

Transportvorgänge in Fluidphasenresonanzmischern

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

**Doktoringenieur
(Dr.-Ing.)**

von Dipl.-Ing. (FH) Silvio Schmalfuß
geb. am 09.09.1984 in Zeulenroda

genehmigt durch die Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Promotionskommission: Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause (Vorsitz)
Prof. Dr.-Ing. Martin Sommerfeld (Gutachter)
Prof. Dr. rer. nat. Ralph Säuberlich (Gutachter)
Prof. Dr.-Ing. Reinhard Sperling (Gutachter)

eingereicht am 28.09.2022

Promotionskolloquium am 27.03.2023

ZUSAMMENFASSUNG

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Anwendung der Euler-Lagrange-Methode in der mechanischen Verfahrenstechnik. Am Beispiel eines neuartigen, rührerlosen Mischapparats, dem Fluidphasenresonanz-Mischer, wird zum Einen die Eignung dieser Simulationsmethode für instationäre, turbulente Strömungen in Apparaten im Technikumsmaßstab demonstriert. Im Zuge dessen wird der Mischapparat ausgehend von einer Ausgangsvariante hinsichtlich seiner Mischeigenschaften verbessert. Als Mischaufgabe dient hierbei das Dispergieren von Feststoffpartikeln in einer Flüssigkeit. Zum Anderen werden die Einflüsse von Partikelkräften im Euler-Lagrange-Modell auf die Mischergebnisse untersucht, ebenso wie die Beiträge der einzelnen Kräfte zur gesamten an den Partikeln angreifenden Kraft. Insbesondere die rechenintensiven Kräfte, allen voran die Basset-Kraft, wurden in Partikelsimulationen im Technikums- oder Industriemaßstab bisher üblicherweise vernachlässigt. Es zeigt sich jedoch, dass keine der Kräfte stets vernachlässigbar ist und für jede der Einzelkräfte von Fall zu Fall entschieden werden muss, ob sie berücksichtigt werden sollte.

ABSTRACT

The present work is about the application of the Euler-Lagrange method in mechanical process engineering. A novel agitator-less mixing apparatus called Fluid Phase Resonance mixer is used as an example to demonstrate the feasibility of this simulation method for transient, turbulent flows in pilot scale devices. For this, based on an initial design, the mixing device is improved with respect to its mixing characteristics for the dispersion of solid particles in a liquid. Furthermore, the influence of single forces in the Lagrangian particle model on the mixing characteristics is analysed, as well as their influence on the overall force acting on the particles. Especially computationally expensive forces, like the Basset force, have usually been neglected in Lagrangian particle simulations for pilot or industry scale devices. But it becomes apparent, that none of the forces analysed may always be neglected. For each of the forces it should be decided from case to case whether to include it or not.

INHALTSVERZEICHNIS

| | | |
|---------|--|----|
| 1 | EINLEITUNG | 1 |
| 1.1 | Mischen und Fluidphasenresonanzmischer | 1 |
| 1.2 | Motivation und Zielstellung | 1 |
| 1.3 | Gliederung der Arbeit | 3 |
| 2 | RESONANZSCHWINGUNGSTECHNIK UND FLUIDPHASENRESONANZ- MISCHEN | 5 |
| 2.1 | Geschichte, Grundlagen, Anwendungen | 5 |
| 2.2 | Technik des FPR-Mischens | 7 |
| 3 | NUMERISCHE METHODEN | 19 |
| 3.1 | Kontinuierliche Phasen | 20 |
| 3.1.1 | Generelle Simulationsmethode | 20 |
| 3.1.2 | Turbulenzmodellierung | 24 |
| 3.1.3 | Auswertemethoden | 29 |
| 3.2 | Disperse Phase | 31 |
| 3.2.1 | Partikelkennzahlen | 33 |
| 3.2.2 | Partikelkräfte und -momente | 35 |
| 3.2.2.1 | Widerstandskraft | 35 |
| 3.2.2.2 | Schwerkraft und Auftrieb | 35 |
| 3.2.2.3 | Druckgradientenkraft | 36 |
| 3.2.2.4 | Transversale Auftriebskräfte | 36 |
| 3.2.2.5 | Virtuelle Masse | 39 |
| 3.2.2.6 | Basset-Kraft | 40 |
| 3.2.2.7 | Drehmoment | 44 |
| 3.2.3 | Partikeldispersion durch Turbulenz | 45 |
| 3.2.4 | Wandkollision | 46 |
| 3.2.5 | Rechenaufwand und vernachlässigte Kräfte und Ef- fekte | 49 |
| 3.2.6 | Auswertemethoden | 51 |
| 3.2.6.1 | Mischkennzahlen | 51 |
| 3.2.6.2 | Krafteinfluss | 53 |
| 3.3 | Methode zur Simulation der Mischvorgänge | 53 |
| 4 | EXPERIMENTELLE METHODE - LASER-DOPPLER-ANEMOMETRIE | 55 |
| 5 | VERBESSERUNG DER STRÖMUNG IN FPR-MISCHERN | 59 |
| 5.1 | Untersuchung der Ausgangsvariante | 59 |
| 5.1.1 | LDA | 59 |

| | | | |
|---------|---|-----|--|
| 5.1.2 | CFD | 63 | |
| 5.1.3 | Ergebnisse und Diskussion | 64 | |
| 5.2 | Verbesserte Variante | 69 | |
| 5.2.1 | Geometrie und Betriebsparameter der verbesserten Variante | 69 | |
| 5.2.2 | LDA | 71 | |
| 5.2.3 | CFD | 71 | |
| 5.2.4 | Ergebnisse und Diskussion | 73 | |
| 5.3 | Zusammenfassung | 77 | |
| 6 | MISCHEIGENSCHAFTEN DER VERBESSERTEN VARIANTEN | 81 | |
| 6.1 | Strömungssimulationen | 82 | |
| 6.2 | Leistungseintrag und Newtonzahl | 85 | |
| 6.3 | Simulation der Mischens mit Tracern und Partikeln | 88 | |
| 6.3.1 | Tracersimulationen | 89 | |
| 6.3.2 | Partikelsimulationen | 90 | |
| 6.3.2.1 | Einfluss der Geometrie | 93 | |
| 6.3.2.2 | Frequenzeinfluss | 96 | |
| 6.4 | Zusammenfassung | 102 | |
| 7 | EINFLUSS DER AUF DIE PARTIKEL WIRKENDEN KRÄFTE | 107 | |
| 7.1 | Relative Größe der Partikelkräfte im gesamten Behälter | 107 | |
| 7.2 | Relative Größe der Partikelkräfte über der Höhe | 110 | |
| 7.3 | Einfluss der Kräfte auf das Mischverhalten | 113 | |
| 7.4 | Zusammenfassung | 117 | |
| 8 | ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK | 119 | |
| | LITERATUR | 121 | |
| | EIGENE VERÖFFENTLICHUNGEN | 133 | |

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

| | | |
|----------------|--|----|
| Abbildung 2.1 | Richardson-Effekt | 6 |
| Abbildung 2.2 | Verbesserung des Stoffaustauschs durch RST | 8 |
| Abbildung 2.3 | Elektrolyse-Effizienzsteigerung durch RST | 9 |
| Abbildung 2.4 | Extraktions-Effizienzsteigerung durch RST | 10 |
| Abbildung 2.5 | Membranfilter-Effizienzsteigerung durch RST | 10 |
| Abbildung 2.6 | Foulingverhinderung durch RST | 11 |
| Abbildung 2.7 | Prinzipskizze FPR-Mischer | 12 |
| Abbildung 2.8 | FPR-Antrieb | 13 |
| Abbildung 2.9 | Versuchsaufbau Querstromfiltration | 14 |
| Abbildung 2.10 | Resonanzverhalten eines FPR-Antriebs | 16 |
| Abbildung 2.11 | Eigenmoden der freien Oberfläche | 17 |
| Abbildung 3.1 | Simulationsmethoden für freie Oberflächen | 22 |
| Abbildung 3.2 | VoF-Beispielsimulation | 25 |
| Abbildung 3.3 | Turbulente Energiekaskade | 26 |
| Abbildung 3.4 | Widerstandskoeffizient in Abhängigkeit von der Partikel-Reynoldszahl | 36 |
| Abbildung 3.5 | Scherauftriebskraft | 38 |
| Abbildung 3.6 | Rotationsauftriebskraft | 39 |
| Abbildung 3.7 | Bassetkraft – Rechenzeit vs. Genauigkeit | 42 |
| Abbildung 3.8 | Partikel-Wand-Kollision | 48 |
| Abbildung 4.1 | LDA-Prinzip | 56 |
| Abbildung 5.1 | Skizze der Ausgangsvariante | 60 |
| Abbildung 5.2 | Optische Effekte am Mischbehälter | 62 |
| Abbildung 5.3 | LDA-Setup | 62 |
| Abbildung 5.4 | Vergleich Turbulenzmodelle | 65 |
| Abbildung 5.5 | Netzunabhängigkeit | 66 |
| Abbildung 5.6 | Ausgangsvariante – LDA vs. CFD | 67 |
| Abbildung 5.7 | Kontur- und Vektorplot Ausgangsvariante | 68 |
| Abbildung 5.8 | Geometrie der verbesserten Variante | 70 |
| Abbildung 5.9 | Rechengitter 135°-Steg am Boden | 72 |
| Abbildung 5.10 | Axiale Geschwindigkeiten 135°-Steg – LDA vs. CFD | 74 |
| Abbildung 5.11 | Radiale Geschwindigkeiten 135°-Steg – LDA vs. CFD | 75 |

- Abbildung 5.12 Tangentiale Geschwindigkeiten 135°-Steg – LDA vs. CFD 76
- Abbildung 5.13 Vergleich zwischen Ausgangsvariante und 135°-Steg am Boden 78
- Abbildung 5.14 Vertikale Geschwindigkeiten in den verbesserten Varianten 78
- Abbildung 6.1 Modifiziertes Rohrende Dreifuß 81
- Abbildung 6.2 Einfluss der Rohrgeometrie auf die Strömung 84
- Abbildung 6.3 Einfluss der Antriebsfrequenz auf die Strömung 86
- Abbildung 6.4 Newtonzahlen der verbesserten Varianten 89
- Abbildung 6.5 Illustration Tracermischen 91
- Abbildung 6.6 Tracermischen - Zeitlicher Verlauf der Mischgüte 92
- Abbildung 6.7 Partikelmischen - Partikelpositionen Variantenvergleich 93
- Abbildung 6.8 Partikelmischen - Partikelpositionen Durchmesserinfluss 93
- Abbildung 6.9 Partikelmischen – Mischgütern 97
- Abbildung 6.10 Partikelmischen - Voronoï-Standardabweichungen 98
- Abbildung 6.11 Partikelmischen - Mischdauern der Geometrien 99
- Abbildung 6.12 Partikelmischen - Konzentrationsprofile 100
- Abbildung 6.13 Partikelmischen - Frequenzabhängigkeit der Mischgüte 101
- Abbildung 6.14 Partikelmischen - Frequenzabhängigkeit der Mischdauer 103
- Abbildung 6.15 Partikelmischen - Frequenzabhängigkeit der Konzentrationsprofile 104
- Abbildung 7.1 Relative Größen der Partikelkräfte 108
- Abbildung 7.2 Höhenprofile der relativen Partikelkräfte 112
- Abbildung 7.3 Einfluss der Kräfte auf die Mischgüte 115
- Abbildung 7.4 Einfluss der Kräfte auf die Mischdauer 116

TABELLENVERZEICHNIS

| | | |
|-------------|--|-----|
| Tabelle 2.1 | Frequenzen der Eigenmoden | 15 |
| Tabelle 5.1 | FPR-Parameter Ausgangsvariante | 61 |
| Tabelle 5.2 | Stoffeigenschaften | 61 |
| Tabelle 5.3 | FPR-Parameter verbesserte Varianten | 69 |
| Tabelle 6.1 | Integrale Werte der vier Varianten | 83 |
| Tabelle 6.2 | Reynoldszahlen, Leistungseintrag, und Newtonzahlen | 88 |
| Tabelle 6.3 | Mischdauer und -güte Tracersimulationen | 92 |
| Tabelle 7.1 | Stokeszahlen bei Kräftegleichheiten | 110 |

ABKÜRZUNGEN

| | |
|------|---------------------------------|
| CFD | Computational Fluid Dynamics |
| DNS | Direct Numerical Simulation |
| FPR | Fluidphasenresonanz |
| FEM | Finite-Elemente-Methode |
| FVM | Finite-Volumen-Methode |
| LBM | Lattice-Boltzmann-Methode |
| LDA | Laser-Doppler-Anemometrie |
| LES | Large Eddy Simulation |
| RANS | Reynolds Averaged Navier Stokes |
| RST | Resonanzschwingungstechnik |
| SPH | Smoothed Particle Hydrodynamics |
| SST | Shear Stress Transport |
| VoF | Volume of Fluid |

SYMBOLVERZEICHNIS

In der vorliegenden Arbeit werden skalare Größen ohne besondere Formatierung angegeben. Für Vektoren und Tensoren werden Symbole in der Formatierung „fett“ genutzt. Existieren für ein Symbol beide Formatierungen, so bezeichnet der Skalar den Betrag des Vektors.

LATEINISCHE SYMBOLE

| Symbol | Einheit | Beschreibung |
|--------------------|----------------|---|
| A | - | Fläche |
| $A_{Dreifuss}$ | m^2 | Fläche des Dreifußausschnitts |
| A_{Steg} | m^2 | Fläche des Stegausschnitts |
| A_C | - | Beschleunigungsparameter |
| A_{Ein} | m^2 | Fläche des Einlasses in der Simulation |
| a_i | - | Konstanten zur Berechnung des Nachlaufs von $F_{B,mod}$ |
| C | - | (Integrations-)Konstante |
| C_B | - | Koeffizient der Bassetkraft |
| $C_{B,mod}$ | $kg\ s^{-1/2}$ | konstanter Faktor der modifizierten Bassetkraft |
| c | m^{-3} | Konzentration |
| c_{end} | m^{-3} | Zielkonzentration |
| C_F | - | Durchflusskoeffizient |
| C_{LR} | - | Koeffizient der Rotationsauftriebskraft |
| C_{LS} | - | Koeffizient der Scherauftriebskraft |
| C_{LS} | - | Koeffizient der virtuellen Masse |
| C_R | - | Koeffizient des Fluid Drehmoments |
| c_{Voro} | m^{-3} | Partikelkonzentration aus Voronoï-Methode |
| $\bar{c}_{Voro,g}$ | m^{-3} | Geometrischer Mittelwert der Voronoï-Konzentrationen |
| C_W | - | Widerstandskoeffizient |
| d_B | m | Behälterdurchmesser |

| Symbol | Einheit | Beschreibung |
|--------------------|-----------------------------------|--|
| d_p | m | Partikeldurchmesser |
| d_R | m | Rohrdurchmesser |
| E | kg m ² s ⁻² | Energie |
| F | kg m s ⁻² | Kraft |
| f_A | s ⁻¹ | Antriebsfrequenz |
| F_B | kg m s ⁻² | Bassetkraft |
| $F_{B,mod}$ | kg m s ⁻² | modifizierte Bassetkraft |
| $F_{B,win}$ | kg m s ⁻² | „Window“-Teil der modifizierten Bassetkraft |
| $F_{B,tail}$ | kg m s ⁻² | Nachlaufs der modifizierten Bassetkraft |
| $F_{B,tail,i}$ | kg m s ⁻² | i -te Exponential Funktion des Nachlaufs von $F_{B,mod}$ |
| $F_{B,tail,i,di}$ | kg m s ⁻² | direkt berechenbarer Teil von $F_{B,tail,i}$ |
| $F_{B,tail,i,rek}$ | kg m s ⁻² | rekursiv berechenbarer Teil von $F_{B,tail,i}$ |
| F_G | kg m s ⁻² | Schwerkraft (zusammengefasst mit Auftrieb) |
| F_{LR} | kg m s ⁻² | Rotationsauftriebs- oder Magnuskraft |
| F_{LS} | kg m s ⁻² | Scherauftriebs- oder Saffmankraft |
| $F_{p,rel}$ | - | relative Partikelkraft, normiert mit Widerstandskraft |
| F_{PG} | kg m s ⁻² | Druckgradientenkraft |
| F_p | kg m s ⁻² | am Partikel angreifende Kraft |
| F_{VM} | kg m s ⁻² | Virtuelle Massenkraft |
| F_W, F_W | kg m s ⁻² | Widerstandskraft |
| f_D | s ⁻¹ | Burstsignalfrequenz |
| g, \mathbf{g} | m s ⁻² | Fallbeschleunigung |
| \mathbf{g}_B | m s ⁻² | Beschleunigungsfunktion der modifizierten Bassetkraft |
| h | m | Höhe |
| h_A | m | Höhe des Rohrausschnitts |
| h_B | m | Behälterhöhe |
| h_R | m | Rohrhöhe |
| h_W | m | Wasserhöhe |
| i | - | Laufvariable |
| I_p | kg m | Partikelträgheitsmoment |

| Symbol | Einheit | Beschreibung |
|-----------------|----------------------------------|---|
| J_m | - | Besselfunktion erster Gattung, m -ter Ordnung |
| k | $\text{m}^2 \text{s}^{-2}$ | turbulente kinetische Energie |
| K_B | $\text{s}^{-1/2}$ | Kernel des „Window“-Teils der modifizierten Bassetkraft |
| K_{tail} | $\text{s}^{-1/2}$ | Kernel des Nachlauf-Teils der modifizierten Bassetkraft |
| k_W | m^{-1} | Wellenzahl |
| $k_{W,E}$ | m^{-1} | Wellenzahl bei integralem Längenmaß |
| $k_{W,K}$ | m^{-1} | Wellenzahl bei Kolmogorov-Längenmaß |
| $k_{W,T}$ | m^{-1} | Wellenzahl bei Taylor-Längenmaß |
| L | m | Längenmaß |
| L_E | m | integrales Längenmaß |
| L_K | m | Kolmogorov-Längenmaß |
| $M_{G,2,rel}$ | - | relative Mischgüte |
| m_p | kg | Masse des Partikels |
| \mathbf{n} | - | Normaleneinheitsvektor |
| N | - | Anzahl |
| N_{CV} | - | Anzahl der Kontrollvolumina |
| N_p | - | Anzahl der Partikel |
| N_t | - | Anzahl der Zeitschritte |
| N_Z | - | Anzahl der Zellen |
| Ne | - | Newtonzahl |
| p | $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$ | Druck |
| p_{Ein} | $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$ | Druck am Einlass |
| P | $\text{kg m}^2 \text{s}^{-3}$ | Leistung |
| P_V | $\text{kg m}^2 \text{s}^{-3}$ | Leistung, berechnet aus Volumenänderungsarbeit |
| P_ε | $\text{kg m}^2 \text{s}^{-3}$ | Leistung, berechnet aus Dissipationsrate |
| r | m | Radius/radiale Koordinate |
| \mathbf{R} | $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$ | Reynolds-Spannungstensor |
| \mathbf{R}_E | - | Euler-Anteil des Korrelationsterms |
| \mathbf{R}_L | - | Lagrange-Anteil des Korrelationsterms |
| \mathbf{R}_p | - | Korrelationsterm |

| Symbol | Einheit | Beschreibung |
|---|-------------------|---|
| Re | - | Reynoldszahl |
| Re _p | - | Partikel-Reynoldszahl |
| Re _r | - | Rotations-Reynoldszahl |
| Re _s | - | Scher-Reynoldszahl |
| r _a | m | Außenradius |
| r _B | m | Behälterradius |
| S | m ² | Oberfläche |
| s _n | - | Restitutionskoeffizient in Normalenrichtung |
| Sl _p | - | Partikel-Strouhalzahl |
| St _p | - | Partikel-Stokeszahl |
| St _{p,BxVM} | - | Partikel-Stokeszahl bei Gleichheit von Bassetkraft und virtueller Masse |
| St _{p,LRxLS} | - | Partikel-Stokeszahl bei Gleichheit der beiden Auftriebskräfte |
| T | s | Zeitskala |
| T _L | s | integrale Zeitskala |
| Tu | % | Turbulenzgrad |
| t _{end} | s | Endzeit |
| t _{win} | s | Länge des Fensters der modifizierten Bassetkraft |
| t _{90%} | s | Zeit bis zum Erreichen des 90%-Kriteriums |
| t _{90%,rel} | - | Zeit bis zum Erreichen des 90%-Kriteriums, normiert mit Periodendauer |
| u _{eff} | m s ⁻¹ | Effektivgeschwindigkeit |
| u _f , u_f | m s ⁻¹ | Fluidgeschwindigkeit |
| u' _f , u'_f | m s ⁻¹ | Fluktuation der Fluidgeschwindigkeit |
| u _{f,n,Ein} | m s ⁻¹ | Fluidgeschwindigkeit in Normalenrichtung am Einlass |
| u _{f,r} | m s ⁻¹ | Fluidgeschwindigkeit in radialer Richtung |
| u _{f,x} | m s ⁻¹ | Fluidgeschwindigkeit in x-Richtung |
| u _{f,y} | m s ⁻¹ | Fluidgeschwindigkeit in y-Richtung |
| u _{f,z} | m s ⁻¹ | Fluidgeschwindigkeit in z-Richtung |
| u _{f,φ} | m s ⁻¹ | Fluidgeschwindigkeit in tangentialer Richtung |

| Symbol | Einheit | Beschreibung |
|---------------------------------|-----------------------------|---|
| u_p, \mathbf{u}_p | m s^{-1} | Partikelgeschwindigkeit |
| $\mathbf{u}_{p,0}$ | m s^{-1} | Partikelgeschwindigkeit vor der Kollision |
| $\mathbf{u}_{p,0}$ | m s^{-1} | Partikelgeschwindigkeit nach der Kollision |
| $u_{p,n}$ | m s^{-1} | Partikelgeschwindigkeit in Normalenrichtung |
| $u_{p,n,0}, \mathbf{u}_{p,n,0}$ | m s^{-1} | Partikelgeschwindigkeit in Wand-Normalenrichtung vor der Kollision |
| $\mathbf{u}_{p,n,2}$ | m s^{-1} | Partikelgeschwindigkeit in Wand-Normalenrichtung nach der Kollision |
| $u_{p,t,0}, \mathbf{u}_{p,n,0}$ | m s^{-1} | Partikelgeschwindigkeit parallel zur Wand vor der Kollision |
| $\mathbf{u}_{p,t,2}$ | m s^{-1} | Partikelgeschwindigkeit parallel zur Wand nach der Kollision |
| $u_{rel}, \mathbf{u}_{rel}$ | m s^{-1} | Relativgeschwindigkeit zwischen Fluid und Partikel |
| V | m^3 | Volumen |
| \dot{V} | $\text{m}^3 \text{ s}^{-1}$ | Volumenstrom |
| \dot{V}_A | $\text{m}^3 \text{ s}^{-1}$ | Antriebsvolumenstrom |
| $\dot{V}_{Dreifuss}$ | $\text{m}^3 \text{ s}^{-1}$ | Volumenstrom im Dreifuß-Rohr |
| \dot{V}_{Steg} | $\text{m}^3 \text{ s}^{-1}$ | Volumenstrom im Steg-Rohr |
| V_{Voro} | m^3 | Volumen der Elemente der Voronoï-Zerlegung |
| V_W | m^3 | Wasser- bzw. Flüssigkeitsvolumen |
| w_i | - | Wichtungsfaktor |
| x | m | x-Koordinate, Betrag des Ortsvektors |
| x_{Str} | m | Interferenzstreifenabstand |
| \mathbf{x} | m | Ortsvektor |
| \mathbf{x}_p | m | Ortsvektor des Partikels |
| y | m | y-Koordinate |
| Y_m | - | Besselfunktion zweiter Gattung, m -ter Ordnung |
| z | - | z-Koordinate |

GRIECHISCHE SYMBOLE

| Symbol | Einheit | Beschreibung |
|-----------------|----------------------------------|--|
| α | - | Volumenanteil |
| α_a | - | Volumenanteil der Phase a |
| α_b | - | Volumenanteil der Phase b |
| $\alpha_{p,0}$ | ° | Aufprallwinkel des Partikels |
| $\alpha_{p,2}$ | ° | Abprallwinkel des Partikels |
| β | - | Koeffizient in der Scherauftriebskorrekturfunktion |
| γ | - | Verhältnis von Partikel- zu Fluidichte |
| δ | - | Dirac-Funktion |
| δ_G | m | Grenzschichtdicke |
| ε | $\text{m}^2 \text{s}^{-3}$ | turbulente Dissipationsrate |
| ζ | - | Zufalls-Vektor |
| η | m | Radiendifferenz |
| θ | ° | Schnittwinkel der LDA-Laserstrahlen |
| κ | - | Krümmung der Oberfläche |
| λ | m | Taylor-Mikroskala |
| λ_{LDA} | m | Wellenlänge des LDA-Lasers |
| $\lambda_{m,n}$ | - | Nullstellen |
| μ_d | - | dynamischer Reibungskoeffizient |
| μ_f | $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ | dynamische Viskosität des Fluids |
| μ_s | - | statischer Reibungskoeffizient |
| μ_t | $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ | dynamische Wirbelviskosität |
| $\nu_{f,eff}$ | $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ | effektive kinematische Viskosität des Fluids |
| ν_f | $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ | kinematische Viskosität des Fluids |
| ν_t | $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ | kinematische Wirbelviskosität |
| ξ | - | Radienverhältnis |
| ρ_f | kg m^{-3} | Fluidichte |
| $\rho_{f,a}$ | kg m^{-3} | Fluidichte der Phase a |
| $\rho_{f,b}$ | kg m^{-3} | Fluidichte der Phase b |
| σ | kg s^{-2} | Oberflächenspannung |

| Symbol | Einheit | Beschreibung |
|------------------------------|----------------------------------|---|
| $\sigma_{c,Voro,g}$ | - | Geometrische Standardabweichung der Voronoï-Konzentrationen |
| σ_u | m s^{-1} | Quadratmittel der Geschwindigkeitsfluktuationen |
| τ | $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$ | viskoser Spannungstensor |
| τ_f | s | Strömungszeitskala |
| τ_L | s | Lagrange-Zeitskala |
| τ_p | s | Partikelrelaxationszeit |
| Φ | - | Platzhalter für skalare Größe |
| ϕ | - | Tangentiale Koordinate |
| Ψ_f | $\text{s}^2 \text{m}^{-2}$ | Kompressibilität |
| ψ | - | Schiefeparameter |
| ψ_{krit} | - | kritischer Schiefeparameter |
| ω | s^{-1} | Oszillationskreisfrequenz |
| ω_f | s^{-1} | Wirbelfrequenz (auch spezifische Dissipationsrate) |
| $\omega_{m,n}$ | s | Eigenkreisfrequenz der Mode m, n |
| ω_p, ω_p | s^{-1} | Partikelrotationsgeschwindigkeit |
| $\omega_{p,0}$ | s^{-1} | Partikelrotationsgeschwindigkeit vor der Kollision |
| $\omega_{p,2}$ | s^{-1} | Partikelrotationsgeschwindigkeit nach der Kollision |
| $\omega_{rel}, \omega_{rel}$ | s^{-1} | Relativrotation zwischen Fluid und Partikel |

EINLEITUNG

1.1 MISCHEN UND FLUIDPHASENRESONANZMISCHER

Das Mischen als eine der Grundoperationen der mechanischen Verfahrenstechnik dient dazu, mindestens zwei separat vorliegende Ausgangsstoffe bzw. Phasen durch mechanische Einwirkung so miteinander zu vermengen, dass im entstehenden Gemisch die Komponenten der Ausgangsstoffe ausreichend homogen verteilt sind. Eingeteilt werden die Mischverfahren beispielsweise nach dem Aggregatzustand der Ausgangsstoffe (Kraume (2012)). Ist, wie in der vorliegenden Arbeit, die kontinuierliche Phase flüssig, so wird im Allgemeinen vom Rühren gesprochen. Üblicherweise werden dabei Rührer genutzt, die durch hervorgerufen einer Relativbewegung zwischen den Phasen diese miteinander vermischen. Im Laufe der Zeit haben sich zahlreiche Varianten von Rührern etabliert, beispielsweise geometrisch recht einfache Scheiben- und Blattrührer, oder etwas aufwendigere Impeller- und Propellerrührer.

