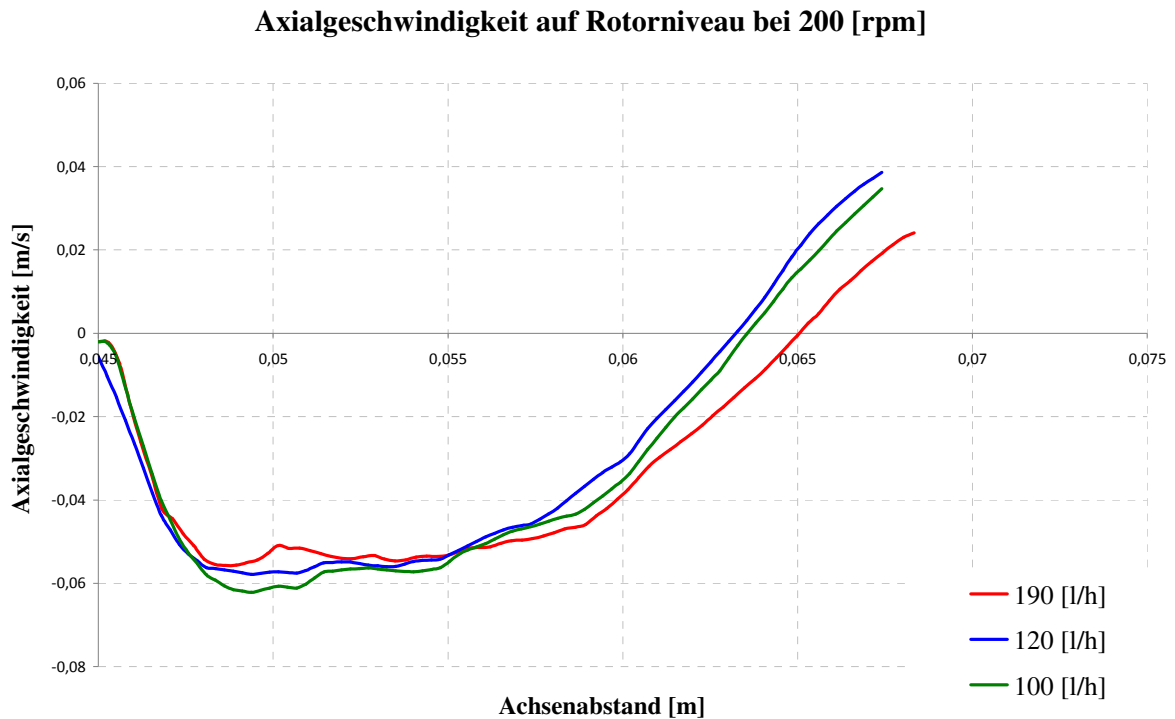


Abbildung 3.18: Axiale Geschwindigkeitsprofile auf Rotorniveau bei 200 [rpm] und verschiedenen Volumenströmen.

3.5.3 Vergleich: PIV - LDA

Für den Betriebszustand von 120 [l/h] und 300 [rpm] liegen, wie anfangs erwähnt, zusätzliche experimentelle Ergebnisse aus der Arbeit von WEIß [16] vor. Die von WEIß verwendete Laborkolonnen unterscheidet sich nur minimal in den Abmessungen, die Stator- und Rotorscheiben haben eine Dicke von 1,5 [mm] anstatt von 2 [mm]. WEIß [16] untersucht in seiner Arbeit den Geschwindigkeitsverlauf entlang einer Linie zwischen Rotorscheibe und Außenwand. Sowohl die axialen als auch die tangentialen Geschwindigkeitskomponenten wurden hierfür mit LDA aufgezeichnet. Standard-PIV ist nicht in der Lage die Geschwindigkeitskomponenten normal zur Bildebene zu erfassen, die tangentialen Geschwindigkeitsprofile können daher nicht verglichen werden. Diese sollen aber in Kapitel 4.2.4 für die Evaluierung von Turbulenzmodellen herangezogen werden.

Wie in Kapitel 1.2.2.2.2 beschrieben ist, stellt die LDA ein punktuell messendes Verfahren dar während PIV den Geschwindigkeitsverlauf einer gesamten Ebene darstellt. Trotz der völlig unterschiedlichen Messprinzipien und der leicht abgeänderten Kolonnengeometrie kann ein Vergleich dieser beiden Experimente getätigt werden.

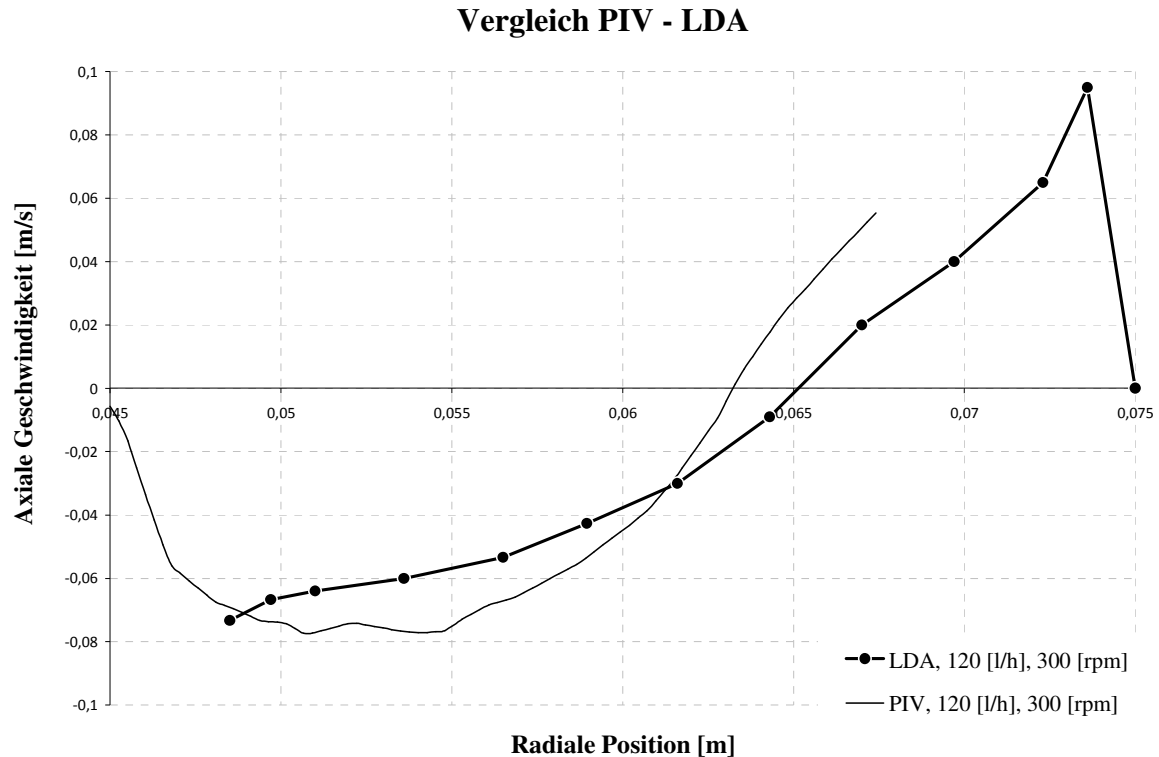


Abbildung 3.19: Vergleich des PIV-Experimentes mit der LDA-Messung von WEIB, [16].

Wie in Abbildung 3.19 ersichtlich ist, stimmen die beiden Profile nur mäßig überein. Die Größenordnungen der Profile passen zwar zusammen, dennoch liefern die beiden Experimente bezüglich des Wirbelzentrums (Schnitt mit der Abszisse) deutlich unterschiedliche Ergebnisse. Obwohl das Geschwindigkeitsprofil des PIV-Experimentes bei der Statorhülse endet, ist noch ein weiterer interessanter Unterschied im positiven Wertebereich ablesbar. Genau an der Stelle der Statorhülse weist die LDA-Kurve eine leichte Delle auf, diese konnte in keiner späteren 2D-Simulation beobachtet werden. Es liegt also die Vermutung nahe, dass der Einfluss der Statorhülse vernachlässigt wurde und im Geschwindigkeitsprofil abgebildet ist. Dies soll später in einer 3D-Simulation (Kapitel 4.3.1) überprüft werden.

4 CFD Simulation

Die im PIV-Experiment erhaltenen Daten und Vektorfelder sollen mit der numerischen Strömungssimulation verglichen werden. Nach der theoretischen Einführung werden die im kommerziellen Softwarepaket *Ansys Fluent 12* verfügbaren Turbulenzmodelle anhand der verfügbaren experimentellen Ergebnisse evaluiert. Schließlich soll die Berechtigung einer aufwändigen 3D-Simulation diskutiert werden.

4.1 Grundlagen der einphasigen Strömungssimulation

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen, die für eine Evaluierung der Turbulenzmodelle notwendig sind, in möglichst kompakter Form präsentiert. Die folgende Zusammenfassung ist aus Lehrbüchern [21][22][23] entnommen. Für eine detaillierte Einführung sei auf die entsprechende Literatur verwiesen. Auf die Theorie der Simulation von Mehrphasenströmungen soll nicht eingegangen werden. Über die Eigenschaften der industriell am häufigsten genutzten Turbulenzmodelle soll abschließend noch ein Überblick gegeben werden.

4.1.1 Erhaltungsgleichungen

Erhaltungsgleichungen bzw. Bilanzgleichungen sind die Grundlage zur Modellierung von Transportprozessen. Sie sind die mathematische Formulierung physikalischer Axiome zur Erhaltung von:

- Masse (für nichtrelativistische Systeme),
- Impuls (basierend auf zweitem Newtonschen Axiom),
- Energie (basierend auf dem 1. Hauptsatz der Thermodynamik).

Bilanziert man eine Erhaltungsgröße ϕ über ein differentielles Volumenelement erhält man die allgemeinste Form der Bilanzgleichungen:

$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{Speicherterm}} + \underbrace{U_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i}}_{\text{Konvektionsterm}} = D \underbrace{\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_i}}_{\text{Diffusionssterm}} + \underbrace{S(\phi)}_{\text{Quellterm}},$$

mit

U_i ...Geschwindigkeitsvektor

D ...Diffusionskoeffizient bzw. molekularer Flussvektor von ϕ

Folgende vier Terme treten in der differentiellen Bilanz auf:

- Der **Speicherterm** beschreibt die lokale zeitliche Änderung (Anreicherung) der Erhaltungsgröße.
- Der **Konvektionsterm** beschreibt den Transport von ϕ auf Grund von Konvektion.
- Der **Diffusionsterm** beschreibt den molekularen Transport durch Diffusion bzw. Leitung.
- Die **Quellterme** berücksichtigen Quellen und Senken, die innerhalb des Kontrollvolumens auftreten können.

4.1.1.1 Kontinuitätsgleichung

Die differentielle Massenbilanz bzw. Kontinuitätsgleichung enthält nur einen Speicher- und einen Konvektionsterm:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0.$$

Da die industrielle Strömungsmechanik immer nur nichtrelativistische Systeme betrachtet tritt kein Quellterm auf. Die Gesamtmasse kann also weder zerstört noch erzeugt werden, obwohl sich die stoffliche Zusammensetzung z.B. auf Grund von chemischen Reaktionen sehr wohl ändern kann. Der Diffusionsterm fällt bei der Betrachtung der Gesamtmasse ebenfalls weg. Dieser würde eine unsinnige Relativbewegung der Gesamtmasse zur konvektiven Strömungsrichtung beschreiben. Für inkompressible Strömungen (Mach-Zahl $< 0,1$) kann auch der Speicherterm vernachlässigt werden und die Kontinuitätsgleichung vereinfacht sich weiter zu:

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0.$$

4.1.1.2 Impulsgleichung

Bilanziert man den Impuls über ein differentielles Volumenelement, können die 3 Richtungs-Komponenten der Impulsgleichung hergeleitet werden:

$$\begin{aligned}\frac{\partial U_1}{\partial t} + U_1 \frac{\partial U_1}{\partial x_1} + U_2 \frac{\partial U_1}{\partial x_2} + U_3 \frac{\partial U_1}{\partial x_3} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_1} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{11}}{\partial x_1} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{21}}{\partial x_2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{31}}{\partial x_3} + g_1, \\ \frac{\partial U_2}{\partial t} + U_1 \frac{\partial U_2}{\partial x_1} + U_2 \frac{\partial U_2}{\partial x_2} + U_3 \frac{\partial U_2}{\partial x_3} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{12}}{\partial x_1} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{22}}{\partial x_2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{32}}{\partial x_3} + g_2, \\ \frac{\partial U_3}{\partial t} + U_1 \frac{\partial U_3}{\partial x_1} + U_2 \frac{\partial U_3}{\partial x_2} + U_3 \frac{\partial U_3}{\partial x_3} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_3} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{13}}{\partial x_1} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{23}}{\partial x_2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{33}}{\partial x_3} + g_3,\end{aligned}$$

bzw. in Tensor-Schreibweise:

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} + g_i.$$

Für Newtonsche Fluide, für die eine lineare Abhängigkeit zwischen Schubspannung und Dehngeschwindigkeit, $\tau = \mu \frac{dU}{dy}$, angenommen wird, vereinfachen sich die Impuls-Gleichungen zu:

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) + g_i.$$

4.1.1.3 Energiegleichung

Die Energiegleichung soll nicht näher behandelt werden, da sie auch in der Simulation vernachlässigt wurde. Einerseits wird die Kolonne „kalt“ (bei Umgebungstemperatur) betrieben und andererseits ist die Koppelung zwischen der Impulsgleichung und der Energiegleichung nur sehr schwach für inkompressible Fluide [21]. Bei inkompressiblen Fluiden wird die Energiegleichung für die Schließung des Gleichungssystems nicht benötigt. Für eine detaillierte Herleitung der Energiegleichung sei auf die Literatur verwiesen [23].

Die fünf Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie werden als vollständige *Navier-Stokes-Gleichungen* bezeichnet. Sie stellen ein System von partiellen nichtlinearen Differentialgleichungen zweiter Ordnung dar und beschreiben die Strömung vollständig bis zu den kleinsten Wirbeln (Früher wurden nur die drei Impulsgleichungen als *Navier-Stokes-Gleichungen* bezeichnet).

Der vollständige *Navier-Stokes-Gleichungssatz* enthält insgesamt 17 Unbekannte (ρ , u , v , w , p , e , h , T und 9 Komponenten des Spannungstensors τ_{ji}) bei nur fünf Gleichungen. Es werden also noch 12 Gleichungen benötigt: drei Zustandsgleichungen für das Fluid und 9 Stokes'sche Beziehungen für die Normal- und Schubspannungen. Eine thermische Zustandsgleichung (z.B. das ideale Gasgesetz) koppelt den Druck p mit der Dichte ρ und der Temperatur T . Zwei weitere kalorische Zustandsgleichungen koppeln die spezifische innere Energie e und die spezifische Enthalpie h mit der Temperatur T . Die 9 Stokes'schen Beziehungen koppeln die Komponenten des Spannungstensors τ_{ji} mit den Geschwindigkeiten u , v und w (bei newtonschen Fluiden) [23].

Dennoch sind die fünf Bilanzgleichungen zur Bestimmung von ρ , u , v , w und e immer noch nicht eindeutig lösbar. Beim Lösen von Differentialgleichungen werden diese integriert und es müssen Integrationskonstanten bestimmt werden. Die Bestimmung dieser Konstanten und damit die eindeutige Lösung des Differentialgleichungssystems geschieht mittels Rand- und Anfangsbedingungen.

4.1.2 Randbedingungen

4.1.2.1 Zuläufe & Abflüsse

Zulauf-Randbedingungen (*inlet boundary conditions*) können über Geschwindigkeiten (*velocity inlet*) oder durch Massenflüsse (*mass flow inlet*) angegeben werden. In den meisten kommerziellen CFD-Codes ist es möglich, einen auf die Zulauffläche normalen Massenstrom zu definieren oder das Geschwindigkeitsprofil direkt einzugeben (falls dieses bekannt ist). Eine weitere Möglichkeit wäre die Definition des Druckes am Zulauf (*pressure inlet*). Dies macht beispielsweise dann Sinn, wenn nicht bekannt ist ob die Strömung an einer gewissen Stelle ein- oder austritt, oder wenn eine Geschwindigkeitsmessung nicht durchführbar ist, wohl aber die Drücke in einer Anlage oder einem experimentellen Aufbau messbar sind. Temperaturen und Konzentrationen werden üblicherweise ebenfalls am Zulauf definiert.

An den Abflussflächen können Massenflüsse (*outflow*) oder statische Drücke definiert (*pressure outlet*) werden. Wenn die Strömung am Ausfluss annähernd entwickelt ist (d.h. wenn alle Bilanzgrößen außer dem Druck einen Nullgradienten in Strömungsrichtung aufweisen) oder die Geschwindigkeitsverteilung und der Druck am Zulauf nicht a priori bekannt sind, kann die *outflow*-Randbedingung verwendet werden. Typischerweise wird aber am Abfluss die *pressure outlet*-Randbedingung verwendet. Diese führt meist zu besserer Konvergenz, falls es während der Iteration zu Rückvermischungen kommt.

4.1.2.2 Wände

Begrenzende Wände oder bewegliche Einbauten werden über die *wall*-Randbedingung definiert. Üblicherweise wird für die Geschwindigkeit an der Wand die „*no-slip-condition*“ angenommen, d.h. die Relativgeschwindigkeit zwischen Wand und Fluid wird auf null gesetzt.

Bezüglich des Stofftransportes sind die Wände meist undurchlässig, d.h. ein Nullgradient der Konzentration normal zur Wand wird angenommen. Bei semipermeablen Membranen muss aber ein Diffusionsterm angegeben werden.

Für den Wärmeübergang können entweder adiabate-, temperierte- oder Wände mit einem definierten Wärmestrom angegeben werden.

4.1.2.3 Symmetrien

Falls ein Modellsystem Symmetrieeigenschaft hat, sollten diese ausgenutzt werden um die Rechenzeit zu reduzieren. Relevant für die Strömungssimulation sind die Spiegelsymmetrie und die Rotationssymmetrie. Mittels Spiegelsymmetrie kann das Rechengbiet halbiert werden (bei einer Symmetrieebene), mit Hilfe der Rotationssymmetrie kann eine 3D-Problemstellung auf 2D reduziert werden, was die Rechenzeit um mehrere Größenordnungen reduziert. Alle Gradienten normal auf die Symmetrieebenen müssen null sein, da kein molekularer oder konvektiver Strom durch die Symmetrieebenen fließen darf.

4.1.2.4 Periodizitäten

Immer wiederkehrende ähnliche Geometrien können durch periodische Randbedingungen abgebildet werden. Diese können wiederum rotatorisch bzw. translatorisch sein und werden an die Grenzen des Modellgebietes gesetzt. Beispielsweise kann eine RDC-Kolonne (mit

Abstandshülsen) in vier keilförmige Winkelausschnitte geteilt werden (rotatorische Periodizität) bzw. kann ein *Compartment* als immer wiederkehrendes Element herausgenommen werden (translatorische Periodizität). Bei periodischen Rändern wird die Lösung am Austritt wieder an den Eintritt transferiert, periodische Randbedingungen treten also immer paarweise auf.

4.1.3 Numerische Methoden für einphasige Systeme

Eine allgemeine analytische Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen konnte bisher nur für einige Spezialfälle (ebene Platte) gefunden werden. Noch immer zählt die analytische Lösung der dreidimensionalen Navier-Stokes-Gleichungen zu den größten ungelösten mathematischen Rätseln der letzten Jahrzehnte.

Das *NS*-Differentialgleichungssystem muss daher numerisch gelöst werden. Die partiellen Differentiale müssen in endliche Differenzen umgewandelt werden. Diese Umwandlung wird als Diskretisierung bezeichnet. Die so erhaltenen Differenzgleichungen können dann auf einem Rechengitter (*grid* bzw. *mesh*) iterativ gelöst werden, man erhält Zahlenwerte für ρ , u , v , w und e an den Netzpunkten des Rechengitters.

Grundsätzlich unterscheidet man zwischen drei Methoden der Diskretisierung:

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

Die drei Methoden sind gleichwertig und können mathematisch ineinander übergeführt werden (FVM und FDM können als Spezialfälle von FEM abgeleitet werden). Da sich in den kommerziellen CFD-Programmen die FV-Methode durchgesetzt hat soll nur diese näher behandelt werden.

4.1.3.1 Die Finite-Volumen-Methode (FVM)

Das zu simulierende Modellgebiet wird mit Hilfe des Rechnetzes in „kleine“ Kontrollvolumina, auch Zellen genannt, geteilt. Dies ermöglicht, wie bereits oben erwähnt, die Überführung der partiellen Differentialgleichungen in algebraische Gleichungen. Für jede Zelle wird dann ein Satz dieser algebraischen Gleichungen iterativ gelöst. Durch die Diskretisierung des Modellgebietes beinhaltet die Lösung allerdings einen numerischen

Fehler, der dann verschwindet wenn die Zellgröße gegen null geht. Mit der Feinheit der Rechenzellen steigt aber auch gleichzeitig die Rechenzeit, da für jede Zelle ein Satz von algebraischen Gleichungen gelöst werden muss. Es gilt einen Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenaufwand zu finden.

4.1.3.2 Rechennetze

Traditionellerweise können Rechennetze in *strukturierte* und *unstrukturierte* Netze gegliedert werden.

Strukturierte Netze zeichnen sich durch ihre Regelmäßigkeit aus. Sie bestehen aus Vierecken (2D) bzw. aus Hexaedern im dreidimensionalen Fall, diese können sowohl orthogonal oder schiefwinkelig sein. Die einfache Zellenindizierung (i,j -Notation) führt dazu, dass Simulationen auf *strukturierten* Netzen weniger Arbeitsspeicher erfordern und bezüglich der Numerik stabiler laufen. Komplexe Geometrien können mit *strukturierten* Rechennetzen allerdings nicht erfasst werden. Ebenso ist die nachträgliche Gitterverfeinerung in Bereichen hoher Gradienten nicht möglich (Kapitel 4.1.5). Dafür müssen *unstrukturierte* oder blockweise *strukturierte* Netze verwendet werden.

Unstrukturierte Netze setzen sich aus unterschiedlichen Elementen zusammen. Dies sind Drei- und Vierecke in 2D bzw. Tetraeder, Hexaeder, Pyramiden, Prismen und Polyeder im dreidimensionalen Fall. *Unstrukturierte* Netze sind viel flexibler und lassen sich an praktisch alle komplexen Geometrien anpassen. Obwohl die Logistik des Netzes viel aufwändiger und numerisch instabiler ist, sind die meisten heutigen CFD-Codes in der Lage beide Netzarten gleichermaßen zu verarbeiten. In Abbildung 4.1 sind die verschiedenen Netzelemente noch einmal zusammengefasst.

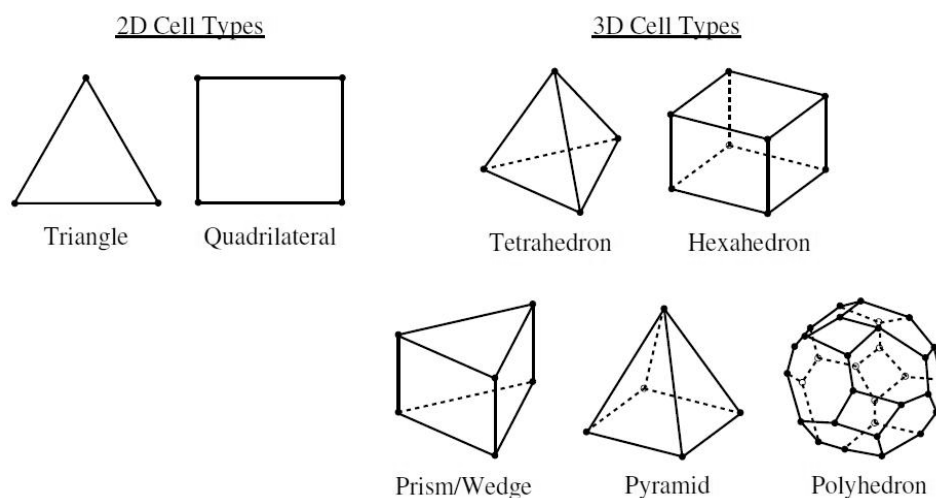


Abbildung 4.1: Zellentypen in 2D und 3D, [18].

Die Qualität des Rechengitters ist die Grundvoraussetzung sowohl für konvergierte als auch für exakte Lösungen. Für die Generierung eines qualitativ hochwertigen Rechengitters können folgende Richtlinien zusammengefasst werden:

- Gitterlinien der wandnächsten Zellen sollten möglichst orthogonal zur Wand stehen.
- Benachbarte Zellen sollten sich in ihrer Größe (Fläche bzw. Volumen) nicht zu stark unterscheiden, das Größenverhältnis sollte 20% nicht überschreiten.
- Schiefe und stark verzerrte Zellen sind zu vermeiden, sie führen zu Instabilitäten und geringerer Genauigkeit. Die Verzerrung (*Skewness*) sollte den Wert 0,65 nicht überschreiten (0,85 im dreidimensionalen Fall)
- Das Längenverhältnis einer Zelle sollte den Wert 5 nicht überschreiten.
- In Bereichen hoher Gradienten (z.B. Grenzschichten) sollte das Netz feiner aufgelöst sein um die Ungenauigkeit aufgrund zu grober Maschenweite (*numerische Diffusion*) zu minimieren.

Besonderes Augenmerk soll in dieser Arbeit auf polyedrische Rechenetze (*polyhedral mesh*) gelegt werden. Obwohl ihre Implementierung in vielen kommerziellen CFD-Codes noch nicht ausgereift ist, finden sie wegen ihrer viel versprechenden Eigenschaften immer mehr Verwendung. PERIĆ [20] vergleicht Simulationen auf einem polyedrischen Netz und einem Tetraeder-Netz. Erstere benötigen nur etwa die Hälfte des Arbeitsspeichers und etwa um 80% kürzere Rechenzeiten (Die Zellenanzahl kann beim Umwandeln eines Tetraeder-Netzes in ein polyedrisches Netz um bis zu 80% reduziert werden). Zudem sind die Ergebnisse auf polyedrischen Netzen etwas genauer. Der Grund für die höhere Genauigkeit liegt in der lokalen Anströmung einer Rechenzelle. Beispielsweise verfügt ein Hexaeder über drei optimale Anströmungsrichtungen, die zur höchsten Genauigkeit führen¹. Bei einem Dodekaeder sind es sechs. Diese geometrische Eigenschaft macht polyedrische Rechenetze für drehende und stark verdrallte Strömungen, wie im Falle einer RDC-Kolonne, besonders attraktiv.

¹ Die höchste Genauigkeit ergibt sich bei orthogonaler Anströmung, da die numerische Diffusion verschwindet.

4.1.4 Turbulenzmodellierung

Turbulente Strömungen sind instationär, dreidimensional und durch starke Fluktuationen des Geschwindigkeitsfeldes (und damit durch erhöhten Queraustausch aller Transportgrößen) charakterisiert. Diese Fluktuationen reichen bis zu sehr kleinen Längenskalen mit sehr hohen Frequenzen. Enorme Mengen an Informationen sind daher erforderlich um turbulente Strömungen komplett beschreiben zu können. Aus Kostengründen werden Strömungen mit hohen Reynoldszahlen nur selten (meist zu Forschungszwecken) exakt simuliert. Vielmehr werden für industrielle Anwendungen die Transportgleichungen modifiziert, um die kleinsten Längen- und Zeitskalen herauszufiltern und damit die Rechenzeit zu verkürzen (auf Kosten der Genauigkeit). Die Manipulation der Transportgleichungen führt allerdings dazu, dass neue Gleichungen und Variablen eingeführt werden. Diese Variablen müssen nun mit Turbulenzmodellen bestimmt werden, um die modifizierten *Navier-Stokes*-Gleichungen schließen zu können. Turbulenzmodellierung kann also als Schließung von modifizierten *Navier-Stokes*-Gleichungssystemen betrachtet werden. Im Folgenden soll eine Übersicht über die am weitesten verbreiteten Turbulenzmodelle gegeben werden. Es sei darauf hingewiesen, dass die Wahl eines Turbulenzmodells immer eine Kompromisslösung zwischen Rechenaufwand und Genauigkeit darstellt. Alle Modelle sind physikalisch „falsch“, dennoch sind manche nützlich.

4.1.4.1 Direct Numerical Simulation (DNS)

Die *Direct Numerical Simulation* ist die einzig exakte Formulierung der *Navier-Stokes*-Gleichungen und stellt genau genommen kein Modell dar. Vollständigkeitshalber soll sie aber angeführt werden.

Die DNS löst die *Navier-Stokes*-Gleichungen direkt, diese werden also nicht, wie oben erwähnt, manipuliert. Sie ist instationär, dreidimensional und erfordert sehr feine Gitterauflösungen und sehr kurze Zeitschritte. Sie ist, trotz der heutzutage verfügbaren hohen Rechenkapazitäten, weit davon entfernt als Werkzeug für industrielle Anwendungen zu dienen. Vielmehr wird DNS für akademische Untersuchungen einfacher turbulenter Strukturen und für die allgemeine Evaluierung von Turbulenzmodellen verwendet. Bis zur Simulation einer RDC-Kolonne mit DNS werden noch viele Computer-Generationen kommen und gehen, weshalb DNS nicht näher behandelt werden soll.

4.1.4.2 Large Eddy Simulation (LES)

Bei der Large Eddy Simulation werden, wie der Name schon vermuten lässt, nur grobe Wirbelstrukturen direkt aufgelöst. Kleinskalige Wirbel werden modelliert (*Subgrid-Scale Modelling*). Die Zerlegung der Bilanzgrößen in einen simulierten und einen modellierten Teil erfolgt durch Filterfunktionen. Die großen Wirbel (*large eddies*) sind hauptverantwortlich für den Transport aller Transportgrößen (Impuls, Energie, Stoff). Sie sind anisotrop (richtungsabhängig) und stark abhängig von der jeweiligen Strömungskonfiguration (Geometrie, Randbedingungen etc.). Die „Geschichte“ dieser großen Wirbel ist von großer Bedeutung, weshalb sie nur sehr schwer zu modellieren sind. Die kleinskaligen Wirbel sind tendenziell isotroper (richtungsunabhängiger) und deshalb auch einfacher zu modellieren.

Welche Wirbelstrukturen simuliert werden, wird durch die Wahl geeigneter Filterfunktionen vom Nutzer festgelegt. Es handelt sich um eine räumliche Filterung der *Navier-Stokes*-Gleichungen, die Gitterweite ist also von fundamentaler Bedeutung. Wirbelstrukturen, die kleiner als eine Gitterzelle sind, können also nur modelliert und nicht direkt simuliert werden.

Auch die LES Methode würde bezüglich der Rechenleistung den Rahmen dieser Arbeit sprengen und soll daher nicht weiter behandelt werden.

4.1.4.3 Reynolds-gemittelte Ansätze (RANS Modelle)

Die Reynolds-Mittelung (*Reynolds decomposition*) ist das Fundament der meisten industriell verwendeten Turbulenzmodelle. Vor mehr als 100 Jahren schlug OSBORNE REYNOLDS vor, die momentanen Bilanzgrößen ϕ in einen zeitlichen Mittelwert $\bar{\phi}$ und eine Schwankungsgröße ϕ' zu zerlegen:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi'$$

Die Reynolds-Mittelung führt zu einer statistischen Beschreibung der Strömung, die sich aus gemittelten (*mean flow*) und aus turbulenten Anteilen zusammensetzt. Eingesetzt in die *Navier-Stokes*-Gleichungen, können die gemittelten *Navier-Stokes*-Gleichungen (Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations) hergeleitet werden:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0,$$

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

Die *RANS*-Gleichungen enthalten im Gegensatz zu den *NS*-Gleichungen einen zusätzlichen Term $(-\rho \overline{u_i u_j})$. Dieser Term wird als *Reynolds-Spannungen* bezeichnet und charakterisiert den turbulenten Impulstransport. Er stellt das Bindeglied zwischen gemittelten und fluktuierenden Anteilen des Geschwindigkeitsfeldes dar. Während also DNS alle Frequenzen der turbulenten Schwankungen auflöst und LES die kleinskaligen Wirbel räumlich filtert, stellen die *RANS*-Gleichungen eine zeitliche Filterung der *NS*-Gleichungen dar.

In Abbildung 4.2 ist der Unterschied zwischen DNS, LES und RANS noch einmal schematisch dargestellt.

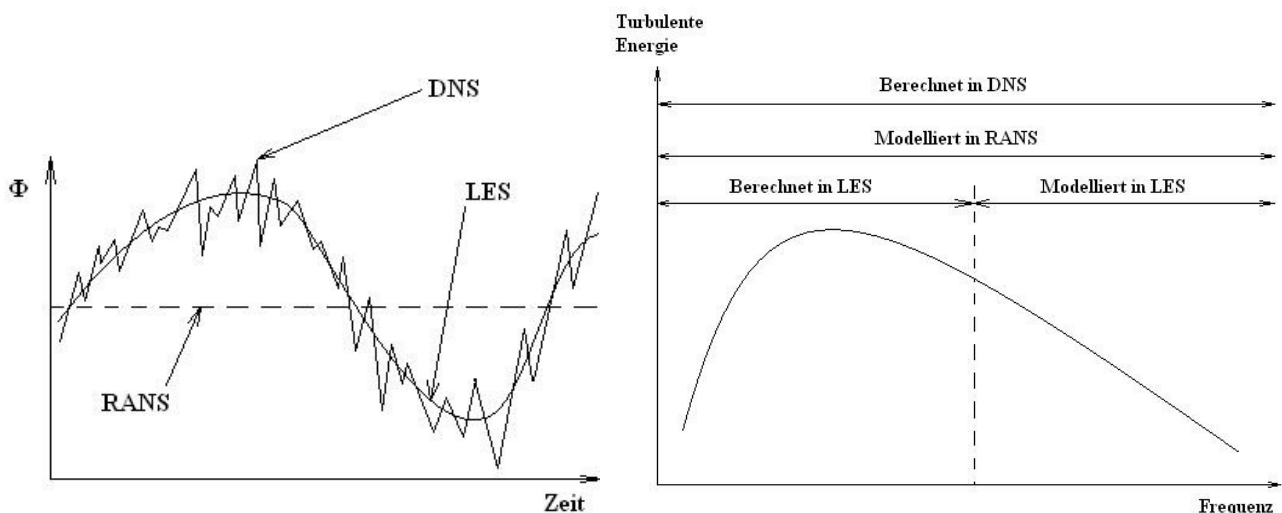


Abbildung 4.2: Schematische Unterschiede zwischen DNS, LES und RANS, [18]. Links: Unterschiedliche Auflösung der Bilanzgröße Φ über der Zeit. Rechts: Turbulente Energie über der Zeit.

Durch die Einführung der *Reynolds-Spannungen* wurden zusätzliche Unbekannte in das Gleichungssystem gebracht ohne die Anzahl der Gleichungen zu erhöhen. Die *Reynolds-Spannungen* müssen also modelliert werden um das Gleichungssystem schließen zu können. Die Schließung dieses Gleichungssystems ist der eigentliche Kern der *RANS*-Turbulenzmodellierung. Hierfür stehen die folgenden zwei Ansätze zur Verfügung:

- Wirbelviskositätsmodelle (beruhend auf der *Boussinesq Approximation*)
- Reynoldsspannungsmodelle (RSM)

4.1.4.3.1 Wirbelviskositätsmodelle

Boussinesq Approximation

BOUSSINESQ geht davon aus, dass der turbulente Impulstransport ein diffusiver Prozess ist und die *Reynolds-Spannungen* mit einer turbulenten Viskosität analog zur molekularen Viskosität modelliert werden können. Die Komponenten der *Reynolds-Spannungen* sollen zu den mittleren Geschwindigkeitsgradienten proportional sein, mit der turbulenten Viskosität μ_t als Proportionalitätsfaktor:

$$\left(-\overline{\rho u_i u_j}\right) = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij}.$$

Das Fluid selbst kann also als Pseudo-Fluid mit einer erhöhten Viskosität $\mu_{eff} = \mu + \mu_t$ interpretiert werden, obwohl die turbulente Viskosität eine Systemgröße und keine Stoffgröße darstellt. Je nachdem wie viele Gleichungen nun verwendet werden um die turbulente Viskosität μ_t zu berechnen spricht man von Null-, Ein- bzw. Zwei-Gleichungs-Modellen. Unter *Wirbelviskositätsmodellen* versteht man also einen Satz von Gleichungen, die für die Bestimmung der Wirbelviskosität μ_t benötigt werden.

Ungeachtet der Anzahl der Gleichungen gehen alle Wirbelviskositätsmodelle davon aus, dass die Wirbel isotrop sind und sich wie Moleküle verhalten. Dies führt dazu, dass beispielsweise einfache Strömungsregime wie Rohrströmungen nur bedingt vorhergesagt werden können, da eindeutig keine Isotropie vorliegt.

Anschließend sollen die wichtigsten Zwei-Gleichungs-Modelle, die auf der Boussinesq Approximation basieren, näher beschrieben werden.

Die Null- und Ein-Gleichungs-Modelle (Spalart-Allmaras) sollen nicht näher behandelt werden, da sie auch in der Praxis nur mehr vereinzelt Anwendung finden.

4.1.4.3.1.1 k-ε Modelle

Die k-ε Modelle sind die industriell am weitesten verbreiteten Turbulenzmodelle, da sie einen guten Kompromiss aus Robustheit, Rechenaufwand und Genauigkeit bilden.

Die Wirbelviskosität μ_t wird mit der turbulenten Energie k und der turbulenten Dissipationsrate ε berechnet:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon},$$

mit

C_μ ...Modellkonstante.

k und ε werden mit jeweils einer eigenen Transportgleichung beschrieben:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon,$$

mit

G_k ...Quellterm für turbulente kinetische Energie aufgrund von Geschwindigkeitsgradienten,

G_b ... Quellterm für turbulente kinetische Energie aufgrund von Auftriebskräften,

Y_M ...Beitrag der fluktuativen Ausdehnung zur gesamten Dissipationsrate,

$C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}, C_{3\varepsilon}$...Modellkonstanten,

$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$...turbulente Pr-Zahlen für k bzw. ε,

S_k, S_ε ...Benutzerdefinierte Quellterme.

Das Standard-k-ε-Modell wurde für hohe Reynoldszahlen entwickelt, für die annähernde Isotropie angenommen werden kann. Im wandnahen Bereichen versagt das Modell und es müssen entweder *wall-functions* oder *Low-Re-Modifikationen* angewandt werden.

In Strömungsregimen mit starken Verwirbelungen bzw. starken Krümmungen der Stromlinien liefert das k-ε-Modell ebenfalls schwache Vorhersagen. Hierfür wurden einige Modifikationen der Parameter vorgenommen, die bekanntesten sind das Realizable-k-ε-Modell und das RNG-k-ε-Modell.

4.1.4.3.1.2 Das RNG-k- ε -Modell

Im Gegensatz zum Standard-k- ε -Modell enthält das RNG-k- ε -Modell einen zusätzlichen Quellterm in der Dissipationsgleichung. Dieser Term bewirkt eine geringere Dissipation in Bereichen mit hohen Dehnungsgeschwindigkeiten, das Standard-k- ε -Modell ist hier erfahrungsgemäß zu dissipativ. In Strömungen mit stark gekrümmten Geometrien und verwirbelten Strömungen liefert dieses Modell also genauere Ergebnisse.

4.1.4.3.1.3 Das Realizable-k- ε -Modell

In Strömungen mit hohen mittleren Dehnungsgeschwindigkeiten können beim Standard-k- ε -Modell die Normalspannungen negativ werden. Beim Realizable-k- ε -Modell wird statt der Konstante C_μ eine Funktion verwendet, die den lokalen Strömungszustand berücksichtigt und negative Normalspannungen verhindert. Des Weiteren enthält die Transportgleichung für die Dissipationsrate ε einen zusätzlichen Produktionsterm.

Das Realizable-k- ε -Modell liefert für rotationsbehaftete und ablösungsbehaftete Strömungen typischerweise genauere Vorhersagen als das Standard-k- ε -Modell oder das RNG-k- ε Modell.

4.1.4.3.1.4 k- ω -Modelle

Neben den k- ε -Modellen sind auch die k- ω -Modelle sehr weit verbreitet. Die turbulente Viskosität μ_t wird mit Hilfe der turbulenten Energie k und der spezifischen Dissipationsrate $\omega \propto \varepsilon / k$ bestimmt:

$$\mu_t = \rho \alpha^* \frac{k}{\omega}$$

α^* ... *Low-Re*-Korrekturkoeffizient

Die turbulente kinetische Energie k und die spezifische Dissipationsrate (turbulente Frequenz) ω werden wiederum mit zwei Transportgleichungen bestimmt. Der wesentliche Unterschied zu den k- ε -Modellen besteht in der Modifikation bezüglich *Low-Re*-Effekten, Kompressibilität und Scherströmungen. k- ω -Modelle liefern bei druckbedingten Ablösevorgängen in Wandnähe genauere Vorhersagen als das Standard-k- ε -Modell, sind aber im Hauptteil außerhalb der wandnahen Grenzschichten (Bulkströmung) dem Standard-k- ε -Modell unterlegen.

4.1.4.3.2 Reynoldsspannungsmodelle (RSM)

Bei den RSM-Modellen werden die einzelnen Komponenten des Reynolds-Spannungstensors berechnet (algebraisch oder mit Transportgleichungsmodellen). Die Richtungsabhängigkeit wird damit berücksichtigt. RSM liefert also für stark verdrallte Strömungen bzw. komplexe Strömungen mit starken Sekundärströmungen die genauesten Ergebnisse unter den *RANS*-Modellen. Allerdings steigt auch die Rechenzeit deutlich an, da für jede Rechenzelle zusätzliche Transportgleichungen für alle 6 Komponenten (bei 3D) des Reynolds-Spannungstensors gelöst werden müssen, sowie eine zusätzliche Transportgleichung zur Bestimmung der Größenordnung von ϵ . Insgesamt werden also in einer dreidimensionalen Simulation mit RSM für jede Rechenzelle 11 Transportgleichungen gelöst¹ (Kontinuität, 3x Impuls, 6x Reynolds-Spannungen, ϵ).

4.1.5 Behandlung der Grenzschicht

Besonderes Augenmerk ist bei fast jeder Problemstellung auf die wandnahen Bereiche zu legen. Die meisten *k- ϵ* - und RSM-Modelle sind auf turbulente Strömungen beschränkt, der wandnahe Bereich ist aber aufgrund von molekularen Viskositätseffekten immer laminar. In der Grenzschicht treten die größten Gradienten aller Bilanzgrößen auf.

Zahlreiche Experimente belegen, dass die turbulente Grenzschicht in drei Bereiche unterteilt werden kann (Abbildung 4.3):

- Viskose Unterschicht (*viscous sublayer*)
- Übergangsschicht (*buffer layer*)
- Voll-turbulente Schicht (*log-law region*)

In der viskosen Unterschicht hat die molekulare Viskosität den größten Einfluss (die Strömung ist laminar), während in der *log-law-region* die voll ausgebildete Turbulenz den größten Einfluss hat. Zwischen diesen beiden Schichten liegt der Übergangsbereich (*buffer layer*), in dem der Einfluss der Viskosität und der Turbulenz von gleicher Größenordnung ist.

¹ Beim *S-k- ϵ* -Modell werden vergleichsweise nur 6 Transportgleichungen pro Rechenzelle gelöst.

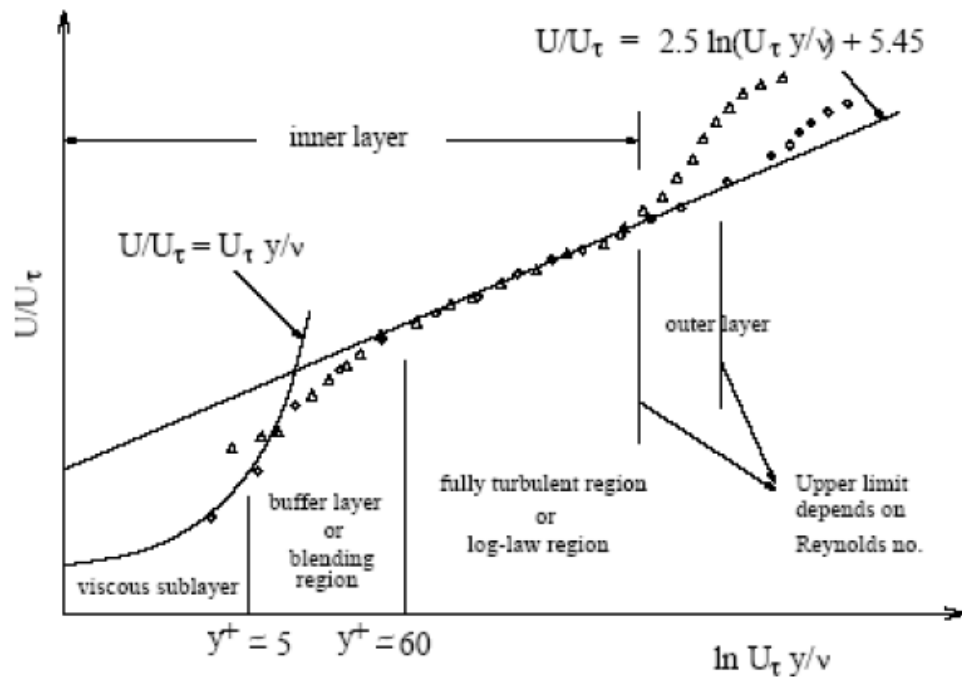


Abbildung 4.3: Geschwindigkeitsverlauf in der turbulenten Grenzschicht, [18].