Das Fluidphasenresonanz (FPR)-Mischen hingegen ist ein rührerloses Mischverfahren. Dabei wird eine Strömung in einer Flüssigkeit erzeugt, indem durch Wechseldruck in einem von zwei mit der Flüssigkeit in Kontakt stehenden Gaspolstern eine schwingende Bewegung angeregt wird. Die so induzierte Strömung wird für die Mischaufgabe genutzt. Im Rahmen dieser Arbeit wird das Suspendieren von festen Partikeln in einer flüssigen Phase, also das Flüssig-Fest-Mischen, in FPR-Mischern untersucht.

1.2 MOTIVATION UND ZIELSTELLUNG

Die klassischen Methoden der Rührerauslegung sind Scale-Ups von Experimenten im Labor- oder Technikumsmaßstab oder die Nutzung bestehender und validierter Korrelationen. In den letzten Jahrzehnten hat im Zuge der besseren zur Verfügung stehenden Rechentechnik und passender Software aber auch die Bedeutung von Simulationen stark zugenommen. Die Bedeutung der Auslegung wird deutlich, wenn man sich folgende Zahlen vor Augen führt (entnommen aus Paul et al. (2004)):

Laut Tatterson et al. (1991) wird weltweit die Hälfte aller Produkte der chemischen Industrie mit Hilfe von Rührprozessen hergestellt und bereits 1991 ist allein in den USA ein Schaden zwischen 1 und 20 Mrd. US-\$ durch falsche Auslegung von Rührprozessen entstanden. Allein schon die Menge an verschiedensten Scale-Up-Regeln macht die Auslegung sehr kompliziert: Kipke (1985) zeigt an einem Rechenbeispiel der Skalierung eines Rührbehälters von Pilot- auf Industriemaßstab, dass die an Hand der verschiedenen von Mersmann und Laufhütte (1985) zusammengestellten Regeln zu einer Rührwerksleistung im Bereich zwischen 32 kW und 6600 kW führen – mehr als zwei Größenordnungen – bzw. laut Kipke die Frage, ob ein Hilfsdieselaggregat ausreicht oder ein eigenes Kraftwerk benötigt wird. Hier zeigt sich deutlich, dass genauere, verlässlichere Methoden zur Auslegung nicht nur hilfreich, sondern notwendig sind bzw. waren.

Hier kommen numerische Berechnungen mit Computational Fluid Dynamics (CFD) ins Spiel. Zur Auslegung von Rührbehältern wurden und werden diese aus Gründen des numerischen Aufwands üblicherweise mit Euler-Euler- bzw. Zweifluid-Modellen durchgeführt. Dabei werden sowohl die kontinuierliche als auch die disperse Phase als Kontinuum modelliert (siehe z.B. Li et al. (2015)). Inzwischen hält hier beim Dispergieren von Feststoffpartikeln in Flüssigkeiten aufgrund der steigenden Rechen- und Speicherkapazitäten und der gleichzeitigen Verbesserung der numerischen Modelle auch die Euler-Lagrange-Methode Einzug (Sommerfeld und Decker (2004)). Hierbei werden die einzelnen Elemente der dispersen Phase als massebehaftete Punktpartikel behandelt (ausführlich beschrieben z.B. von Crowe et al. (2011)). Bei beiden Methoden werden verschiedene Kräfte, die auf die disperse Phase wirken, vernachlässigt, darunter vor allem die Basset-Kraft und oft auch die virtuelle Masse und transversale Auftriebskräfte (Van den Akker (2010)). Dafür gibt es häufig keine physikalische Rechtfertigung, sondern es wird üblicherweise auf den erhöhten Rechenaufwand verwiesen (siehe z.B. Decker (2005) und Hjelmfelt und Mockros (1966)). Natürlich ist das für die Verfahrensentwicklung im industriellen Maßstab ein valides Argument. Insbesondere die Berechnung der Basset-Kraft erhöht den Rechenaufwand für die disperse Phase deutlich, Sommerfeld (1996) gibt eine etwa zehnfach längere Rechendauer an. Mehrere Arbeiten deuten jedoch darauf hin, dass z.B. auch die Basset-Kraft eine durchaus große Rolle im Verhältnis zu anderen Kräften spielen kann (Casas et al. (2018), Hjelmfelt und Mockros (1966) und Krafcik et al. (2018)). Gerade bei den in Rührkesseln und anderen Apparaten der Mischtechnik vorkommenden stark

turbulenten und scherbehafteten Strömungen könnte diese Vernachlässigung jedoch zu deutlichen Abweichungen der Simulationsergebnisse von der Realität führen, was wiederum ernsthafte ökologische und ökonomische Folgen haben kann, wie oben bereits beschrieben. Wird zum Beispiel die Dispersion überschätzt und der Mischer daraufhin mit zu wenig Leistung ausgelegt, kann die Mischaufgabe eventuell gar nicht erfüllt werden. Wird hingegen das Suspendieren unterschätzt, werden Ressourcen für einen überdimensionierten Antrieb verschwendet.

Im Rahmen dieser Arbeit soll nun einerseits das Suspendieren von Feststoffpartikeln in FPR-Mischern untersucht werden. Es sollen verschiedene Varianten entwickelt und hinsichtlich ihrer Mischeigenschaften untersucht werden, sodass am Ende eine Vorzugsvariante bestimmt werden kann.

Andererseits soll das Hauptaugenmerk der Arbeit aber nicht nur auf der Verfahrensentwicklung und strömungstechnischen Verbesserung des FPR-Mischens liegen, sondern auf den Transportmechanismen im FPR-Mischer im Speziellen und dem Suspendieren von Partikeln im Allgemeinen. Dazu werden Partikelsimulationen mit einem Euler-Lagrange-Ansatz genutzt. So kann der Einfluss der verschiedenen vom Fluid auf die Partikel wirkenden Kräfte untersucht und in Abhängigkeit von Partikelträgheitseigenschaften analysiert werden. Alle relevanten Kräfte (Widerstandskraft, transversaler Scher- und Rotationsauftrieb, Druckgradientenkraft, Schwerkraft, Auftrieb, Virtuelle Masse, Basset-Kraft) werden berücksichtigt und ihre Beiträge zur Gesamtkraft und – für Basset- und Auftriebskräfte – zum Mischverhalten untersucht. Mit Approximationsmodellen wie dem von Hinsberg et al. (2011) und erhöhter Rechenleistung ist es nun erstmals möglich, auch im industriellen Maßstab den Beitrag aller relevanten Kräfte zum Partikeltransport in einem Mischbehälter zu untersuchen. Am Ende soll diese Arbeit also eine Orientierung geben, welche Kräfte bei der Simulation von Suspendiervorgängen berücksichtigt werden müssen.

1.3 GLIEDERUNG DER ARBEIT

In den anschließenden Kapiteln werden zunächst Grundlagen des FPR-Mischens (Kapitel 2), der genutzten numerischen Methoden (Kapitel 3), und der eingesetzten Messtechnik erörtert (Kapitel 4).

Kapitel 5 beschäftigt sich mit der Untersuchung der Ausgangsvariante und der Entwicklung alternativer, gut für das Suspendieren geeigneter

Konfigurationen des FPR-Mischers mit Hilfe von CFD-Simulationen. Anhand von Messungen mit Laser-Doppler-Anemometrie (LDA) wird deren Validität überprüft.

Im darauf folgenden Kapitel 6 werden die Mischeigenschaften der weiterentwickelten Konfigurationen untersucht, sodass am Ende dieses Kapitels eine Vorzugsvariante empfohlen werden kann.

Schließlich wird in Kapitel 7 der Einfluss der verschiedenen Partikelkräfte sowohl auf die Gesamtkraft als auch auf das Mischverhalten untersucht.

RESONANZSCHWINGUNGSTECHNIK UND FLUIDPHASENRESONANZ-MISCHEN

2.1 GESCHICHTE, GRUNDLAGEN, ANWENDUNGEN

Wie bereits erwähnt, ist das FPR-Mischen ein rührerloses Mischverfahren. Es geht, zumindest am Hochschulstandort Merseburg, zurück auf Arbeiten von Georgij Ostrovskij (z.B. Ostrovskij et al. (1993)) zur so genannten Resonanzschwingungstechnik (RST), die sich den Richardson-Effekt (Richardson und Tyler (1929), auch „Annulareffekt“ genannt) zunutze macht. Demzufolge treten bei oszillierenden (Rohr-)Strömungen an Begrenzungen Geschwindigkeitsüberhöhungen auf, wie in [Abbildung 2.1](#) dargestellt ist. Genauer kommt es zu einer Überhöhung der zeitlich gemittelten, quadrierten Geschwindigkeitskomponente in axialer Richtung.

Sexl (1930) hat die theoretischen Grundlagen für ein unendlich langes Rohr mit kreisförmigem Querschnitt sowohl aus den Navier-Stokes-Gleichungen (Gln. (3.1) und (3.2)) abgeleitet, als auch aus der Prandtl'schen Grenzschichttheorie. Das Geschwindigkeitsprofil über dem Radius r errechnet sich Sexl zufolge nach

$$\overline{u_{f,z}^2}(r) = \frac{C^2}{2\omega^2} \left[1 - 2\sqrt{\frac{r_a}{r}} \exp\left(-\sqrt{\frac{\omega}{2\nu_f}}\eta\right) \cos\sqrt{\frac{\omega}{2\nu_f}}\eta + \frac{r_a}{r} \exp\left(-2\sqrt{\frac{\omega}{2\nu_f}}\eta\right) \right] \quad (2.1)$$

Darin sind C eine Integrationskonstante, ω die Oszillationskreisfrequenz, r_a der Außenradius des Rohrs, η die Differenz $r_a - r$, und ν_f die kinematische Viskosität des Fluids. Die Grenzschichtdicke, d.h. in diesem Fall der Abstand des Maximums von der Rohrwand, ergibt sich zu

$$\delta_G = 2.28\sqrt{\frac{2\nu_f}{\omega}} \quad (2.2)$$

Diese erhöhten Geschwindigkeiten führen zum Beispiel zu einem schnelleren Abbau von Konzentrations- oder Temperaturgradienten zwischen

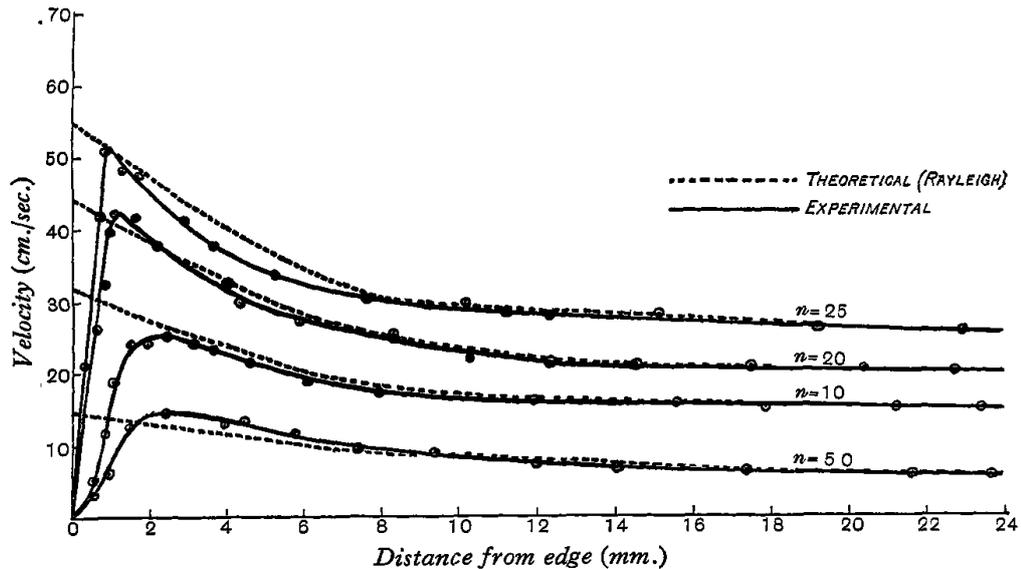


Abbildung 2.1: Darstellung der Geschwindigkeitsüberhöhungen an Wänden in oszillierenden Strömungen im Vergleich zu theoretischen Vorhersagen (entnommen aus Richardson und Tyler (1929)).

Grenzschicht und restlichem Fluid. In zahlreichen Untersuchungen wurde das große Potenzial dieses Prinzips für die Verbesserung verfahrenstechnischer Anwendungen demonstriert:

- Verbesserung des Stoffaustauschs in Blasensäulen (Hussein (2004), [Abbildung 2.2](#)): Die Geschwindigkeitserhöhung ruft höhere Turbulenz hervor, die wiederum die Blasengröße verringert. Kleinere Blasen bei konstantem Gasgehalt bedeuten eine größere Blasenanzahl mit größerer integraler Oberfläche, die für den Stoffaustausch zur Verfügung steht.
- Steigerung der Stromausbeute von Elektrolysevorgängen (Säuberlich (2012), [Abbildung 2.3](#)): Findet die Elektrolyse in einem parallel zu den Elektroden schwingenden Elektrolyt statt, wirken gleichzeitig zwei Mechanismen. Zum Einen werden an den Elektroden entstehende Gasbläschen durch die relativ hohen Geschwindigkeiten sehr gut abgelöst, sodass die Elektrodenoberfläche schnell wieder für den Elektrolysevorgang zur Verfügung steht. Zum Anderen wird durch die Geschwindigkeitsüberhöhung Turbulenz induziert, die zu einem schnelleren Abbau von Konzentrationsgradienten in der Elektrodengrenzschicht führt, sodass die Verfügbarkeit des Elektrolyten in der Grenzschicht steigt.

- Höhere Effizienz bei Extraktions-/Lösevorgängen (Säuberlich (2012), [Abbildung 2.4](#)): Wie bei der Elektrolyse, findet auch hier eine Oszillation parallel zu einem Teil der Oberfläche des zu lösenden Materials statt. Und auch hier bewirken die Geschwindigkeitsüberhöhungen und die damit einhergehende (verstärkte) Turbulenz in der Grenzschicht einen schnelleren Ausgleich des Konzentrationsgradienten und im Endeffekt eine Beschleunigung des Lösevorgangs.
- Höhere Effizienz in der Querstromfiltration (Pflieger (2009), [Abbildung 2.5](#)): Hier wird dem Flüssigkeitsstrom, der parallel zum Filter läuft, die Oszillation überlagert, die durch die Geschwindigkeitsüberhöhungen dafür sorgt, dass die Filtrerrückstände vom Filter abgewaschen werden und er so länger durchlässig für den Permeatstrom bleibt.
- Belagbildung in Photobioreaktoren verlangsamt bzw. nahezu verhindert (Säuberlich (2012), [Abbildung 2.6](#)): Ähnlich dem Wirkprinzip in der Querstromfiltration wird die Entstehung eines Biofilms an den Reaktorwänden dadurch verhindert, dass durch die hohen Geschwindigkeiten ein Anhaften der Organismen stark reduziert wird.

2.2 TECHNIK DES FPR-MISCHENS

Während all diese Anwendungen den Richardstoneffekt nutzen, ist dieser für das FPR-Mischen von nachrangiger Bedeutung. Im Rahmen von Forschungsprojekten bei Prof. Dr. rer. nat. Ralph Säuberlich an der Hochschule Merseburg wurde unter Mitarbeit vom Autor die Verfahrensgrundlage der oszillierenden Strömungen für die Anwendung bei Suspensionsvorgängen angepasst. Ein FPR-Mischer ist prinzipiell so aufgebaut, dass ein Flüssigkeitsreservoir mit zwei voneinander getrennten Gaspolstern verbunden ist und eines oder beide Polster mit harmonisch oszillierendem Druck beaufschlagt werden kann. In einem einfachen Fall kann es sich bei einer solchen Anordnung um ein teilweise mit Flüssigkeit gefülltes U-Rohr handeln, bei dem an einem Schenkel des Rohres das Gaspolster oberhalb der Flüssigkeit mit Druck angeregt wird. Für die vorliegende Arbeit wird ein Aufbau entsprechend [Abbildung 2.7](#) genutzt.

In einen Mischbehälter, der Flüssigkeit enthält, taucht zentral ein Rohr so ein, dass dessen unteres Ende sich zu einem gewissen Teil in der Flüssigkeit befindet.

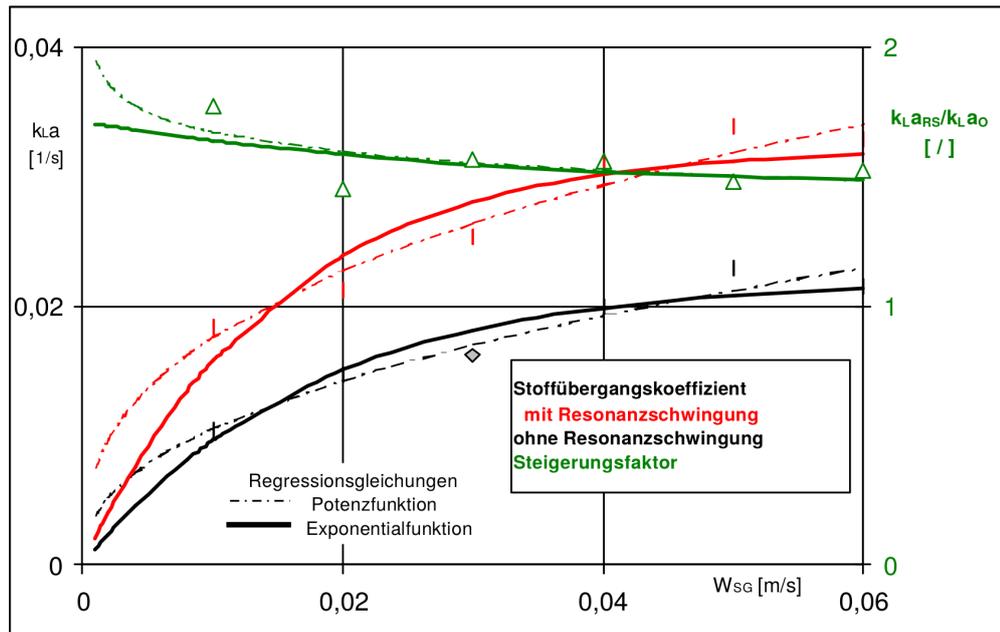


Abbildung 2.2: Verbesserung des Stoffaustauschs in Blasensäulen durch oszillierende Strömungen in Abhängigkeit von der Gasleerrohrgeschwindigkeit (entnommen aus Hussein (2004))

sigkeit befindet. Das obere Ende, in dem sich ein Gaspolster ausbildet, ist mit einem Antrieb (ähnlich dem in [Abbildung 2.8](#)) verbunden, der harmonisch oszillierenden Druck erzeugt. Im Behälter befindet sich oberhalb der Flüssigkeit und außerhalb des Rohres das zweite Gaspolster, das zur Atmosphäre hin geschlossen oder geöffnet sein kann. Wird nun das Gaspolster im Rohr mit oszillierendem Druck beaufschlagt, wird die Flüssigkeit zu Schwingungen angeregt und eine Strömung wird im Behälter induziert, die für die Mischaufgabe genutzt wird. Das System verhält sich hier entsprechend eines Feder-Masse-Schwingers bzw. – wenn das äußere Gaspolster gegen die Atmosphäre hin geschlossen ist – einer Masse, die zwischen zwei Federn eingespannt ist. Die Gaspolster agieren als Feder und die Flüssigkeit als Masse (genauer gesagt als Masse und Dämpfer). Aus dieser Analogie folgt, dass das System eine Resonanzfrequenz hat. Wird es mit dieser angeregt, erzeugt man mit relativ geringem Energieaufwand starke Strömungen (siehe [Abbildung 2.10](#) oben), sodass ein energieeffizientes Mischen möglich ist. Von diesem Umstand rührt auch der Name Fluidphasenresonanzmischen her – die Fluidphasen bilden ein resonanzfähiges System, das für Mischaufgaben genutzt werden kann.

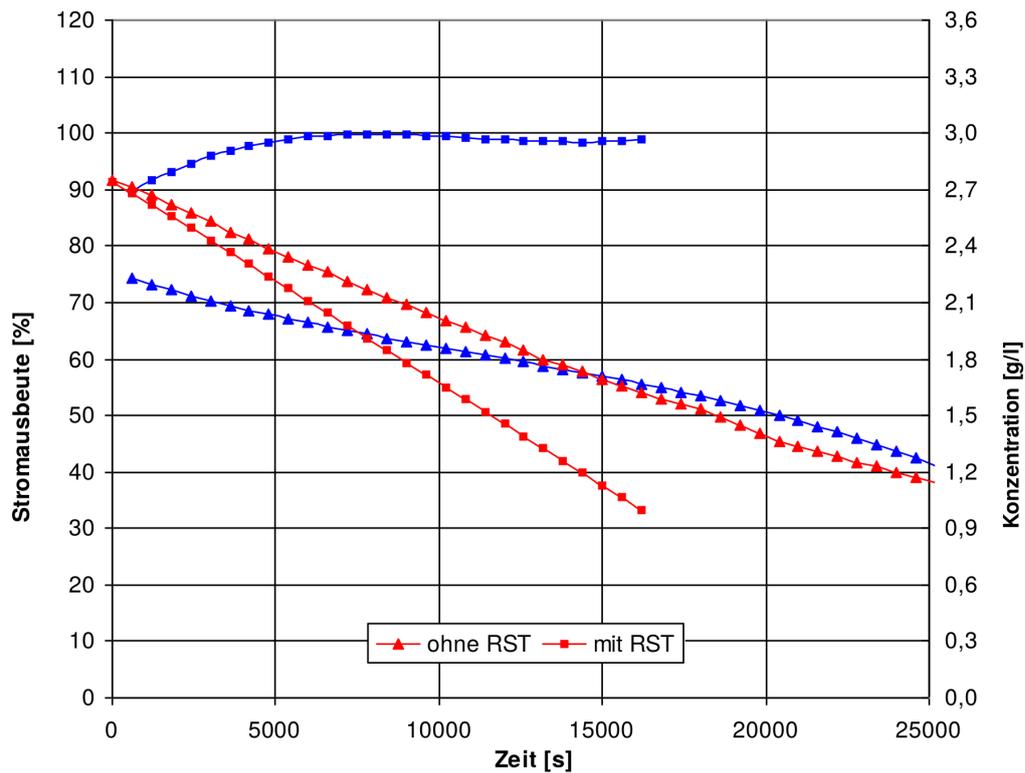


Abbildung 2.3: Vergleich des zeitlichen Verlaufs von Stromausbeute (blau) und Kupferkonzentration in einer Elektrolysezelle ohne und mit RST (entnommen aus Säuberlich (2012)).

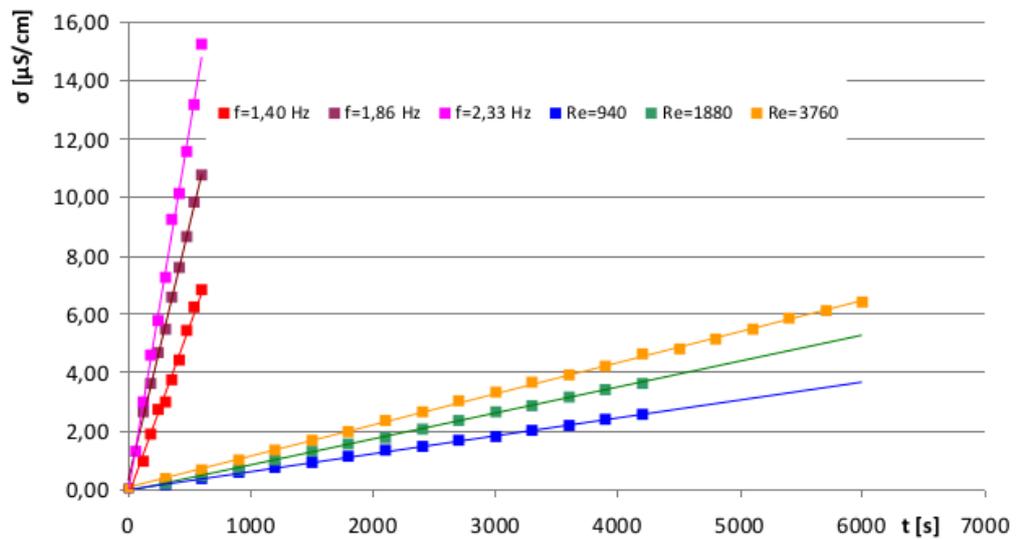


Abbildung 2.4: Zeitlicher Verlauf der Leitfähigkeit im Lösungsmittel als Indikator für die Menge an gelöstem Stoff für verschiedene Betriebsmodi ohne RST (hier Angabe der Reynoldszahl des strömenden Mediums) und mit RST (Angabe der Oszillationsfrequenz) (entnommen aus Säuberlich (2012)).

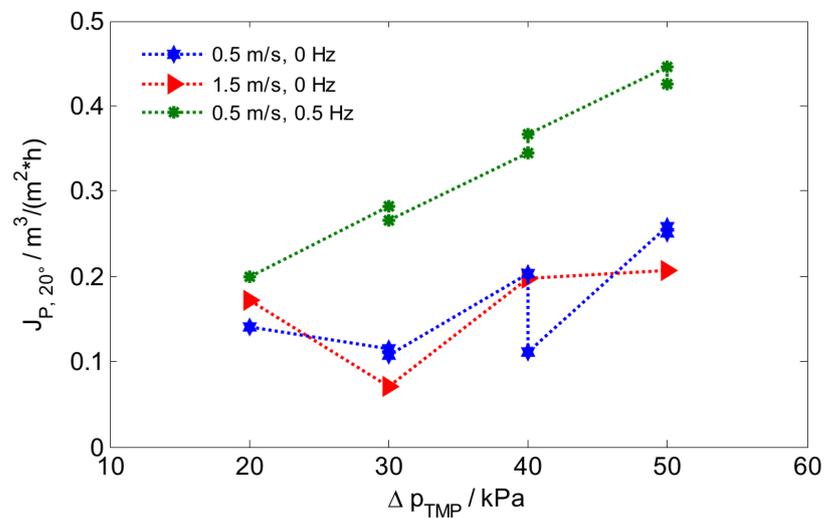


Abbildung 2.5: Vergleich des Permeatstroms über einem Membranfilter ohne (blau, rot) und mit (grün) RST bei verschiedenen Differenzdrücken über der Membran (entnommen aus Pflieger (2009)).



Abbildung 2.6: Biofilm-Belagbildung in einem Fotobioreaktor nach einwöchiger Fermentation von *Chlorella vulgaris*; links: ohne [RST](#) deutlich erkennbarer Biofilm; rechts: mit Einsatz von [RST](#) ist optisch kein Belag zu erkennen (entnommen aus Säuberlich (2012)).

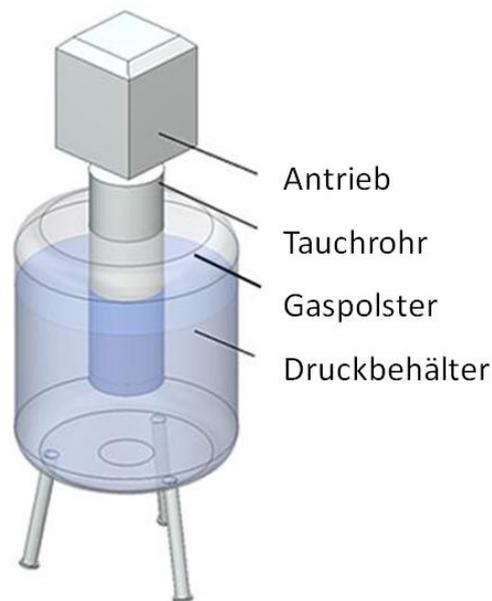


Abbildung 2.7: Prinzipskizze eines FPR-Mischers

Im Rahmen der Arbeit wurden unter anderem verschiedene Antriebe für das FPR-Mischen konstruiert. Zwei davon sind in [Abbildung 2.8](#) dargestellt. Das wesentliche Funktionsprinzip sieht einen Elektromotor (in der Abbildung rot dargestellt) mit Steuerung über einen Frequenzumrichter vor. Dieser ist über ein Getriebe einerseits mit einem Schwungrad verbunden, andererseits mit einem Pleuel, das die Rotationsbewegung in eine oszillierende Auf- und Abbewegung eines Balgs ([Abbildung 2.8](#) links) oder eines Kolbens in einem Zylinder ([Abbildung 2.8](#) rechts) umsetzt. Balg bzw. Zylinder sind mit dem Gaspolster über der Flüssigkeit im Mischbehälter über eine Verrohrung verbunden und übertragen so bei rotierendem Motor einen harmonisch oszillierenden Wechseldruck. Für die Untersuchungen in der vorliegenden Arbeit wurde ein Modell genutzt, das weitestgehend dem in [Abbildung 2.8](#) links entspricht.

Viele Methoden zur Nutzbarmachung des Annulareffekts wiesen den Nachteil auf, dass die notwendige Erzeugung der Schwingungen sehr energieintensiv war. So beschreiben beispielsweise Blanpain-Avet et al. (1999) einen Querstrom-Mikrofiltrationsversuch, bei dem Bier mit Hilfe oszillierender Strömungen über einen Membranfilter gefiltert werden sollte. In [Abbildung 2.9](#) ist der Versuchsaufbau skizziert: Das Prinzip ist, das zunächst Ventil EV_1 geöffnet wird, sodass sich der Druck im Gaspolster über dem Bier aufbaut und dieses vom Reservoir in Richtung Membranfilter und über diesen hinweg fließt. Hat sich der Druck im

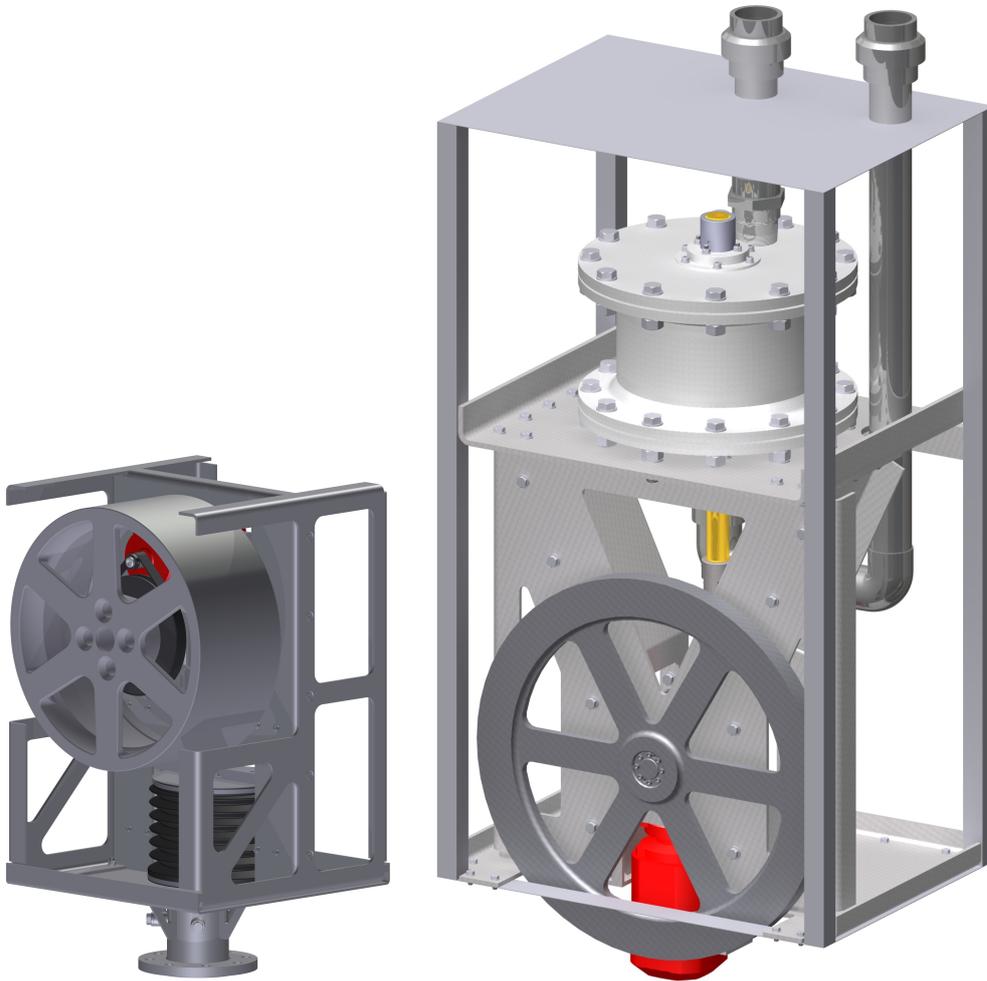


Abbildung 2.8: Visualisierung zweier FPR-Antriebe; links: 280 W-Antrieb zur Montage am Behälter, ähnlich dem für die Versuche genutzt; die Felge dient als Schwungmasse; dahinter in rot ist der Motor zu erkennen, der auf einer Seite per Getriebe und Riementrieb mit der Schwungmasse und auf der anderen Seite über ein Getriebe und ein Pleuel mit dem unten sichtbaren Faltenbalg verbunden ist; die Auf- und Abbewegung des Balgs erzeugt den oszillierenden Luftdruck; rechts: Antrieb mit 1,2 kW Leistung, auch hier ist die Schwungmasse gut zu erkennen, der Motor treibt hier allerdings einen Kolben im oben zu sehenden Zylinder an.

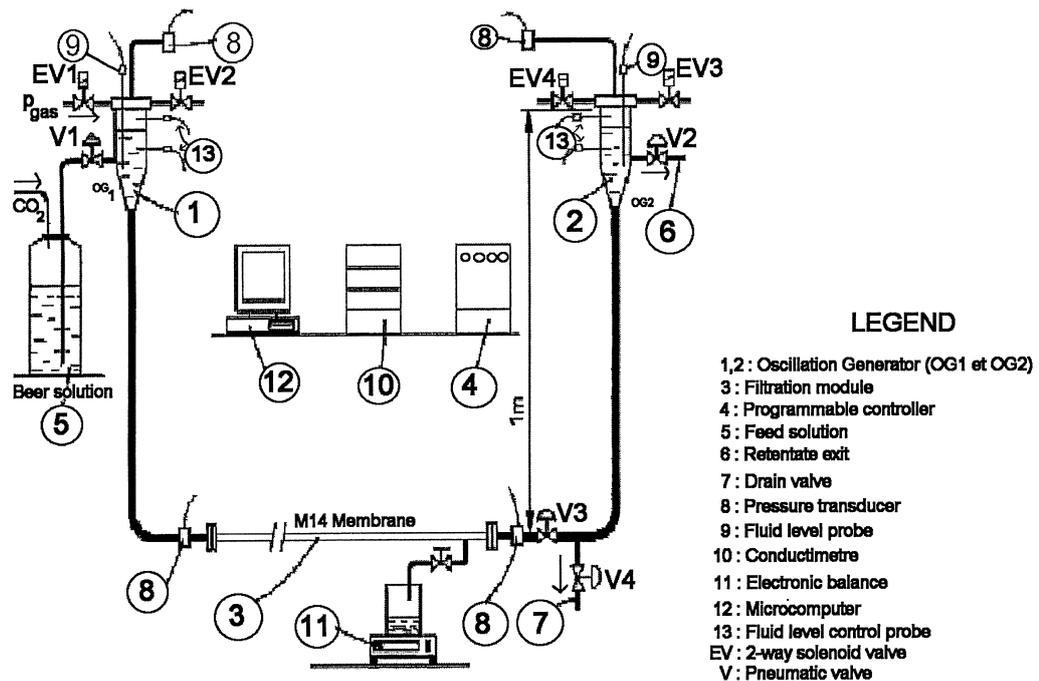


Abbildung 2.9: Versuchsaufbau zur Querstromfiltration (entnommen aus Blanpain-Avet et al. (1999)).

System dem Gasdruck p_{gas} am Ventil EV_1 angeglichen, wird EV_1 geschlossen und das Ventil EV_2 wird geöffnet. Das Gaspolster über dem Bier entspannt sich nun gegen die Atmosphäre. Damit entweicht die zuvor per Druckluft eingebrachte Energie aus dem System. Entsprechend schlecht ist auch die Gesamtenergiebilanz, sodass Blanpain-Avet et al. die Schwingungstechnik hinsichtlich der Wirtschaftlichkeit nur für einen kleinen Teil der von Ihnen untersuchten Betriebsmodi empfehlen können. Im Gegensatz dazu ist der hier genutzte Antriebsgestaltung deutlich energieeffizienter, da im Prinzip nur die Reibungsverluste ausgeglichen werden müssen. Durch das geschlossene Gaspolster im Zentralrohr zwischen Antrieb und Flüssigkeit entweicht kein Gas nach außen und somit bleibt auch die Energie im System.

Die Oszillationen im Behälter können unter bestimmten Umständen Eigenmoden der freien Oberfläche anregen (sogenanntes Schwappen oder engl. sloshing). Einen umfassenden Überblick zur Theorie dahinter, den Auswirkungen in der Technik und möglichen Gegenmaßnahmen bietet Ibrahim (2005). Diese Moden lassen sich für einfache Geometrien analytisch berechnen, für kompliziertere Modelle bieten sich numerische Methoden und Experimente an. Für einen aufrecht stehenden Zylinder bzw. Hohlzylinder mit Außenradius r_B und Höhe h_W lassen sich nach

Ibrahim die Eigenkreisfrequenzen $\omega_{m,n}$ der Moden m, n wie folgt berechnen:

$$\omega_{m,n}^2 = \frac{g\lambda_{m,n}r}{r_B} \tanh\left(\frac{\lambda_{m,n}r h_W}{r_B}\right) \quad (2.3)$$

$\lambda_{m,n}r$ ist die n -te Nullstelle der Gleichungen

$$\frac{\partial J_m(\lambda_{m,n}r)}{\partial r} = 0 \quad |r = r_B \quad (2.4)$$

für einen Zylinder bzw. die n -te Nullstelle der Determinante

$$\begin{vmatrix} J'_m(\lambda_{m,n}r) & Y'_m(\lambda_{m,n}r) \\ J'_m(\xi\lambda_{m,n}r) & Y'_m(\xi\lambda_{m,n}r) \end{vmatrix} = 0 \quad |r = r_B \quad (2.5)$$

für einen Hohlzylinder mit dem Radienverhältnis $\xi = r_R/r_B$. Die Variablen m und n sind die Anzahl der Maxima entlang des Umfangs bzw. über dem Radius. J_m und Y_m sind die Besselfunktionen erster und zweiter Gattung (siehe z.B. Bessel (1875)).

In [Abbildung 2.11](#) sind exemplarisch drei dieser Eigenmoden als Aufnahmen im Labor und als Visualisierungen von FEM-Berechnungen mit Hilfe des Programms Comsol dargestellt. [Tabelle 2.1](#) listet für die gezeigten Moden die mit obigen Gleichungen analytisch ermittelten, mit Comsol numerisch berechneten und experimentell bestimmten Eigenfrequenzen auf. Die numerisch und experimentell berechneten Werte stimmen sehr gut mit den analytisch für einen Hohlzylinder bestimmten Werten überein.

Tabelle 2.1: Übersicht über die Ermittlung der Eigenmoden mit verschiedenen Methoden.

| Mode | analytisch, Zylinder | analytisch, Hohlzylinder | numerisch | experimentell |
|------|-------------------------|-----------------------------|-----------|----------------------|
| 1,1 | 1,42 | 1,24 | 1,25 | 1,15 (0,99 ... 1,30) |
| 1,2 | 1,84 | 1,75 | 1,75 | 1,60 (1,41 ... 1,79) |
| 1,3 | 2,15 | 2,11 | 2,11 | 2,01 (1,83 ... 2,18) |

Das Schwappen bringt zwei wesentliche Nachteile mit sich: Es führt zu starken Belastungen der Konstruktion und es führt dazu, dass sich das Resonanzverhalten verschlechtert, die Effizienz des FPR-Mischers also reduziert wird. In [Abbildung 2.10](#) unten ist der Einbruch des Wechseldrucks und der Auslenkung der Flüssigkeitsoberfläche beim Einsetzen

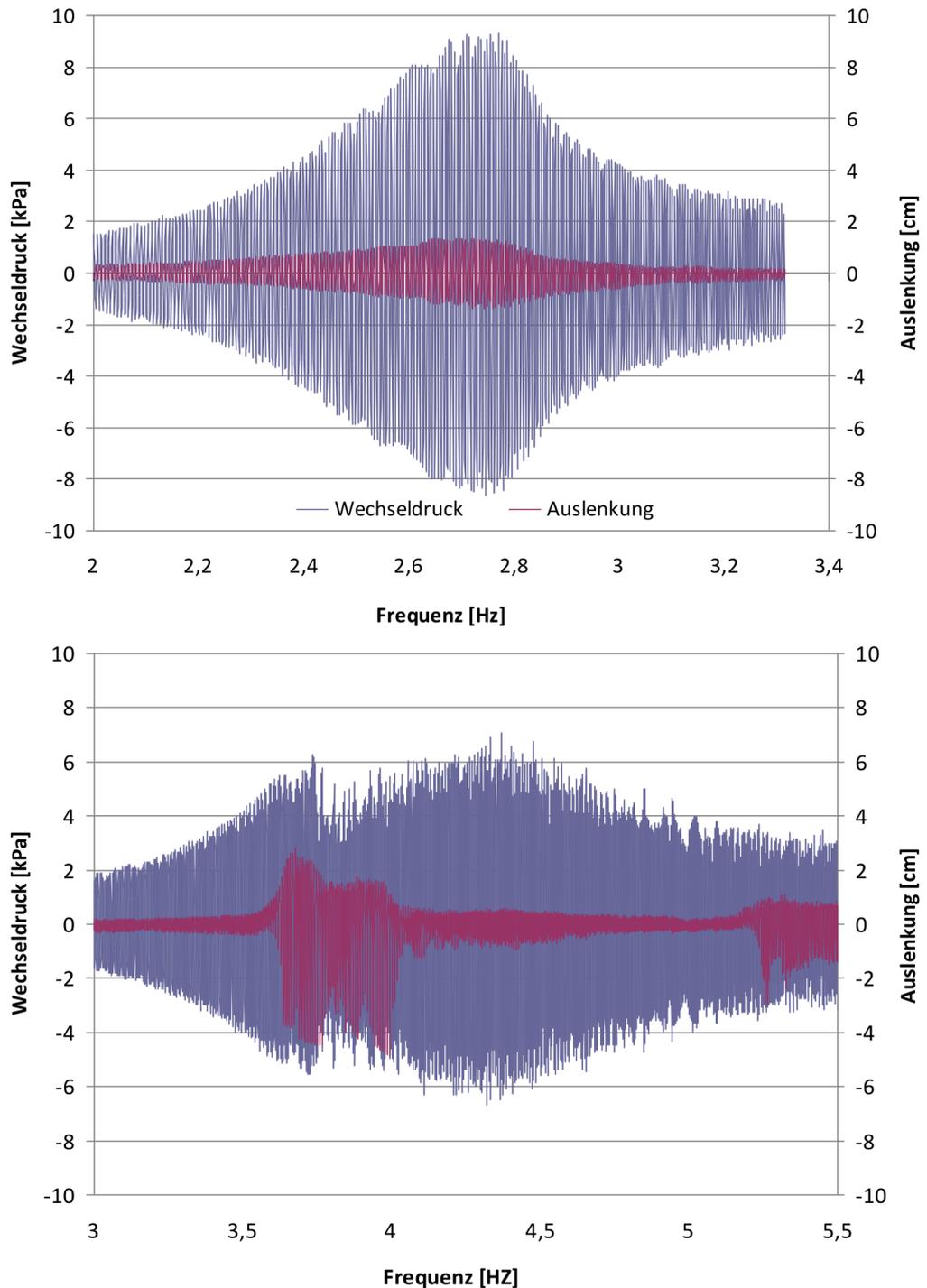


Abbildung 2.10: Wechseldruck im Tauchrohr und Auslenkung der Flüssigkeitsoberfläche im Ringraum eines FPR-Behälters in Abhängigkeit der Anregungsfrequenz; oben: Ohne Anregung von Eigenmoden ist gut die Ausprägung der Resonanz um etwa 2,7 Hz zu erkennen; unten: in einem anderen System, bei dem die Frequenz der Eigenmode in etwa im Bereich der Resonanzfrequenz liegt, brechen mit dem Einsetzen des Schwappens bei etwa 3,7 Hz die Auslenkung und der Wechseldruck ein.

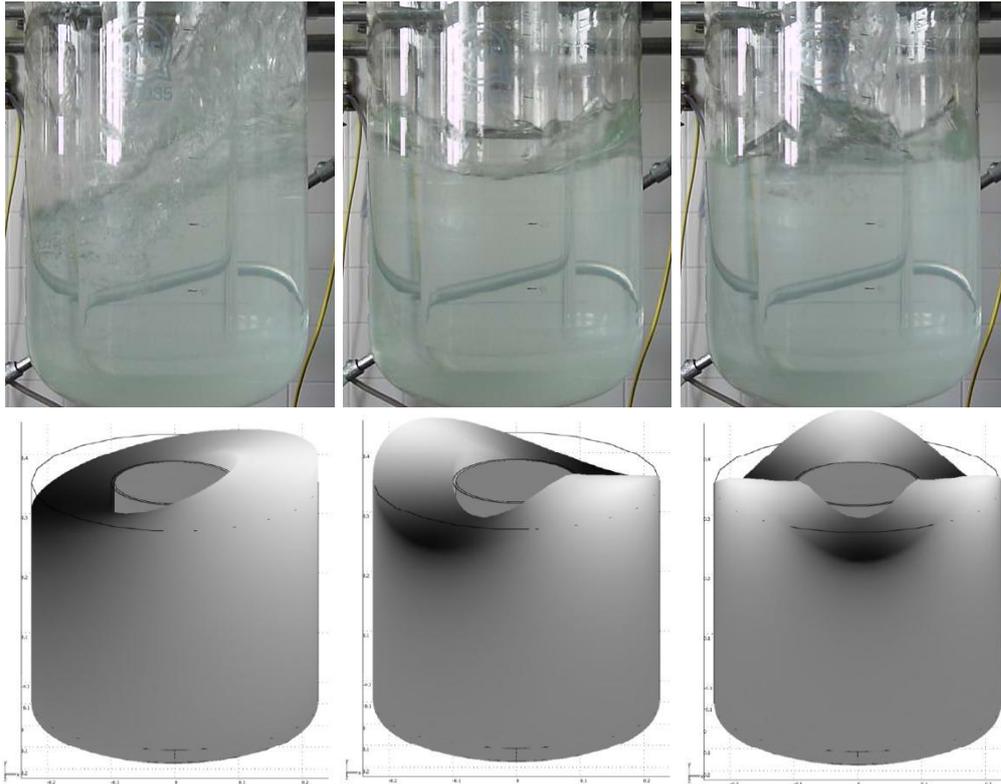


Abbildung 2.11: Drei Eigenmoden der freien Oberfläche im Ringraum des FPR-Mischers; oben: Aufnahmen im Labor; unten: Darstellung von Berechnungen mit Comsol.

des Schwappens gut zu erkennen. Diesem Effekt kann entgegengewirkt werden, indem:

- die Auslenkung der freien Oberfläche klein gehalten wird
- die Frequenzen der Eigenmoden und die Resonanzfrequenz bzw. Betriebsfrequenz möglichst weit auseinander liegen
- Einbauten, die das Aufkommen der Eigenmoden verhindern, genutzt werden
- die Frequenz mittels einer Regelung, die das Einbrechen von Wechseldruck- oder Auslenkungsamplitude erkennt, geregelt wird
- nur geringe Auslenkungen der freien Oberfläche zugelassen werden

Für die weiteren Untersuchungen wurden die Antriebsfrequenzen unter anderem so gewählt, dass keine Eigenmoden angeregt wurden. Die verbesserten Varianten haben zusätzlich den Vorteil, dass die Querschnittsfläche des Zentralrohrs deutlich kleiner ist als der Querschnitt des äußeren Ringraums, wodurch die Amplitude im Ringraum relativ klein bleibt.

Wie bereits in der Einleitung erwähnt, ist eine geeignete Verfahrensauslegung hinsichtlich energetischer und damit auch finanzieller und ökologischer Faktoren in der Verfahrenstechnik und hier insbesondere bei Mischvorgängen essenziell. Nicht zuletzt deswegen werden Mischvorgänge seit spätestens den 60er Jahren mit Hilfe numerischer Berechnungen untersucht (Spielman und Levenspiel (1965)). Bedingt durch die große Komplexität verfahrenstechnischer Prozesse und die damals noch deutlich niedrigere zur Verfügung stehende Rechenleistung, waren jedoch starke Vereinfachungen notwendig und an eine Simulation komplexer, dreidimensionaler Geometrien mit instationären, turbulenten Strömungen war nicht zu denken (Harvey und Greaves (1982a,b)). Mit dem Aufkommen effizienterer Algorithmen und Modelle und stetig leistungsfähiger werdenden Rechnern, hat die Nutzung von Simulationen zur Auslegung verfahrenstechnischer Prozesse nach und nach auch in der Industrie Fuß gefasst und wird heute inzwischen auf vielfältige Weise zur Komplementierung von Laborexperimenten und Scale-Ups genutzt. Diese Berechnungen haben den Vorteil, dass der Scale-Up der Ergebnisse entfällt, da die Simulationen mit der gewünschten Geometrie durchgeführt werden können. Richtig angewendet, ermöglichen Simulationen also Kosteneinsparungen und führen zur Reduktion des notwendigen Aufwands bei Prozessauslegungen. Zusätzlich können sie ebenfalls neue Einsichten liefern, die mit Experimenten nicht möglich waren, weil entsprechende Messmethoden fehlen oder zu aufwendig sind.

Mischvorgänge setzen zwangsläufig das Vorhandensein mindestens zweier Phasen voraus. Im Rahmen dieser Arbeit werden im Prinzip drei verschiedene Phasen beschrieben: Die flüssige Phase im Mischbehälter als erste kontinuierliche Phase, das Gaspolster oberhalb der Flüssigkeit als getrennt vorliegende, zweite kontinuierliche Phase, und die zu dispergierenden Partikel in der Flüssigkeit als disperse dritte Phase. Die Gasphase ist zwar für den FPR-Prozess notwendig, hat aber auf den Mischvorgang an sich keinen Einfluss.

Im Folgenden werden die für die Simulationen genutzten numerischen Methoden für die kontinuierlichen Phasen ([Abschnitt 3.1](#)) und die disperse Phase ([Abschnitt 3.2](#)) näher erläutert. Zusätzlich werden an-

dere mögliche Methoden kurz dargestellt. Einen umfangreichen Überblick über verschiedene Prinzipien der Mehrphasensimulation geben beispielsweise Michaelides et al. (2016).

3.1 KONTINUIERLICHE PHASEN

3.1.1 *Generelle Simulationsmethode*

Standardmäßig werden kontinuierliche Phasen in der Strömungsmechanik heutzutage und schon seit geraumer Zeit in einem Euler'schen Referenzgitter simuliert (Michaelides et al. (2016, S. 79)), also mit einem festen Rechengitter, durch das sich das Fluid hindurch bewegt. Es gibt allerdings auch Lagrange'sche Ansätze hierfür, wie z.B. Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH), basierend auf Arbeiten aus dem Bereich der Astronomie (Gingold und Monaghan, 1977; Lucy, 1977). Weitere Ansätze sind neben anderen die Finite-Elemente-Methode (FEM), die jedoch eher in der Festkörpermechanik genutzt wird, die Lattice-Boltzmann-Methode (LBM), zurückgehend u.a. auf Arbeiten von Broadwell (1964), Frisch et al. (1986) und Hardy et al. (1976), die aber für die vorliegende Geometrie und Strömung ungeeignet ist, da sie zum Beispiel eine viel zu hohe Auflösung und damit einhergehend zu lange Berechnungsdauern erfordern würde, oder Spektralmethoden (Orszag (1969)), die standardmäßig aber nur für relativ einfache Geometrien sinnvoll sind.

Anfangs wurden für numerische Strömungsberechnungen Verfahren wie inverse Matrizen (z.B. Van Dyke (1958)) und vor allem die Finite-Differenzen-Methode (z.B. MacCormack und Paullay (1972)). In dieser Arbeit wird jedoch wie heutzutage im Bereich der CFD üblich die Finite-Volumen-Methode (FVM) genutzt. Diese Methode basiert auf Arbeiten von zum Beispiel Godunov (1959) und Varga (1999) (im Original 1963 erschienen). Für Strömungssimulationen wird die FVM spätestens seit den frühen Siebzigerjahren angewendet (McDonald (1971) und Rizzi und Inouye (1973)). Wie der Name schon erahnen lässt, wird das Rechengebiet in eine Vielzahl von Kontrollvolumen (finiten Volumen) zerlegt. Zur Lösung partieller Differentialgleichungen werden diese zunächst in Oberflächenintegrale überführt. An den Begrenzungen der Volumina werden diese Integrale ausgewertet. Da die Flüsse an den Begrenzungen eines Elements genau den entsprechend entgegengesetzten Flüssen der benachbarten Elemente entspricht, ist diese Formulierung konservativ, was bei der Modellierung von Erhaltungsgleichungen wie in der Fluid-

mechanik von Vorteil ist. Dies ist ein Grund, warum sich die [FVM](#) in diesem Bereich heute im Großen und Ganzen durchgesetzt hat. Außerdem erlaubt die [FVM](#) eine relativ unkomplizierte Nutzung unstrukturierter Gitter, die sich in industriellen bzw. realitätsnahen Anwendungen fast nie vermeiden lassen.

Generell lassen sich Strömungen mit den Navier-Stokes-Gleichungen beschreiben, die aus der Kontinuitäts- bzw. Massenerhaltungsgleichung

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_f = 0 \quad (3.1)$$

und im dreidimensionalen Fall drei Impulserhaltungsgleichungen

$$\frac{\partial \mathbf{u}_f}{\partial t} + (\mathbf{u}_f \cdot \nabla) \mathbf{u}_f = \frac{1}{\rho_f} (-\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}) + \sum_i \mathbf{F}_i \quad (3.2)$$

bestehen. Hierbei sind \mathbf{u}_f und p Geschwindigkeit und Druck, t ist die Zeit, \mathbf{F}_i sind weitere am Fluid angreifende Körperkräfte (Schwerkraft, Magnetkräfte, usw.), $\boldsymbol{\tau}$ ist der viskose Spannungstensor, der für Newton'sche Fluide die Form

$$\boldsymbol{\tau} = \mu_f (\nabla \mathbf{u}_f + (\nabla \mathbf{u}_f)^T) \quad (3.3)$$

annimmt. Darin ist μ_f die dynamische Viskosität des Fluids. Diese Gleichungen werden im Rahmen dieser Arbeit mit Hilfe der [FVM](#) numerisch gelöst.

Die Simulationemethode für die beiden kontinuierlichen Phasen, also der Flüssigkeit und der darüber befindlichen Gaspolster, soll das Verhalten der freien Oberfläche inner- und außerhalb des Rohres und das federartige Verhalten der Gaspolster abbilden können. Prinzipiell leisten das z.B. Euler-Euler-Modelle, die jede der Phasen als ein das komplette Rechengebiet in veränderlicher Konzentration ausfüllendes Fluid sehen. Für das komplette Rechengebiet müssen die Navier-Stokes-Gleichungen für zwei Fluide und zusätzlich Gleichungen für die Interaktion zwischen den Fluiden gelöst werden. Das bedeutet eine deutliche Erhöhung des Rechenaufwandes und der numerischen Komplexität, weshalb diese Methode hier nicht zur Anwendung kommen soll.