Grundsätzlich gibt es bei der Behandlung von Grenzschichten zwei Herangehensweisen: Wandfunktionen und das „*Near-wall Modelling*“ (Abbildung 4.4). In der ersteren werden die Bereiche, die von der Viskosität beeinflusst werden (Viskose Unterschicht und Übergangsschicht) nicht aufgelöst. Stattdessen werden semi-empirische Funktionen definiert um diese zwei Bereiche zu überbrücken. Hierfür muss die Dicke der wandnächsten Schicht so gewählt werden, dass sowohl die viskose Unterschicht als auch die Übergangsschicht darin enthalten sind. Als Maß für die Wahl der geeigneten Dicke der wandnächsten Zellschicht dient der dimensionslose Abstand y^+ . Dieser ist wie folgt definiert:

$$y^+ = \frac{y u_t}{\nu} \quad \text{mit} \quad u_t = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}},$$

mit

u_t ... Wandschubspannungsgeschwindigkeit.

Die Dicke der ersten Zellschicht y sollte so gewählt werden, dass y^+ im Bereich zwischen 30 und 300 liegt. Die Wahl der geeigneten Dicke ist ein iterativer Prozess, da für die Berechnung der y^+ Werte das gemittelte Strömungsfeld bekannt sein muss. Es wird also mit einem Netz begonnen, das geeignet erscheint. Dann werden aus der Lösung die y^+ Werte für die wandnächsten Zellen berechnet, diese gegebenenfalls verfeinert und die Simulation wiederholt.

Die zweite Möglichkeit zur Behandlung der Grenzschicht ist das *Near-wall Modelling* bzw. *Enhanced Wall Treatment*. Die durch Viskosität beeinflussten Bereiche werden aufgelöst. Dies wird durch eine graduelle Verdichtung der Zellen in Wandnähe erreicht. Der y^+ Wert der wandnächsten Zellschicht sollte $y^+ \sim 1$ betragen.

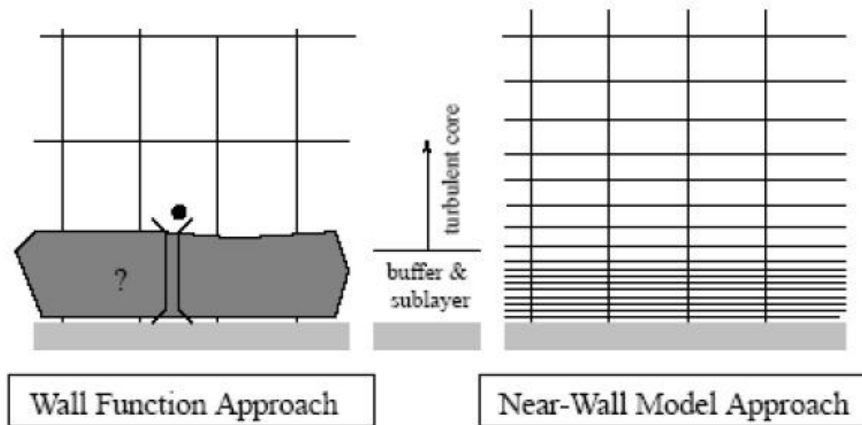


Abbildung 4.4: Herangehensweisen der Wandbehandlung, [18].

Der Ansatz der Wandfunktionen ist sicherlich sehr ökonomisch und robust, allerdings versagt er bei hohen Körperkräften, starken Druckgradienten oder *low-Re*-Effekten. In diesen Fällen kann die Genauigkeit mit *Enhanced Wall Treatment* durch sehr aufwändige Rechengitter, längere Rechenzeiten und höheren Speicherbedarf erkauft werden. Die Simulationen in dieser Arbeit wurden ausschließlich mit *Enhanced Wall Treatment* durchgeführt.

Abschließend soll noch einmal eine Übersicht über die oben besprochenen Turbulenzmodelle gegeben werden (Tabelle 4.1). Die benötigte Rechenleistung sowie die physikalische Richtigkeit nehmen nach unten hin ab.

Tabelle 4.1: Turbulenzmodelle - Übersicht

Modell		Eigenschaften	Beschränkungen
Direct Numerical Simulation (DNS)		<ul style="list-style-type: none"> kein Turbulenzmodell wird verwendet exakte Formulierung der <i>NS</i>-Gleichungen die präziseste Abbildung der Wirklichkeit 	<ul style="list-style-type: none"> extrem feine Gitter & kleine Zeitschritte notwendig enorme Rechenkosten / Datenmengen für industrielle Problemstellungen noch nicht anwendbar
Large Eddy Simulation (LES)		<ul style="list-style-type: none"> große Wirbel werden direkt simuliert, kleine werden modelliert. "Geschichte" der Wirbel wird berücksichtigt. 	<ul style="list-style-type: none"> wie DNS numerisch zu aufwändig
Reynolds Stress Model (RSM)		<ul style="list-style-type: none"> Isotropie wird nicht angenommen genauestes <i>RANS</i>-Modell Auf sehr komplexe Strömungsregime anwendbar 	<ul style="list-style-type: none"> hohe Rechenkosten (11 Gleichungen)
k-ε-Modelle (6 Transportgleichungen)	Standard k-ε	<ul style="list-style-type: none"> das am besten evaluierte Modell robust, einfach und stabil breite industrielle Anwendung für hohe Re-Zahlen entwickelt 	<ul style="list-style-type: none"> Isotropie wird angenommen schwache Vorhersage bei: <ul style="list-style-type: none"> stark gekrümmten Stromlinien, verdrallten Strömungen, Ablösungen / Wandnähe
	RNG k-ε	<ul style="list-style-type: none"> zusätzlicher Quellterm in der Dissipationsgleichung weniger dissipativ als S-k-ε Verbesserung bei Stromlinienkrümmung und Verdrallung 	<ul style="list-style-type: none"> Isotropie wird angenommen Schwächer als S-k-ε bei Rauchfahnen und axialsymm. Düsenströmungen
	Realizable k-ε	<ul style="list-style-type: none"> Verbesserung bei hohen Dehnungsgeschwindigkeiten schwach verdrallten Strömungen Ablösungen 	<ul style="list-style-type: none"> Isotropie wird angenommen
k-ω-Modelle (6 T.-gl.)		<ul style="list-style-type: none"> spezifische Dissipationsrate ω in Wandnähe genauer als S-k-ε keine Wandfunktionen benötigt 	<ul style="list-style-type: none"> Isotropie wird angenommen Für Bulkströmungen schwächer als S-k-ε

4.2 2D-Simulation

Wie bereits von DRUMM & BART [17] gezeigt, liefern 2D- und 3D-Simulationen identische Ergebnisse für den Fall völliger Achsensymmetrie. Die Ersparnis an Rechenzeit bei etwa 10.000 Rechenzellen in 2D und etwa 2,5 Millionen Zellen in 3D ist offensichtlich¹. Dies ist aber nur dann gültig, wenn es nicht auf Grund von Störstellen (z.B. Statorhülsen) zum Symmetriebruch kommt. Will man den Einfluss der Statorhülsen miteinbeziehen, muss der kleinste wiederkehrende periodische Teil für die Simulation herangezogen werden. Im Falle der vorliegenden Laborkolonnen wäre das ein 90°-Zylindersegment, da vier Distanzhülsen beim Aufbau des RDC zum Einsatz gekommen sind. Dieser Fall soll im Kapitel 4.3 diskutiert werden. Zunächst sollen aber die in *Ansys Fluent 12* verfügbaren Turbulenzmodelle mittels 2D-Simulationen und dem Vergleich mit den PIV-Daten evaluiert werden.

4.2.1 Konvergenzkriterien

Konvergenz bedeutet, dass alle Transportgleichungen bis zu einer definierten Fehlertoleranz genau berechnet wurden und sich die Lösung nicht mehr signifikant ändert. Als Beurteilungskriterien für Konvergenz wurden in allen durchgeführten 2D- und 3D-Simulationen einerseits die Residuen der Transportgleichungen und andererseits zwei Variablen-Monitore² verwendet.

Der üblicherweise geforderte Mindestwert von 10^{-3} für skalierte Residuen wurde in allen Simulationen um einige Größenordnungen unterschritten.

Die zwei Monitore dienen zur quantitativen Überwachung des Iterationsfortschrittes. Hierfür wurde die in Kapitel 3.5.3 genannte Linie zwischen Rotorscheibe und Außenwand gewählt. Ein Monitor zeigte die maximale Axialgeschwindigkeit entlang dieser Linie an, der andere den Durchschnittswert³. Erst als beide Monitore einen über mehrere 1000 Iterationen konstanten Wert aufwiesen, wurde die Lösung als konvergiert betrachtet, was eine vielfach bessere Strategie zum Verlauf der Konvergenz darstellt als die reine Beurteilung der Residuen.

¹ Die Anzahl an Rechenzellen bezieht sich auf die in dieser Arbeit verwendeten Rechennetze für 3 *Compartments* mit *Enhanced Wall Treatment* und einer maximalen Zellengröße von etwa 1 [mm].

² Variablen-Monitore sind der einfache Plot einer beliebigen Größe an einer gewünschten Stelle über dem Iterationsfortschritt.

³ In den 3D-Simulationen wurde auf Grund des axialen Symmetriebruches der Durchschnittswert der Tangentialgeschwindigkeit gewählt.

4.2.2 Rechennetz

Beim Erstellen des 2D-Rechengitters stellt sich zunächst die Frage nach der Anzahl der zu simulierenden *Compartments*. Ein *Compartment* stellt den kleinsten immer wiederkehrenden Teil der Kolonne dar, prinzipiell wäre also die Simulation eines einzigen *Compartments* mit periodischen Randbedingungen am ökonomischsten. Wie jedoch HADERER [19] in seiner Arbeit zeigen konnte, kommt es bei der Simulation eines einzelnen *Compartments* auf Grund von Rückströmungen zu Konvergenzproblemen. Werden mehrere *Compartments* in das Simulationsgebiet miteinbezogen, so können Schwankungen iterativ eliminiert werden bevor sie durch die periodische Randbedingung wieder an den Einlass des Simulationsgebietes gesetzt werden. Obwohl erfahrungsgemäß drei *Compartments* für eine konvergierte Lösung ausreichen würden, wurden für alle 2D-Simulationen fünf *Compartments* gewählt. Bei höheren Drehzahlen nimmt die axiale Vermischung zu, was sich negativ auf die numerische Stabilität (Konvergenz) auswirkt. Die Residuen und Monitore neigen bei höheren Drehzahlen stärker zum Schwingen, wenn nicht genügend viele *Compartments* simuliert werden bzw. die beiden translatorisch-periodischen Systemgrenzen (Abbildung 4.5) zu nah aneinander liegen. Die höhere Rechenzeit (~10.000 Zellen für 3 *Comp.* bzw ~17.000 für 5 *Comp.*) fällt im zweidimensionalen Fall kaum ins Gewicht.

Abbildung 4.5 zeigt das verwendete zweidimensionale Rechennetz. Es besteht aus genau 17126 viereckigen Rechenzellen, die zur Wand hin verdichtet sind (*Enhanced Wall Treatment*). Diese Verdichtung wurde mit einer "*Boundary Layer*"-Funktion in *Ansys Gambit 2.4.6.* realisiert

Tabelle 4.2: Übersicht - 2D axialsymmetrisches Rechennetz

Zellenanzahl:	17126
Zellenelemente:	unstrukturierte Vierecke, (<i>pave</i>)
Maximale Seitenlänge (<i>spacing</i>):	1 [<i>mm</i>]
Boundary Layer:	
Wandnächste Zellenbreite:	0,04 [<i>mm</i>]
Wachstumsrate der Zellenbreite:	1,26
Reihenanzahl:	14

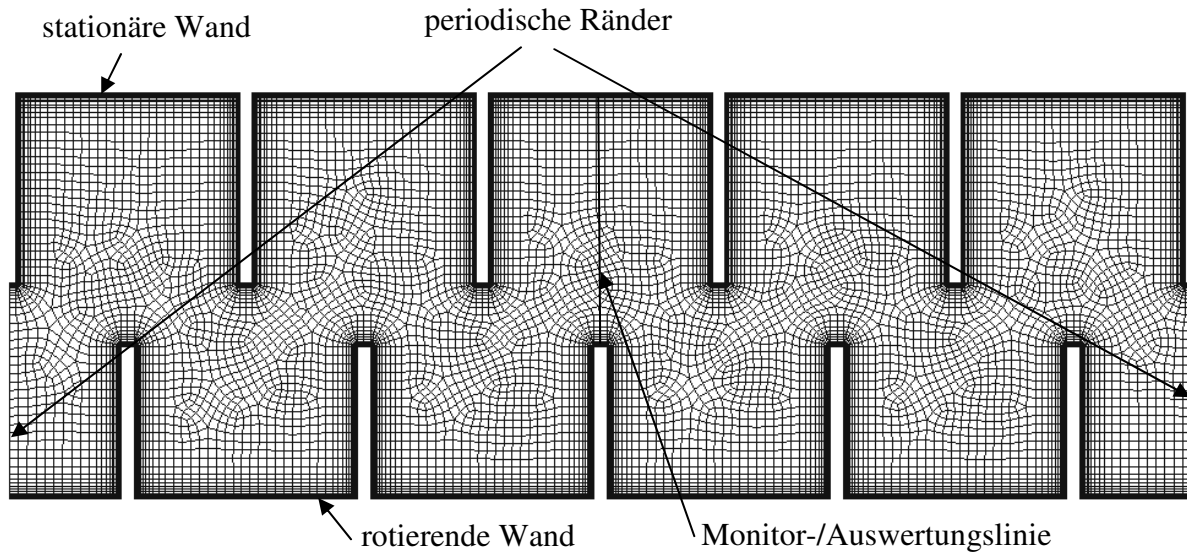


Abbildung 4.5: axialsymmetrisches 2D-Rechengitter mit 5 Compartments und *Enhanced Wall Treatment*.

Die Bestimmung der Breite der wandnächsten Zelle ist, wie in Kapitel 4.1.5 beschrieben, ein iterativer Prozess. Hierfür wurden im Vorfeld zwei Testsimulationen bei 400 [rpm] durchgeführt. Der benötigte Abstand der wandnächsten Zelle konnte dann auf etwa 0.04 [mm] extrapoliert werden und der y^+ -Wert lag schließlich in der Größenordnung von 1. Für die Simulationen mit geringeren Drehzahlen ist dieser Abstand zwar unnötig klein, hat aber auf die Genauigkeit keinerlei negative Auswirkungen. Ein für alle 2D-Simulationen einheitliches Rechengitter wurde in diesem Fall der geringen Ersparnis an Rechenzeit vorgezogen. Abbildung 4.6 zeigt noch einmal einen vergrößerten Ausschnitt des Rechengitters rund um die Rotorscheibe.

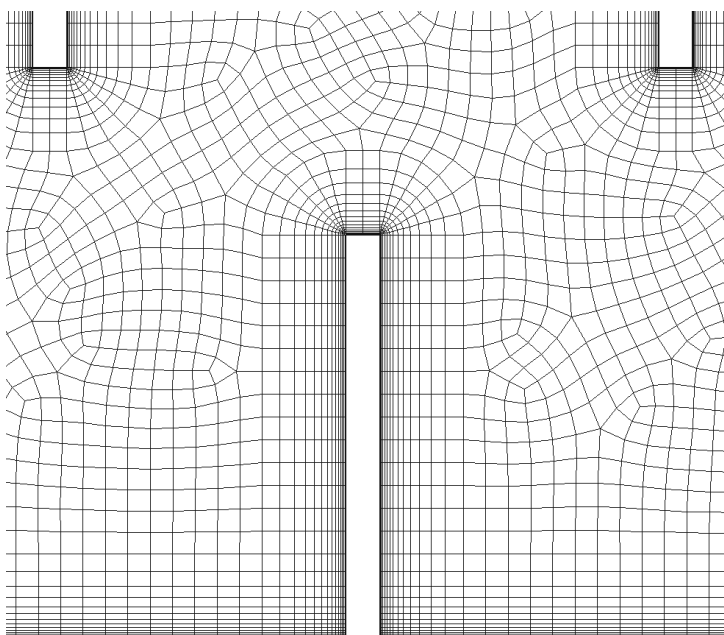


Abbildung 4.6: Verdichtung der Rechenzellen im wandnahen Bereich, *Enhanced Wall Treatment*.

Die maximale Zellenschiefe (*Skewness*) ist mit 0,53 deutlich unter dem geforderten Wert von 0,65 (Kapitel 4.1.3.2), 99% der Zellen haben eine *Skewness* von $< 0,36$. Die 14 Reihen der *Boundary Layer* wurden wegen des sanften Überganges in die Bulk-Zellen gewählt, benachbarte Zellen sollten im Sinne der numerischen Stabilität möglichst gleich groß sein.

4.2.3 Randbedingungen & Diskretisierung

Wie bereits erwähnt, wurde am Ein- und Auslass eine periodische Randbedingung gesetzt. Die Zellknotenpunkte entlang dieser beiden Kanten sind identisch, alle Werte am "Auslass" werden für die nachfolgende Iteration an den "Einlass" gesetzt. Der periodische Massenstrom von 33,26 [g/s] (entspricht $120 [l_{Wasser}/h]$ ¹) wurde als „*mass-flow*“ eingestellt.

Die Statorscheiben und die Kolonnenaußenwand wurden als stationäre Wände (*no slip*), die Rotorwelle und die Rührerscheiben als rotierende Wände definiert. Die Drehzahl wurde zwischen den jeweiligen Einstellungen entsprechend variiert. Da nur die kontinuierliche Phase simuliert wurde und deshalb keine Dichteunterschiede vorkommen, wurde die Gravitation nicht berücksichtigt.

Der stationäre *entkoppelte* Löser wurde angewandt. Als Diskretisierungsalgorithmen wurden *PRESTO!* für den Druck und *QUICK* für alle übrigen Transportgleichungen verwendet², die Genauigkeit war also 3. Ordnung. Für die *Druck-Geschwindigkeits-Koppelung* wurde *SIMPLE* gewählt, der Wärmeübergang (d.h. die Energiegleichung) wurde vernachlässigt.

Im Anschluss sollen die Ergebnisse der 2D-Simulationen diskutiert werden. Die in *Ansys Fluent 12* verfügbaren Turbulenzmodelle werden einzeln mit den Ergebnissen des PIV-Experimentes verglichen (sowohl die axialen Geschwindigkeitsprofile auf einer Linie zwischen Rotorscheibe und Außenwand als auch die Geschwindigkeitsvektorfelder³ in der untersuchten Ebene). Abschließend sollen die tangentialen Geschwindigkeitsprofile mit den experimentellen Daten von WEIB [16] verglichen und die gewählte Gitterfeinheit überprüft werden.

¹ Die experimentell untersuchten Betriebszustände mit 100 [l/h] und 190 [l/h] wurden wegen des geringen Einflusses nicht simuliert.

² Sinnvoll für rotierende und stark verdrallte Strömungen [24].

³ Die Darstellung von Vektorfeldern ist in *Ansys Fluent* etwas problematisch. In jede Rechenzelle wird ein Geschwindigkeitsvektor gesetzt, im Falle von "*Enhanced Wall Treatment*" bedeutet dies eine Unmenge an Vektoren in Wandnähe, der Vergleich mit dem Vektorfeld des Experimentes wird damit erschwert. Für den Vergleich wurde deshalb ein grobes Rechenetz erzeugt. Die Zellengröße (*spacing*) dieses Netzes entsprach dabei der Größe der *Interrogation windows* aus dem Experiment (Kapitel 3.4). Die konvergierten Lösungen wurden für die Auswertung auf dieses grobe Netz interpoliert, die Vektorpfeile waren damit wie im Experiment gleichmäßig über das *Compartment* verteilt.

4.2.4 Evaluierung der Turbulenzmodelle

4.2.4.1 Standard-k-ε

Das Standard k-ε-Modell liefert bekannterweise schwache Vorhersagen bei Strömungen mit starken Stromlinienkrümmungen. Dies wird beim Vergleich mit dem PIV-Experiment klar ersichtlich (Abbildung 4.7). Das Wirbelzentrum (Schnitt mit der Abszisse) wird deutlich versetzt vorhergesagt ($r = 0.057$ bei S-k-ε, $r = 0.063$ experimentell, 20% Abweichung). Die maximalen Axialgeschwindigkeiten im rechten Wirbel sind zwar in den experimentellen Daten nicht ersichtlich, dennoch lässt der Trend große Abweichungen erwarten.

Der Vergleich der Vektorfelder in der untersuchten Ebene (Abbildung 4.8) macht die Schwächen des Standard k-ε-Modells noch deutlicher. Im rechten unteren Eck des *Compartments* wird ein nicht vorhandener Wirbel vorhergesagt. Der wandnahe Bereich oberhalb der Statorscheibe wird auf Grund der Ablösung völlig falsch prognostiziert, ebenso der wandnahe Bereich neben der Rotorwelle. Die Annahme der Isotropie (Boussinesq Approximation) erscheint für den komplexen Strömungsverlauf innerhalb einer RDC-Kolonne zweifelhaft.

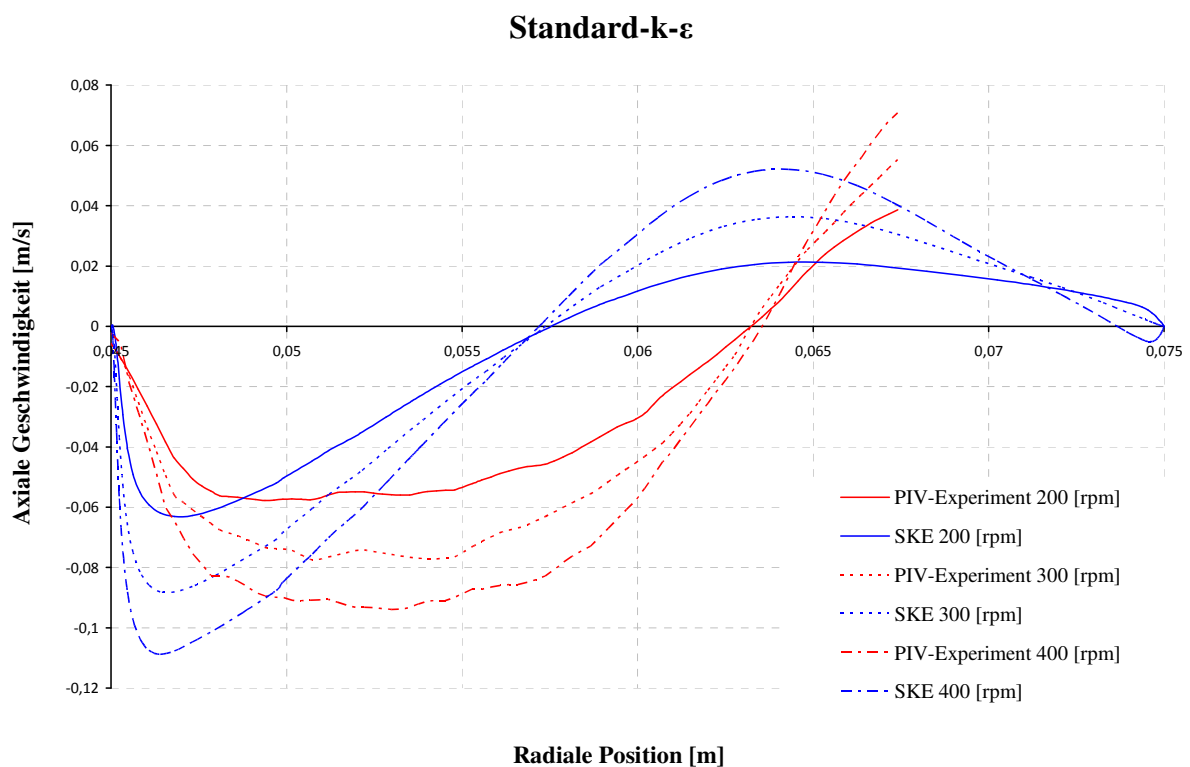


Abbildung 4.7: Axiale Geschwindigkeitsprofile auf Rotorniveau bei 120 [l/h] und verschiedenen Drehzahlen.