Andere Methoden lösen die Navier-Stokes-Gleichungen nur einmal, aber mit unterschiedlichen Stoffeigenschaften in den verschiedenen Phasen bzw. im Rechengebiet (nach Rusche (2002), siehe dazu [Abbildung 3.1](#)):

- **Interface- oder Surface-Tracking:** Hierbei wird die Grenzfläche zwischen den beiden Fluiden numerisch verfolgt, also „getrackt“. Dies

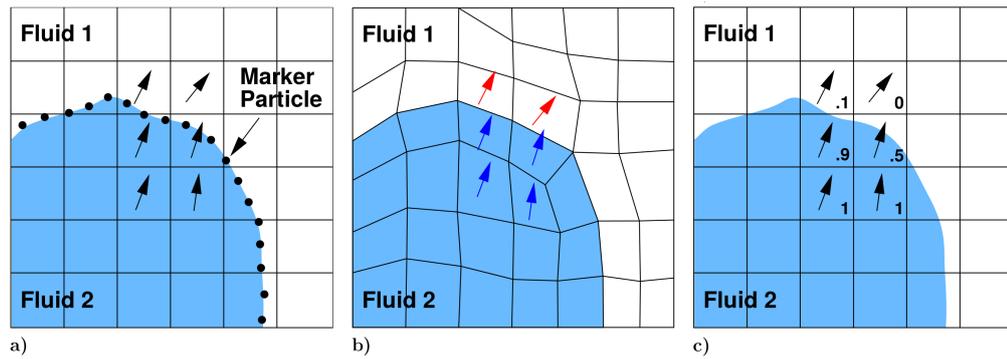


Abbildung 3.1: Methoden zur Beschreibung der freien Oberfläche, entnommen aus Rusche (2002): a) Interface- oder Surface-Tracking, bei dem hier Markerpartikel die Oberfläche beschreiben; b) Moving Mesh: Das Rechengitter wird der freien Oberfläche angefügt; c) Volume Tracking: Der Phasenanteil wird in den Zellen berechnet.

geschieht entweder mit einer Höhenfunktion oder mit Marker-Partikeln bzw. -Zellen (Abbildung 3.1 a)).

- Moving-Mesh: Bestimmte Punkte des Rechengitters repräsentieren die freie Oberfläche und werden mit der Grenzfläche bewegt (Abbildung 3.1 b)).
- Interface-Capturing oder Volume-Tracking: Die Oberfläche wird nicht explizit beschrieben. Stattdessen werden Marker-Partikel oder Indikatorfunktionen genutzt und die Oberfläche wird daraus rekonstruiert (Abbildung 3.1 c)).

Die ersten beiden Methoden haben den großen Vorteil, dass sie die Oberfläche explizit beschreiben und dadurch „scharf“ halten. Das Verschieben der Markerpartikel oder das Verformen des Rechengitters ist jedoch zusätzlicher Rechenaufwand und mitunter sehr komplex. Blaseneintrag bzw. Tropfenbildung, also topologische Veränderungen der Oberfläche, sind nur sehr schwer zu handhaben. Zusätzlich haben Interface-Capturing-Methoden Probleme mit dem Massenerhalt (McSherry et al. (2017), Rusche (2002)).

Die älteste Interface-Capturing-Methode dürfte der von Harlow und Welch (1965) beschriebene „Marker-And-Cell“-Ansatz (MAC) sein, bei dem masselose Partikel im Fluid verteilt werden und sich mit der Strömung bewegen. Die Vielzahl an nötigen Partikeln macht allerdings auch diese Methode sehr rechenintensiv. Chronologisch gesehen folgt hier-

auf die „Volume-of-Fluid“-Methode (Volume of Fluid (VoF), Hirt und Nichols (1981)), bei welcher der Volumenanteil der ersten Phase als zusätzliche skalare Transportgleichung gelöst wird. Ganz ähnlich ist die letzte der hier vorgestellten Möglichkeiten, die „Level-Set-Methode“ (LSM, Osher und Sethian (1988)). Auch hier wird zusätzlich eine skalare Größe transportiert, im Gegensatz zu VoF jedoch ausgeprägt als vorzeichenbehaftete Distanzfunktion. D.h. die Oberfläche kann rekonstruiert werden als die Fläche, an der diese Größe null ist.

Für diese Arbeit gewählt wurde schließlich die VoF-Methode. Die in OpenFOAM zur Oberflächenrekonstruktion genutzte „inter-gamma“-Methode (Jasak und Weller (1995)) ist stabil, massenerhaltend, und sie verhindert, dass die Grenze zwischen den Phasen „verschmiert“ – vorausgesetzt, dass die lokale Courant-Zahl an der Oberfläche nicht zu groß ist (Jasak und Weller (1995) geben als Obergrenze etwa 0.33 an für den dreidimensionalen Fall). Im Folgenden wird die in OpenFOAM implementierte Variante der VoF-Methode etwas näher für den inkompressiblen Fall erläutert (nach Rusche (2002)).

Verwendet wird hier eine Single-Field-Variante. Das heißt, dass, wie bereits erwähnt, für das komplette Rechengebiet nur ein Satz an Erhaltungsgleichungen gelöst wird. Mit Hilfe einer Step- oder Heavisidefunktion α als Indikator werden die Phasen voneinander unterschieden:

$$\alpha = \begin{cases} 1 & \text{Fluid a} \\ 0 < \alpha < 1 & \text{Übergangsgebiet} \\ 0 & \text{Fluid b} \end{cases} \quad (3.4)$$

α wird zusammen mit den fluiden Phasen transportiert:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + (\mathbf{u}_f \cdot \nabla) \alpha = 0 \quad (3.5)$$

Die Materialeigenschaften im gesamten Gebiet können mit Hilfe einer einzelnen Funktion beschrieben werden, hier am Beispiel der Fluidichte ρ_f :

$$\rho_f = \rho_{f,a} \alpha + \rho_{f,b} (1 - \alpha) \quad (3.6)$$

mit den Indizes a und b als Indikator für die beiden Phasen. Die Grenzfläche kann als Gradient des Volumenanteils α rekonstruiert werden und befindet sich dort, wo dieser Gradient nicht null ist.

Da die Oberfläche natürlich Einfluss auf die Bewegungen des Fluids hat, muss die Impulserhaltungsgleichung (Gl. 3.2) erweitert werden:

$$\frac{\partial \mathbf{u}_f}{\partial t} + (\mathbf{u}_f \cdot \nabla) \mathbf{u}_f = \frac{1}{\rho_f} \left(-\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \int_{S(t)} \sigma \kappa' \mathbf{n}' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dS \right) + \sum_i \mathbf{F}_i \quad (3.7)$$

Das Integral auf der rechten Seite ist der zusätzliche Impuls durch die Oberflächenspannung σ , wobei κ die Krümmung und \mathbf{n} der Normalenvektor der Oberfläche S sind. Gestrichene Symbole sind Werte an der Grenzfläche und δ ist die dreidimensionale Dirac-Funktion

$$\delta(\mathbf{x}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z) \quad (3.8)$$

In [Abbildung 3.2](#) ist das VoF-Prinzip beispielhaft illustriert. Es handelt sich dabei um die Berechnung des OpenFOAM-Tutorials „damBreak“. Darin wird ein stilisiertes Wasserreservoir berechnet, dessen Begrenzungen plötzlich verschwinden, sodass das Wasser beginnt zu fließen. Zu sehen ist der Ausgangszustand in [Abbildung 3.2](#) oben links: Das Wasser ist hier in rot dargestellt und entspricht $\alpha = 1$. Es befindet sich zunächst in der linken unteren Ecke und breitet sich dann allmählich im umgebenden Medium (blau, $\alpha = 0$) aus. Es trifft dabei auf ein Hindernis am Boden, wodurch ein Spritzer entsteht, der schließlich auf die Wand rechts trifft. Gut zu sehen ist, dass an der Grenze zwischen den beiden Phasen Übergangsgebiete auftreten, an denen die Volumenfraktion α zwischen 0 und 1 liegt, hier in grün dargestellt.

3.1.2 Turbulenzmodellierung

Die meisten realen Strömungen, sei es im Bereich der industriellen Anwendungen oder seien es natürlich auftretende, sind turbulent, so auch die im vorliegenden Fall der FPR-Mischer. Vor allem im Bereich des unteren Rohrendes kann von einer turbulenten Strömung ausgegangen werden.

Turbulenz entsteht üblicherweise zunächst in Form großskaliger Wirbel ([Abbildung 3.3](#)), deren Größe auch als integrales Längenmaß $L_E = 1/k_{W,E}$ bezeichnet wird, wobei k_W die Wellenzahl ist. Diese großen Wirbel zerfallen durch Trägheitskräfte zu immer kleineren Wirbeln, zunächst im Bereich der Taylor-Mikroskala $\lambda = 1/k_{W,T}$, und daraufhin im Bereich der Kolmogorov-Skala $L_K = 1/k_{W,K}$. Auf noch kleineren Skalen

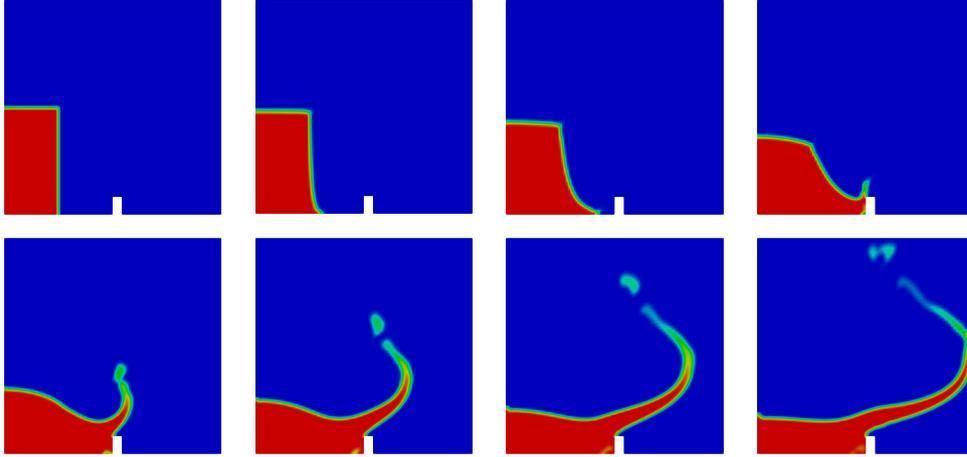


Abbildung 3.2: Simulation eines „ Dammsbruchs“ mit Hilfe des OpenFOAM-VoF-Solvers interFoam; nach dem Start der Berechnung oben links breitet sich das Wasser (rot) allmählich aus und trifft auf ein Hindernis am Boden, wodurch eine Art Spritzer hin zur Wand rechts entsteht.

wird die Energie schließlich durch viskose Dissipation in Wärmeenergie umgewandelt.

Zur Turbulenzmodellierung soll hier ein Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS)-Modell gewählt werden, da Direct Numerical Simulation (DNS) und Large Eddy Simulation (LES) im Rahmen dieser Arbeit zu zeit- bzw. rechenintensiv gewesen wären. DNS lösen alle relevanten Zeit- und Längenskalen, bis hin zum Kolmogorov-Zeit- und Längemaß, auf, während bei LES, wie der Name schon vermuten lässt, nur die großen, energiereichen Wirbel berechnet und die kleineren modelliert werden. Der RANS-Ansatz wurde erstmals von Reynolds (1895) beschrieben. Reynolds zerlegte die Strömungsgrößen, wie zum Beispiel die Geschwindigkeit, in einen zeitlich gemittelten und einen fluktuierenden Anteil ("Reynolds decomposition"):

$$\mathbf{u}_f = \overline{\mathbf{u}_f} + \mathbf{u}'_f \quad (3.9)$$

Aus der Kontinuumsgleichung (3.1) und der Impulserhaltungsgleichung (3.2) ergeben sich durch die Mittelung die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen:

$$\nabla \overline{\mathbf{u}_f} = 0 \quad (3.10)$$

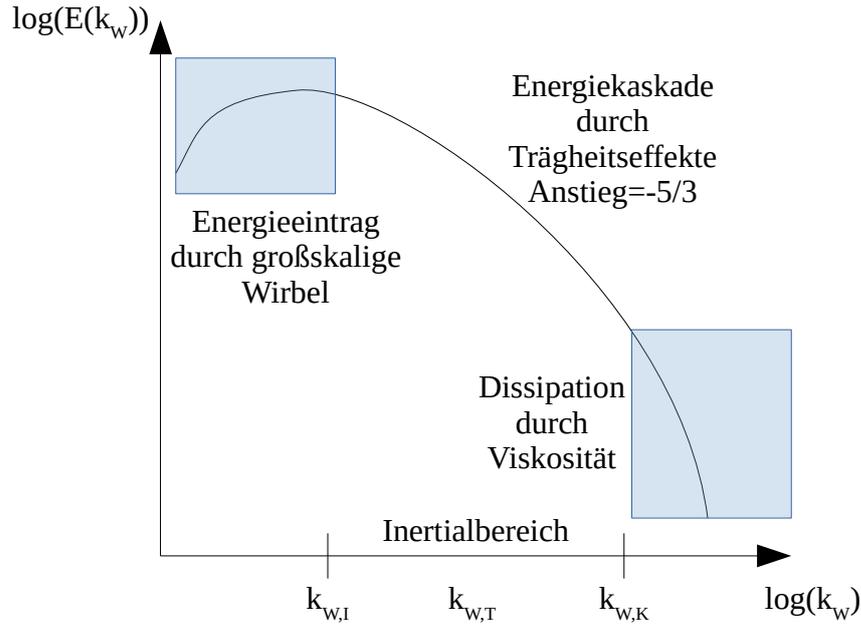


Abbildung 3.3: Turbulente Energiekaskade als doppelt logarithmisch aufgetragener Energiegehalt der Wirbel E über der Wellenzahl k_w .

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_f}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}}_f \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}}_f = \frac{1}{\rho_f} (-\nabla \bar{p} + \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}) - \nabla \overline{\mathbf{u}'_f \mathbf{u}'_f{}^T} + \sum_i \mathbf{F}_i \quad (3.11)$$

Durch die Zerlegung des nichtlinearen Konvektionsterms $(\mathbf{u}_f \cdot \nabla) \mathbf{u}_f$ in einen gemittelten und einen fluktuierenden Anteil entsteht der Reynolds-Spannungstensor aus den Fluktuationen der Fluidgeschwindigkeit \mathbf{u}'_f :

$$\mathbf{R} = \overline{\rho \mathbf{u}'_f \mathbf{u}'_f{}^T}, \quad (3.12)$$

zu finden auf der rechten Seite der Gleichung, normiert mit $1/\rho$. Zu erwähnen ist an dieser Stelle noch, dass keine klassische RANS-, sondern eine „URANS“-Simulation durchgeführt wird. Dabei handelt es sich um eine „Unsteady RANS“-Simulation, also eine transiente Methode bei der die Zeitableitung berücksichtigt wird. In der ursprünglichen Form traten ausschließlich zeitlich konstante Werte auf.

Anstelle der zunächst vier Unbekannten im Gleichungssystem (p und drei Komponenten von \mathbf{u}_f), gibt es nun zehn, da der symmetrische Reynoldsspannungstensor sechs zusätzliche unbekannte Größen aufweist. In der Turbulenzmodellierung gibt es zwei prinzipielle Ansätze, dieses Schließungsproblem zu lösen: Reynolds-Stress- und Wirbelviskositäts-Modelle. Erstere, zurückgehend auf Arbeiten von Chou (1945) und Rotta

(1951) lösen zusätzliche Gleichungen für die Komponenten von R , was auf der einen Seite die Abbildung komplexer Interaktionen der Turbulenz und der anisotropen Natur von R ermöglicht, auf der anderen Seite aber auch zu numerischen Instabilitäten und deutlich erhöhtem Rechenaufwand führt. Wirbelviskositätsmodelle versuchen, den Reynoldsspannungstensor in Analogie zur molekularen Viskosität in Abhängigkeit vom (bekannten) Scherspannungstensor zu beschreiben. Eine Idee, die auf eine Arbeit von Boussinesq (1877) zurückgeht:

$$\overline{\rho u'_f u'^T_f} = \mu_t \left(\nabla \overline{u_f} + (\nabla \overline{u_f})^T \right) - \frac{2}{3} \overline{k} \delta \quad (3.13)$$

wobei μ_t die dynamische Wirbelviskosität ist, und k die turbulente kinetische Energie:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'^2_{f,x} + u'^2_{f,y} + u'^2_{f,z}} \quad (3.14)$$

Die dynamische Wirbelviskosität, bzw. ihre kinematische Entsprechung $\nu_t = \mu_t / \rho_f$, wird von den RANS-Modellen berechnet. Dazu müssen ein Längenmaß L und ein Zeitmaß T bekannt bzw. aus anderen Turbulenzgrößen ermittelbar sein, die mit einer zu bestimmenden Konstanten die Wirbelviskosität ergeben:

$$\nu_t = C \frac{L^2}{T} \quad (3.15)$$

Es gibt für die Ermittlung der Maße L und T algebraische bzw. Null-Gleichungs-Modelle, Ein-, und Zwei-Gleichungs-Modelle – je nachdem, wie viele zusätzliche Gleichungen für die Turbulenz gelöst werden.

Algebraische Modelle sind durchaus interessant für Spezialfälle, für die sie kalibriert wurden, da sie numerisch robust und effizient sind. Für Anwendungen abseits dieser Fälle sollten sie nicht oder nur mit großer Vorsicht eingesetzt werden; unter Umständen müssen die Parameter der Modelle an den Anwendungsfall angepasst werden. Für viele komplexere Geometrien sind sie komplett ungeeignet (Wilcox (2006)). Bekannte Vertreter sind die Modelle von Baldwin und Lomax (1978), Smith und Cebeci (1967), und die als „Halb-Gleichungs“-Modell bezeichnete Variante von Johnson und King (1985). In solchen Modellen wird z.B. k abhängig vom turbulenten Mischungsweg berechnet.

Ein-Gleichungs-Modelle lösen zum Beispiel Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie k (bspw. Bradshaw et al. (1967), Goldberg (1991), Prandtl und Wieghardt (1945) und Wolfshtein (1967)), oder

direkt für die Wirbelviskosität ν_t (bspw. Baldwin und Barth (1991), Menter (1997), Sekundov (1971) und Spalart und Allmaras (1992)). Im Allgemeinen benötigen diese Modelle weniger Anpassung an die jeweilige Anwendung und stimmen besser mit den Messungen ein, für die sie kalibriert wurden, als Null-Gleichungs-Modelle; allerdings gilt auch für diese, dass sie in der Regel nur für bestimmte Spezialfälle gut geeignet sind (Wilcox (2006)). Null- und Ein-Gleichungsmodelle berechnen die turbulenten Zeit- und Längenskalen, ohne a priori Kenntnis über die Strömungsstruktur zu haben.

Standardmäßig werden seit einiger Zeit Zwei-Gleichungs-Modelle genutzt, die diesen Nachteil nicht aufweisen, da sie stets zwei Größen berechnen, aus denen man die turbulenten Skalen berechnen kann. Wie schon bei den Ein-Gleichungs-Modellen, ist eine der Größen meist die turbulente kinetische Energie k . Die wohl meistgenutzten Modelle berechnen zusätzlich die Dissipationsrate ε bzw. die spezifische Dissipationsrate ω_f (auch Wirbelfrequenz genannt), und heißen dementsprechend k - ε - und k - ω -Modell. Der Zusammenhang zu den Turbulenzskalen lässt sich dann mittels Dimensionsanalyse vereinfacht wie folgt darstellen:

$$\begin{aligned} k &\propto L^2/T^2 \\ \omega_f &\propto 1/T \quad \rightarrow \nu_t = Ck/\omega_f \\ \varepsilon &\propto L^2/T^3 \quad \rightarrow \nu_t = Ck^2/\varepsilon \end{aligned} \tag{3.16}$$

Darin ist C eine anzupassende Konstante.

Lange Zeit, laut Wilcox (2006) bis zumindest in die 1990er Jahre, war das k - ε -Modell das meistgenutzte Zwei-Gleichungs-Modell. Es geht zurück auf Chou (1945), die Standardimplementierung ist die von Launder und Spalding (1974), aber es liegt in zahlreichen weiteren Varianten vor (z.B. als RNG- k - ε -Modell von Yakhot et al. (1992) oder als „Realizable“- k - ε -Modell von Shih et al. (1995)). Vor allem für Anwendungen in der Aerodynamik ist es gut geeignet, hat aber einige entscheidende Nachteile. So ist es zu ungenau im Falle von großen Druckgradienten und damit auch bei Strömungsablösungen, die Integration zur Wand in der viskosen Unterschicht ist kompliziert, und es müsste für viele Anwendungen kalibriert werden, um sinnvolle Ergebnisse zu produzieren.

Wohl auch aufgrund dieser Nachteile wurde das k - ω -Modell im Lauf der Zeit allmählich häufiger eingesetzt. Dieses Modell geht laut Wilcox (2006) zurück auf Kolmogorov (1942), wurde zum Beispiel von Saffman (1970) weiterentwickelt und deutlich verbessert und wird heute meist in der von Wilcox (2006) vorgeschlagenen Form genutzt. Insbesondere im

Wandbereich hat es deutliche Vorteile gegenüber dem k - ε -Modell. Die Ursache liegt im Verhalten von ε bzw. ω in Wandnähe: Da die Dissipationsrate in der Nähe der Wand immer kleiner und schließlich null wird, steigt die turbulente Viskosität in Wandnähe grenzenlos an, wenn sie nach [Gleichung 3.16](#) aus k und ε berechnet wird. Die Wirbelfrequenz ω hingegen wird in Wandnähe üblicherweise nicht zu null. Für eine Berechnung nach [Gleichung 3.16](#) ist also bei Nutzung von ε eine explizite Behandlung des wandnahen Bereiches nötig, bei Nutzung von ω nicht. Weiterhin werden auch freie Scherströmungen durch das k - ω -Modell besser beschrieben. Der einzige Nachteil ist die größere Sensitivität gegenüber Randbedingungen für die Turbulenzgrößen im Freistrahlsbereich.

Angesichts dieser Vor- und Nachteile (k - ω ist in Wandnähe deutlich besser, k - ε in der Grundströmung), ist es naheliegend, diese beiden Modelle mit Hilfe einer Blending-Funktion zu vereinen. Diese Idee liegt unter anderem dem k - ω -SST-Modell (Shear Stress Transport) zugrunde (Menter (1993)).

Es ist zu erwarten, dass das k - ω -SST-Modell den FPR-Mischer am besten abbilden kann. Dennoch werden in [Abschnitt 5.1](#) sowohl das k - ω -SST- als auch das k - ε -Modell genutzt und an Hand eines Vergleichs von Messdaten wird das passendere ausgewählt. In OpenFOAM (Version 2.3.1) implementiert sind laut Benutzerhandbuch das k - ω -SST-Modell nach Menter und Esch (2001), mit aktualisierten Koeffizienten von Menter et al. (2003), und das Standard- k - ε -Modell nach Launder und Spalding (1974).

Zur Charakterisierung der Strömung werden unter anderem zwei Turbulenzkennzahlen genutzt. Die erste hiervon ist die integrale Zeitskala T_L , die aus den im RANS-Modell genutzten Größen wie folgt berechnet werden kann:

$$T_L = 0,16 \cdot k/\varepsilon \quad (3.17)$$

Die zugehörige integrale Längenskala wird wie folgt berechnet:

$$L_E = 3 \cdot T_L \cdot \sqrt{2/3k} \quad (3.18)$$

3.1.3 Auswertemethoden

Mittlere Geschwindigkeiten zum Vergleich mit Messwerten und zwischen den verschiedenen Mischervarianten werden als zeitliche Mittelwerte über mehrere Schwingungen in den einzelnen Rechengitterele-

menten über die N_t im zeitlichen Abstand Δt gespeicherten Zeitschritte berechnet:

$$\bar{u}_{f,x/y,sim} = \frac{1}{N_t} \sum_{i=0}^{N_t} u_{f,x/y,sim,i} \quad (3.19)$$

Für die Berechnung der Maximal- bzw. Minimalgeschwindigkeiten werden die turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen berücksichtigt. Die turbulenten Fluktuationen der Geschwindigkeitskomponenten, $\overline{u'_f}$, lassen sich aus der turbulenten kinetischen Energie k , die bei den Rechnungen mit Turbulenzmodell berechnet wird, unter Annahme isotroper Turbulenz ($u'_{f,x} = u'_{f,y} = u'_{f,z}$) entsprechend Gl. 3.14 abschätzen:

$$u'_{f,sim} = \sqrt{\frac{2}{3} k_{sim}} \quad (3.20)$$

Daraus werden nun in jeder Zelle des Rechengebiets Maximal- und Minimalwerte über die ausgewertete Zeitspanne berechnet:

$$u_{f,x/y,sim,max/min} = \max / \min(u_{x/y,sim} \pm u'_{f,sim}) \quad (3.21)$$

Um die Effizienz im Sinne der eingebrachten Leistung des Rührwerks, die tatsächlich in Strömungsgeschwindigkeit umgesetzt wird, beurteilen zu können, wird eine für diesen rührerlosen Mischbehälter angepasste Newtonzahl (siehe z.B. Shah (1991) wie folgt berechnet:

$$Ne = \frac{P}{\rho_f u_{eff}^3 d_R^2} \quad (3.22)$$

Darin sind d_R der Rohrdurchmesser des Mischers und ρ_f die Dichte der Flüssigkeit im Behälter. Die effektive Geschwindigkeit u_{eff} im Behälter wird berechnet aus den Geschwindigkeitsmagnituden $u_{f,i}(t)$ in den Zellen des Rechnernetzes im Bereich der Flüssigkeit:

$$u_{eff} = \frac{1}{V_W} \cdot \sum_{i=0}^{N_Z} \left(f_A \sum_{t=t_0}^{t_0+1/f_A} (u_{f,i}(t) \cdot \Delta t) \cdot V_i \cdot \alpha_i \right) \quad (3.23)$$

mit Flüssigkeits- bzw. Wasservolumen V_W , Anzahl der Zellen N_Z , Antriebsfrequenz f_A , dem Zellvolumen V_i , und dem Flüssigphasenanteil in den Zellen, α_i . Es handelt sich also um die sowohl zeitlich als auch räumlich gemittelte Geschwindigkeit.

Der Leistungseintrag wird auf zwei Arten bestimmt. Die erste Methode ist die Berechnung über die Volumenänderungsarbeit am Einlass mit der Fläche A_{Ein} über eine Schwingungsperiode:

$$P_V = 2 \cdot f_A \cdot A_{Ein} \sum_{t=t_0}^{t_0+1/f_A} (p_{Ein}(t) \cdot u_{f,n,Ein}(t) \cdot \Delta t) \quad (3.24)$$

mit der senkrecht zur Fläche des Einlasses stehenden Geschwindigkeitskomponente $u_{f,n,Ein}$ und dem dort herrschenden Druck p_{Ein} .

Zusätzlich wird der Leistungseintrag noch über das Produkt aus Dissipationsrate ε und Masse der Flüssigkeit in den einzelnen Zellen als zeitlich gemittelter Wert berechnet (wie beispielsweise in Decker (2005)):

$$P_\varepsilon = 2 \cdot \sum_{i=0}^{N_Z} \left(f_A \cdot \sum_{t=t_0}^{t_0+1/f_A} (\alpha_i \rho_{f,i} V_i \varepsilon_i \Delta t) \right) \quad (3.25)$$

Der Faktor zwei in den Gln. (3.24) und (3.25) rührt daher, dass in den Berechnungen die Symmetrieebene des Behälters genutzt wird die natürlich nur die Hälfte der tatsächlichen Leistung benötigt.

Analog zur effektiven Geschwindigkeit in Gl. (3.23) wird am unteren Ende des Rohres eine Effektivgeschwindigkeit über dem Rohrquerschnitt bestimmt. Zusammen mit dem Rohrdurchmesser d_R , der hier als Äquivalent zum Rührerdurchmesser genutzt wird, und der kinematischen Viskosität der Flüssigkeit ν_f wird als weitere Kennzahl die effektive Reynolds-Zahl in den Mischern berechnet:

$$Re = \frac{u_{f,eff} d_R}{\nu_f} \quad (3.26)$$

Schließlich werden für u_f , k , ε , L_E , und T_L zeitlich über N Schwingungen gemittelte integrale Werte im Bereich der liquiden Phase berechnet:

$$\bar{\Phi}_{int} = \frac{f_A}{N} \sum_{t=t_0}^{t=t_0+N/f_A} \left(\frac{\Delta t}{V_W} \sum_{i=0}^{N_Z} (\alpha_i \Phi_i V_i) \right) \quad (3.27)$$

Darin ist Φ die zu mittelnde Größe.

3.2 DISPERSE PHASE

Eine der einfachsten Methoden, um Mischvorgänge zu berechnen, ist die Nutzung eines passiven skalaren Tracers, der als Feld in der Strömung

mittransportiert wird. Diese Methode wird auch in der vorliegenden Arbeit genutzt, um Mischkennzahlen abzuschätzen. Der Einsatzbereich der Methode ist jedoch beschränkt auf entweder Partikel, die der Strömung nahezu schlupffrei folgen oder das Mischen von ideal mischbaren Flüssigkeiten ähnlicher Dichten und Viskositäten. Dazu wird für den Transport des Skalars Φ zusätzlich zu den Navier-Stokes-Gleichungen folgende Gleichung numerisch gelöst:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + (\mathbf{u}_f \cdot \nabla) \Phi = \nabla \cdot (\nu_{f,eff} \nabla \mathbf{u}_f) \quad (3.28)$$

Das darin enthaltene $\nu_{f,eff}$ ist die effektive kinematische Viskosität, die wiederum die Summe aus der kinematischen Viskosität des Fluids ν_f und der Wirbelviskosität ν_t ist.

Können die zu dispergierenden Partikel der Strömung nicht mehr folgen, können diese entweder mit der oben schon erwähnten Euler-Euler-Methode oder mit der Euler-Lagrange-Methode beschrieben werden. Um den Einfluss einzelner Partikelkräfte zu untersuchen, ist der Euler-Lagrange-Ansatz zu bevorzugen. Umso mehr, da u.a. die Basset-Kraft untersucht werden soll, die die Historie entlang der einzelnen Partikeltrajektorien benötigt.

Das Prinzip der Euler-Lagrange-Methode ist es, die Strömung des Fluids in einem Euler'schen Referenzrahmen zu beschreiben, und die Bewegung der einzelnen Elemente der dispersen Phase, d.h. der Partikel, in einem mitbewegten, Lagrange'schen Referenzrahmen. Dies geschieht für sphärische Partikel entsprechend der folgenden Differentialgleichungen (siehe z.B. Sommerfeld et al. (2008)):

$$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \mathbf{u}_p \quad (3.29)$$

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \sum_i \mathbf{F}_{p,i} \quad (3.30)$$

$$I_p \frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} = \mathbf{T} \quad (3.31)$$

Hierin sind \mathbf{x}_p , \mathbf{u}_p , und $\boldsymbol{\omega}_p$ Partikelort, -geschwindigkeit, und -rotationsgeschwindigkeit, m_p und I_p Masse und Trägheitsmoment des Partikels, und $\mathbf{F}_{p,i}$ und \mathbf{T} sind auf das Partikel wirkende Kräfte und das Fluid-Drehmoment.

Da partikelauflösende Modelle für die in Betracht kommende Anzahl von Partikeln einen deutlich zu hohen Rechenaufwand mit sich bringen würden, werden die Partikel als Punktmassen approximiert. Dies bringt mit sich, dass die auf die Partikel wirkenden Kräfte modelliert werden müssen. Die Bewegungsgleichung (3.30) für kleine Partikel und kleine Re_p in nicht-turbulentem Fluid geht zurück auf grundlegende Arbeiten von Basset (1888), Boussinesq (1885) und Oseen (1927), die deshalb auch als BBO-Gleichung bezeichnet wird. Maxey und Riley (1983) haben diese für nicht-gleichförmige Strömungen modifiziert. In Sommerfeld et al. (2008) wird diese erneut erweitert – für höhere Re_p und um weitere relevante Kräfte. An dieser Erweiterung von Sommerfeld et al. orientiert sich diese Arbeit im Wesentlichen. In den folgenden Abschnitten werden Partikelkennzahlen, Partikelkräfte, und weitere verwendete Modelle näher erläutert.

3.2.1 Partikelkennzahlen

Häufig genutzt wird im Rahmen dieser Arbeit die Relativgeschwindigkeit zwischen Fluid und Partikel, auch Schlupf oder Schlupfgeschwindigkeit genannt. Sie ist definiert als

$$\mathbf{u}_{rel} = \mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p \quad (3.32)$$

und wird unter anderem genutzt, um die Partikel-Reynoldszahl zu berechnen, die das Verhältnis von Trägheits- und Zähigkeitskräften beschreibt:

$$Re_p = \frac{d_p u_{rel}}{\nu_f} \quad (3.33)$$

mit dem Partikeldurchmesser d_p und der kinematischen Viskosität des Fluids ν_f . Anhand dieser Kennzahl lassen sich beispielsweise verschiedene Regime zur Beschreibung der Widerstandskraft unterscheiden.

Analog hierzu gibt es eine Rotations-Reynoldszahl

$$Re_r = \frac{d_p^2 \omega_{rel}}{\nu_f} \quad (3.34)$$

mit der relativen Rotation zwischen Fluid und Partikel

$$\boldsymbol{\omega}_{rel} = (\text{rot } \mathbf{u}_f) - \boldsymbol{\omega}_p \quad (3.35)$$

und eine Scher-Reynoldszahl

$$\text{Re}_s = \frac{d_p^2 (\text{rot } \mathbf{u}_f)}{\nu_f}. \quad (3.36)$$

Darin ist ω_p die Rotationsgeschwindigkeit des Partikels, ω_p deren Betrag.

Zur Beurteilung des Folgevermögens von Partikeln in Strömungen wird die Stokeszahl St_p genutzt. Sie beschreibt das Verhältnis von Partikelrelaxationszeit τ_p zu einer relevanten Zeitskala der Strömung τ_f :

$$\text{St}_p = \frac{\tau_p}{\tau_f} \quad (3.37)$$

Die Strömungszeitskala τ_f ist nicht fest definiert, sondern hängt davon ab, was beurteilt werden soll. So geben zum Beispiel Sommerfeld et al. (2008) an, dass in einer turbulenten Strömung die integrale Zeitskala $T_L \propto k/\epsilon$ relevant ist, während dies in großskaligen Wirbeln wie z.B. in Scherschichten die Zeit ist, die ein Wirbel benötigt, um einen bestimmten Punkt zu überstreichen. Die Partikelrelaxationszeit hingegen ist definiert als die Zeit, die ein Partikel benötigt, um aus der Ruhe auf 63,2% der Geschwindigkeit der umgebenden Strömung zu beschleunigen und berechnet sich zu:

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_f} \quad (3.38)$$

mit der Partikeldichte ρ_p und der dynamischen Fluidviskosität μ_f .

Für die Berechnung der Bassetkraft nach Michaelides und Roig (2011) wird des Weiteren die dort definierte Partikel-Strouhalzahl Sl_p benötigt:

$$\text{Sl}_p = \frac{9}{2} \frac{\nu_f}{\omega_f d_p^2} \quad (3.39)$$

Eine weitere Kennzahl für die Partikelcharakterisierung ist das Dichteverhältnis γ , der Quotient aus Fluid- und Partikeldichte:

$$\gamma = \frac{\rho_p}{\rho_f} \quad (3.40)$$

Schließlich sei noch der Beschleunigungsparameter A_C genannt, der bei der Berechnung der Virtuellen Masse und der Bassetkraft eine Rolle spielt:

$$A_C = \frac{u_{rel}^2}{d_p \left| \frac{du_{rel}}{dt} \right|} \quad (3.41)$$

3.2.2 Partikelkräfte und -momente

3.2.2.1 Widerstandskraft

Den üblicherweise größten Einfluss auf die Partikelbewegung hat die Widerstandskraft, die sich aus einem Reibungs- und einem Formwiderstand zusammensetzt. Sie berechnet sich zu:

$$F_W = \frac{3 \rho_f m_p}{4 \rho_p d_p} C_W \mathbf{u}_{rel} u_{rel} \quad (3.42)$$

Der Widerstandskoeffizient C_W wurde eingeführt um die Widerstandskraft auch für höhere Werte von Re_p angeben zu können. Im Stokes-Bereich, also einer schleichenden Strömung mit $Re_p < 0,5$, sind Zähigkeitseffekte dominant, während Trägheitskräfte keine Rolle spielen. Im Übergangsbereich $0,5 < Re_p < 1.000$ werden die Trägheitskräfte zunehmend wichtiger. Im Newton-Bereich (ab $Re_p \approx 1.000$) ist die Strömung um das Partikel voll turbulent und C_D bleibt zunächst konstant (siehe [Abbildung 3.4](#)). Ab der kritischen Reynoldszahl $Re_p \approx 2,5 \cdot 10^5$ fällt C_W stark ab, da hier die Grenzschicht um das Partikel ebenfalls turbulent wird. Im superkritischen Bereich ab $Re_p \approx 4 \cdot 10^5$ steigt C_W wieder an. In den in dieser Arbeit untersuchten Mischern sind keine $Re_p > 2,5 \cdot 10^5$ zu erwarten, da eine solche Reynoldszahl einer Geschwindigkeit von etwa 3,125 m/s entspricht. Für die Partikelberechnungen werden folgende Korrelationen genutzt:

$$C_W = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} & Re_p < 0,5 & \text{Stokes (1851)} \\ \frac{24}{Re_p} \left(1 + 0,15 Re_p^{0,667} \right) & 0,5 \leq Re_p < 1000 & \text{Schiller und Naumann (1933)} \\ 0,44 & Re_p \geq 1000 & \end{cases} \quad (3.43)$$

3.2.2.2 Schwerkraft und Auftrieb

Die auf die Partikel wirkende Schwerkraft wird zusammengefasst mit der vom Partikel erfahrenen Auftriebskraft als

$$F_G = m_p g (1 - \rho_f / \rho_p) . \quad (3.44)$$

Darin ist g der Vektor der Fallbeschleunigung.

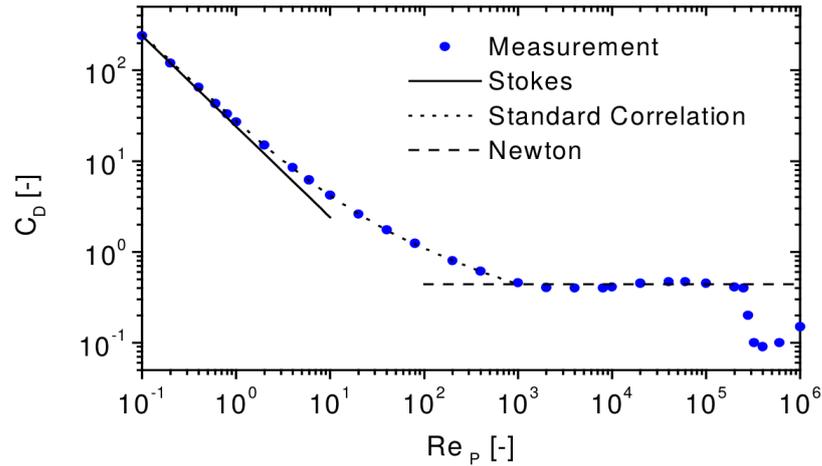


Abbildung 3.4: Darstellung des Widerstandskoeffizienten C_W (hier C_D , von „drag coefficient“) in Abhängigkeit von der Partikelreynoldszahl Re_p : Vergleich von Experimenten mit verschiedenen Korrelationen („Standard Correlation“ entspricht dem Modell von Schiller und Naumann in Gl. (3.43)) (Entnommen aus Sommerfeld et al. (2008)).

3.2.2.3 Druckgradientenkraft

Herrscht im das Partikel umgebenden Fluid ein Druckgradient, so resultiert aus diesem eine am Partikel angreifende Kraft:

$$F_{PG} = m_p \frac{\rho_f}{\rho_p} \frac{D\mathbf{u}_f}{Dt} \quad (3.45)$$

Unter anderem Sommerfeld et al. (2008) und Decker (2005) fassen Druckgradientenkraft und Auftriebskraft zusammen, da im Kern beide auf Druckgradienten beruhen. Im zur Simulation genutzten Tool OpenFOAM ist die Auftriebskraft jedoch wie hier beschrieben mit der Schwerkraft zusammengefasst. Für das Ergebnis hat das natürlich keine Auswirkungen, wenn alle Kräfte berücksichtigt werden.

3.2.2.4 Transversale Auftriebskräfte

Neben der Auftriebskraft aufgrund der Dichte des Fluids gibt es noch weitere Auftriebskräfte. Diese wirken allerdings nicht entgegen der Richtung der Gravitation, sondern senkrecht zur Strömungsrichtung. Daraus leitet sich auch die Zusatzbezeichnung „transversal“ ab (lateinisch „transversus“: quer).

SCHERAUFTRIEBSKRAFT In Scherströmungen herrscht auf Grund der nicht konstanten Fluidgeschwindigkeit eine ungleichmäßige Druckverteilung über der Oberfläche des Partikels, da der Druck bei gleichbleibender Gesamtenergie mit steigender Geschwindigkeit sinkt. Das ruft eine Kraft senkrecht zur Strömung hervor, die sogenannte Scherauftriebskraft oder Scherliftkraft. Ist \mathbf{u}_{rel} positiv, dann zeigt diese Kraft in Richtung der größeren Fluidgeschwindigkeit; ist \mathbf{u}_{rel} hingegen negativ, dann zeigt die Kraft in Richtung der kleineren Fluidgeschwindigkeit (siehe Abb. 3.5). Die Berechnung basiert auf Arbeiten von Saffman (1965, 1968), weshalb diese Kraft auch als Saffman-Kraft bezeichnet wird:

$$F_{LS}^y = 1,615 \cdot d_p^2 \sqrt{(\rho_f \mu_f)} |\mathbf{u}_{rel}| \sqrt{\left| \frac{\partial \mathbf{u}_f}{\partial y} \right|} \quad (3.46)$$

Erweitert auf den allgemeinen, dreidimensionalen Fall lautet die genutzte Korrelation:

$$F_{LS} = \frac{\pi}{8} \rho_f d_p^3 C_{LS} (\mathbf{u}_{rel} \times (\text{rot } \mathbf{u}_f)) \quad (3.47)$$

mit dem Koeffizienten

$$C_{LS} = \frac{4,1126}{\text{Re}_s^{0,5}} f(\text{Re}_p, \text{Re}_s) \quad (3.48)$$

und der Korrekturfunktion von Mei (1992), basierend auf Arbeiten von Dandy und Dwyer (1990):

$$f(\text{Re}_p, \text{Re}_s) = \begin{cases} (1 - 0,3314 \cdot \beta^{0,5}) \exp(-\text{Re}_p/10) & \text{Re}_p \leq 40 \\ 0,0524 \cdot (\beta \text{Re}_p)^{0,5} & \text{Re}_p > 40 \end{cases} \quad (3.49)$$

mit

$$\beta = 0,5 \cdot \frac{\text{Re}_s}{\text{Re}_p} . \quad (3.50)$$

ROTATIONSAUFTRIEBSKRAFT Gibt es eine Relativrotation ungleich null zwischen dem Partikel und dem Fluid, so resultiert daraus eine weitere Querkraft, genannt Rotationsauftriebskraft. Oft wird diese Kraft auch als Magnuskraft oder Magnuseffekt bezeichnet, wahrscheinlich weil Rayleigh (1877) die Erklärung des Effekts Magnus (1853) zuschrieb. Laut Barkla und Auchterlonie (1971) beschrieben und erklärten allerdings schon Robins (1805) und Newton (1671) dieses Phänomen. Es begründet

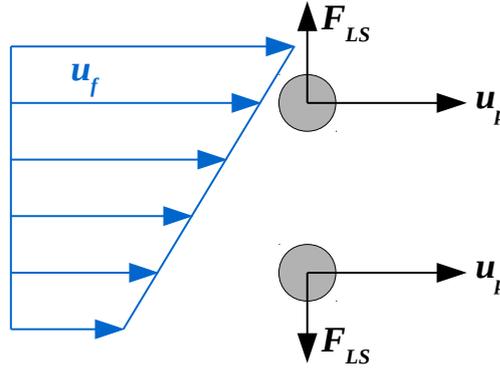


Abbildung 3.5: Illustration der Saffman- oder Scherauftriebskraft; ist $u_f > u_p$, so zeigt F_{LS} in Richtung der größeren Fluidgeschwindigkeit (oben); ist $u_f < u_p$, so zeigt F_{LS} in Richtung der niedrigeren Fluidgeschwindigkeit (unten).

sich daraus, dass aufgrund der relativen Rotation die Relativgeschwindigkeit zwischen Fluid und Partikeloberfläche an einer Seite des Partikels ab- und auf der anderen zunimmt. Auf der Seite der Geschwindigkeitserhöhung wird das Fluid verzögert, was zu einem lokal höheren Druck führt, sodass das Partikel zur gegenüberliegenden Seite abgelenkt wird (siehe Abb. 3.6). Rubinow und Keller (1961) gaben dafür eine analytische Lösung an, die für höhere Partikel-Reynoldszahlen um einen Koeffizienten C_{LR} erweitert wurde:

$$F_{LR} = \frac{\pi}{8} C_{LR} d_p^2 \rho_f \frac{u_{rel}}{\omega_{rel}} (\omega_{rel} \times u_{rel}) \quad (3.51)$$

Für kleine Partikel-Reynoldszahlen wird dabei die Korrelation von Rubinow und Keller genutzt, für höhere die von Oesterle und Bui Dinh (1998), wie von Crowe et al. (2011) empfohlen:

$$C_{LR} = \begin{cases} \frac{d_p \omega_{rel}}{u_{rel}} \left(= \frac{Re_r}{Re_p} \right) & Re_p \leq 1 \\ 0,45 + \left(\frac{Re_r}{Re_p} - 0,45 \right) \cdot \exp(-0,05684 \cdot Re_r^{0,4} \cdot Re_p^{0,3}) & 1 < Re_p \leq 140 \end{cases} \quad (3.52)$$

Daneben existieren noch weitere Korrelationen für C_{LR} , zum Beispiel von Lun und Liu (1997) und Tsuji et al. (1985). Auch negative Koeffizienten wurden beobachtet, allerdings erst ab hohen Re_p -Werten von etwa 10^5 (s. z.B. Muto et al. (2012)). Solch hohe Werte werden im Rahmen der dargestellten Untersuchungen nicht erwartet.

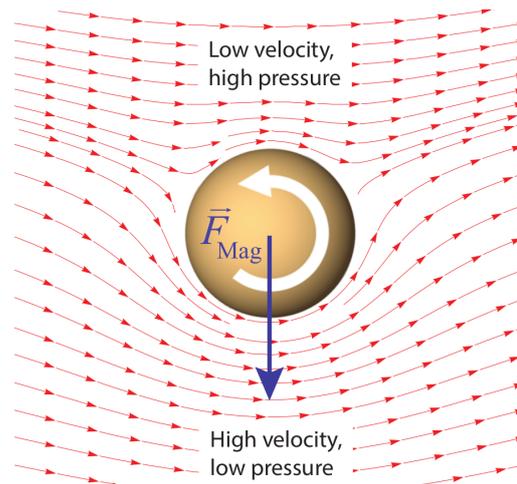


Abbildung 3.6: Illustration der Rotationsauftriebskraft; der Vektor zeigt in die Richtung, in der sich Partikel und Fluid in die gleiche Richtung bewegen (entnommen aus Costa et al. (2018)).

3.2.2.5 Virtuelle Masse

Wird ein Partikel (oder, allgemeiner, ein Körper) in einem Fluid beschleunigt, muss zusätzlich zur Beschleunigungsarbeit am Partikel bzw. Körper am umgebenden Fluid Arbeit verrichtet werden. Diese zusätzliche Arbeit wird mit dieser Kraft, der sogenannten virtuellen Masse, berücksichtigt:

$$F_{VM} = 0,5 C_{VM} \rho_f \frac{m_p}{\rho_p} \left(\frac{Du_f}{dt} - \frac{du_p}{dt} \right) \quad (3.53)$$

Da der Term $1/2 \cdot \rho_f m_p / \rho_p$ der halben Masse des Fluidvolumens entspricht, das das Partikel verdrängt, lässt sich Gl. (3.53) also auch so interpretieren, dass zusätzlich zur Partikelmasse diese Masse an Fluid beschleunigt werden muss. Das Partikel wird scheinbar – virtuell – um diese Masse schwerer. Daher rührt der Name virtuelle Masse. Auton et al. (1988) haben darauf hingewiesen, dass die substantielle Ableitung verwendet werden sollte. Odar und Hamilton (1964) schlugen die Erweiterung durch den in Gl. (3.53) enthaltenen Koeffizienten C_{VM} vor, der u.a. vom Beschleunigungsparameter A_C (Gl. (3.41)) abhängt:

$$C_{VM} = 2,1 \frac{0,132}{A_C^2 + 0,12} \quad (3.54)$$

Michaelides und Roig (2011) haben die Originaldaten neu interpretiert und festgestellt, dass die virtuelle Masse keine Funktion dieses Parame-

ters ist und Gl. (3.53) ohne Modifikation genutzt werden kann, sodass hier gilt:

$$C_{VM} = 1 \quad (3.55)$$

3.2.2.6 Basset-Kraft

Die Basset-Kraft kann als Äquivalent der viskosen Kräfte zu den Trägheitskräften der virtuellen Masse gesehen werden. Sie beschreibt eine zeitliche Verzögerung der Entwicklung der Grenzschicht um das Partikel während seiner sich zeitlich verändernden Bewegung durch das Fluid. Sie wurde ursprünglich von Basset (1888) beschrieben und wird in der vorliegenden Arbeit in folgender Form berücksichtigt:

$$F_B = \frac{3}{2} C_B d_p^2 \sqrt{\pi \rho_f \mu_f} \int_0^t \frac{d\mathbf{u}_{rel}/dt'}{\sqrt{t-t'}} dt' \quad (3.56)$$

Aufgrund der Integration über die komplette Partikeltrajektorie wird diese Kraft im Englischen auch als „History“-Force bezeichnet.

Der Koeffizient C_B wurde zunächst wiederum von Odar und Hamilton (1964) als Funktion des Beschleunigungsparameters A_C (Gl. (3.41)) bestimmt:

$$C_B = 0,48 + \frac{0,52}{(A_C + 1)^3} \quad (3.57)$$

Die oben schon erwähnte Neuinterpretation der Daten von Michaelides und Roig (2011) ergaben folgenden hier genutzten Koeffizienten:

$$C_B = 1 - 0,527 \cdot [1 - \exp(-0,14 \cdot \text{Re}_p \text{Sl}_p^{0,82})^{2,5}] \quad (3.58)$$

Reeks und McKee (1984) beobachteten in numerischen Experimenten, dass der Einfluss einer anfänglichen relativen Geschwindigkeit ungleich null zwischen Fluid und Partikel nicht wie erwartet mit der Zeit abklingt. Michaelides (2003) argumentiert dagegen, dass

- Reeks und McKee von sehr kleinen Re_p ausgehen und der Basset-Kraft-Term sich unter finiten Re_p so verhält, dass kein „Memory“-Effekt auftritt;
- die Randbedingung, dass die Partikel mit einer von der Fluidgeschwindigkeit verschiedenen Geschwindigkeit in einem ansonsten ungestörten Fluidfeld starten, mathematisch korrekt, physikalisch aber zweifelhaft sei.

Aus diesen Gründen wurde hier auf den von Reeks und McKee (1984) vorgeschlagenen zusätzlichen Term verzichtet.

Im Gegensatz zu den anderen berücksichtigten Kräften, deren Berechnung und Implementierung verhältnismäßig einfach ist, macht die oben erwähnte Integration über die komplette Partikeltrajektorie die Berechnung der Basset-Kraft sehr komplex, speicher- und zeitaufwendig. In der Einleitung wurde bereits auf Sommerfeld (1996) verwiesen, der eine Verzehnfachung der Rechendauer bei Berücksichtigung der Basset-Kraft beobachtete, Hinsberg et al. (2011) schreiben gar von einer 100- bis 1000-fach längeren Rechendauer im Vergleich zu den anderen Kräften. Um diesem Umstand etwas entgegenzusetzen, wurden zwei Ansätze entwickelt:

- Michaelides (1992) schlägt eine Laplace-Transformation vor, was laut Hinsberg et al. (2011) aber nicht für nichtlineare Probleme und ortsabhängige Geschwindigkeitsfelder geeignet ist.
- „Window“-Methoden, wie von Dorgan und Loth (2007) und Bombardelli et al. (2008) vorgeschlagen, berücksichtigen nur eine gewisse Anzahl an Zeitschritten vor dem aktuell berechneten. Da der Einfluss der alten Zeitschritte aber nur sehr langsam abklingt, muss das gewählte Zeitfenster recht groß sein, wenn die Berechnung akkurat bleiben soll. Zusätzlich wird die Basset-Kraft für $t \rightarrow 0$ singular. Die von Bombardelli et al. (2008) getesteten Methoden der spezifischen Quadratregeln und fraktionalen Ableitungen haben eine zeitliche Genauigkeit von lediglich $\mathcal{O}(\sqrt{t})$ bzw. $\mathcal{O}(t)$.
- Hinsberg et al. (2011) haben eine effiziente Methode zur näherungsweise Berechnung des Basset-Integrals entwickelt mit Hilfe einer Kombination aus Window-Methode und Approximation des Nachlaufs mit Hilfe von Exponentialfunktionen. Der Rechenaufwand kann im Vergleich zu anderen Methoden mit ähnlicher Genauigkeit um mehr als eine Größenordnung reduziert werden, wie in Fig. 3.7 gut zu sehen ist.