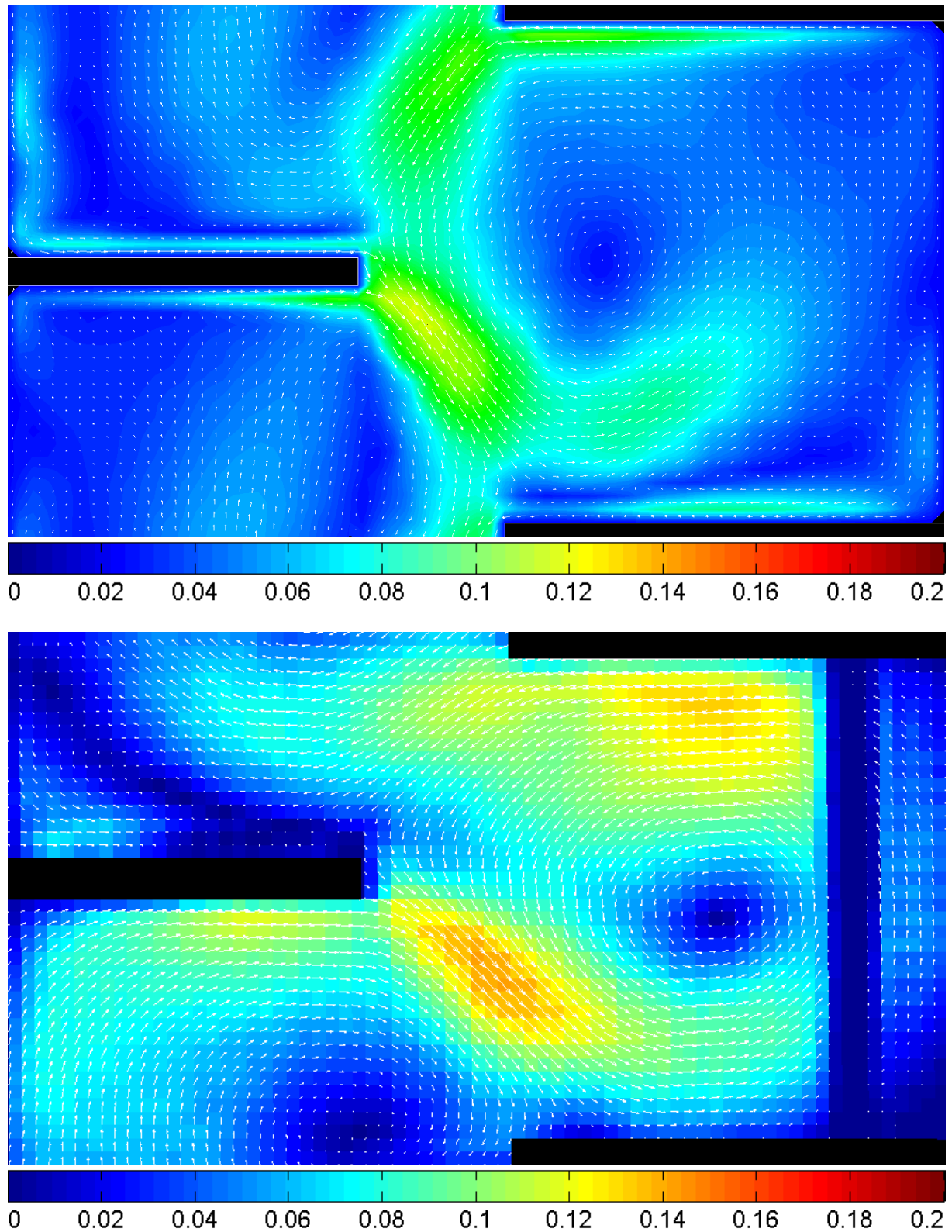


Abbildung 4.8: Vergleich der Geschwindigkeitsvektorfelder mit einheitlicher Farbskalierung in $[m/s]$, $300[rpm]$, $120 [l/h]$, Standard $k-\varepsilon$ (oben), PIV (unten).

4.2.4.2 Realizable-k- ϵ

Die "realizability"-Modifikation des Standard-k- ϵ -Modells (Kapitel 4.1.4.3.1.3) lässt erfahrungsgemäß Verbesserungen für leicht verdrehte Strömungen erwarten. Diese konnten im konkreten Fall nicht beobachtet werden. Die axialen Geschwindigkeitsprofile weisen zum Verwechseln ähnliche Abweichungen wie bei Standard-k- ϵ auf. Zusätzlich deuten die wellenförmigen Schiefe in Achsennähe und die leichten Schwingungen der Residuen und Monitore auf instationäre Bereiche (schwingende Wirbel) im Lösungsgebiet hin.

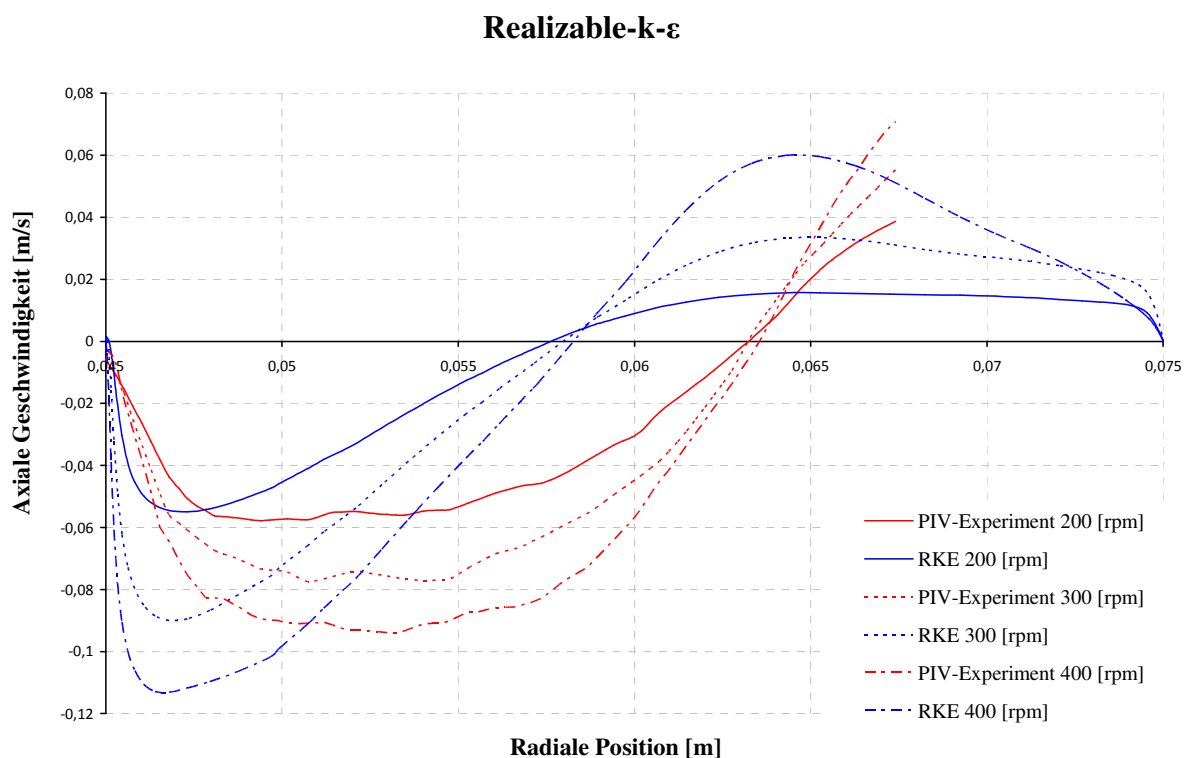


Abbildung 4.9: Axiale Geschwindigkeitsprofile auf Rotorniveau bei 120 [l/h] und verschiedenen Drehzahlen.

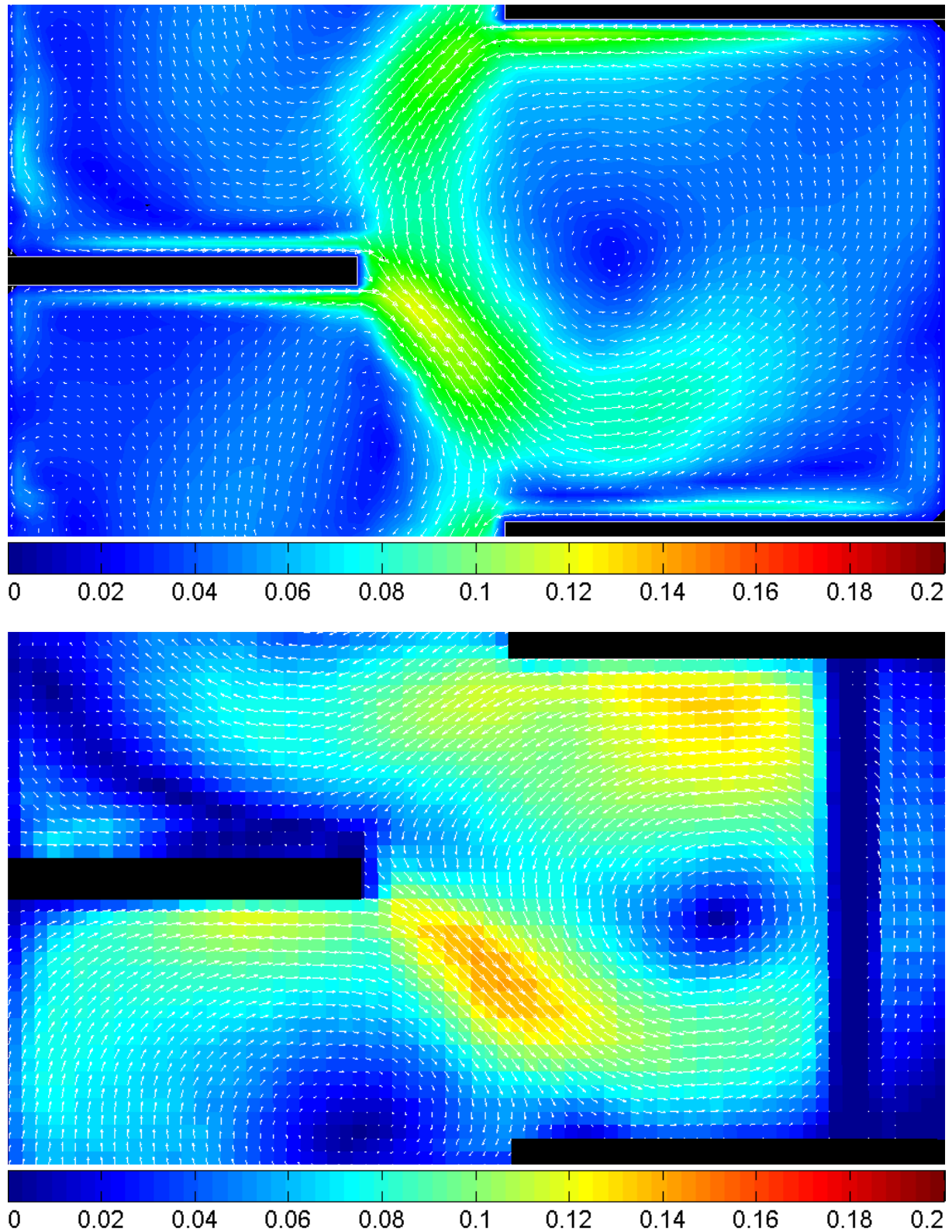


Abbildung 4.10: Vergleich der Geschwindigkeitsvektorfelder mit einheitlicher Farbskalierung in $[m/s]$, $300[rpm]$, $120 [l/h]$, Realizable-k- ε (oben), PIV (unten).

4.2.4.3 RNG-k- ϵ

RNG-k- ϵ lieferte die besten Ergebnisse unter den k- ϵ -Modellen. Interessant ist die Beobachtung, dass die Abweichung der Geschwindigkeitsprofile bei geringeren Drehzahlen (200 [rpm]) zunahm. Die Vorhersage ist ähnlich mangelhaft wie bei den übrigen k- ϵ -Modellen (Abbildung 4.11). Bei höheren Drehzahlen (300 und 400 [rpm]) stimmt aber die Lage des rechten Wirbelzentrums sowie Form und Größenordnung der Kurven überraschend gut mit dem Experiment überein (Abbildung 4.12, Abbildung 4.13).

Beim Vergleich der Vektorfelder wird allerdings ersichtlich, dass nur der rechte Wirbel akzeptabel vorhergesagt wird. Die linke Hälfte des *Compartments* weist die selben Schwächen aller übrigen k- ϵ -Modelle auf, somit kann kein k- ϵ -Modell seriöserweise empfohlen werden. Die Annahme der Isotropie (Boussinesq Approximation) darf also nicht getroffen werden.

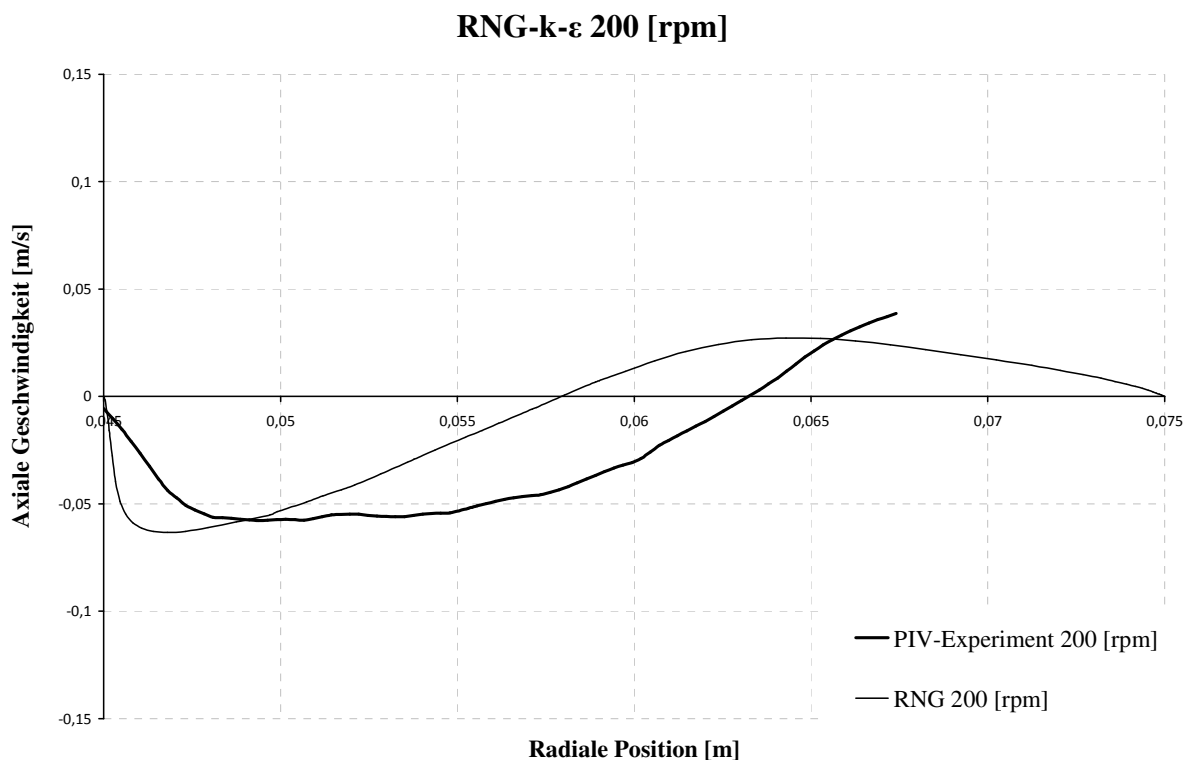


Abbildung 4.11: Axiales Geschwindigkeitsprofil auf Rotorniveau bei 200 [rpm] und 120 [l/h].

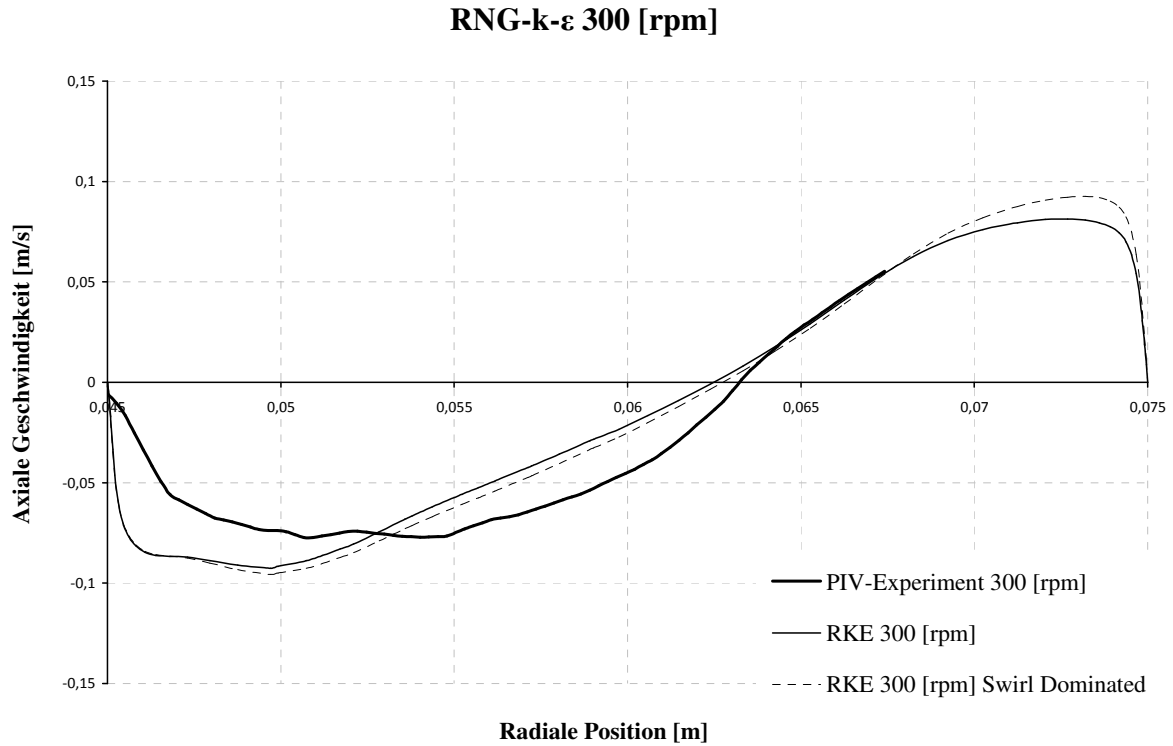


Abbildung 4.12: Axiales Geschwindigkeitsprofil auf Rotorniveau bei 300 [rpm] und 120 [l/h]¹.

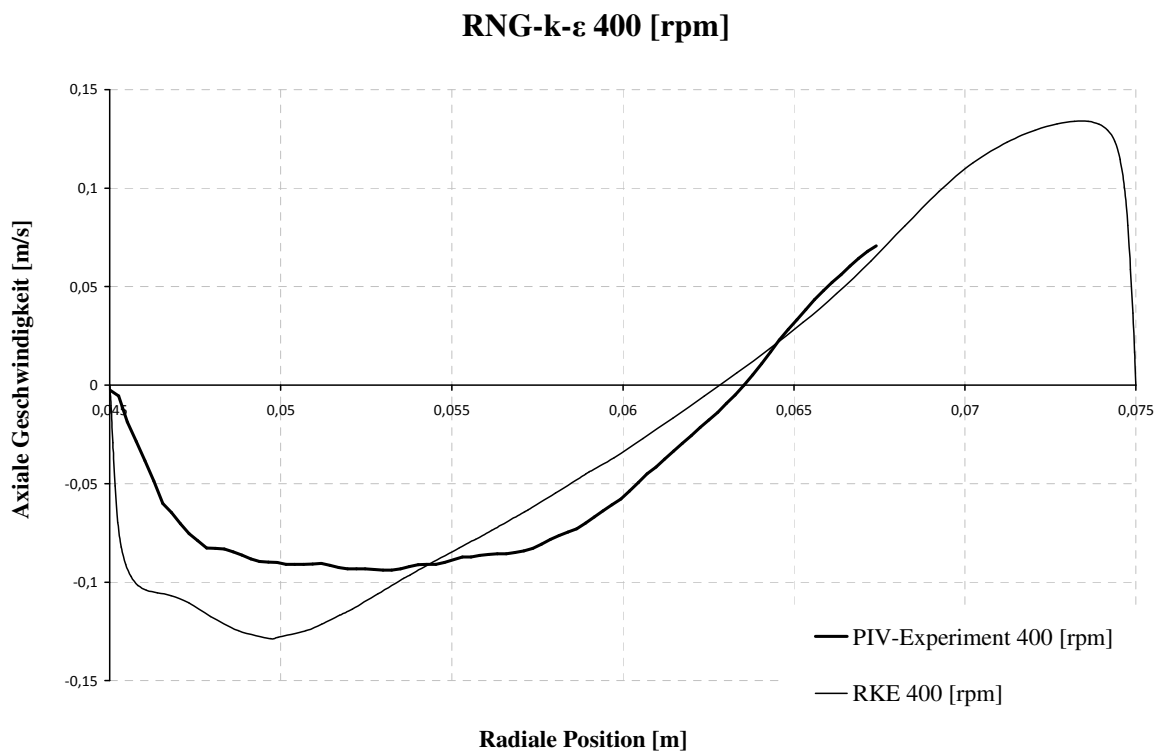


Abbildung 4.13: Axiales Geschwindigkeitsprofil auf Rotorniveau bei 400 [rpm] und 120 [l/h].

¹ Für den Betriebszustand von 300 [rpm] wurde zusätzlich die "Swirl Dominated"-Option untersucht, diese hatte jedoch nur minimale Auswirkungen auf das Ergebnis.