Die Grundidee der Methode von Hinsberg et al. (2011) ist, die Kraft zunächst in einen „Window“-Teil $F_{B,win}$ und einen „Tail“-Teil $F_{B,tail}$, also

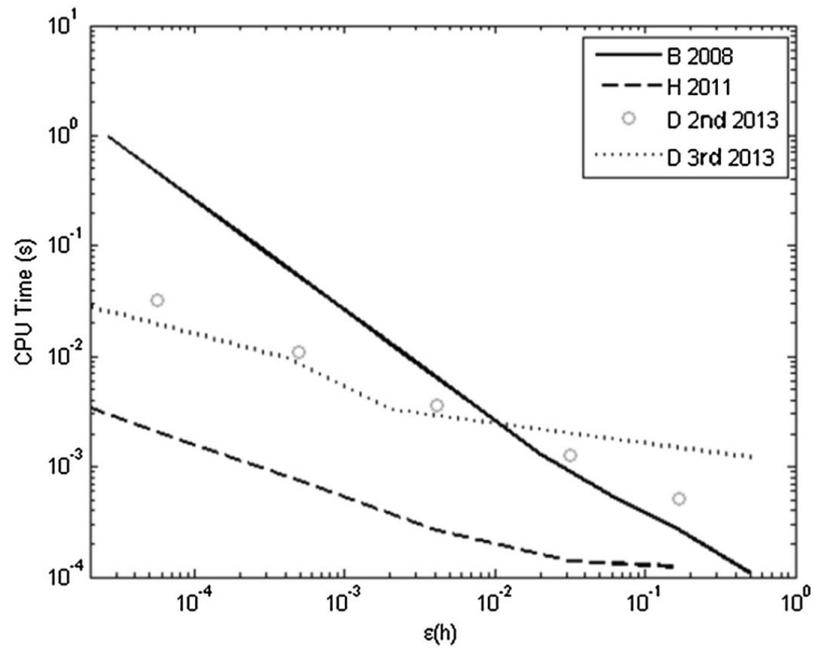


Abbildung 3.7: Rechenzeit vs. Genauigkeit für vier Berechnungsmethoden für die Basset-Kraft, entnommen aus Moreno-Casas und Bombardelli (2016); B 2008: Bombardelli et al. (2008), H 2011: Hinsberg et al. (2011), D 2nd 2013: Daitche (2013, Schema zweiter Ordnung), D 3rd 2013: Daitche (2013, Schema dritter Ordnung).

einen Nachlauf, aufzuspalten und eine modifizierte Basset-Kraft $F_{B,mod}$ zu berechnen:

$$\begin{aligned} F_{B,mod} &= F_{B,win} + F_{B,tail} \\ &= C_{B,mod} \int_{t-t_{win}}^t K_B(t-t') \mathbf{g}_B(t') dt' + C_{B,mod} \int_{-\infty}^{t-t_{win}} K_{tail}(t-t') \mathbf{g}_B(t') dt' \end{aligned} \quad (3.59)$$

Darin sind die K_B und K_{tail} die Kernel für den Fenster- bzw. den Nachlauf-Anteil. Der Fenster-Anteil entspricht den oben erwähnten Methoden: Für eine bestimmte Zeit t_{win} in die Vergangenheit wird das Integral tatsächlich numerisch berechnet, mit dem originalen Kernel $K_B(t-t') = 1/\sqrt{(t-t')}$ und der Funktion $\mathbf{g}_B(t) = d\mathbf{u}_{rel}/dt$. Der Faktor $C_{B,mod}$ fasst den Koeffizienten und die Konstanten aus [Gleichung 3.56](#) zusammen:

$$C_{B,mod} = \frac{3}{2} C_B d_p^2 \sqrt{\pi \rho_f \mu_f} \quad (3.60)$$

Hinsberg et al. (2011) geben als numerisch auswertbares Ergebnis für den Fenster-Anteil an:

$$\begin{aligned} F_{B,win} &\approx \frac{4}{3} C_{B,mod} \mathbf{g}_{B,0} \sqrt{\Delta t} + C_{B,mod} \mathbf{g}_{B,N_t} \frac{\sqrt{\Delta t} (N_t - \frac{4}{3})}{(N_t - 1) \sqrt{N_t - 1} + (N_t - \frac{3}{2}) \sqrt{N_t}} \\ &+ C_{B,mod} \sqrt{\Delta t} \sum_{n=1}^{N_t-1} \mathbf{g}_{B,n} \left(\frac{n + \frac{4}{3}}{(n+1) \sqrt{n+1} (n + \frac{3}{2}) \sqrt{n}} + \frac{n - \frac{4}{3}}{(n-1) \sqrt{n-1} + (n - \frac{3}{2}) \sqrt{n}} \right) \end{aligned} \quad (3.61)$$

Darin ist N_t die Anzahl der Zeitschritte im Fenster.

Für den Nachlauf wird ein rekursiver Algorithmus genutzt, um den Rechenaufwand zu minimieren. Dazu wird er zunächst als Summe von m Exponentialfunktionen $F_{B,tail,i}$ approximiert:

$$F_{B,tail} = \sum_{i=1}^m a_i F_{B,tail,i} \quad (3.62)$$

wobei a_i positive Konstanten sind. Die Einzelkräfte $F_{B,tail,i}$ werden wiederum in einen direkt zu berechnenden und einen rekursiven Anteil aufgespalten:

$$F_{B,tail,i} = F_{B,tail,i,di} + F_{B,tail,i,rek} \quad (3.63)$$

Der direkt berechenbare Teil ergibt sich zu:

$$\begin{aligned} F_{B,tail,i,di} \approx 2 C_{B,mod} \sqrt{et_i} \cdot e^{-\frac{t_{win}}{2t_i}} \left\{ g_{B,N_t} \left[1 - \phi \left(-\frac{\Delta t}{2t_i} \right) \right] \right. \\ \left. + g_{B,N_t+1} \cdot e^{-\frac{\Delta t}{2t_i}} \left[\phi \left(\frac{\Delta t}{2t_i} \right) - 1 \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.64)$$

mit $\phi(z) = (e^z - 1)/z$, festen Koeffizienten t_i (siehe Hinsberg et al. (2011)), und der Zeitspanne des Fensters, t_{win} . Aus dem Wert für $F_{B,tail,i}$ vom vorhergehenden Zeitschritt lässt sich schließlich der noch fehlende rekursive Teil berechnen:

$$F_{B,tail,i,rek} = e^{-\frac{\Delta t}{2t_i}} F_{B,tail,i}(t - \Delta t) \quad (3.65)$$

Die Implementation im Quellcode von OpenFOAM gestaltete sich relativ kompliziert, aber durch die deutlichen Geschwindigkeits- und Genauigkeitsgewinne war der Aufwand mehr als gerechtfertigt.

3.2.2.7 Drehmoment

Basierend auf experimentellen Arbeiten von Sawatzki (1970) und Berechnungen von Dennis et al. (1980), kann man nach Sommerfeld et al. (2008) das vom Fluid auf das Partikel ausgeübte Drehmoment

$$\mathbf{T} = -\pi \mu_f d_p^3 \boldsymbol{\omega}_p \quad (\text{nach Rubinow und Keller (1961)}) \quad (3.66)$$

mit folgender Korrelation auf dreidimensionale Strömungen und höhere Reynoldszahlen erweitern:

$$\mathbf{T} = \frac{1}{64} \rho_f d_p^5 C_R \boldsymbol{\omega}_{rel} \boldsymbol{\omega}_{rel} \quad (3.67)$$

mit

$$C_R = \begin{cases} \frac{64\pi}{\text{Re}_r} & \text{für } \text{Re}_r \leq 32 \\ \frac{12,9}{\text{Re}_r^{0,5}} + \frac{128,4}{\text{Re}_r} & \text{für } \text{Re}_r > 32 \end{cases} \quad (3.68)$$

Hierdurch können Relativrotationen zwischen Fluid und Partikel hervorgerufen werden, die für einige der oben beschriebenen Kräfte relevant sind. Eine weitere Ursache für Relativrotationen können Wandkollisionen sein, deren Modellierung in [Abschnitt 3.2.4](#) beschrieben wird.

3.2.3 Partikeldispersion durch Turbulenz

Wie [Abschnitt 3.1.2](#) beschrieben, wird ein RANS-Modell für die Turbulenzmodellierung genutzt. Das bedeutet, dass die turbulenten Fluktuationen u'_f nicht aufgelöst werden und das Partikel nur die mittlere Fluidgeschwindigkeit „sehen“ würde. Die turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen müssen also modelliert werden, um die Partikeldispersion durch diese Fluktuationen nicht zu vernachlässigen. Die in OpenFOAM implementierten Dispersionsmodelle nennen sich „gradientDispersion“ und „stochasticDispersion“. Der Betrag von u'_f wird in beiden Modellen als Zufallszahl aus einer Gauß'schen Verteilung mit Erwartungswert 0 und Varianz $2/3 \cdot k$ ermittelt. Die Modelle unterscheiden sich nur in der Richtung der Fluktuation. Beim Gradientenmodell zeigt der Vektor stets entgegengesetzt zum Gradienten der turbulenten kinetischen Energie, also in Richtung $-\nabla k$, wodurch die stochastische Natur der Fluktuationen in Bezug auf die Richtung zu stark eingeschränkt wird. Beim stochastischen Modell zeigt der Vektor in eine komplett zufällige Richtung, wodurch u.a. die Korrelation zwischen aufeinander folgenden Zeitschritten völlig verloren geht. Beide Modelle also sind kaum geeignet, die turbulente Fluktuation realistisch abzubilden. Es wurde deswegen das von Sommerfeld (1993) beschriebene und u.a. von Laín und Sommerfeld (2008) und Sommerfeld (2001b) erfolgreich angewendete Langevin-Gleichungs-Dispersionsmodell implementiert. Darin wird die zur vom Partikel gesehene mittleren Fluidgeschwindigkeit addierte Fluktuation u'_f wie folgt berechnet:

$$u'_f(t + \Delta t) = \mathbf{R}_p(\Delta t, \Delta \mathbf{x})u'_f(t) + \sigma_u \sqrt{1 - R_p^2(\Delta t, \Delta \mathbf{x})} \boldsymbol{\zeta} \quad (3.69)$$

Sie setzt sich zusammen aus einem mit der Fluktuation im vorgehenden Zeitschritt $u'_f(t)$ korrelierenden Teil (linker Term) und einer Zufallskomponente (rechter Term). Darin ist σ_u das Quadratmittel der Geschwindigkeitsfluktuationen und $\boldsymbol{\zeta}$ ist ein Vektor, dessen Komponenten unabhängig voneinander aus einer Gaußverteilung mit Mittelwert null und Standardabweichung eins ermittelt werden. Da ein RANS-Modell verwendet wird, muss von isotroper Turbulenz (d.h. $u'_{f,x} = u'_{f,y} = u'_{f,z}$) ausgegangen werden und σ_u lässt sich somit aus k berechnen:

$$\sigma_u = u'_{f,x} = u'_{f,y} = u'_{f,z} = \sqrt{\frac{2}{3}}k \quad (3.70)$$

Der Korrelationsterm \mathbf{R}_p besteht aus einem vom Zeitschritt Δt abhängigen Lagrange'schen und einem von der Positionsveränderung $\Delta \mathbf{x}$ abhängigen Euler'schen Anteil:

$$\mathbf{R}_p(\Delta t, \Delta \mathbf{x}) = R_L(\Delta t) \cdot \mathbf{R}_E(\Delta \mathbf{x}) \quad (3.71)$$

Von Sommerfeld et al. (2008) wird der Lagrange-Anteil berechnet als

$$R_L(\Delta t) = e^{-\frac{\Delta t}{\tau_L}}, \quad (3.72)$$

mit dem Simulations-Zeitschritt Δt und der Lagrange-Zeitskala

$$\tau_L = 0,24 \frac{\sigma_u^2}{\varepsilon} \quad (3.73)$$

Der Euler-Anteil wird nach Karman und Howarth (1938) aus Korrelationskoeffizienten in Längs- und Querrichtung berechnet, wobei aus dem eigentlich entstehenden Tensor nur die drei Hauptkomponenten berücksichtigt werden:

$$\mathbf{R}_E = [f(\Delta \mathbf{x}) - g(\Delta \mathbf{x})] \cdot \frac{\Delta \mathbf{x} \cdot \Delta \mathbf{x}}{\Delta x} + g(\Delta \mathbf{x}) \cdot \delta \quad (3.74)$$

δ bezeichnet darin das Kronecker-Delta. Die Korrelationskoeffizienten ergeben sich zu:

$$f(\Delta \mathbf{x}) = e^{-\frac{\Delta x}{L_E}} \quad (3.75)$$

$$g(\Delta \mathbf{x}) = \left(1 - \frac{\Delta x}{2L_E}\right) e^{-\frac{\Delta x}{L_E}} \quad (3.76)$$

Die integrale Euler'sche Längenskala ergibt sich aus Experimenten von Sommerfeld (1996) zu

$$L_E = 3T_L\sigma_u. \quad (3.77)$$

3.2.4 Wandkollision

In begrenzten Strömungsgebieten, wie auch hier in einem Mischer, finden in der Regel Kollisionen der Partikel mit den das Strömungsgebiet begrenzenden Wänden statt. Zur Modellierung dieser Stöße wird das Hard-Sphere-Modell genutzt. Darin kommen die integralen Formen

der Bewegungsgleichungen, genauer der Impulsgleichungen zur Anwendung. Verformungen der Kollisionspartner werden nicht explizit berücksichtigt. Im Gegensatz dazu gibt es noch das von Cundall und Strack (1979) entwickelte Soft-Sphere-Modell, bei dem die Kollisionen zeitlich aufgelöst werden und die Kollisionspartner sich teilweise überlappen. Aus dieser Überlappung wird eine abstoßende Kraft in Analogie zu einem Feder-Masse-Dämpfer-System berechnet, wobei zum Beispiel die Überlappung der Kompression einer Feder mit einer zum Material passenden Federkonstante entspricht. Bei nicht-binären Kollisionen muss zwingend das Soft-Sphere-Modell genutzt werden. Aufgrund der zeitlichen Auflösung ist dieses Modell jedoch deutlich rechenintensiver als das genutzte Hard-Sphere-Modell, und da nur Partikel-Wand-Kollisionen modelliert werden, liegen auch nur binäre Kollisionen vor.

In OpenFOAM implementiert waren zum Einen ein Soft-Sphere-Modell, dass zwangsläufig an ein deterministisches Partikelkollisionsmodell gekoppelt ist, und damit zu extrem hohen Rechenzeiten geführt hätte, und zum Anderen ein relativ simples Hard-Sphere-Modell, dass weder zwischen den Kollisionsarten unterschied, noch Partikelrotation berücksichtigte. Im Folgenden wird das für diese Arbeit genutzte und in OpenFOAM implementierte Hard-Sphere-Modell näher erläutert.

In Abbildung 3.8 ist schematisch die Kollision eines sphärischen Partikels mit einer Wand dargestellt. Die Indizes „0“ und „2“ stehen dabei für die Zustände vor und nach der Kollision. Die Auf- und Rückprallgeschwindigkeiten $u_{p,0}$ und $u_{p,2}$ definieren zusammen mit dem Normaleinheitsvektor e_n der Wand im Auftreffpunkt die Auf- und Rückprallwinkel $\alpha_{p,0}$ und $\alpha_{p,2}$. Weiterhin lässt sich ein Schiefeparameter ψ berechnen:

$$\psi = \frac{u_{p,t,0}}{u_{p,n,0}} \quad (3.78)$$

Trifft das Partikel senkrecht auf die Wand, d.h. $\alpha_{p,0} = 90^\circ$ und $u_{p,0} \parallel e_n$, so ist $u_{p,t,0} = 0$ und damit auch $\psi = 0$. Je schief der Stoß, desto größer wird auch der Schiefeparameter. Dieser wird später benötigt um zwischen verschiedenen Stoßarten zu unterscheiden.

Bei allen Kollisionen wird angenommen, dass das Partikel zunächst am Beginn der Kompressionsphase an der Wand entlang gleitet. Crowe et al. (2011) und Schäfer (1996) unterscheiden für die Zeit der Kollision danach zwischen drei Fällen:

1. Das Partikel hört noch während der Kompressionsphase auf zu gleiten und rollt an der Wand entlang.

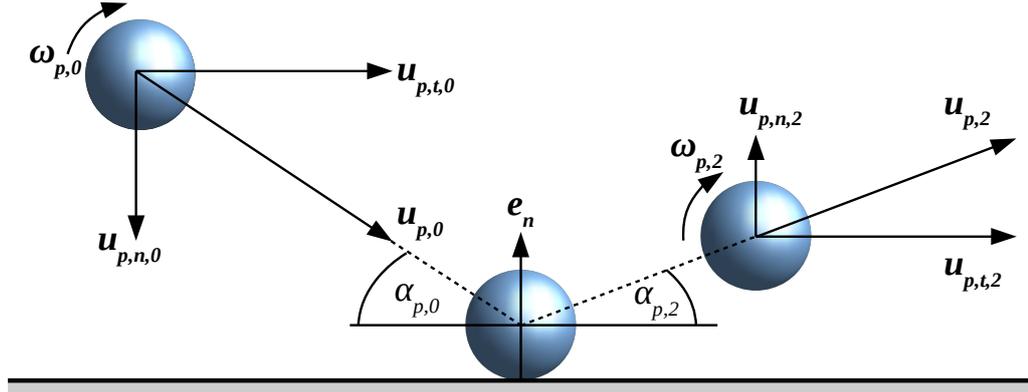


Abbildung 3.8: Schematische Darstellung der Kollision eines sphärischen Partikels mit einer Wand.

2. Das Partikel hört in der Rückprallphase auf zu gleiten und beginnt zu rollen.
3. Das Partikel gleitet während der kompletten Kontaktzeit an der Wand entlang.

Über translatorische und rotatorische Impulserhaltungsgleichungen und den drei Fällen entsprechenden Randbedingungen für die verschiedenen Phasen der Kollision ergibt sich, dass für die Fälle 1 und 2 die gleichen Lösungen genutzt werden können. Zwischen den Fällen wird an Hand eines Grenz-Schiefeparameters entschieden:

$$\psi_{krit} = \frac{7}{2} \mu_s (1 + s_n) \quad (3.79)$$

mit dem statischen Reibungskoeffizienten μ_s und dem Restitutionskoeffizienten in Normalenrichtung s_n . Es ergeben sich folgende Zusammenhänge für die Partikelbewegung nach der Kollision:

$$\text{für } \psi > \psi_{krit} : \begin{cases} \mathbf{u}_{p,2} = \mathbf{u}_{p,0} - (1 + s_n)(\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{u}_{p,0})(\mathbf{e}_n - \mu_d \mathbf{e}_t) \\ \omega_{p,2} = \omega_{p,0} + 5(1 + s_n) \frac{\mu_d}{d_p} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{u}_{p,0})(\mathbf{e}_n \times \mathbf{e}_t) \end{cases} \quad (3.80)$$

$$\text{für } \psi \leq \psi_{krit} : \begin{cases} \mathbf{u}_{p,2} = \mathbf{u}_{p,0} - (1 + s_n)(\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{u}_{p,0})\mathbf{e}_n - \frac{2}{7} u_{p,t,0} \mathbf{e}_t \\ \omega_{p,2} = \omega_{p,0} - \frac{10}{7} \frac{u_{p,t,0}}{d_p} (\mathbf{e}_t \times \mathbf{e}_n) \end{cases}$$

Darin ist μ_d der dynamische Reibungskoeffizient. Der erste Satz an Gleichungen, $\psi > \psi_{krit}$, entspricht dabei einem Gleitstoß, also den oben erwähnten Fällen 1 und 2, der zweite Satz entspricht einem Haftstoß (Fall 3).

3.2.5 Rechenaufwand und vernachlässigte Kräfte und Effekte

Die verschiedenen genutzten Modelle bedeuten natürlich alle einen zusätzlichen Rechenaufwand. Vor dem Hintergrund, dass die Euler-Lagrange-Methode an sich schon einen höheren Rechenaufwand bedeutet als Euler-Euler-Methoden, erklärt sich, dass Simulationen im Bereich der Rührtechnik erst spät die Euler-Lagrange-Simulationen aufkamen und auch heute nicht so oft eingesetzt werden. Insbesondere die Berechnung des Integrals der Bassetkraft, aber auch z.B. die totalen Differentiale, verlängern die Rechendauer merklich. Nicht zuletzt deswegen werden bei den meisten Partikelsimulationen im Bereich der mechanischen Verfahrenstechnik viele der Kräfte vernachlässigt und auch die anderen Modelle nicht oder nur in vereinfachter Form genutzt. Üblicherweise werden neben Widerstands-, Schwer- und Auftriebskraft nur Druckgradientenkraft, seltener die Scherauftriebskraft berücksichtigt (Blais und Bertrand (2017), Blais et al. (2016), Decker (2005) und Shah et al. (2015)).

Bei der Modellierung der dispersen Phase wurden aber auch in der vorliegenden Arbeit verschiedene Effekte und Kräfte vernachlässigt. Ohne Anspruch auf Vollständigkeit sind diese im Folgenden aufgelistet, inklusive einer kurzen Erläuterung, warum diese vernachlässigt werden konnten.

- **Zwei- bzw. Vier-Wege-Kopplung:** Der Volumen- und Massenanteil der Partikel ist relativ gering, im Maximalfall 1,6 Vol.-% bzw. 4,1 Masse-%, sodass sowohl die Rückwirkung der Partikel auf die kontinuierliche Phase, als auch Partikel-Partikel-Interaktionen vernachlässigt werden.
- **Elektrische Kräfte und Thermophorese:** Da keine elektrischen Ladungen oder Felder auftreten, können elektrische Kräfte (Coulombkraft, Bildkraft (z.B. Yu, 1977), Dielektrophorese (z.B. Jones, 1979)) vernachlässigt werden; und da die Temperatur nicht berücksichtigt wird, kann auch die Thermophorese (z.B. Talbot et al., 1980) vernachlässigt werden.
- **Rotations-Basset-Kraft:** Ähnlich der Basset-Kraft für die Translation, gibt es auch eine Basset-Kraft für die Rotation (siehe z.B. Basset (1888), Feuillebois und Lasek (1978) und Michaelides et al. (2016)). Für diese liegt nach Kenntnisstand des Autors allerdings weder eine Korrelation für höhere Reynoldszahlen vor, noch gibt es effiziente Berechnungsmethoden dafür.

- **Brown'sche Diffusion, Cunningham-Korrektur, van-der-Waals-Kräfte und Flüssigkeitsbrücken:** Bei den betrachteten Partikelgrößen sind diese Effekte vernachlässigbar, da sie üblicherweise nur auf sehr kleine Partikel einen Einfluss haben.
- **Wandeffekte** Befindet sich das Partikel in der Nähe einer Wand, so ist die für viele der oben genannten Modelle genutzte Annahme einer von Wänden ungestörten Strömung nicht mehr gegeben. Das rührt zum Einen daher, dass beim Aufprall das zähe Fluid im Spalt zwischen Wand und Partikel verdrängt werden muss, und zum Anderen aus der Interaktion der Strömung im Nachlauf des Partikels mit der Wand, wenn sich das Partikel parallel zur Wand bewegt. Zahlreiche Arbeiten haben das Thema untersucht: Die Änderung der Widerstandskraft beschreiben Brenner (1961) und Cox und Brenner (1967) im Falle der Bewegung senkrecht zur Wand, Goldman et al. (1967a), Goldman et al. (1967b) und O'Neill und Stewartson (1967) für eine Bewegung parallel zur Wand. Für die genutzten Partikel ergeben sich signifikante Änderungen nur in einem Bereich bis maximal 5 mm von der Wand. Wang et al. (1997) beschreiben eine „Optimum“-Scherauftriebskraft für niedrige Reynoldszahlen, die Scherströmungs- und Wandeffekte zusammenfassen und die i.d.R. geringer ist als im Modell von Saffman (1965). Takemura und Magnaudet (2003) beschreiben ein Scherliftkraft-Modell für niedrige bis moderate Reynoldszahlen bis etwa 100, dass wiederum eine höhere Auftriebskraft vorhersagt, als das Modell von Wang et al. Aufgrund des geringen Einflusses, der teilweise sehr rechenaufwändigen Modelle, und weil die Partikel fast nur im Bereich des Bodens tatsächlich in Wandnähe kommen, werden Wandeffekte hier vernachlässigt.
- **Irreguläre Wandkollisionen:** Bei Partikel-Wandkollisionen können die tatsächlichen Kollisionsergebnisse deutlich von den im Kapitel 3.2.4 beschriebenen abweichen, wenn die Partikel nicht-sphärisch sind (siehe z.B. Matsumoto und Saito (1970b), Quintero Arboleda et al. (2014), Sommerfeld (2001a) und Tsuji et al. (1991)), oder die Wandrauheit groß genug ist, um einen Effekt auf die Kollision zu haben (siehe z.B. Huber und Sommerfeld (1998), Kussin und Sommerfeld (2002) und Matsumoto und Saito (1970a)). In der vorliegenden Arbeit werden jedoch ausschließlich sphärische Partikel betrachtet und die Wandrauheit des Glas-Mischbehälters ist zu gering, um einen Einfluss auf die Kollisionen zu haben.

3.2.6 Auswertemethoden

3.2.6.1 Mischkennzahlen

Zur Beurteilung des Mischvorgangs sollen in dieser Arbeit Dauer und Mischqualität betrachtet werden. Im folgenden werden die Methoden zur Berechnung dieser Kennzahlen erläutert.

MISCHDAUER Die Mischdauer findet als das sogenannte „90%-Kriterium“ Beachtung, wie es zum Beispiel auch Kraume (1992) verwendet. Es ist definiert als die Zeit, die das Mischgut benötigt, um bis in 90% der Füllhöhe vorzudringen. Um zufällige Abweichungen zu verhindern, wurde diese Definition so ausgelegt, dass mindestens 0,1% der Partikel das 0,9-fache der Füllhöhe erreicht haben müssen

MISCHGÜTE UND PARTIKELKONZENTRATIONEN Die relative Mischgüte $M_{G,2,rel}$ wird nach Kraume (2006) berechnet. Diese Kennzahl wurde zum Beispiel auch schon von Cekinski et al. (2010) genutzt, um die Mischgüte in einem simulierten Rührbehälter zu charakterisieren. Es handelt sich dabei um die Standardabweichung der tatsächlichen Konzentration c_i in Kontrollvolumina (CV) von der Zielkonzentration c_{Ziel} , bezogen auf die Zielkonzentration, die dann noch über die letzte simulierte Oszillation zeitlich gemittelt wird:

$$M_{G,2,rel} = f_A \sum_{t=t_0}^{t_0+1/f_A} \left(\frac{\Delta t}{c_{Ziel}} \sqrt{\frac{1}{V_W} \sum_{i=0}^{N_{CV}} ((c_i - c_{Ziel})^2 \cdot V_i)} \right) \quad (3.81)$$

Da die Partikelanzahl in den Simulationen etwa ein bis zwei Größenordnungen kleiner ist als die Anzahl der Zellen des Rechengitters, wurden für die Auswertung würfelförmige Gebiete mit einer Kantenlänge von 50 mm zu Kontrollvolumina zusammengefasst. Eine Änderung der Kantenlänge hat die Ergebnisse nicht nennenswert verändert, sodass davon ausgegangen wird, dass diese Länge sinnvoll gewählt ist. Bei Tracersimulationen berechnet sich c_i aus dem Mittelwert der Tracerkonzentration über alle Zellen im Kontrollvolumen, gewichtet mit den Zellvolumina. Für Partikelsimulationen ergibt sich der Wert aus dem Quotienten aus Partikelanzahl und Volumen des Kontrollvolumens.

Ein höherer Wert von $M_{G,2}$ bedeutet eine schlechtere Durchmischung. Bei einer idealen Mischung müsste überall die gleiche Konzentration herrschen, womit die Abweichungen vom Mittelwert und damit die Standardabweichung 0 betragen würde.

Es gibt auch eine Mischgüte $M_{G,1}$. Dies ist die maximale Abweichung der Konzentration in den Kontrollvolumina von der Zielkonzentration. Üblicherweise wird diese aber nicht zur Beurteilung von Mischzuständen in der Verfahrenstechnik herangezogen.

Für höhenabhängige Konzentrationsprofile wurde der Behälter in zehn gleich hohe Abschnitte eingeteilt. In jedem der Abschnitte wird dann eine zeitlich über N Perioden und räumlich gemittelte Partikelkonzentration bestimmt:

$$\bar{c}(h) = \frac{f_A}{N} \sum_{t=t_0}^{t_0+N/f_A} \Delta t c(h, t) / V(h) \quad (3.82)$$

MISCHGÜTE AUS VORONOÏ-ZERLEGUNG Als weiteres Werkzeug zur Beurteilung wurden Voronoï-Diagramme genutzt: Ein Raum, der eine Menge an vorgegebenen Punkten enthält, wird so zerlegt, dass jedem dieser Punkte derjenige Teil des Raums zugeordnet wird, der ihm näher ist als allen anderen Punkten. Diese Methode ist benannt nach Georgi Voronoi, und wurde zum Beispiel bereits von Monchaux et al. (2010) oder Ernst et al. (2019) zur Identifikation von Partikel-Clustern in turbulenten Strömungen genutzt. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Voronoï-Zerlegung so angewendet, dass der einzuteilende Raum der Bereich der Flüssigkeit im Mischbehälter ist und die Partikel die Punkte in den einzelnen Volumina darstellen. Dem Autor ist keine Arbeit bekannt, in der so vorgegangen wird, um die Mischgüte zu beurteilen. Gerade bei relativ niedrigen Partikelkonzentrationen könnte diese Methode aber durchaus einen Vorteil gegenüber der Mischgüte $M_{G,2}$ haben, da es nicht notwendig ist, die Partikel zunächst größeren Kontrollvolumina zuzuweisen.