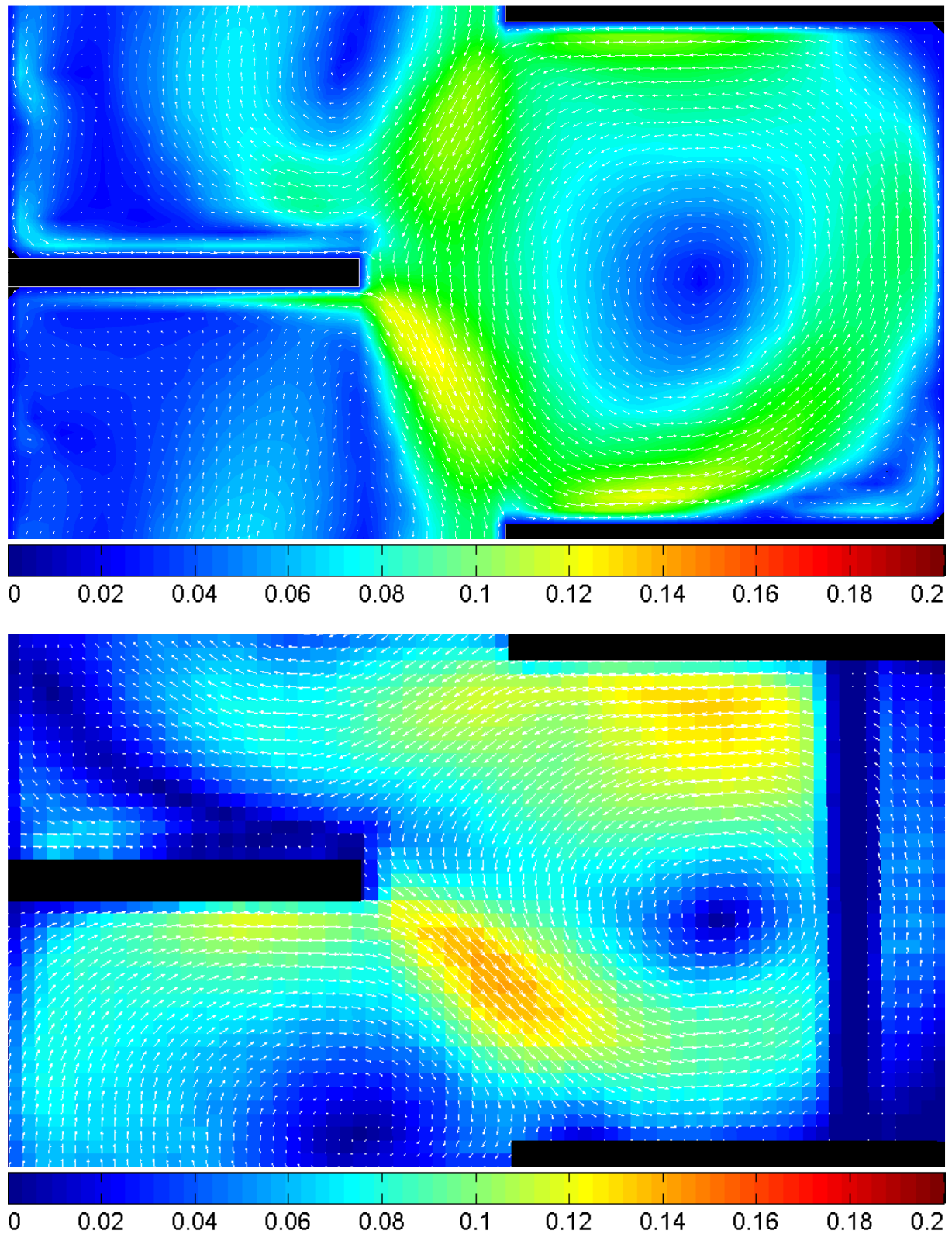


Abbildung 4.14: Vergleich der Geschwindigkeitsvektorfelder mit einheitlicher Farbskalierung in $[m/s]$, $300[rpm]$, $120 [l/h]$, RNG $k-\varepsilon$ (oben), PIV (unten).

4.2.4.4 Standard-k- ω , k-kl- ω , Transition-SST

Aus Gründen der Vollständigkeit sollen die Ergebnisse der restlichen in *Ansys Fluent 12.0* verfügbaren Modelle kurz erwähnt werden.

Unter den k- ω -Modellen konnte keines zur akzeptablen Konvergenz gebracht werden¹. Sowohl die Residuen als auch die Monitore wiesen starke periodische Schwingungen auf, was auf eine instationäre Lösung hindeutet.

Die Ergebnisse von k-kl- ω und Transition-SST sollen ohne nähere Einleitung der Modelle präsentiert werden, da ebenfalls leichte Schwingungen und große Abweichungen der axialen Geschwindigkeitsprofile zu beobachten waren (Abbildung 4.15). Für eine detailliertere Beschreibung dieser Modelle sei auf die Literatur verwiesen [18].

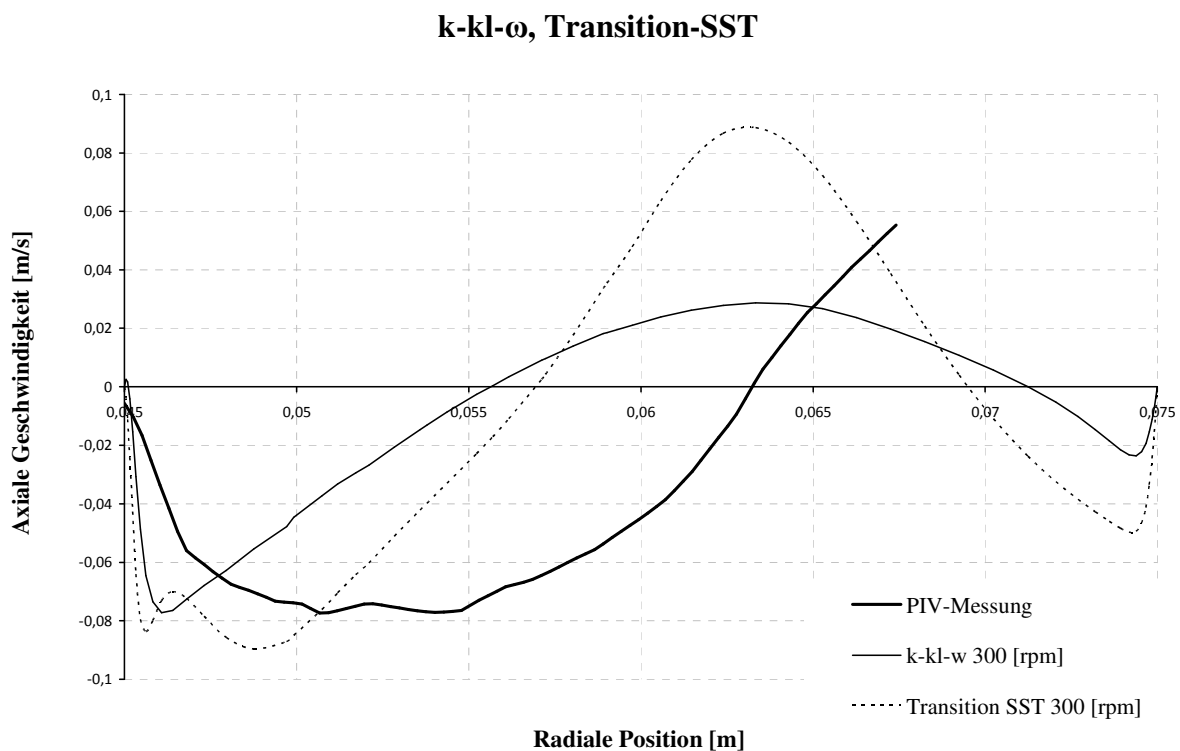


Abbildung 4.15: Axiale Geschwindigkeitsprofile auf Rotorniveau bei 300 [rpm] und 120 [l/h], k-kl- ω und Transition-SST.

¹ Die Verringerung der *Unterrelaxations*-Faktoren oder Verwendung besserer Startwerte brachte keine sichtbare Verbesserung.

4.2.4.5 Reynolds Stress Model (RSM)

Wie bereits von HADERER [19] und DRUMM [17] berichtet, eignet sich RSM als einziges *RANS*-Modell für die Beschreibung des einphasigen Strömungsverhaltens innerhalb einer RDC-Kolonne. Die axialen Geschwindigkeitsprofile zeigen bei allen Drehzahlen hervorragende Übereinstimmungen mit dem Experiment. Die Höchstwerte der axialen Geschwindigkeit, die Form der Kurven und die Wirbelzentren werden annähernd exakt vorhergesagt. Beim Vergleich der Vektorfelder (Abbildung 4.19) wird deutlich, dass nur RSM in der Lage ist, den linken Wirbel, und damit das gesamte *Compartment* naturgetreu abzubilden. Selbst der Halbwirbel oberhalb der Rotorscheibe wird akzeptabel prognostiziert. Verglichen mit den untersuchten Zweigleichungsmodellen (S-k- ϵ , RNG-k- ϵ , R-k- ϵ) fällt der Mehraufwand an Rechenzeit im Falle einer 2D-Simulation (nur ~17.000 Zellen) kaum ins Gewicht. Die Numerik (das Konvergenzverhalten) verlief im Falle von RSM mit Abstand am stabilsten, die skalierten Residuen und die Monitore wiesen glatte bzw. schwingungsfreie Verläufe auf. Mit keinem anderen Modell konnte eine derart deutlich stationäre Lösung erzielt werden. RSM ist damit das einzige *RANS*-Modell, das seriöserweise für die einphasige Simulation empfohlen werden kann. Es soll daher als einziges Modell für die numerisch aufwändigen 3D-Simulationen (Kapitel 4.3) verwendet werden.

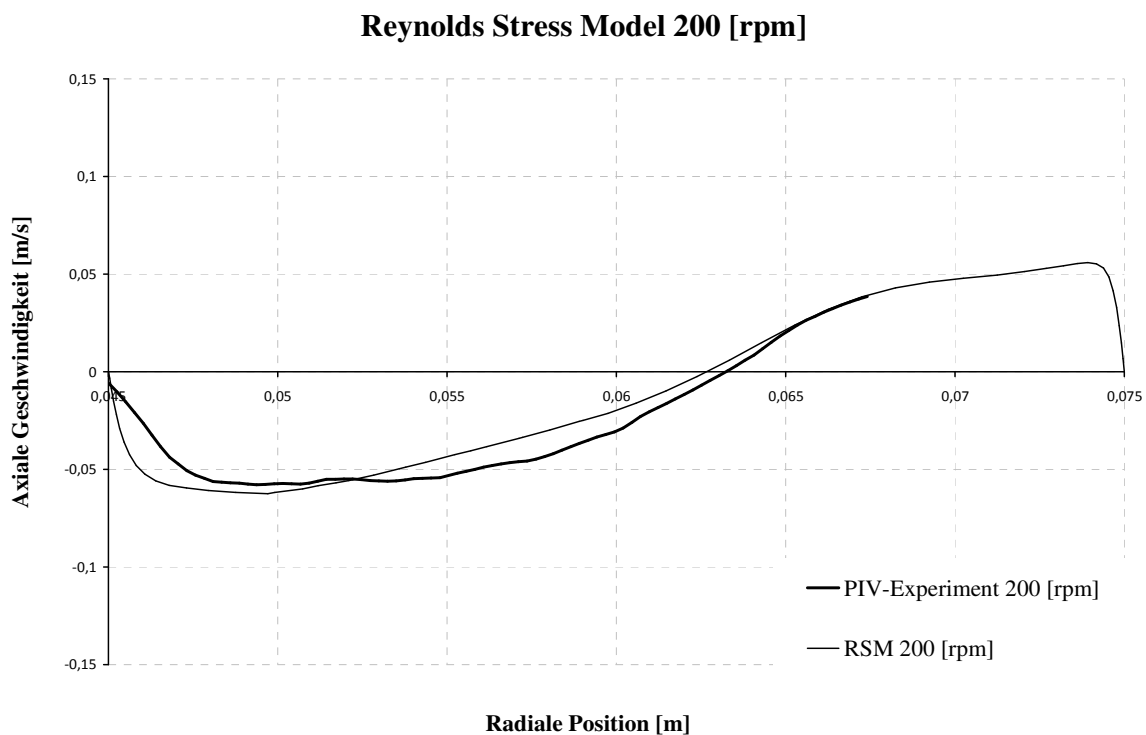


Abbildung 4.16: Axiales Geschwindigkeitsprofil auf Rotorniveau bei 200 [rpm] und 120 [l/h].

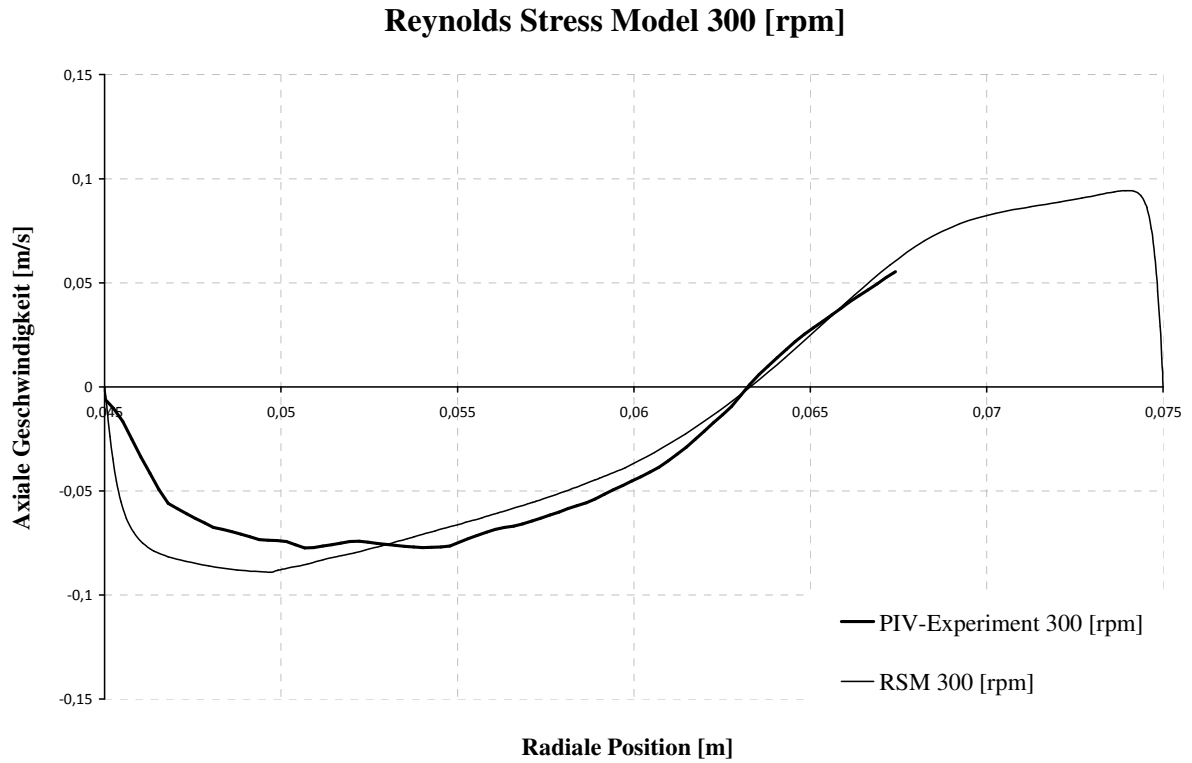


Abbildung 4.17: Axiales Geschwindigkeitsprofil auf Rotorniveau bei 300 [rpm] und 120 [l/h].

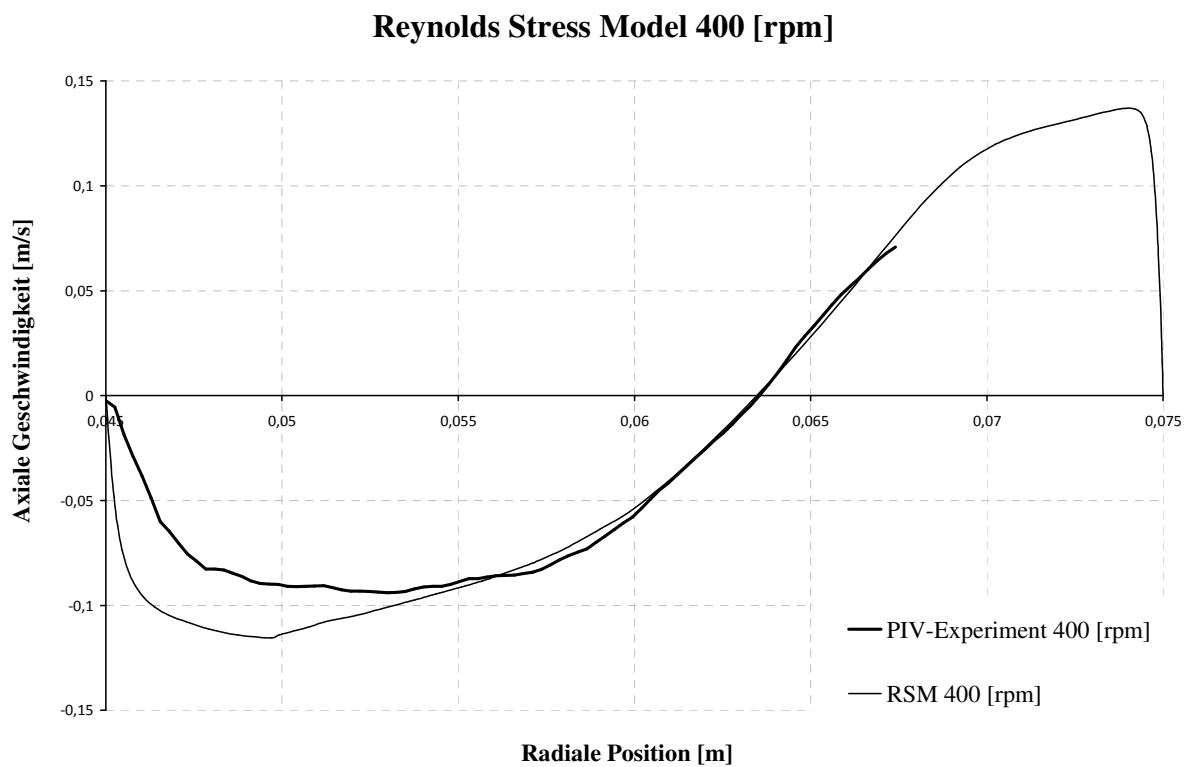


Abbildung 4.18: Axiales Geschwindigkeitsprofil auf Rotorniveau bei 400 [rpm] und 120 [l/h].

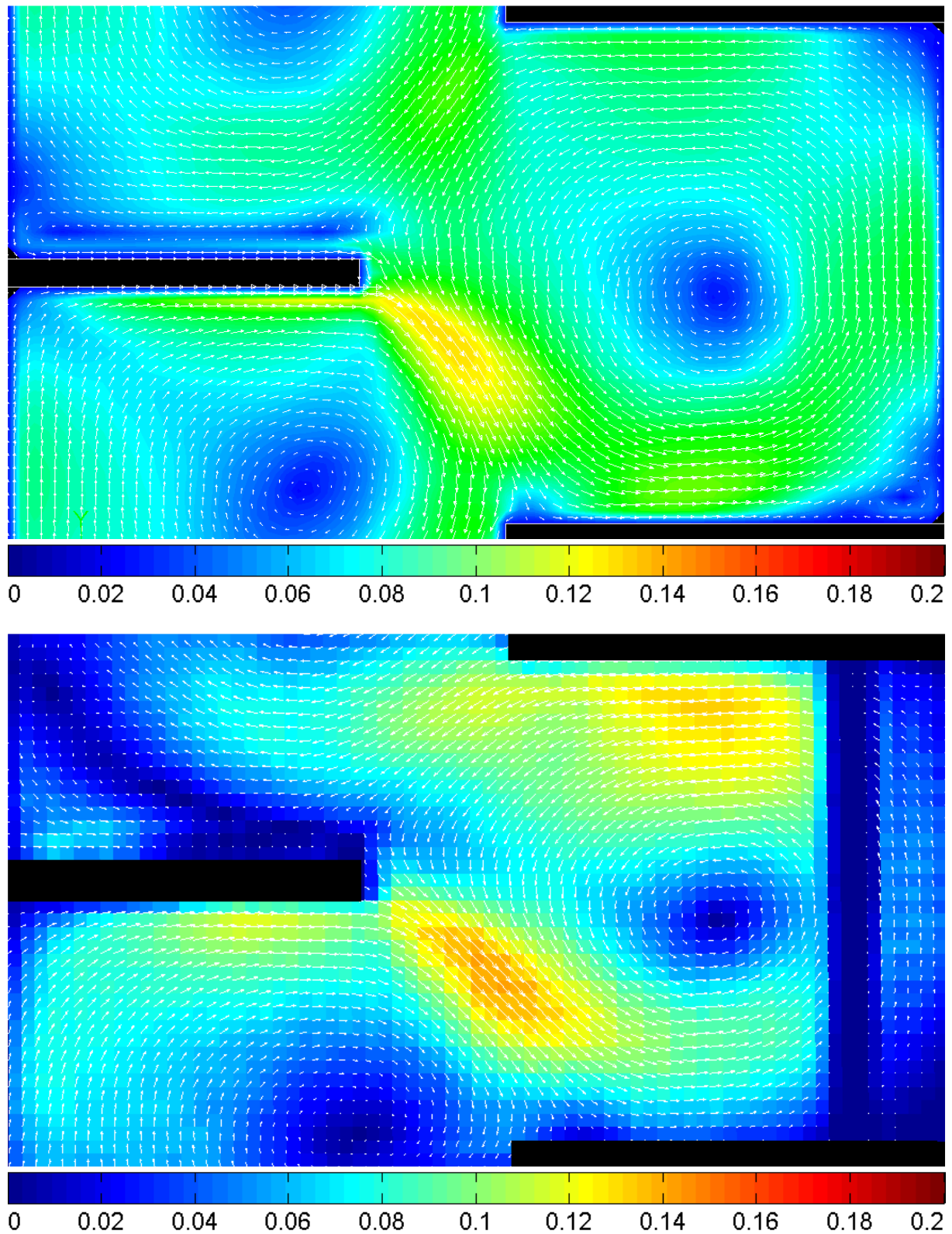


Abbildung 4.19: Vergleich der Geschwindigkeitsvektorfelder mit einheitlicher Farbskalierung in $[m/s]$, $300[rpm]$, $120 [l/h]$, RSM (oben), PIV (unten)

4.2.5 Vergleich der Tangentialgeschwindigkeit

Wie bereits in der Einleitung erwähnt, liegen aus der LDA-Messung von WEIB [16] experimentelle Daten über den Verlauf der Tangentialgeschwindigkeit vor. Beim Vergleich der Profile (Abbildung 4.20) werden die zuvor besprochenen Ergebnisse bestätigt. RSM liefert auch im Bezug auf die tangentielle Geschwindigkeit die genauesten Vorhersagen, gefolgt von RNG-k- ϵ . Der geringe Unterschied zwischen R-k- ϵ und S-k- ϵ wird erneut ersichtlich. Die Tangentialgeschwindigkeit wird zwar von allen Modellen überbetont, im Gegensatz zu den axialen Geschwindigkeitsprofilen unterscheidet sich die qualitative Form der Kurven jedoch kaum.