Der Kehrwert der Volumina kann als lokale Partikelkonzentration c_{Voro} interpretiert werden:

$$c_{Voro,i} = 1/V_{Voro,i} \quad (3.83)$$

Zur Beurteilung der Mischgüte wird die Standardabweichung dieser Kehrwerte der Volumina genutzt, allerdings die geometrische, da sich die einzelnen Volumina um mehrere Größenordnungen unterscheiden. Der geometrische Mittelwert der Konzentrationen wird berechnet zu

$$\bar{c}_{Voro,g} = \sqrt[N_p]{\prod_{i=1}^{N_p} c_{Voro,i}} \quad (3.84)$$

Daraus lässt sich die geometrische Standardabweichung bestimmen:

$$\sigma_{c,Voro,g} = \exp \left(\sqrt{\frac{1}{N_p} \cdot \sum_{i=1}^{N_p} \left(\ln \left(\frac{c_{Voro,i}}{\bar{c}_{Voro,g}} \right)^2 \right)} \right) \quad (3.85)$$

Zur Auswertung wurden hier nur der Zustand am Ende der letzten vollständig simulierten Oszillation genutzt. Wie schon bei der Mischgüte $M_{G,2}$ bedeutet auch hier ein höherer Wert eine schlechtere Durchmischung. Diese Methode ist natürlich nicht auf Tracersimulationen anwendbar, da hier keine Partikel als Basis für eine Zerlegung vorhanden sind.

3.2.6.2 Kräfteinfluss

Um den Einfluss der einzelnen Partikelkräfte $F_{p,i}$ herauszuarbeiten, werden deren Beträge für jedes Partikel in den betrachteten Zeitschritten mit der Widerstandskraft F_W normiert. Anschließend werden diese normierten Werte über alle N_p Partikel gemittelt und schließlich wird noch ein zeitlicher Mittelwert über mehrere Perioden gebildet:

$$\bar{F}_{p,rel,i} = \frac{f_A}{N_t} \sum_{t=t_0}^{t_0+N_t/f_A} \left(\frac{\Delta t}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \frac{F_{p,i}}{F_{W,i}} \right) \quad (3.86)$$

Um nur den quasi-stationären Zustand abzubilden, werden für diese Berechnungen nur die Werte der letzten beiden Oszillationen genutzt.

Für eine höhenabhängige Auswertung der Kräfte wird der Behälter zunächst in zehn gleich hohe horizontale Abschnitte eingeteilt. In jedem dieser Bereiche wird dann analog für jede Einzelkraft ein zeitlich und räumlich gemittelter Relativwert berechnet.

3.3 METHODE ZUR SIMULATION DER MISCHVORGÄNGE

In Anbetracht der Anzahl durchzuführender Simulationen von Mischvorgängen (insgesamt 108) war es notwendig, den Rechenaufwand zu minimieren. Aufgrund der Größe des Rechengitters und der transienten Natur der Strömung bewegte sich schon die Dauer der Simulation nur der kontinuierlichen Phase im Bereich von etwa einer Woche. Als Ansatz zur Reduktion der Rechendauer sollten einmal berechnete Felder wieder verwendet werden. Dazu wurden die Felder (Geschwindigkeit, Druck, turbulente kinetische Energie, etc.) der letzten vollständig

berechneten Oszillation zeitlich hinreichend gut aufgelöst ($\Delta t = 10$ ms) gespeichert. Für die Simulationen der Mischvorgänge wurden nacheinander diese Felder eingelesen und damit die Bewegungen der dispersen Phase berechnet. Nach jeder vollständigen Oszillation werden die Fluidfelder dann wieder vom Beginn der Oszillation eingelesen, da sich diese aufgrund der quasistationären Verhältnisse nicht ändern. So kann mit einer gespeicherten Fluidschwingungsperiode eine beliebig hohe Anzahl an Schwingungen für die disperse Phase berechnet werden, ohne den Rechen- und Speicheraufwand dafür zu stark zu steigern. Ein Nachteil dieser Methode ist, dass die Rückwirkung der dispersen auf die kontinuierliche Phase nicht berücksichtigt werden kann. Auf Grund der üblicherweise niedrigen Konzentrationen ist dies aber ohnehin nicht nötig gewesen.

EXPERIMENTELLE METHODE - LASER-DOPPLER-ANEMOMETRIE

Um die Simulationen zu validieren, wurden im Rahmen dieser Arbeit Messungen mit einem „Laser-Doppler-Anemometrie“-System (LDA) durchgeführt. Dessen Funktionsprinzip soll im Folgenden beschrieben werden.

Yeh und Cummins (1964) standen vor dem Problem, dass sie relativ kleine Geschwindigkeiten in der Größenordnung von etwa 0,1 mm/s in Flüssigkeiten messen wollten. Üblich dafür waren zu dieser Zeit Einfärbemethoden. Da die aus Diffusionsprozessen resultierenden Ausbreitungsgeschwindigkeiten nun in einem nicht mehr zu vernachlässigenden Verhältnis zu den zu messenden Geschwindigkeiten standen und diese überlagerten, entwickelten sie das LDA-Prinzip. Es entspricht dem eines Interferometers, bei dem ein Laserstrahl geteilt und einer der beiden Strahlen durch eine Strömung gelenkt wird, die lichtstreuende Partikel enthält. Anschließend wird die Frequenzverschiebung (der Doppler-Shift) zwischen dem Streulicht aus der Strömung und dem unveränderten Laserstrahl gemessen und daraus die Partikelgeschwindigkeit bestimmt.

Üblicherweise werden inzwischen jedoch andere Formen des LDA genutzt, ähnlich dem in Abb. 4.1 dargestellten Schema. Dabei wird ebenfalls ein Laser durch einen Strahlteiler in zwei Strahlen aufgespaltet, die dann aber innerhalb der zu messenden Strömung zum Schnitt gebracht werden, sodass ein Messvolumen entsteht (Abb. 4.1 unten links). Durchquert nun ein mit der Strömung treibendes Partikel dieses Messvolumen, kann von der Empfangsoptik ein Streulichtsignal detektiert werden. Der Empfänger kann sich dabei auf der gleichen Seite des Partikels befinden (back scatter), auf der gegenüberliegenden (forward scatter) oder seitlich in einem bestimmten Winkel versetzt (side scatter). Das zustande kommende Signal kann für sehr kleine Teilchen relativ einfach über das Interferenzstreifenmodell erklärt werden, das auch in Abb. 4.1 skizziert ist. In den sich kreuzenden Strahlen entstehen Interferenzmuster, deren Streifenabstand x_{str} nur von der Wellenlänge λ des einfallenden Lichts und des Schnittwinkels θ abhängt. Passiert nun ein Partikel dieses Interferenzmuster, so streut es entsprechend seiner Geschwindigkeit und

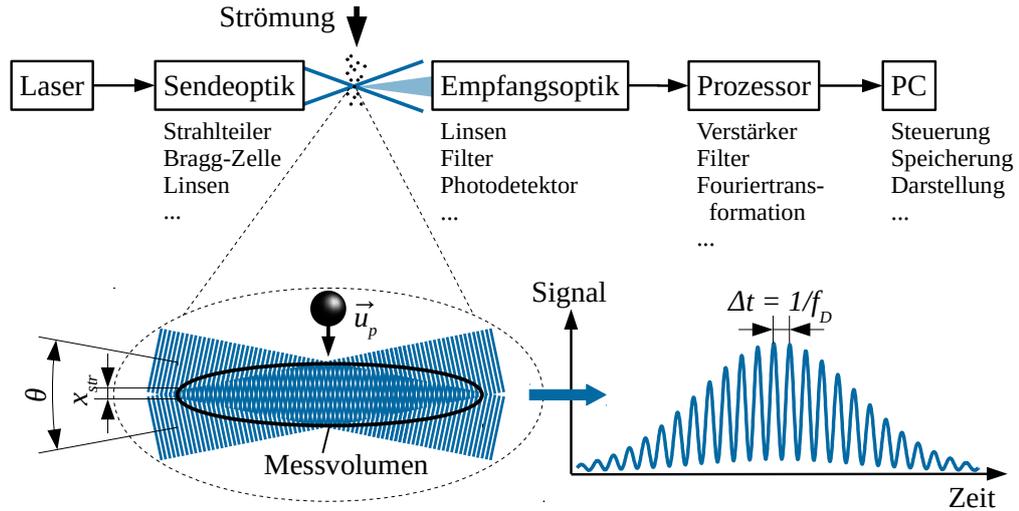


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung des LDA-Prinzips: Oben: Komponenten eines LDA-Systems; Unten links: Darstellung des Messvolumens als Interferenzmuster zweier sich schneidender Laserstrahlen und ein das Messvolumen passierendes Partikel; Unten rechts: Beispielhaftes Burst-Signal.

des Abstands x_{str} das Licht zum Empfänger. Zusätzlich wird das Signal vom Gauss'schen Intensitätsprofil der Laserstrahlen geprägt, sodass sich ein Burst-Signal ergibt (Abb. 4.1 unten rechts).

Für den Streifenabstand erhält man

$$x_{str} = \frac{\lambda_{LDA}}{2 \cdot \sin(\theta/2)}, \quad (4.1)$$

und zusammen mit der Relation für die Partikelgeschwindigkeit in der Strahlenebene senkrecht zur optischen Achse $f_D = u_{p,n}/x_{str}$ ergibt sich

$$u_{p,n} = \frac{f_D \cdot \lambda_{LDA}}{2 \cdot \sin(\theta/2)} \quad (4.2)$$

Bezüglich der Auswertung von LDA-Messungen gibt es eine Besonderheit: Anders als üblich, wird das Signal nicht kontinuierlich abgetastet, sondern es gibt ein Signal, sobald ein Partikel das Messvolumen passiert und das Streulicht am Photodetektor empfangen wird. Es handelt sich also um ein stochastisches Signal. Dies führt unter anderem zu einem Bias hin zu höheren Geschwindigkeiten. Zur Verdeutlichung: Es werde für eine gewisse Zeit in einem fixen Messvolumen mit konstanter Tracerpartikelkonzentration gemessen. Wird das Messvolumen eine Hälfte der

Zeit mit einer niedrigeren und die andere Hälfte der Zeit mit einer höheren Geschwindigkeit durchströmt, so haben mehr schnelle Tracerpartikel das Volumen passiert. Würde man nun den Mittelwert aller Partikelgeschwindigkeiten als mittlere Geschwindigkeit ansehen, ergäbe dies eine zu hohe Geschwindigkeit. Eine Möglichkeit, dies zu berücksichtigen, besteht in der in der vorliegenden Arbeit genutzten Ankunftszeitwichtung (siehe z.B. Nobach (1997)). Wie der Name bereits vermuten lässt, werden die einzelnen Partikelgeschwindigkeiten hier mit der Ankunftszeitdifferenz

$$w_i = t_i - t_{i-1} \quad (4.3)$$

gewichtet, sodass sich die mittlere gemessene Geschwindigkeitskomponente $\bar{u}_{p,n}$ wie folgt aus N gemessenen Einzelwerten $u_{p,n,i}$ ergibt:

$$\bar{u}_{p,n} = \frac{\sum_{i=1}^N u_{p,n,i} \cdot w_i}{\sum_{i=1}^N w_i} \quad (4.4)$$

Die Minimal- und Maximalwerte werden als 0,05- bzw 0,95-Quantil bestimmt, um eventuelle Ausreißer zu eliminieren:

$$u_{p,n,min/max} = Q_{0,05/0,95}(u_{p,n,i}) \quad (4.5)$$

Damit die Partikel auch tatsächlich der Strömung folgen ist es wichtig, dass ihre Stokeszahl ausreichend klein ist. Genauer wird üblicherweise gefordert, dass gilt $St_p < 0,1$ (siehe Gleichung 3.37). Um unerwünschte Effekte durch Auftrieb und Schwerkraft zu vermeiden, sollen Partikel mit etwa der Dichte von Wasser genutzt werden. Die Wahl fiel schließlich auf Polystyrol-Partikel mit einer Dichte von 1050 kg/m^3 und einem Durchmesser von $80 \text{ }\mu\text{m}$ (Dynoseeds® TS 80 der Firma Microbeads, Norwegen). Wie sich in den Simulationen später herausstellt, ergeben sich damit mittlere Stokeszahlen von etwa $0,01$. Es kann also davon ausgegangen werden, dass die Partikel die lokalen Strömungsverhältnisse gut wiedergeben.

VERBESSERUNG DER STRÖMUNG IN FPR-MISCHERN

Mit CFD-Simulationen wird in diesem Abschnitt die zu Beginn der Arbeiten vorhandene Ausgangsvariante des FPR-Mischers untersucht. Die Ergebnisse der numerischen Berechnung werden durch LDA-Messungen validiert und auf Grundlage der Ergebnisse werden Verbesserungen an der Geometrie des Mischers erarbeitet, die in Kapitel 6 und Kapitel 7 hinsichtlich ihrer Mischeigenschaften eingehender untersucht werden.

5.1 UNTERSUCHUNG DER AUSGANGSVARIANTE

Bei der Ausgangsvariante, die in den Abbildungen 5.1 a) und b) skizziert ist, handelt es sich um einen rotationssymmetrischen Aufbau, weshalb für diese erste Variante sowohl Messungen als auch Simulationen in „2D“, also nur in einer Ebene durchgeführt werden. In einen Mischbehälter mit Klöpperboden und dem Durchmesser d_B ist von oben ein Tauchrohr mit Durchmesser d_R eingelassen, das in der Höhe h_R über dem Behälterboden endet. Das obere Ende des Tauchrohrs ist mit dem Antrieb verbunden, der das Gaspolster innerhalb des Tauchrohrs mit harmonisch oszillierendem Druck der Frequenz f_A beaufschlagt. Das untere Ende des Tauchrohrs ragt in die Flüssigkeit (hier: Wasser) hinein, mit der der Behälter bis zur Füllhöhe h_W gefüllt ist. Die Geometrie- und Betriebsparameter sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst, die Stoffeigenschaften in Tabelle 5.2.

5.1.1 LDA

Der Messbereich im Behälter ist durch verschiedene Umstände eingeschränkt: zum einen im unteren Bereich durch Lichtbrechungseffekte am gekrümmten Klöpperboden und zum anderen im oberen Bereich durch Lichtbrechung an der freien Flüssigkeitsoberfläche, wie z.B. durch Welligkeit und Blasenbildung. Zur Verminderung von optischen Effekten durch die gekrümmte Behälterwand wurde zusätzlich ein quaderförmiges, den unteren Teil des Mischbehälters umfassendes, wassergefülltes Bassin angefertigt (siehe Abbildung 5.2). Da es auch im Bereich

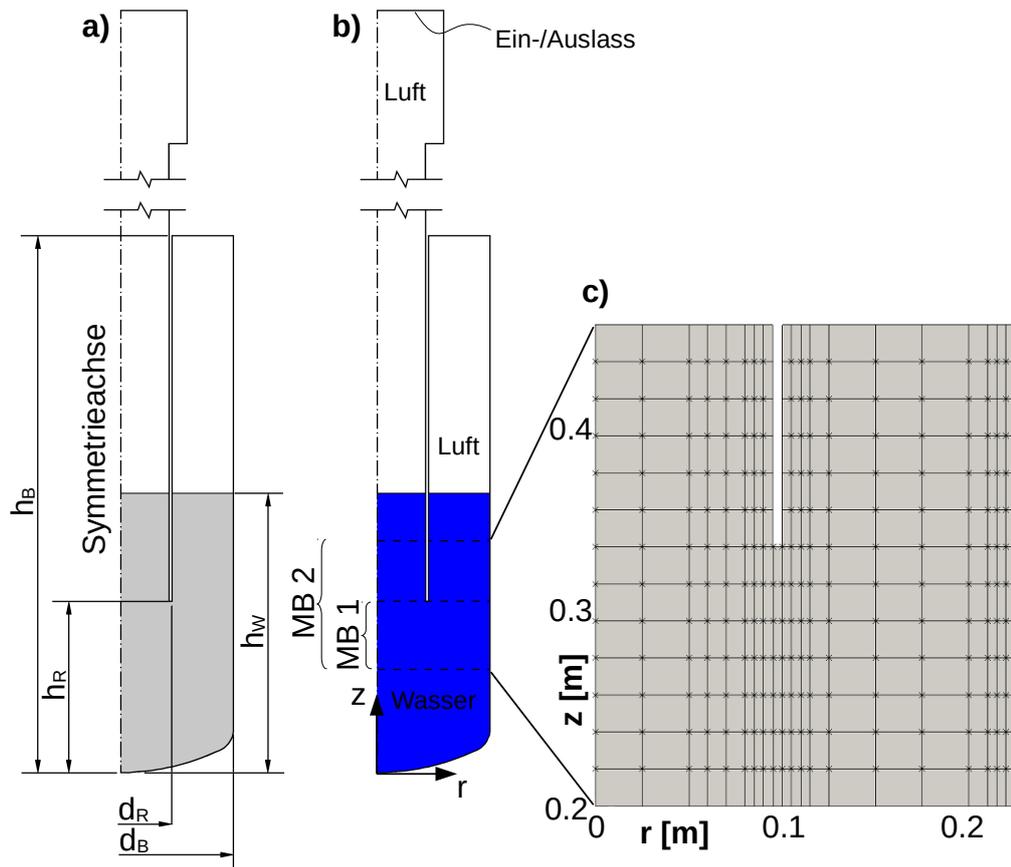


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung der Ausgangsvariante des FPR-Mischers; a) Bemaßung in der Schnittansicht; b) Darstellung der Messbereiche MB 1 und MB 2 für die LDA-Messungen, der Bereiche der beiden fluiden Phasen Wasser (blau) und Luft, und der Koordinaten r und z ; c) Messgitter für die LDA-Messungen.

| PARAMETER | BETRAG |
|---|--------|
| Behälterdurchmesser d_B [m] | 0,45 |
| Rohrdurchmesser d_R [m] | 0,2 |
| Behälterhöhe h_B [m] | 1,1 |
| Rohrhöhe üb. Boden h_R [m] | 0,335 |
| Füllhöhe h_W [m] | 0,55 |
| Flüssigkeitsvolumen V_W [m ³] | 0,08 |
| Antriebsfrequenz f_A [1/s] | 2,0 |
| Max. Antriebsvolumenstrom $\dot{V}_{A,max}$ [m ³ /s] | 0,012 |

Tabelle 5.1: Geometrie- und Betriebsparameter der Ausgangsvariante des FPR-Mischers

| | FLÜSSIGKEIT (WASSER) | GAS (LUFT) |
|---|-------------------------|----------------------|
| Dichte ρ_f [kg/m ³] | 1 000 | 1,3 |
| Kinematische Viskosität ν_f [m ² /s] | $1,0 \cdot 10^{-6}$ | $13,0 \cdot 10^{-6}$ |
| Kompressibilität ψ_f [s ² /m ²] | $4,7 \cdot 10^{-10}$ | $9,9 \cdot 10^{-6}$ |
| Oberflächenspannung σ [kg/s ²] | 0,073 | |

Tabelle 5.2: Stoffeigenschaften der beiden Fluidphasen (Wasser und Luft).

des Tauchrohrs zu erheblicher Lichtbrechung an der stark gekrümmten Wandung kommt, ist es mit den vorhandenen Mitteln nicht möglich gewesen, ein definiertes Messvolumen innerhalb des Tauchrohres zu erzeugen, wenn die Strahlebene horizontal und die Halbachse außerhalb der Symmetrieebene liegt. Somit konnten dort keine Profile der radialen Geschwindigkeitskomponente ermittelt werden. Die Messbereiche und das Netz der Messpunkte sind in den [Abbildungen 5.1 b\) und c\)](#) dargestellt. Bereich 1 ist der Messbereich für die radialen Komponenten mit 156 Messpunkten, Bereich 2 der Messbereich für die vertikalen Komponenten mit 208 Messpunkten. Für jeden dieser Messpunkte werden 3 000 Messwerte aufgenommen. Das LDA wurde im Backscatter-Modus betrieben, d.h. der Transmitter wird gleichzeitig als Receiver genutzt, siehe [Abbildung 5.3](#).



Abbildung 5.2: Optische Effekte an den gekrümmten Wänden des FPR-Mischers; links: stark verzerrtes Bild der hinter dem Mischbehälter liegenden Gegenstände; rechts: Verbesserung durch quaderförmiges, mit Wasser gefülltes Bassin.

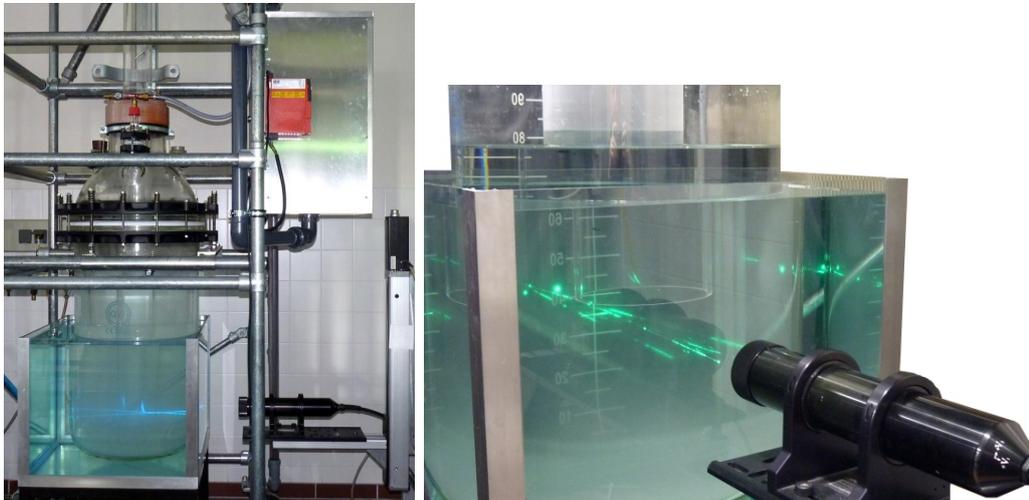


Abbildung 5.3: LDA-Setup am FPR-Mischer mit Bassin; links: Seitansicht von Mischbehälter mit Zentralrohr, Antrieb und Bassin und LDA; rechts: Detailansicht des LDA-Transmitters.

5.1.2 CFD

Für die Simulation wird der Vorgang als instationäre, kompressible Zweiphasenströmung modelliert, wobei die zwei Phasen in diesem Fall getrennt voneinander vorliegen und nicht mischbar sind. Instationarität ergibt sich aus der periodisch schwingenden Bewegung. Zwei Phasen und Kompressibilität sind notwendig, damit die Federwirkung des Gaspolders und die Bewegungen der freien Oberfläche korrekt wiedergegeben werden können. Um herauszufinden, wie die Turbulenz im Mischer am besten abgebildet werden kann, werden drei verschiedene Rechnungen durchgeführt: eine laminare Rechnung, eine Rechnung mit $k-\varepsilon$ -Modell, und eine mit $k-\omega$ -SST-Modell. Abb. 5.1 entspricht prinzipiell der für die Simulation genutzten Geometrie. Um den Rechenaufwand niedrig zu halten, wird die Rotationssymmetrie der Geometrie ausgenutzt. Das Simulationsgebiet besteht deshalb aus einem keilförmigen Segment mit der z -Achse als Rotationsachse und der r -Achse in radialer Richtung. Mit dem OpenFOAM-Tool "blockMesh" wurden vier verschiedene fein aufgelöste Rechengitter erstellt, um die Netzunabhängigkeit zu untersuchen (ca. 16 000, 93 000, 133 000, und 190 000 Zellen). Vor allem der untere Bereich, in dem sich die flüssige Phase befindet, ist feiner aufgelöst. In diesem Bereich ist das Netz am Ende des Rohres wiederum am feinsten, da dort die größten Geschwindigkeiten und Gradienten auftreten. Wie bei 2D-Simulationen mit OpenFOAM üblich, besteht das Netz in z -Richtung (also hier in der Umfangsrichtung) nur aus einem Element. An der Vorder- und Rückseite des Berechnungsgebietes wird als Randbedingung für alle Größen die Wedge-Randbedingung genutzt, die in OpenFOAM die Vorder- und Rückseite von axialsymmetrischen Modellen definiert. Bei der Berechnung werden nur die Komponenten in radialer und vertikaler Richtung berücksichtigt, die tangentialen jedoch ignoriert. An der Rotationsachse wird für alle Größen Symmetrie vorgegeben. Für die Geschwindigkeit wird an allen Wänden eine Haftbedingung gesetzt, außer am oberen Ende des Rohres. Dort wird entsprechend des Antriebs eine periodische Geschwindigkeit vorgegeben:

$$\mathbf{u}_f = \sin(2\pi f_A t) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ u_{f,max} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

Die maximale Geschwindigkeit $u_{f,max}$ resultiert aus der Antriebsfrequenz f_A und der Geometrie des Antriebs. Da das System abgesehen

von diesem Ein- bzw. Auslass abgeschlossen ist, muss es neben der oben erwähnten Federwirkung auch aus diesem Grund mit einem Solver für kompressible Medien behandelt werden. An den Wänden werden für k , ε , ω_f , und ν_t die in OpenFOAM vorhandenen Wandfunktionen genutzt, für den Druck p und den Volumenanteil α werden „zeroGradient“-Randbedingungen vorgegeben, d.h. der Gradient in Wandnormalrichtung wird zu 0 gesetzt. Die Simulation wird wie bereits in [Abschnitt 3.1.1](#) beschrieben mit einem VoF-Solver durchgeführt, namentlich mit dem OpenFOAM-Solver „compressibleInterFoam“ (Version 2.3.1). Insgesamt werden 40 Schwingungen simuliert und die Ergebnisse in Zeitschritten von 10 ms gespeichert. Die Euler-Zeitschritte der Berechnung werden automatisch so angepasst, dass die Courant-Zahl nicht über 0,2 steigt. Dadurch ergeben sich Zeitschritte in der Größenordnung von etwa 0,1 ms.

5.1.3 Ergebnisse und Diskussion

[Abbildung 5.4](#) zeigt eine Gegenüberstellung der Ergebnisse für die gemittelten Geschwindigkeitskomponenten in radialer und axialer Richtung, $\bar{u}_{f,r}$ und $\bar{u}_{f,z}$, der LDA-Messung und der Simulationen mit den drei verschiedenen Turbulenzmodellen. Während die laminare Rechnung vor allem für die radiale Komponente deutliche Unterschiede zu den Messdaten aufweist, spiegeln sowohl das k - ε - als auch das k - ω -SST-Modell die Messungen qualitativ recht gut wider. Da beim quantitativen Vergleich der auftretenden Minimal- und Maximalwerte das k - ω -SST-Modell besser abschneidet, wird dieses auch für die weiteren Untersuchungen genutzt.

Mit dem k - ω -SST-Modell wurde im Anschluss eine Netzunabhängigkeitsstudie durchgeführt. In [Abbildung 5.5](#) sind in radialer Richtung die Ergebnisse zusammengefasst. Dargestellt sind die maximalen im Rechengebiet auftretenden, zeitlich gemittelten Geschwindigkeiten in radialer Richtung über der Anzahl der Zellen im Rechengitter. Es ergeben sich zwischen den Netzen mit 93 000 und 133 000 Zellen Änderungen der Extremwerte der betrachteten Maximal-, Minimal-, und Durchschnittsgeschwindigkeiten von 0,021 bis 9,0 %. Zu einem feineren Netz mit 190 000 Zellen betragen die Änderungen nur noch 0,013 bis 3,1 %. Die Simulation mit 16 000 Zellen ist deutlich zu grob aufgelöst. Es wurde schließlich das 133 000-Zellen-Netz gewählt.