Modellvergleich - Tangentialgeschwindigkeit bei 300 [rpm]

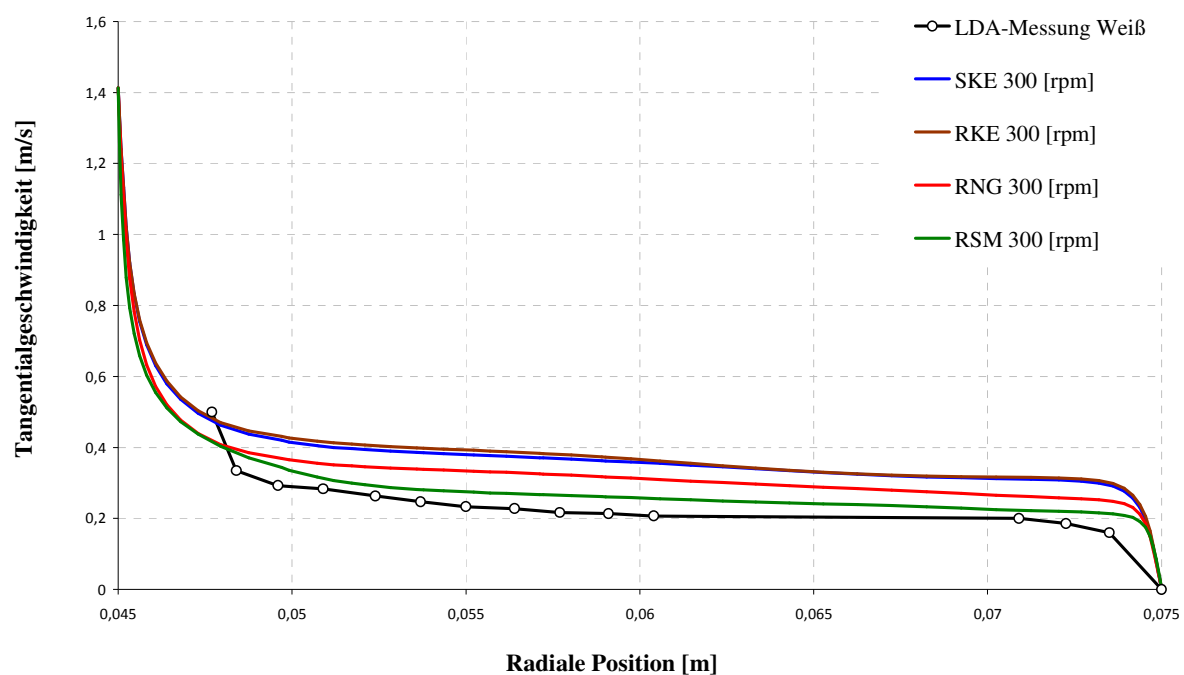


Abbildung 4.20: Vergleich der Tangentialgeschwindigkeiten verschiedener Turbulenzmodelle bei 300 [rpm] und 120 [l/h].

4.2.6 Gitterfeinheit

Bevor die numerisch aufwändige 3D-Simulation besprochen wird, soll noch die gewählte Netzfeinheit (*spacing*) überprüft werden. Die Größe der Rechenzellen spielt eine wesentliche Rolle bei der Genauigkeit von Simulationsergebnissen. Je größer die Rechenzellen gewählt werden, desto größer wird auch der numerische Fehler (numerische Diffusion). Werden die

Rechenzellen verfeinert, steigt auch die Genauigkeit bei zunehmendem Rechenaufwand. Es gilt, die optimale Kompromisslösung zwischen numerischem Aufwand und Genauigkeit zu finden, denn die Zellengröße hat ab einer bestimmten Feinheit keinen signifikanten Einfluss mehr. Man spricht in dem Fall von einer gitterunabhängigen Lösung.

Für die Überprüfung der Gitterunabhängigkeit wurde die Lösung der RSM-Simulation bei 200 [rpm] herangezogen. Hierfür wurden alle Rechenzellen des Simulationsgebietes adaptiert bzw. geviertelt und die Simulation wurde wiederholt.

Wie in Abbildung 4.21 ersichtlich ist, hatte die zweimalige Vervielfachung der Zellenanzahl nur minimale Auswirkungen auf die Lösung. Die 4- bzw. 16-fache Rechenzeit war dagegen deutlich spürbar. Die oben diskutierten Lösungen dürfen also durchaus als gitterunabhängig bezeichnet werden. Die Gittermaschenweite (*spacing*) von 1 [mm] scheint für die vorliegenden *Compartment*-Abmessungen gut gewählt zu sein und soll daher auch in der anschließenden 3D-Simulation verwendet werden.

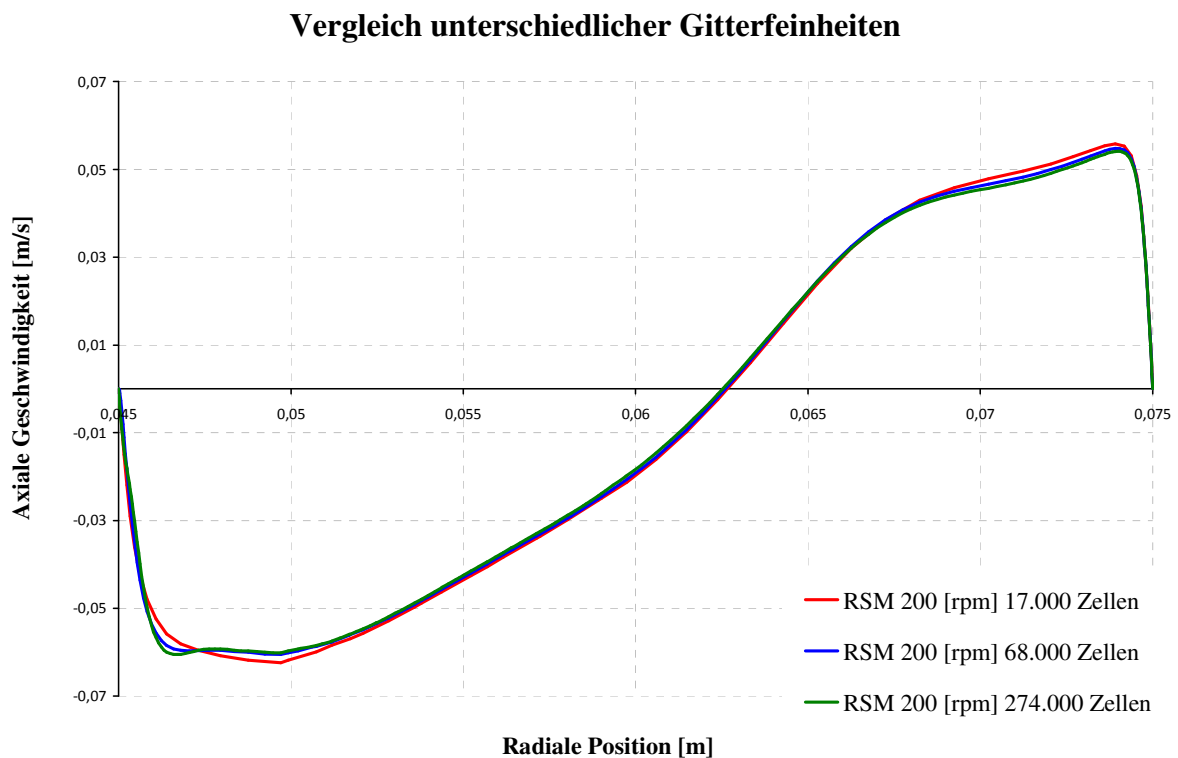


Abbildung 4.21: Vergleich der axialen Geschwindigkeitsprofile bei verschiedenen Gitterfeinheiten.

4.3 3D-Simulation

Wie bereits erwähnt, stellt die Reduktion einer Problemstellung von 3D auf 2D eine enorme Zeitersparnis dar. Die Anzahl der Rechenzellen kann durch Ausnützung der Axialsymmetrie um ein Vielfaches reduziert werden. Die Annahme der Axialsymmetrie stellt dabei eine Vereinfachung der Geometrie dar, denn der Einfluss der Statorhülsen wird damit vernachlässigt. Ob der Einfluss dieser Statorhülsen von Bedeutung ist und damit eine aufwändige 3D-Simulation rechtfertigt, soll im Folgenden untersucht werden.

Abschließend soll das in Kapitel 4.1.3.2 erwähnte polyedrische Rechennetz untersucht werden. Dieses kann nur im dreidimensionalen Fall verwendet werden und scheint für eine derart komplexe verdrallte Strömung ein sehr aussichtsreicher Lösungsansatz zu sein [20].

Als Turbulenzmodell wurde für alle anschließenden 3D-Simulationen das Reynolds-Stress-Model verwendet, da es in der 2D-Simulation als einziges Modell passende Lösungen lieferte. Bezüglich Konvergenzkriterien und Randbedingungen wurden keine Unterschiede zur 2D-Simulation gemacht. Aufgrund der sehr langen Rechenzeiten wurden jeweils 3 *Compartments* und eine Betriebseinstellung simuliert (300 [rpm], 120 [l/h]).

4.3.1 Einfluss der Statorhülsen

Will man den Einfluss der Statorhülsen berücksichtigen, so lässt sich die Geometrie nicht mehr auf 2D reduzieren. Da es durch die Störstellen (Statorhülsen) zum Symmetriebruch kommt, muss der kleinste periodische Teil herausgenommen werden. Bei 4 Statorhülsen bedeutet das ein 90°-Zylindersegment.

4.3.1.1 Hybrides Rechennetz

Die Erstellung eines geeigneten Rechennetzes ist im dreidimensionalen Fall meistens sehr anspruchsvoll. Die Position der Statorhülsen sowie die Forderung nach einer Zellen-Verdichtung in Wandnähe (*Enhanced Wall Treatment*) erschweren die Netzgenerierung zusätzlich. Die Statorhülsen befinden sich bei der Laborkolonnen sehr nah an der Außenwand und berühren diese, in Abhängigkeit von der Fertigungsgenauigkeit, auch teilweise. Eine solche Konfiguration ist in Bezug auf die Netzerzeugung höchst unangenehm. Bei tangentialen Schnitten entstehen immer schiefe Rechenzellen, ganz egal wie fein die Gitterauflösung in diesem Bereich gewählt wird. Um dieses Problem zu vermeiden wurde die

Statorhülse in der Simulation um 2 [mm] nach innen versetzt. Dadurch entsteht in der Simulation ein überbetonter Spalt zwischen Statorhülse und Glaswand. Um die Durchströmung durch diese Verengung korrekt beschreiben zu können, müssen mindestens 10 Rechenzellen zwischen Statorhülse und Außenwand generiert werden, ein zusätzlich erschwerender Faktor für die Vernetzung.

Um der oben genannten Forderung gerecht zu werden wurde das 90°-Zylindersegment mit einem konzentrischen Zylinder in zwei Bereiche bzw. Volumina geschnitten:

Das Netz im inneren Volumen wurde mit der *Cooper-Funktion*¹ erstellt. Hierfür wurde der rotationssymmetrische Teil der Ebene mittels *Boundary-Layer*² (an Welle und Rotorscheibe) und *Sizing-Functions* (an den Statorscheiben bis zur Schnittebene) vernetzt (Abbildung 4.23) und anschließend um die Achse "gecoopert". Dabei entstanden keilförmige Hexaeder (*wedges*).

Das äußere Volumen, in dem sich auch die Statorhülse befindet, war weit aufwändiger zu vernetzen. Die *Cooper-Funktion* kann auf Grund der Störstelle nicht genutzt werden. Die Verdichtung der wandnahen Zellen und die Mindestanzahl von 10 Zellen im engsten Spalt mussten mit *Sizing-Functions*³ realisiert werden.

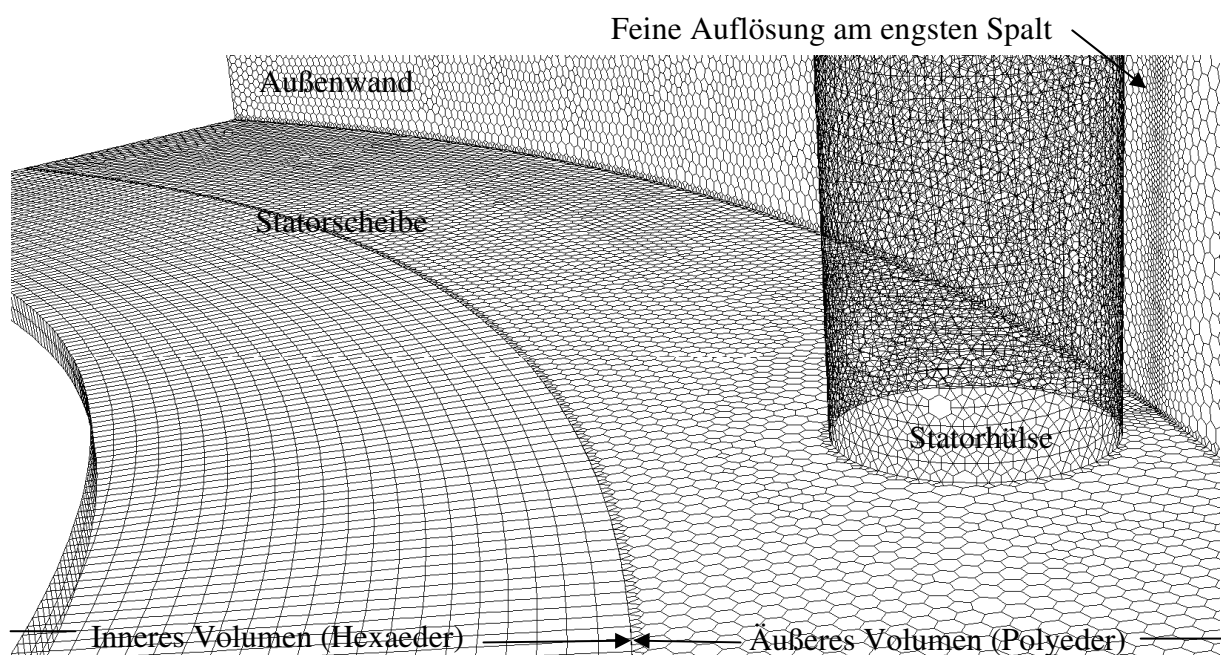


Abbildung 4.22: Ausschnitt des hybriden Rechnetzes an der Statorscheibe.

¹ Damit können Flächenstrukturen auf 3D-Geometrien vererbt werden, siehe [18].

² Für die *Boundary-Layer* an der Rotorwelle wurden die selben Einstellungen wie in 2D verwendet, Kapitel 4.2.2.

³ Um Rechenzeit einzusparen, wurden die Parameter der *Sizing-Functions* im äußeren Volumen etwas gröber gewählt. Die Startgröße der Zellen betrug 0,4 [mm] anstatt 0,04 [mm], da die Geschwindigkeiten und somit die y^+ -Werte im äußeren Bereich der Kolonne ohnehin geringer sind.

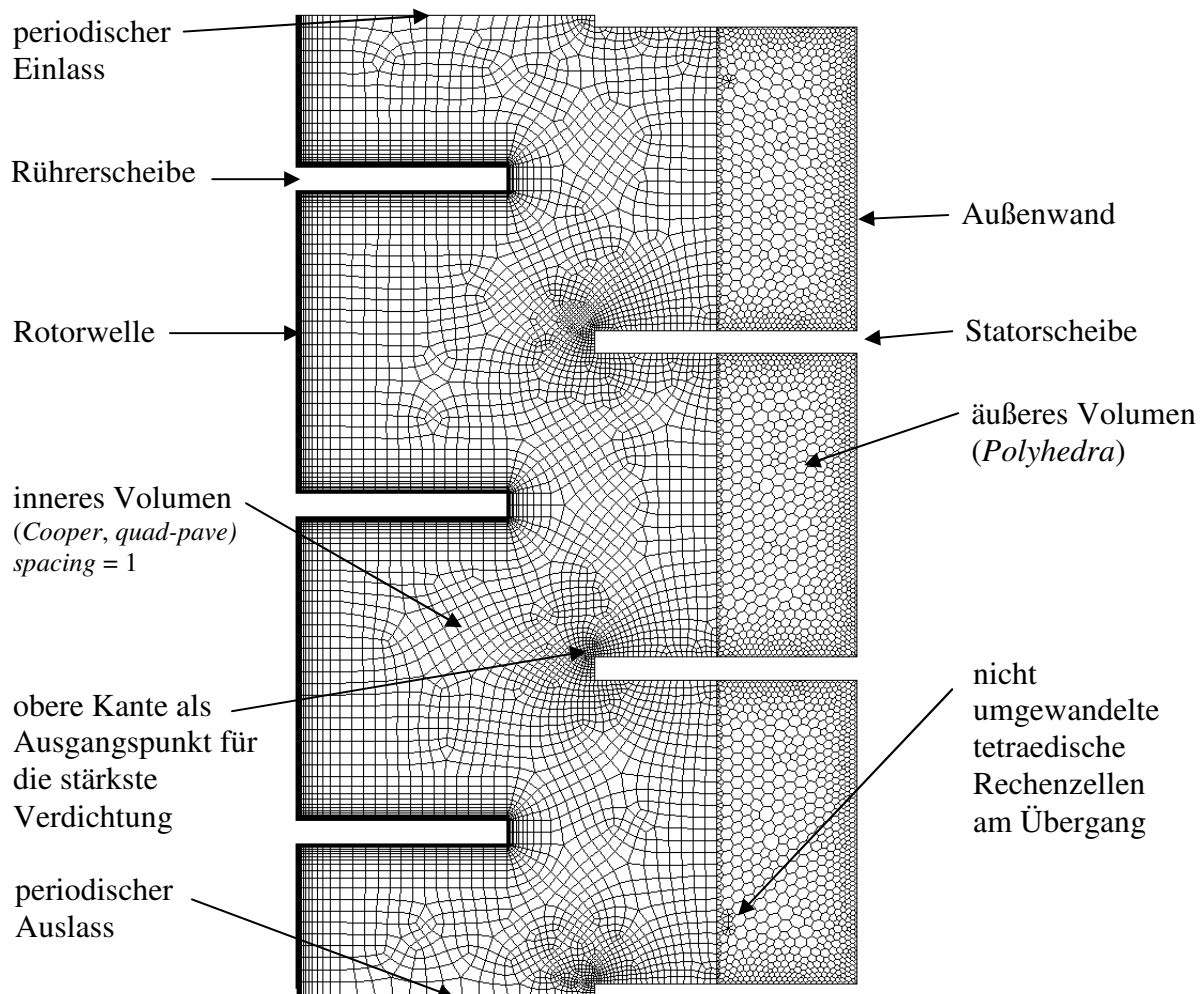


Abbildung 4.23: Rotatorisch-periodische Ebene, 3 Compartments, Enhanced Wall Treatment.

Das äußere Volumen wurde also nach Zuweisung der *Sizing-Functions* zu den jeweiligen Wänden mit Tetraedern¹ aufgefüllt und anschließend in *Ansys Fluent* in Polyeder umgewandelt (Abbildung 4.22). Grundsätzlich hätte man auch an den Statorscheiben im inneren Volumen mit *Boundary-Layern* arbeiten können. Jedoch entstehen beim "Cooper" extrem flache Zellen am Übergang zum äußeren Volumen. Der große Unterschied in Größe und Form der benachbarten Zellen hätte sich sehr negativ auf die Numerik ausgewirkt². Aus diesem Grund wurde die Zellenverdichtung entlang der gesamten Statorscheibe mit *Sizing-Functions* realisiert. Wie in Abbildung 4.23 ersichtlich ist, wurden die Oberkanten der Statorscheiben als Quellen der größten Verdichtung gewählt. Die Anströmung der Statorscheiben ist in diesem Bereich bekannterweise am stärksten und die y^+ -Werte demnach am höchsten. Die Parameter der übrigen *Sizing-Functions* waren im inneren und im äußeren

¹ Die Übergangselemente zwischen Hexaedern und Tetraedern werden aus Pyramiden gebildet.

² Diese Art von Übergang konnte aufgrund von Fehlermeldungen in *Ansys Gambit* ohnehin nicht realisiert werden.

Volumen identisch um einen möglichst sanften Übergang zu gewährleisten, dennoch wurden einige tetraedrische Zellen am Übergang fälschlicherweise nicht umgewandelt (Abbildung 4.23).

Verdichtung durch *Boundary-Layer*

Verdichtung durch *Sizing-Functions*

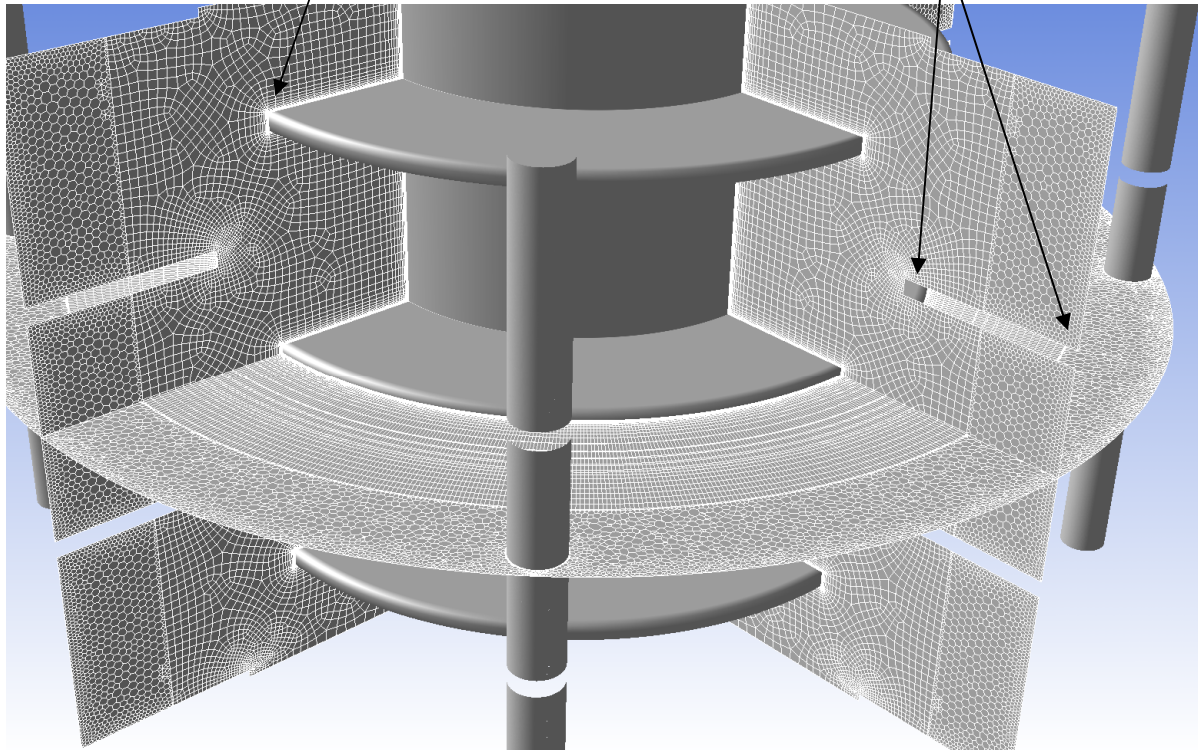


Abbildung 4.24: Isometrische Darstellung des 3D-Rechnetzes.

Tabelle 4.3: Übersicht, hybrides 3D-Rechnetz.

Zellenanzahl:	2,59 Millionen für 3 <i>Compartments</i>
Zellenelemente:	Innen: keilförmige Hexaeder (<i>wedges</i>) Außen: Polyeder
Maximale Seitenlänge (<i>spacing</i>):	1 [mm]
<i>Boundary-Layer</i> an Welle und Rotorscheibe:	
Wandnächste Zellenbreite:	0,04 [mm]
Wachstumsrate der Zellenbreite:	1,26 bei 14 Reihen
<i>Sizing-Functions</i> an Statorhülsen, Statorscheiben und Außenwand:	
Startgröße:	0,4 [mm]
Wachstumsrate:	1,2
<i>Sizing-Functions</i> an den Oberkanten der Statorscheiben:	
Startgröße:	0,1 [mm]
Wachstumsrate:	1,1

4.3.1.2 Axialgeschwindigkeit in Abhängigkeit der tangentialen Position

Wie bereits in Kapitel 3.5.3 erwähnt, weist die von WEIB [16] erhaltene Messkurve eine leichte Delle im positiven Wertebereich auf. Es liegt die Vermutung nahe, dass der Einfluss der Statorhülse im damaligen Experiment nicht berücksichtigt worden ist und sich die Messlinie daher noch im Wirbelgebiet der Hülse befand. Um dieser Vermutung nachzugehen, wurden die üblichen Axialprofile bei verschiedenen tangentialen Positionen bzw. Winkeln aufgetragen¹. Wie in Abbildung 4.25 ersichtlich ist, weichen die Axialprofile in Nähe der Statorhülse ($30^\circ - 50^\circ$) signifikant von einander ab. Der Einfluss auf die Messung darf also bei ungeeigneter Platzierung der Messsonden keinesfalls vernachlässigt werden.

Aufgrund der qualitativen Kurvenverläufe lässt sich die tangentiale Position der LDA-Messsonde zwischen 30° und 35° vermuten, ohne die damalige Versuchsanordnung exakt zu kennen.

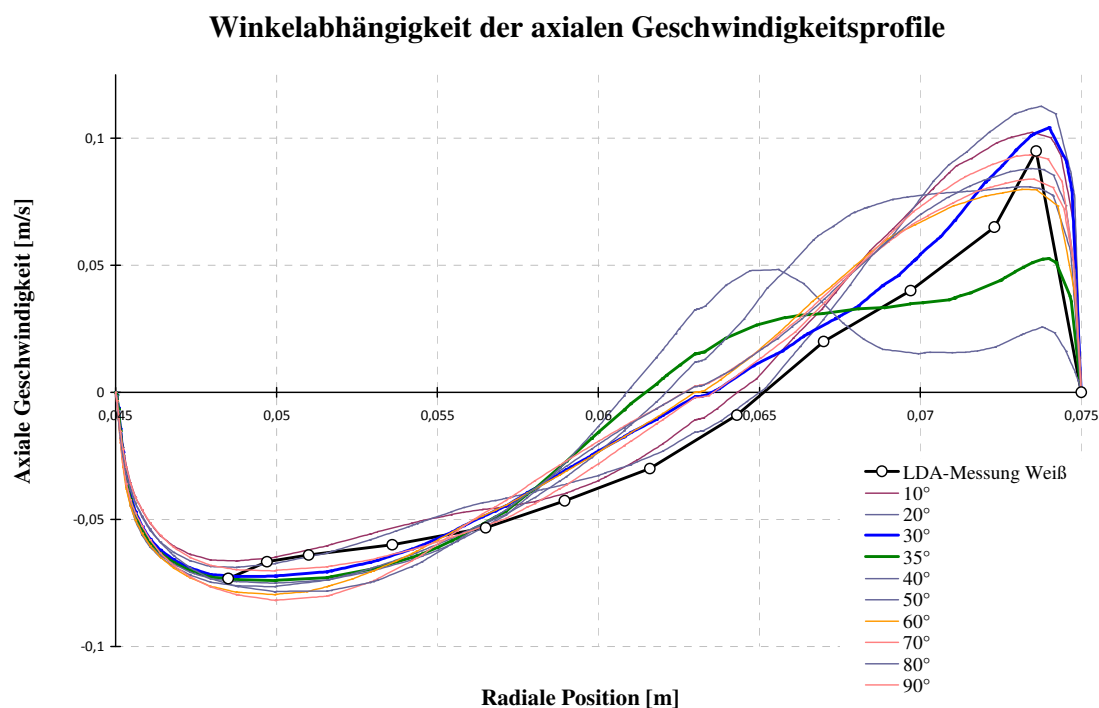


Abbildung 4.25: Axiale Geschwindigkeitsprofile bei verschiedenen tangentialen Positionen, RSM, $300[rpm]$, $120 [l/h]$.

Bei genauerer Betrachtung des Bereiches zwischen 30° und 35° konnten verblüffende Übereinstimmungen erzielt werden.

¹ Die rotatorisch-periodischen Ebenen befinden sich bei 0° bzw. 90° , der Mittelpunkt der Statorhülse bei exakt 45° .

Winkelabhängigkeit der axialen Geschwindigkeitsprofile

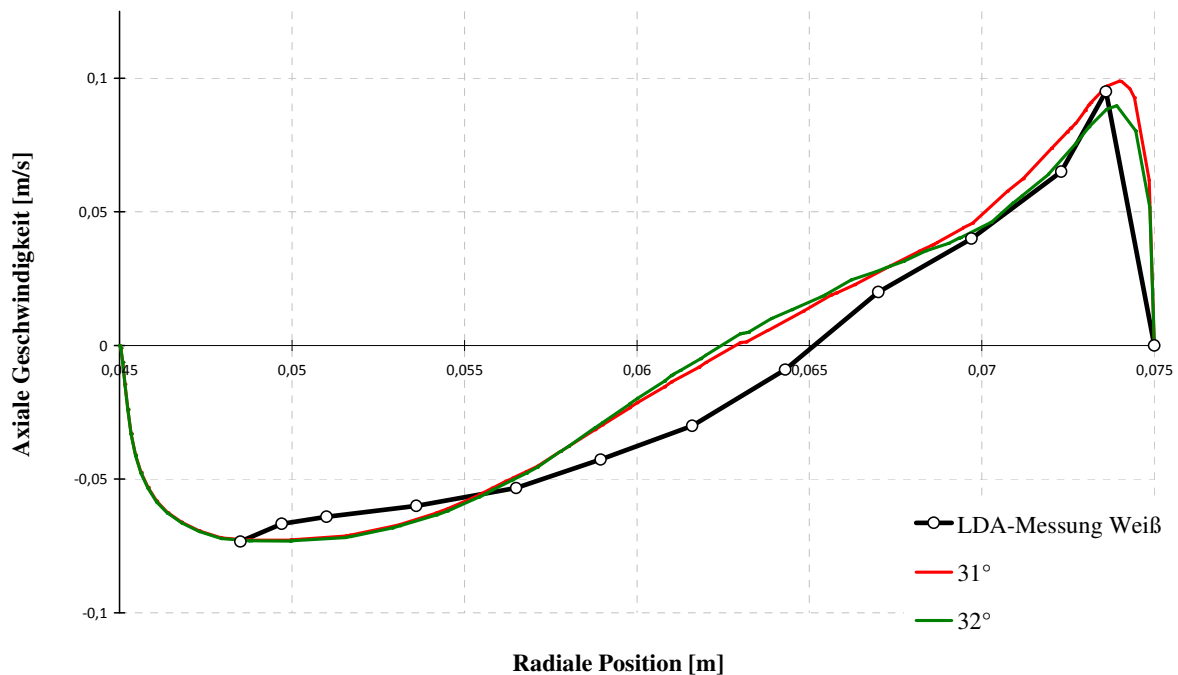


Abbildung 4.26: Axiale Geschwindigkeitsprofile bei 31° und 32°.

Wie in Abbildung 4.26 ersichtlich ist, stimmen die axialen Geschwindigkeitsprofile bei 31° und 32° erstaunlich gut mit den Ergebnissen der LDA-Messung von WEIß überein. Abgesehen vom Wirbelzentrum decken sich sowohl Extremwerte als auch Form der Kurven hervorragend mit dem Experiment.

Inwieweit sich derartige Störstellen auf die Turbulenz bzw. den Tropfenzerfall und damit auf die Trennleistung der Kolonne auswirken, kann mit der einphasigen Simulation nicht beantwortet werden. Jedoch lässt sich die Aussage treffen, dass zumindest bei der Messung dieser Einfluss bedacht werden muss. Nur bei Wahl einer geeigneten Messebene (Messlinie bei LDA), in der die Wirbel der Störstellen bereits abgeklungen sind, lässt sich das Strömungsverhalten mit 2D-Simulationen vergleichen und aufwändige 3D-Simulationen können eingespart werden.

Will man jedoch einen räumlichen Eindruck des Strömungsbildes erhalten, so ist eine 3D-Simulation unumgänglich. Eine derart komplexe und verdrallte Strömung kann mit 2D-Simulationen fast unmöglich anschaulich dargestellt werden. Die Darstellung der Bahnlinien beispielsweise (Abbildung 4.27 und 4.28) verdeutlicht eine starke Schraubströmung im äußeren Bereich des *Compartments*. Im achsennahen Bereich ist der Einfluss der Welle wesentlich größer und der Teil des Fluidvolumens zwischen den Rotorscheiben rotiert wesentlich schneller um die Welle als um das Wirbelzentrum.

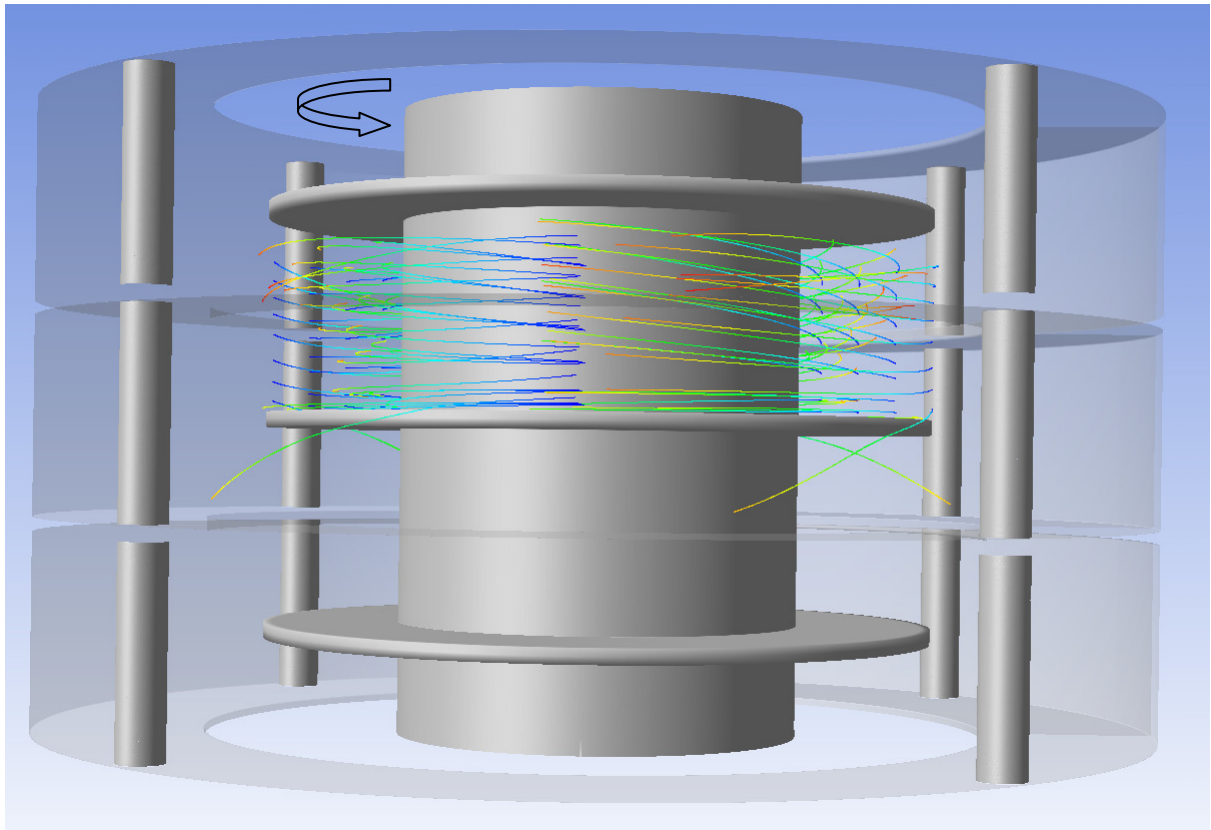


Abbildung 4.27: Bahnlinien im achsennahen Bereich, Einfärbung nach Zeit.

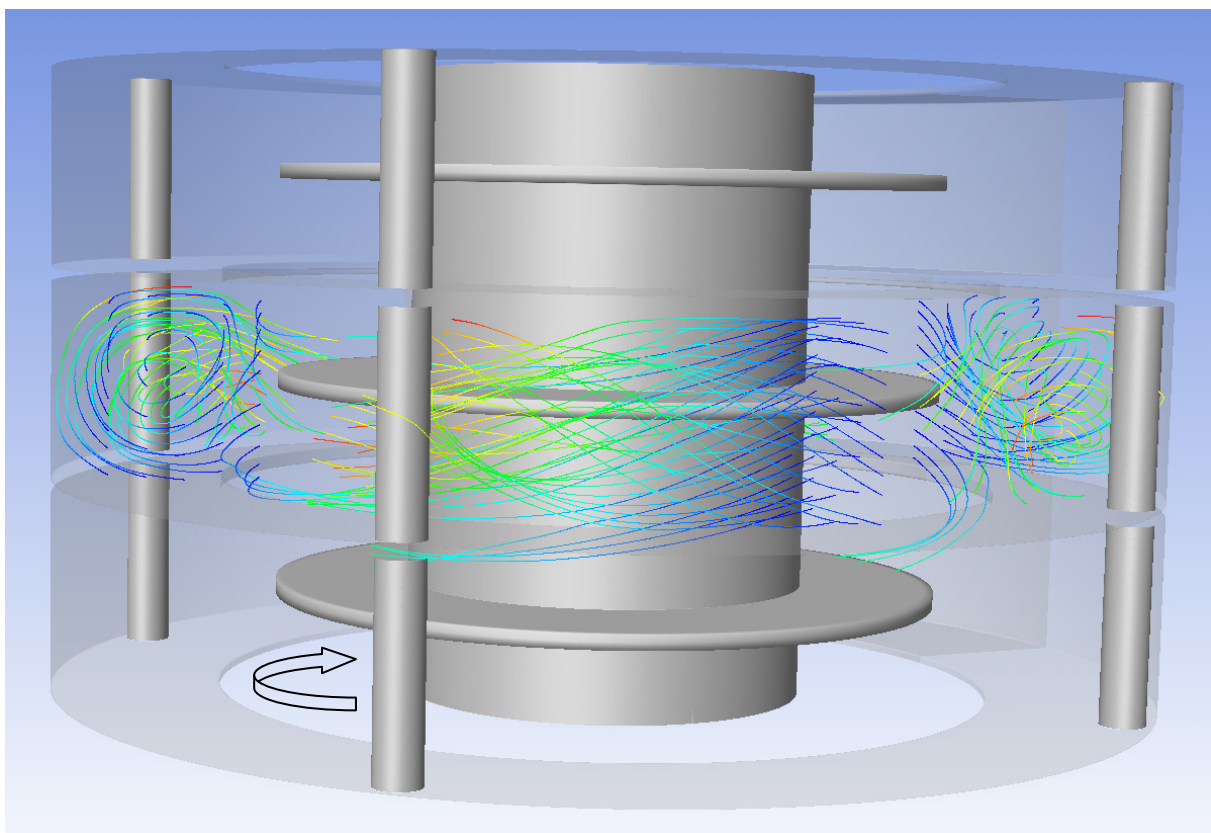


Abbildung 4.28: Bahnlinien in äußeren Bereich des *Compartments*, Einfärbung nach Zeit.

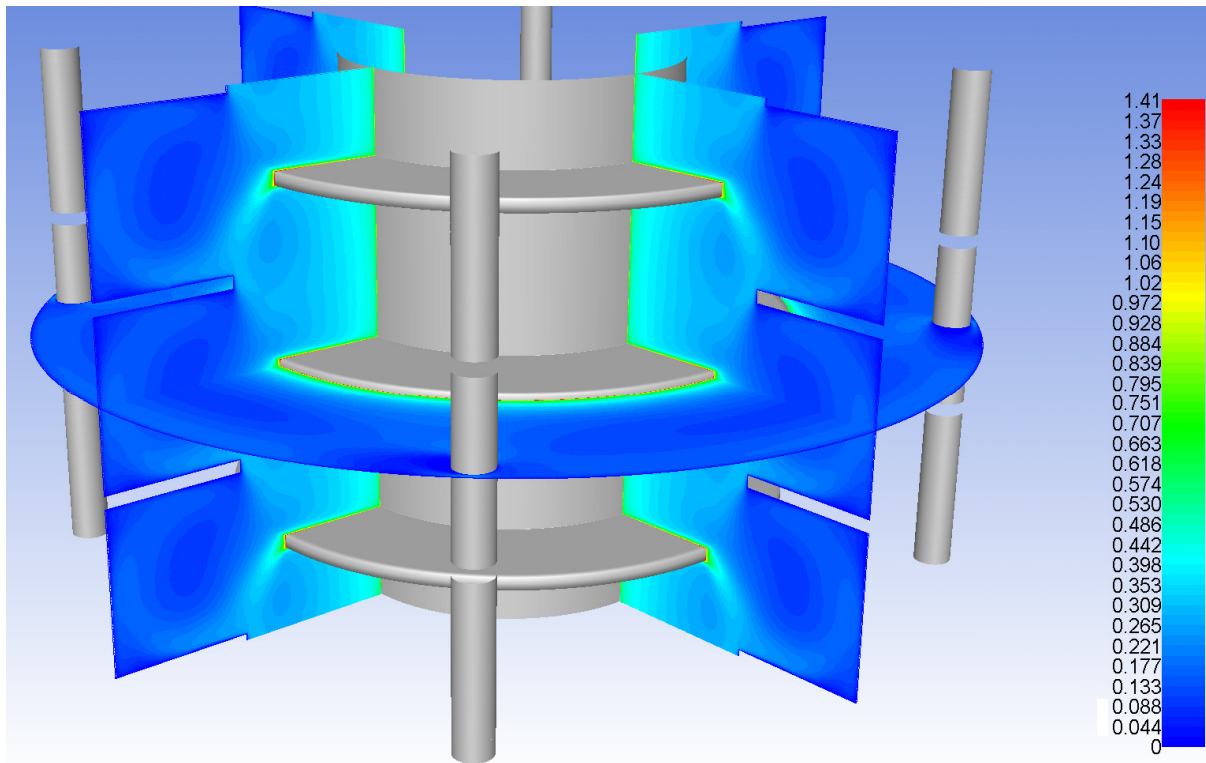


Abbildung 4.29: Konturen der absoluten Geschwindigkeit in der rotatorisch-periodischen Ebene und einer axialen Schnittebene, Farbskalierung in [m/s].

In Abbildung 4.29 sind die Konturen der absoluten Geschwindigkeiten in drei Schnittebenen abgebildet. Im Gegensatz zu den experimentell erhaltenen Geschwindigkeitskonturen ist in Abbildung 4.29 auch die tangentielle Komponente enthalten. Deutlich erkennbar ist das Totwassergebiet hinter den Abstandhülsen (dunkelblau), sowie die erhöhte Geschwindigkeit am engsten Spalt zwischen Hülsen und Glaswand.

Ein derartiger Einblick in das Strömungsverhalten ist mit einer 2D-Simulation und Axialsymmetrie kaum möglich, allerdings stellt die oben besprochene Simulation eine eher akademische Herangehensweise dar. Die Rechenzeit ist bei 2,6 Millionen Rechenzellen für industrielle Problemstellungen sicherlich noch zu lang, zumal ja nur eine Phase simuliert wurde und Tropfenpopulationsbilanzen außer Acht gelassen wurden. Dennoch könnten sich solche detaillierten 3D-Simulationen beim derzeitigen Fortschritt der Rechnerkapazitäten in näherer Zukunft als Grundlage für die Auslegung und Weiterentwicklung von Extraktionsapparaten erweisen. Ebenso könnte die stetige Weiterentwicklung der Vernetzungsalgorithmen für polyedrische Rechenetze die 3D-Simulationen wieder stärker in den Vordergrund rücken.

Deshalb soll im anschließenden Kapitel die Simulation auf einem reinen Polyedernetz untersucht werden.

4.3.2 Simulation auf einem polyedrischen Rechennetz

Die Gittergenerierung ist im dreidimensionalen Fall bezüglich Arbeitsspeicher extrem aufwändig. Der in dieser Arbeit verwendete Computer stieß mit 16 GB Arbeitsspeicher des Öfteren an seine Grenzen. Wie im vorangegangenen Kapitel erwähnt wurde, musste das Volumen in zwei Teile geschnitten werden. Es war nicht möglich das gesamte Volumen (jede Wand) mit *Sizing Functions* zu versehen und in einem Stück mit Tetraedern zu vernetzen. 16 GB Arbeitsspeicher waren hierfür in *Ansys Gambit 2.4.6* nicht ausreichend. Der Einfachheit halber wurde also das innere Volumen mit Hexaedern aufgefüllt.

Im folgenden Kapitel soll das gesamte Simulationsgebiet mit Tetraedern (bzw. Polyedern nach erfolgter Umwandlung) vernetzt werden. Die Abstandshülse soll für diese Simulation wieder vernachlässigt werden, der Zylinderausschnitt muss also nicht mehr 90° betragen. Gewählt wurden ein 15° Segment und 3 *Compartments* (Abbildung 4.31). Obwohl das simulierte Volumen auf ein Sechstel reduziert wurde, war es nicht möglich alle 3 *Compartments* in einem Stück zu vernetzen. Jedes *Compartment* wurde halbiert, die sechs entstandenen Volumina mussten einzeln vernetzt werden, um nicht an die Grenzen des Arbeitsspeichers zu stoßen.

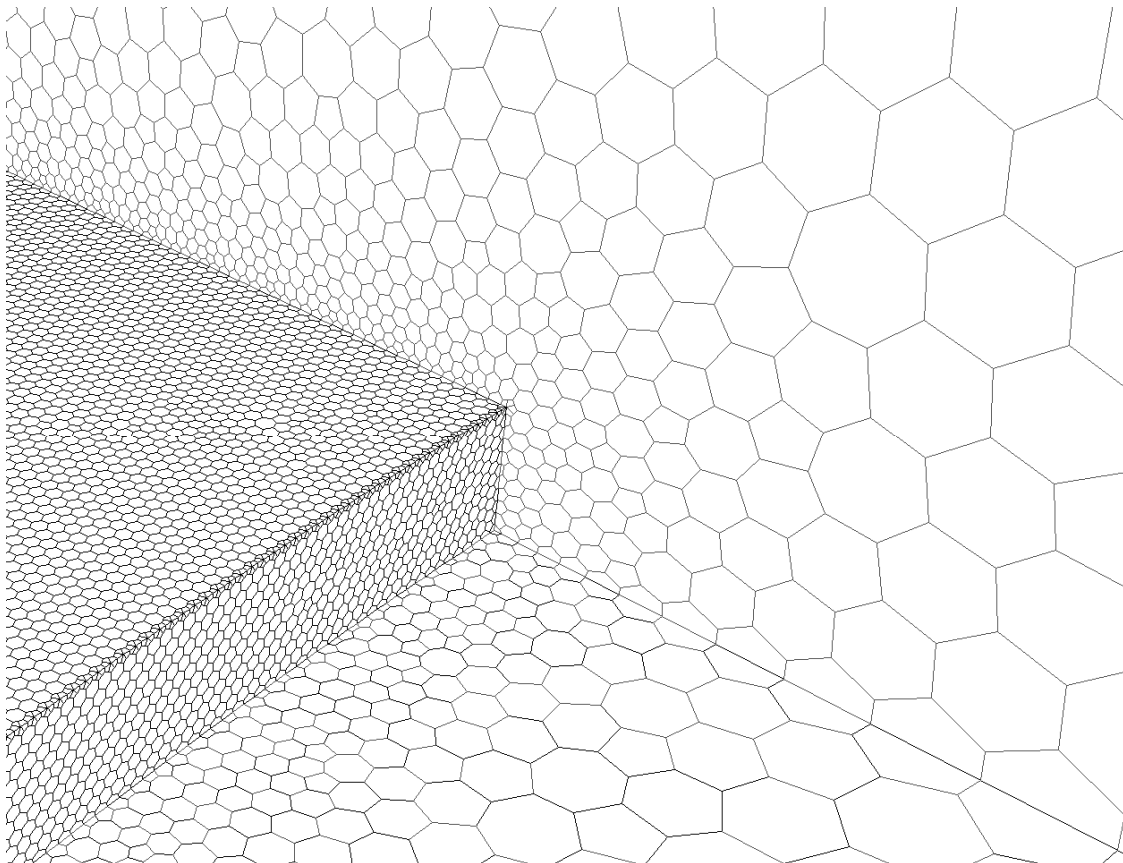


Abbildung 4.30: Polyedrisches Netz rund um die Statorscheibe.

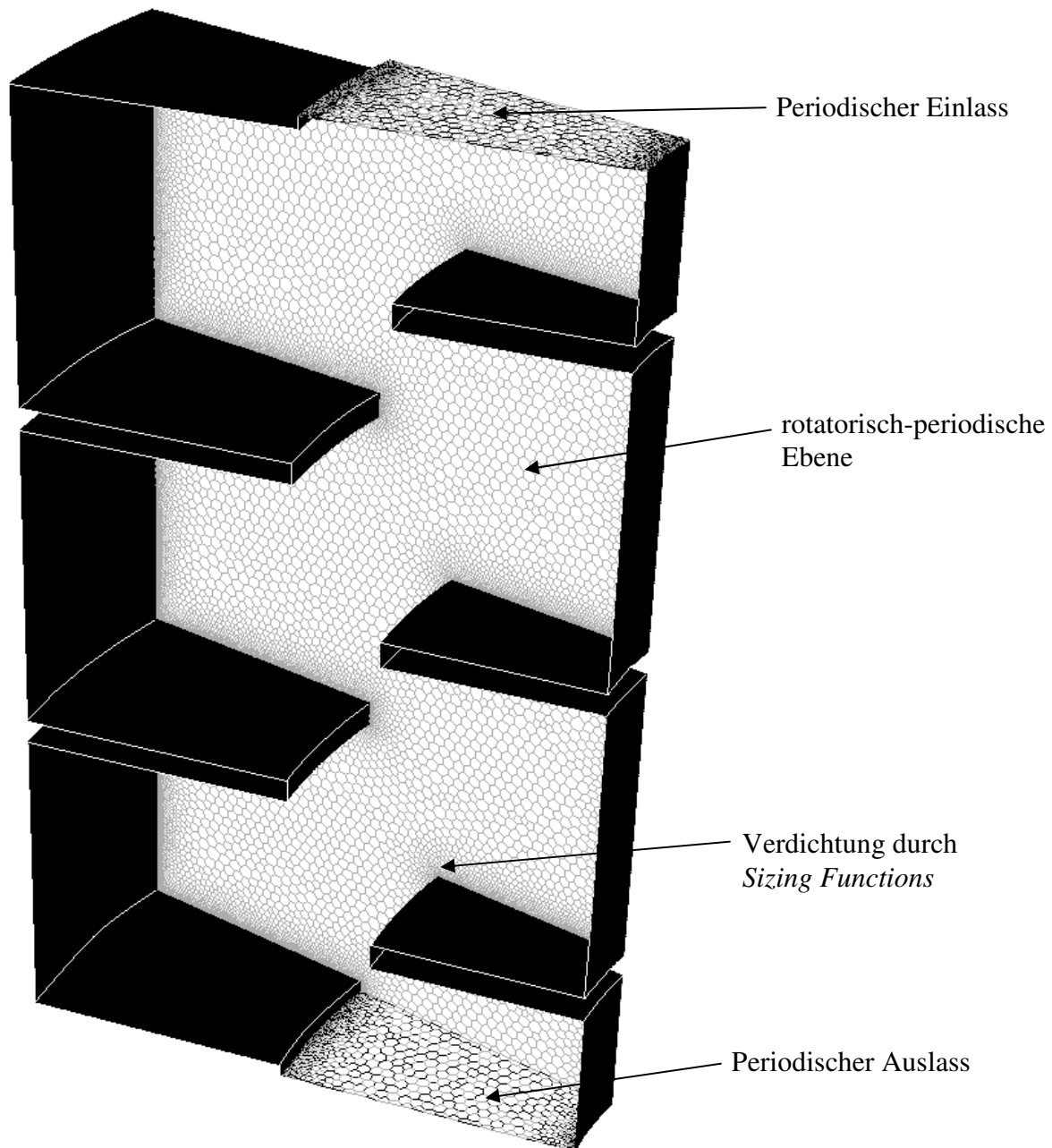


Abbildung 4.31: 15°-Zylindersegment, Polyedernetz, 3 Compartments, Enhanced Wall Treatment.

Tabelle 4.4: Übersicht - 3D Polyedrisches Rechenetz

Zellenanzahl:	2,55 Millionen
Zellenelemente:	Polyeder
Maximale Seitenlänge (<i>spacing</i>):	1 [mm]
<i>Sizing Functions</i> an allen Wänden::	
Startgröße:	0,1 [mm]
Wachstumsrate:	1,1

Da die Abstandshülse nicht berücksichtigt wurde, besteht wieder völlige Achsensymmetrie. Die axialen Geschwindigkeitsprofile sollen daher sowohl mit der 2D-Simulation als auch mit dem PIV-Experiment verglichen werden.

Abbildung 4.32 verdeutlicht die größte Abweichung zwischen dem 2D-*Quad*-Netz und dem 3D-*Poly*-Netz in Nähe der Rührerscheibe ($r \approx 0,045 - 0,05$). Wie in Kapitel 3.5.1 bereits erwähnt wurde, sind die experimentellen Daten in diesem Bereich nicht vertrauenswürdig. Ob das polyedrische Netz nun in diesem Bereich zu besseren Vorhersagen führt, kann an dieser Stelle nicht eindeutig beantwortet werden. Was jedoch außer Zweifel steht, ist der enorme zeitliche Mehraufwand für die Erstellung eines polyedrischen Netzes. Die Algorithmen für die Umwandlung der Tetraeder in Polyeder sind zudem in *Ansys Fluent* immer noch relativ unausgereift, Programmabstürze waren die Regel. Ebenso betrug die Iterationszeit ein Vielfaches der 2D-Simulation (~10.000 Zellen in 2D; ~2,6 Millionen für ein 15°-Zylindersegment).

Wird die Abstandshülse nicht berücksichtigt, scheint sich das polyedrische Rechenetz nicht zu lohnen. Für diese Anwendung können mit 2D-Simulationen in kürzester Zeit brauchbare Ergebnisse erzielt werden, die Erstellung eines 3D-Polyedernetzes erfordert hingegen sehr viel Erfahrung, Zeit und Geduld.

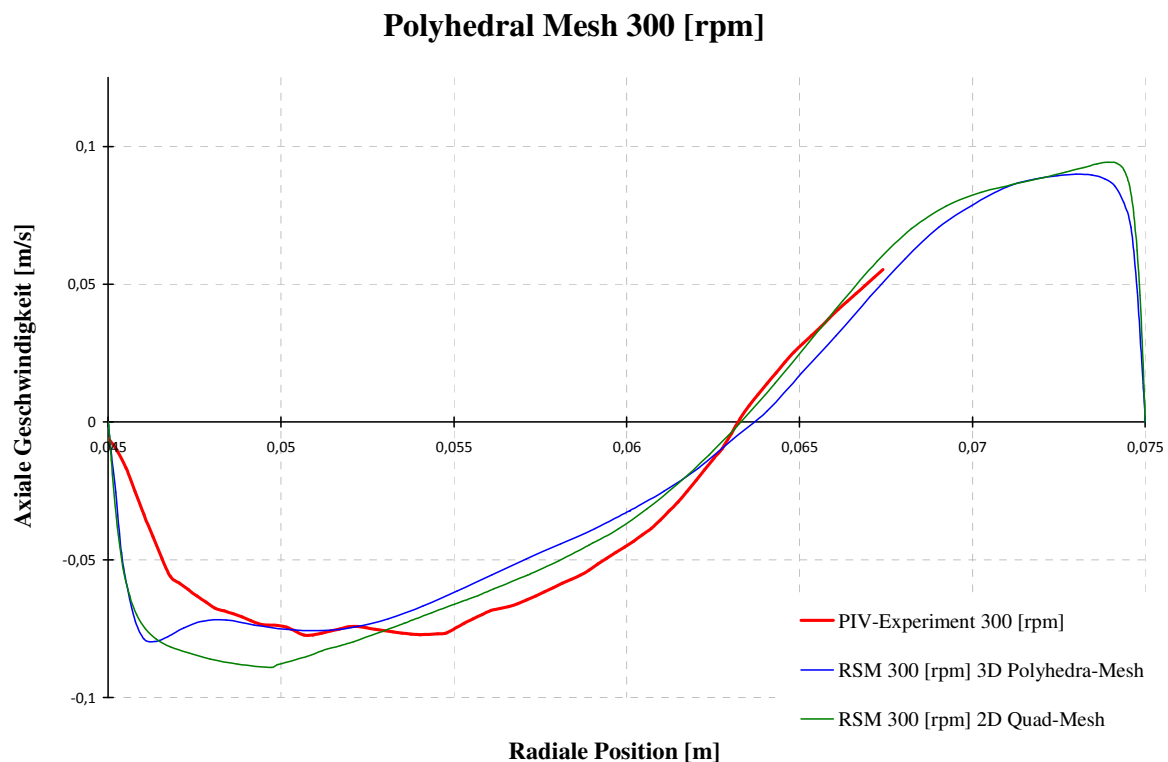


Abbildung 4.32: Axiale Geschwindigkeitsprofile auf Rotorniveau, 300 [rpm], 120 [l/h].

5 Zusammenfassung & Ausblick

In dieser Arbeit wurde das einphasige Strömungsverhalten einer RDC-Extraktionskolonne untersucht. Das Strömungsbild wurde zunächst mit PIV bei verschiedenen Betriebszuständen (Drehzahlen und Volumenströmen) experimentell erfasst. Die erhaltenen Vektorfelder deuten darauf hin, dass sich der Volumenstrom der kontinuierlichen Phase nur minimal auf das Strömungsverhalten auswirkt. Das qualitative Strömungsbild unterscheidet sich nur minimal zwischen den verschiedenen Betriebseinstellungen. Die Anzahl, die Form und die Lage der Wirbel scheint nur von den geometrischen Abmessungen eines *Compartments* abzuhängen.

Die experimentellen Daten wurden anschließend dazu verwendet, die in *Ansys Fluent* verfügbaren Turbulenzmodelle zu evaluieren. Bei Vernachlässigung der Abstandshülsen konnte die Geometrie auf ein axialsymmetrisches 2D-Problem reduziert werden.

Das *Reynolds Stress Model* (RSM) lieferte bei diesem stark verdrallten Strömungsregime als einziges Modell physikalisch annehmbare Ergebnisse. Die Annahme der Isotropie (Richtungsunabhängigkeit) bei den k - ϵ - bzw. k - ω -Modellen scheint eine unzulässige Vereinfachung zu sein.

In einer numerisch aufwändigen 3D-Simulation wurde der Einfluss der Statorhülsen untersucht. Es konnten erstaunlich gute Übereinstimmungen mit der LDA-Messung von WEIß [16] erzielt werden. Der Einfluss auf die Trennwirkung der Kolonne kann mit einer einphasigen Simulation nicht beurteilt werden, dennoch lässt sich die Aussage treffen, dass die tangentielle Position der Messebene sorgfältig gewählt werden muss. Bei ungeeigneter Platzierung der Messebene können die Resultate nicht mit der axialsymmetrischen 2D-Simulation verglichen werden.

Durch die Verwendung eines polyedrischen Rechennetzes können im dreidimensionalen Fall bis zu 80% der Rechenzellen eingespart werden, allerdings sind die dazugehörigen Algorithmen in *Ansys Fluent* noch nicht völlig ausgereift. Die Vernetzung dieser komplexen Geometrie erwies sich mit *Sizing-Functions* als äußerst mühsam.

Das einphasige Strömungsverhalten konnte mit RSM und *Enhanced Wall Treatment* sehr naturgetreu vorhergesagt werden, sowohl in 2D als auch in 3D. Für den zweiphasigen Betriebszustand waren 3D-Simulationen bisweilen numerisch zu aufwändig. Hierfür könnten sich in näherer Zukunft polyedrische Rechennetze als hilfreich erweisen.

6 Nomenklatur

Symbole

A	Oberfläche, Austauschfläche	$[m^2]$
D	Diffusionskoeffizient, molekularer Flussvektor	$[m^2/s]$
D	Durchmesser	$[m]$
e	Innere Energie	$[J]$
g	Gravitationsbeschleunigung	$[m/s^2]$
h	Spezifische Enthalpie	$[J/m^3]$
H	Höhe	$[m]$
k	Kinetische Energie der turbulenten Schwankungsbewegung	$[m^2/s^2]$
k	Stoffdurchgangskoeffizient	$[kmol/(s\ m^2)]$
N	Stoffmenge	$[kmol]$
p	Druck	$[Pa]$
r	Radius	$[m]$
t	Zeit	$[s]$
U	Mittlere Strömungsgeschwindigkeit	$[m/s]$
x	Konzentration	$[kmol/m^3]$
y^+	Dimensionsloser Abstand	$[-]$

Griechische Buchstaben

α_{ij}	relative Flüchtigkeit	$[-]$
ε	Turbulente Dissipationsrate	$[m^2/s^3]$
μ	Dynamische Viskosität	$[Pa\cdot s]$
ν	Kinematische Viskosität	$[m^2/s]$
ρ	Dichte	$[kg/m^3]$
τ	Schubspannung	$[N/m^2]$
Φ	Bilanzgröße, Erhaltungsgröße (Masse, Impuls, Energie)	
ω	Spezifische Dissipationsrate, Turbulente Frequenz	$[1/s]$

Indizes

<i>eff</i>	effektiv
K	Kolonne
R	Raffinatphase
T	turbulent
W	Wand
*	Phasengleichgewicht

Acronyme

ARD	Asymmetric Rotating Disc Contactor
CTA	Constant Temperature Anemometry
DNS	Direct Numerical Simulation
ECT	Electrical Capacitance Tomography
LDA	Laser Doppler Anemometrie
LES	Large Eddy Simulation
LP	Leichte Phase
PDA	Phasen Doppler Anemometrie
PIV	Particle Image Velocimetry
RDC	Rotating Disk Contactor
RNG	Re-Normalized Group
RZE	Rührzellen-Extraktor
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations
SHE	Selbststabilisierender Hochleistungs-Extraktor
SP	Schwere Phase
UDV	Ultrasonic Doppler Velocimetry
WS	Wertstoff

7 Referenzen

- [1] Asher R.C.; „Ultrasonic sensors in the chemical and process industries”, Journal of Physics E: Scientific Instruments 16, pp 959-963, 1983.
- [2] Pilhofer T., Miller H.D.; „Photoelektrische Meßmethode zur Bestimmung der Größenverteilung mitteldisperser Tropfen in einem nicht mischbaren flüssigen Zweistoffsystem“, Chemie-Ing.-Techn. Jg. 44, Nr. 5, pp 295-300, 1972.
- [3] Yeh Y., Cummins H.Z., „Localized fluid flow measurements with an He-Ne laser spectrometer“, Appl. Phys. Lett. 4, pp 176-178, 1964.
- [4] <http://www.dantecdynamics.com/Default.aspx?ID=822>, zugegriffen am 19. August 2009
- [5] Durst F., Zare M., „Laser Doppler measurements in two-phase flows“ Proc. LDA Symp. Copenhagen, pp 403-29, 1975.
- [6] <http://www.dantecdynamics.com/Default.aspx?ID=823>, zugegriffen am 19. August 2009.
- [7] Kompenhans J., Raffel M., Willert C., “Particle Image Velocimetry - A Practical Guide”, Springer, Berlin, 1998.
- [8] Husung G., „Tropfengröße, spezifische Wellenleistung und Energiedissipation in gerührten Gegenstromextraktoren“, Chem.-Ing.-Tech. 56, Nr. 7, pp 548-549, 1984.
- [9] King L. V.: „On the Convection of Heat From Small Cylinders in a Stream of Fluid: Determination of the Convection Constants of Small Platinum Wires, with Applications to Hot-wire Anemometry“, Proc. R. Soc. London, Vol 90, pp 563-570, 1914.
- [10] <http://www.dantecdynamics.com/Default.aspx?ID=824>, zugegriffen am 3. September 2009.
- [11] <http://www.imaging-solutions.de>, zugegriffen am 19. August 2009.
- [12] <http://www.dantecdynamics.com/Default.aspx?ID=731>, zugegriffen am 3. September 2009.
- [13] Schönbacher A., "Thermische Verfahrenstechnik - Grundlagen und Berechnungsmethoden für Ausrüstungen und Prozesse", Springer, Berlin, 2002.
- [14] Lohrengel B., "Einführung in die thermischen Trennverfahren: Trennung von Gas-, Dampf- und Flüssigkeitsgemischen", Oldenbourg, 2007.
- [15] Lüdecke C., Lüdecke D., "Thermodynamik: Physikalisch-chemische Grundlagen der thermischen Verfahrenstechnik", Springer, Berlin, 2000.

-
- [16] Weiß C., "Experimentelle Charakterisierung und numerische Simulation von dispersen Zweiphasenströmungen in gerührten Gegenstromkolonnen der Bauart RDC", Dissertation, TU Graz, Oktober 1995.
- [17] Drumm C., Bart H.J., "Hydrodynamics in a RDC Extraktor: Single and Two-Phase PIV Measurements and CFD Simulations", Chem. Eng. Technol., 29, No. 11, pp 1297-1302, 2006.
- [18] Fluent 6.3 User's Guide, September 2006, Fluent Inc.
- [19] Haderer T., "CFD-Simulation der Hydrodynamik einer gerührten Extraktionskolonne und Vergleich mit experimentell ermittelten hydrodynamischen Kenngrößen", Dissertation, TU Graz, 2004.
- [20] Perić M., "Flow simulation using control volumes of arbitrary polyhedral shape", ERCOFTAC Bulletin, No. 62, 2004.
- [21] Andersson B. et al., "Computational Fluid Dynamics for Chemical Engineers", course book 4th. edition, Chalmers University, Göteborg, 2008.
- [22] Paschedag A.R., "CFD in der Verfahrenstechnik - Allgemeine Grundlagen und mehrphasige Anwendungen", Wiley-VCH, 2004.
- [23] Lecheler S., "Numerische Strömungsberechnung", Vieweg&Teubner, Wiesbaden, 2009.
- [24] Martens S., "Strömungsmechanik und Stoffaustausch", Vorlesungsskriptum, TU Graz, 2009.
- [25] Warsito W., Fan L.-S.; "Measurement of real-time flow structures in gas-liquid and gas-liquid-solid flow systems using electrical capacitance tomography (ECT)", Chemical Engineering Science 56, pp 6455-6462, 2001.
- [26] Wang T. et al., "Application of Doppler ultrasound velocimetry in multiphase flow", Chem. Eng. Journal 92, pp 111-122, 2003.
- [27] Vikhansky A., Kraft M., "Modelling of a RDC using a combined CFD-population balance approach", Chem. Eng. Sci. 59, pp. 2597-2606, 2004.
- [28] Modes G., H.-J. Bart, "CFD-Simulation der Strömungsnichtidealitäten der dispersen Phase bei der Extraktion in gerührten Extraktionskolonnen", Chem.-Ing.-Techn. 73, pp. 332-338, 2001.
- [29] Fei W.Y., Wang Y.D., Wan Y.K., "Physical modelling and numerical simulation of velocity fields in rotating disc contactor via CFD simulation and LDV measurement", Chem. Eng. J., 78, pp. 131-139, 2000.

- [30] Ghaniyari-Benis S. et al., " Three-Dimensional Simulation of Hydrodynamics in a Rotating Disc Contactor using Computational Fluid Dynamics", Chem. Eng. Techn. 32, No. 1, pp. 93-102, 2009.
- [31] Preisack B., "Aufbau und in Betriebnahme einer Bench-Scale-RDC Kolonne und Vermessung der Verweilzeitverteilung mittels Leitfähigkeitsmessungen", Diplomarbeit, TU-Graz, 2009.
- [32] Gurker T., Dissertation, TU-Graz, 2010.