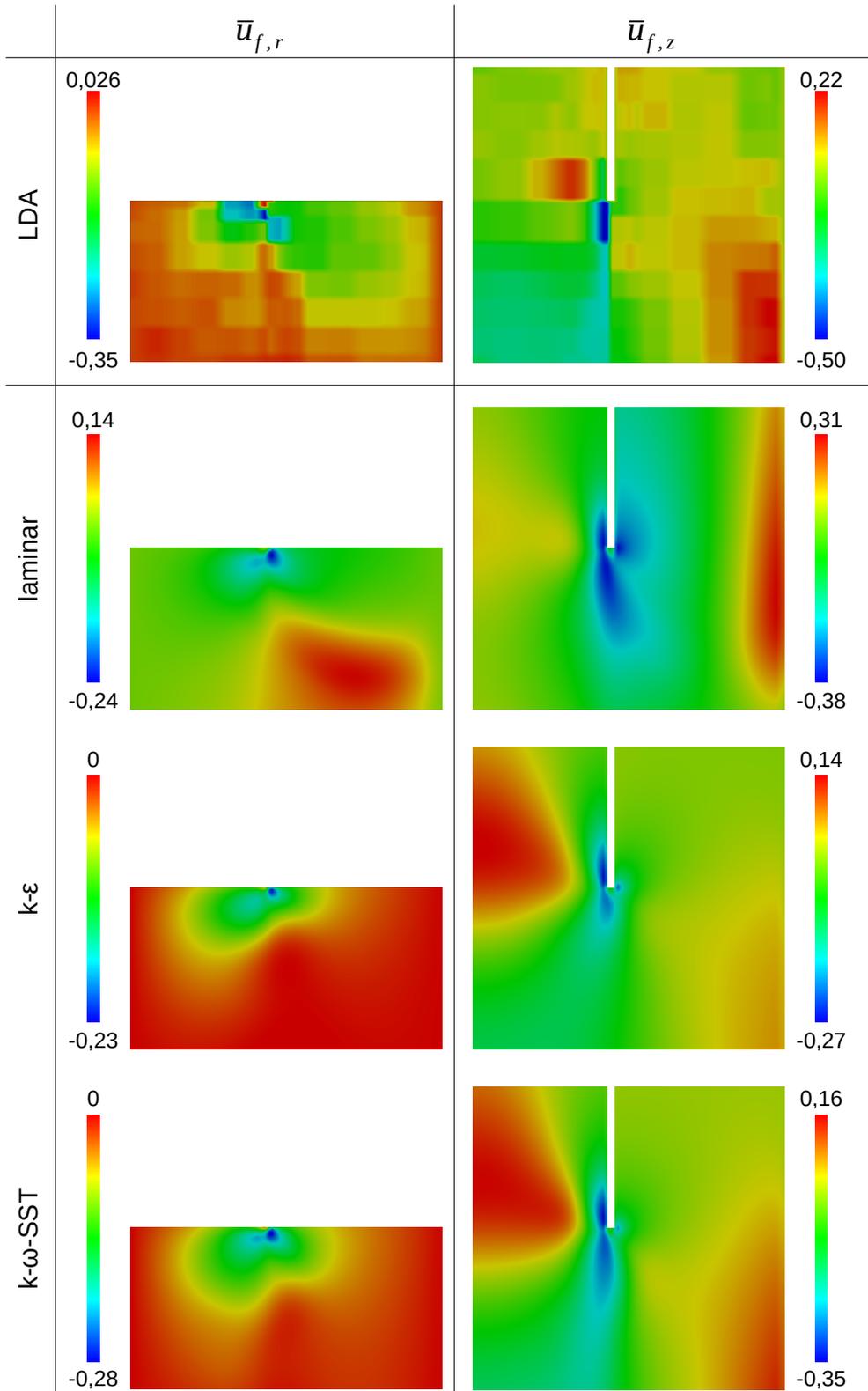


Abbildung 5.4: Vergleich der Ergebnisse für die gemittelten Geschwindigkeitskomponenten zwischen LDA-Messung und den untersuchten Turbulenzmodellen; die Farbskalen sind an die jeweiligen Minimal- und Maximalwerte angepasst und zeigen die Geschwindigkeit in m/s für die in [Abbildung 5.1](#) beschriebenen Messbereiche.

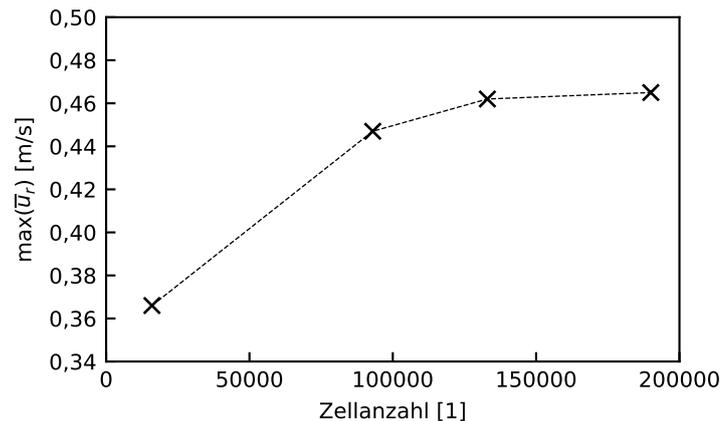


Abbildung 5.5: Beispielhafte Ergebnisse der Netzunabhängigkeitsuntersuchung für $\max(\bar{u}_r)$ (höchste im Rechengebiet auftretende zeitlich gemittelte radiale Geschwindigkeitskomponente) in Abhängigkeit von der Zellanzahl.

In [Abbildung 5.6](#) sind die Ergebnisse der Messungen und der Simulationen mit 133 000-Zellen-Gitter und $k-\omega$ -SST-Modell gegenübergestellt. Unterschiede zu [Abbildung 5.4](#) ergeben sich aus dem Umstand, dass der Turbulenzmodell-Vergleich mit dem 93 000-Zellen-Netz durchgeführt wurde. Sowohl qualitativ als auch quantitativ stimmen gemessene und numerisch ermittelte Werte sehr gut überein. Es ist also davon auszugehen, dass die hier genutzten Rechengitterparameter hinreichend fein für die Simulation der Strömung im Mischbehälter sind.

Am Vektor- und Konturplot der zeitlich gemittelten Geschwindigkeitsmagnitude in [Abbildung 5.7](#) sind die für diese Ausgangsvariante nachteiligen Eigenschaften bezüglich des Mischverhaltens gut auszumachen: Es treten zum Einen drei voneinander getrennte, toroidale Wirbel auf - einer im unteren Bereich und zwei weitere oberhalb des Rohrendes, inner- und außerhalb des Rohres. Es ist davon auszugehen, dass eine Durchmischung zwischen diesen voneinander getrennten Strukturen nur sehr langsam vonstatten geht. Zusätzlich treten insbesondere im Bereich oberhalb des Rohrendes sehr niedrige Durchschnittsgeschwindigkeiten auf. Auch das lässt darauf schließen, dass eine Durchmischung in diesem Gebiet nur sehr langsam geschieht, so sie denn überhaupt stattfindet. Für schwerere zu dispergierende Stoffe kann sogar davon ausgegangen werden, dass sich diese kaum vom Boden weg bewegen, da auch dort nur geringe Geschwindigkeiten vorherrschen.

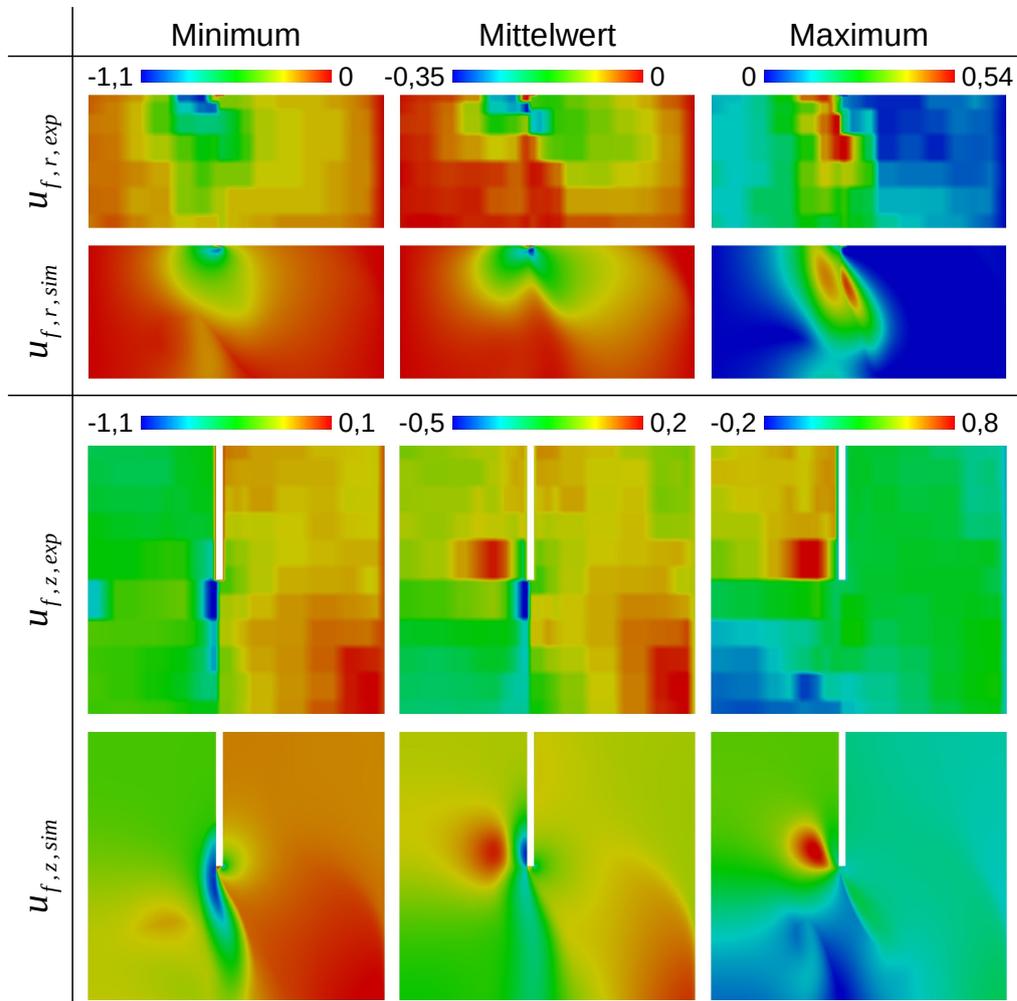


Abbildung 5.6: Gegenüberstellung der experimentellen (Subskript „exp“) und numerischen (Subskript „sim“) Ergebnisse der Ausgangsvariante des FPR-Mischers; oben radiale, unten axiale Geschwindigkeitskomponente für die in [Abbildung 5.1](#) beschriebenen Messbereiche; v.l.n.r. Minimal-, Mittel-, und Maximalwerte in m/s.

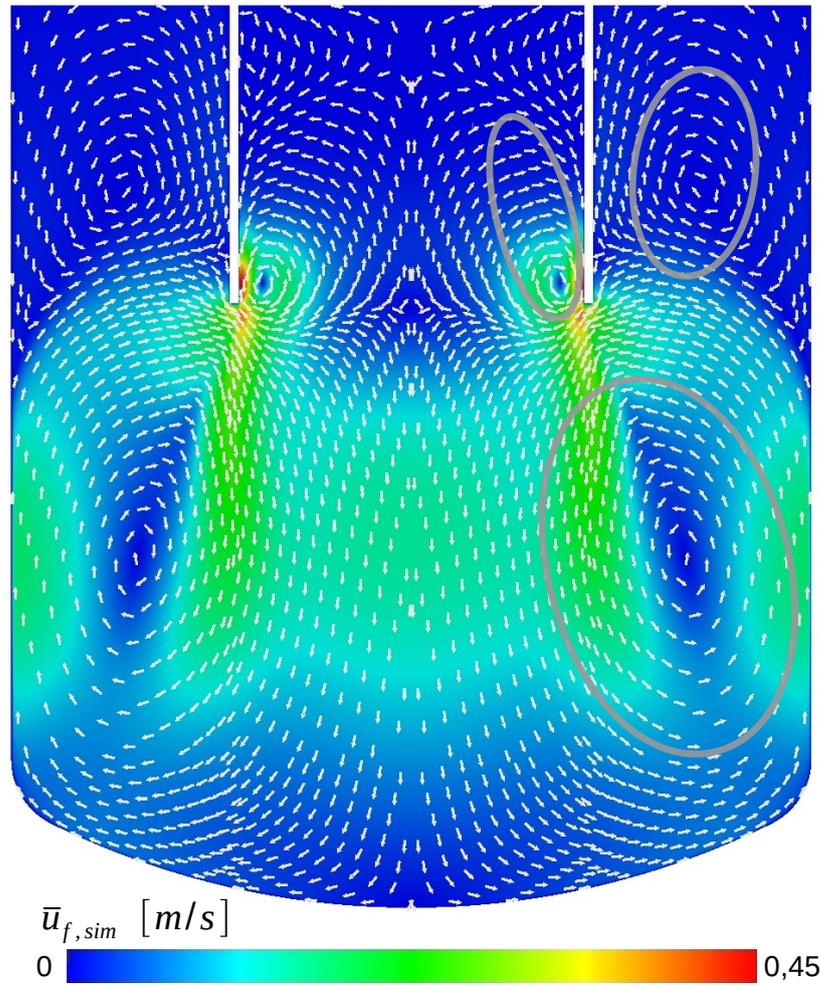


Abbildung 5.7: Kontur- und Vektorplot der zeitlich gemittelten Geschwindigkeitsmagnitude im unteren Teil des Mischbehälters; der Plot wurde an der Symmetrieachse gespiegelt.

5.2 VERBESSERTE VARIANTE

5.2.1 Geometrie und Betriebsparameter der verbesserten Variante

Die oben aufgezählten nachteiligen Eigenschaften der Ausgangsvariante sollen im Folgenden durch verschiedene Maßnahmen in einer verbesserten Varianten vermieden werden, die in [Abbildung 5.8](#) dargestellt ist. Um die Geschwindigkeiten am Boden zu erhöhen, wird das Rohr sowohl im Durchmesser verringert, als auch weiter in Richtung Boden bzw. in diesem Fall direkt auf dem Boden positioniert. Zusätzlich wird das Rohrende umgestaltet: In dieser ersten verbesserten Variante befindet sich am Rohrende eine Art Steg über 135° des Umfangs (im folgenden 135° -Steg genannt, [Abbildung 5.8c](#)). Durch diese Umgestaltungen sollen Strömungen induziert werden, die möglichst den gesamten Behälter erfassen.

In [Abbildung 5.8a](#)) sind die Abmessungen des Mischbehälters mit 135° -Steg-Rohrende zu sehen, die zugehörigen Maße finden sich in [Tabelle 5.3](#).

| PARAMETER | BETRAG |
|---|---------------------|
| Behälterdurchmesser d_B [m] | 0,45 |
| Rohrdurchmesser d_R [m] | 0,1 |
| Behälterhöhe d_h [m] | 1,1 |
| Rohrhöhe über Boden h_R [m] | 0/0,02 |
| Höhe Ausschnitt h_A [m] | 0,04 |
| Füllhöhe h_W [m] | 0,7 |
| Flüssigkeitsvolumen V_W [m ³] | 0,1 |
| Antriebsfrequenz f_A [1/s] | 1,2, 1,5, 2,0 |
| Max. Antriebsvolumenstrom $\dot{V}_{A,max}$ [m ³ /s] | 0,0071/0,0089/0,012 |

Tabelle 5.3: Geometrie- und Betriebsparameter der verbesserten [FPR](#)-Mischervarianten.

Des weiteren wurden zwei Betriebsparameter geändert, namentlich die Füllhöhe, die von 0,55 m auf 0,7 m erhöht wurde, und die Antriebsfrequenz, die von 2 Hz auf 1,2 Hz reduziert wurde.

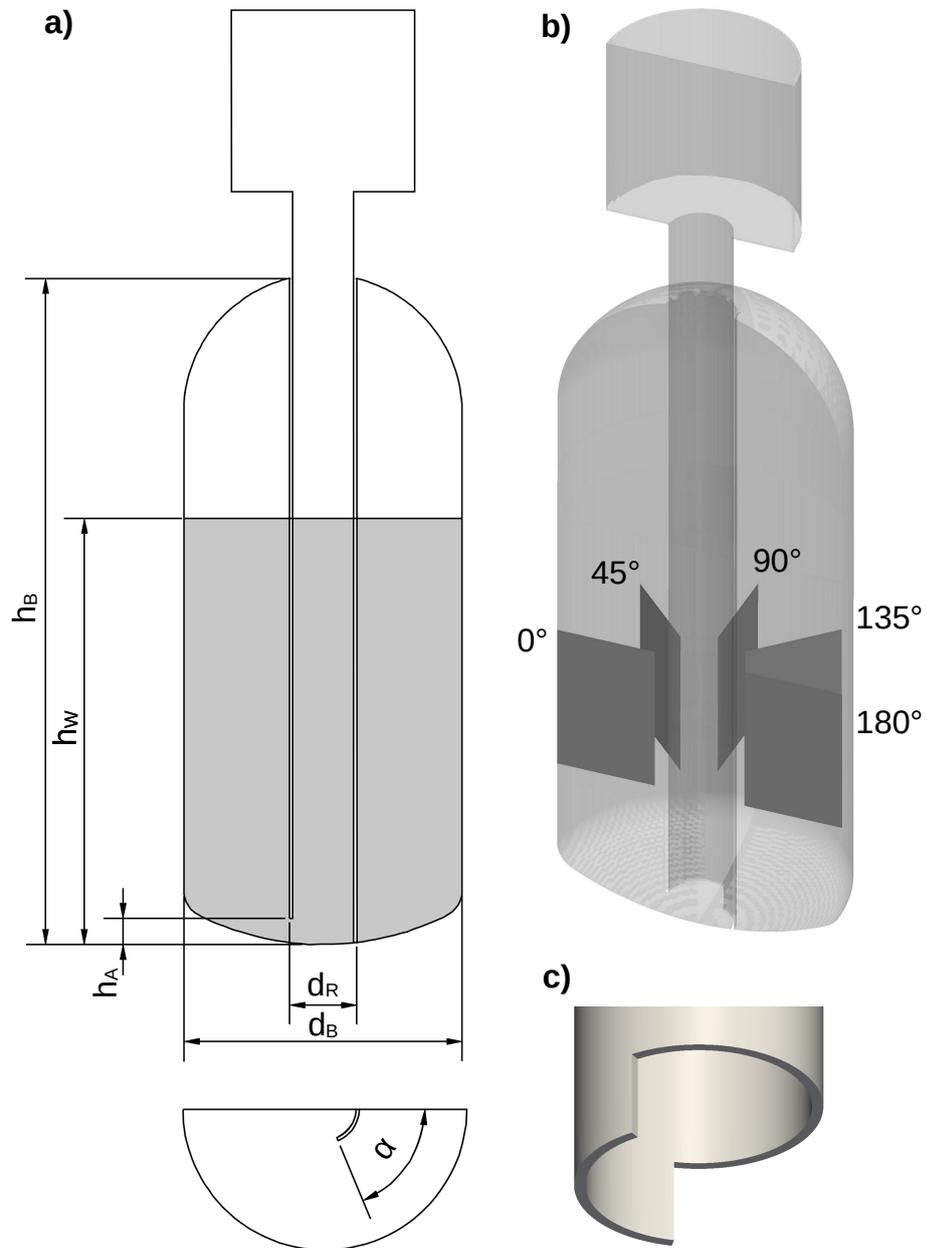


Abbildung 5.8: Geometrie der verbesserten Variante; a) Schnittansichts-Zeichnung mit Maßangaben; b) Lage und Größe der Messebenen im Halbschnitt mit der Symmetrieebene als Schnittebene; c) Illustration des moifizierten Rohrendes mit „135°-Steg“.

5.2.2 LDA

Das LDA-Setup entspricht im Wesentlichen dem in [Abschnitt 5.1.1](#) beschriebenen Setup für die Ausgangsvariante. Eine Änderung ergab sich aus den Modifikationen an Geometrie und Füllhöhe: Messungen funktionierten nur außerhalb des Zentralrohres. In diesem äußeren Bereich konnte der Messbereich allerdings nach oben erweitert werden, da die Füllhöhe jetzt etwas größer ist. Eine weitere Änderung ergibt sich aus der nicht mehr gegebenen Rotationssymmetrie: Statt in einer wurde nun in fünf senkrechten Ebenen gemessen, die zueinander um jeweils 45° versetzt sind. In [Abbildung 5.8b](#)) sind diese Ebenen dargestellt. Sie decken eine Hälfte des Mischers ab, es wird also die Symmetrieebene in der Mitte genutzt, in denen sich die Ebenen „ 0° “ und „ 180° “ befinden. In jeder Ebene wurden 156 Messpunkte erfasst und aufgrund der geänderten Strömungssituation wurden Geschwindigkeitskomponenten in den drei Raumrichtungen gemessen, allerdings nicht gleichzeitig sondern sukzessive. Die Auswertung erfolgte analog zur Ausgangsvariante, nur für fünf Ebenen und drei Geschwindigkeitskomponenten.

5.2.3 CFD

Auch das CFD-Setup musste auf Grund der oben beschriebenen Änderungen angepasst werden. Die augenfälligste Änderung ergab sich hinsichtlich des Rechengitters aufgrund der geänderten Symmetrieverhältnisse. Wie schon beim LDA-Setup wird auch hier die Spiegelsymmetrie genutzt, statt wie vorher die Rotationssymmetrie. Dies bedeutet, dass nun eine 3D-Simulation mit deutlich mehr Rechengitterzellen durchgeführt wird, was letztendlich auf eine drastische Erhöhung der Rechendauer hinausläuft. In [Abbildung 5.9](#) ist das für den 135° -Steg am Boden genutzte Rechengitter dargestellt. Die Zellgrößen entsprechen in etwa denen der Simulation zur Ausgangsvariante. Auch hier ist der Bereich um das Rohrende feiner aufgelöst, da dort mit stärkeren Geschwindigkeitsgradienten, höherer Turbulenz und letztlich kleinskaligeren Phänomenen zu rechnen ist.

Die Randbedingungen entsprechen ebenfalls weitestgehend den oben genutzten. Statt der „wedge“-Randbedingung wird nun die r-z-Ebene als Symmetrieebene definiert und die Geschwindigkeit am oberen Ende wurde entsprechend der Betriebsparameter angepasst. Es wurden 20 s simuliert (entsprechend 24 Oszillationen), zur Auswertung wurden

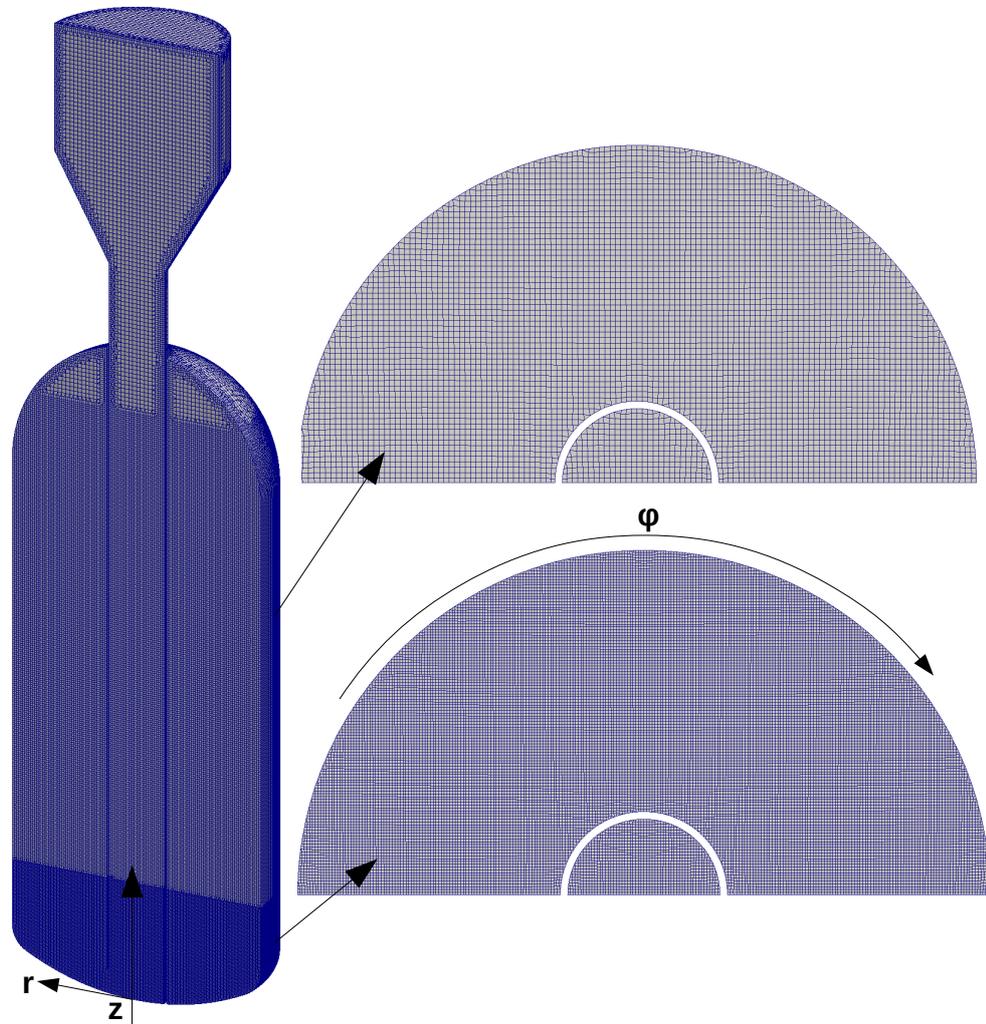


Abbildung 5.9: Rechengitter mit auf dem Boden aufsitzendem 135° -Steg-Rohrende; links: gesamtes Modell mit Definition des Ursprungs und der r - und z -Koordinate; rechts: Schnittansichten parallel zur r - ϕ -Ebene im fein aufgelösten unteren Bereich und im etwas gröber aufgelösten oberen Bereich.

nur die letzten zehn vollen Schwingungen herangezogen. Zu Beginn der Auswertzeit war ein quasistationärer Zustand erreicht, d.h. die Strömung zum Zeitpunkt t entspricht der Strömung zum Zeitpunkt $t + 1/f_A$. Für die Auswertung wurde analog zur Auswertung der Ausgangsvariante vorgegangen. Nur mit den Unterschieden, dass die Komponenten in drei Raumrichtungen in fünf verschiedenen Ebenen vorliegen und diese zur Vergleichbarkeit mit den Messungen von einem kartesischen in ein zylindrisches Koordinatensystem umgerechnet wurden.

5.2.4 Ergebnisse und Diskussion

In den Abbildungen 5.10, 5.11, und 5.12 sind die Ergebnisse für die axialen, radialen, und tangentialen Geschwindigkeiten am 135° -Steg mit dem Zentralrohr am Boden als Konturplots in den fünf Messebenen aus Abbildung 5.8 dargestellt. Wie schon bei den Ergebnissen der Ausgangsvariante (Abschnitt 5.1.3) sind auch hier jeweils zeitliche Maximal-, Durchschnitts-, und Minimalwerte ermittelt worden.

In einigen Bereichen der Messebenen kam es wahrscheinlich zu Störungen der Laserstrahlen des LDA durch die stark gekrümmte Behälteroberfläche, sodass in diesen Bereichen leider keine Messergebnisse vorliegen. Dies trat ausschließlich bei den Messungen der radialen und tangentialen Geschwindigkeiten auf, was sich dadurch erklären lässt, dass bei der Messung der axialen Geschwindigkeiten beide Laserstrahlen senkrecht auf die Behälterwand treffen, bei den anderen beiden Komponenten nicht. Die entsprechenden Bereiche sind in den Darstellungen nicht berücksichtigt.

Insgesamt ist auch hier eine gute Übereinstimmung von Messung und Simulation zu konstatieren. Abweichungen treten vor allem in den Messungen der tangentialen Geschwindigkeiten in der Symmetrieebene, d.h. bei 0° und 180° , auf. Doch selbst hier stimmen die mittleren Geschwindigkeiten in etwa überein und betragen – wie es an einer Symmetrieebene zu erwarten wäre – ca. 0 m/s. Die Beträge der Minimal- und Maximalwerte sind in den Messungen höher, da wahrscheinlich vor allem auf Grund der Turbulenz natürlich auch tangentiale Geschwindigkeiten auftreten. Dennoch ist, wie erwähnt, insgesamt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Experimenten und Simulation zu beobachten und das erzeugte Rechengitter scheint zufriedenstellende Resultate zu ermöglichen.

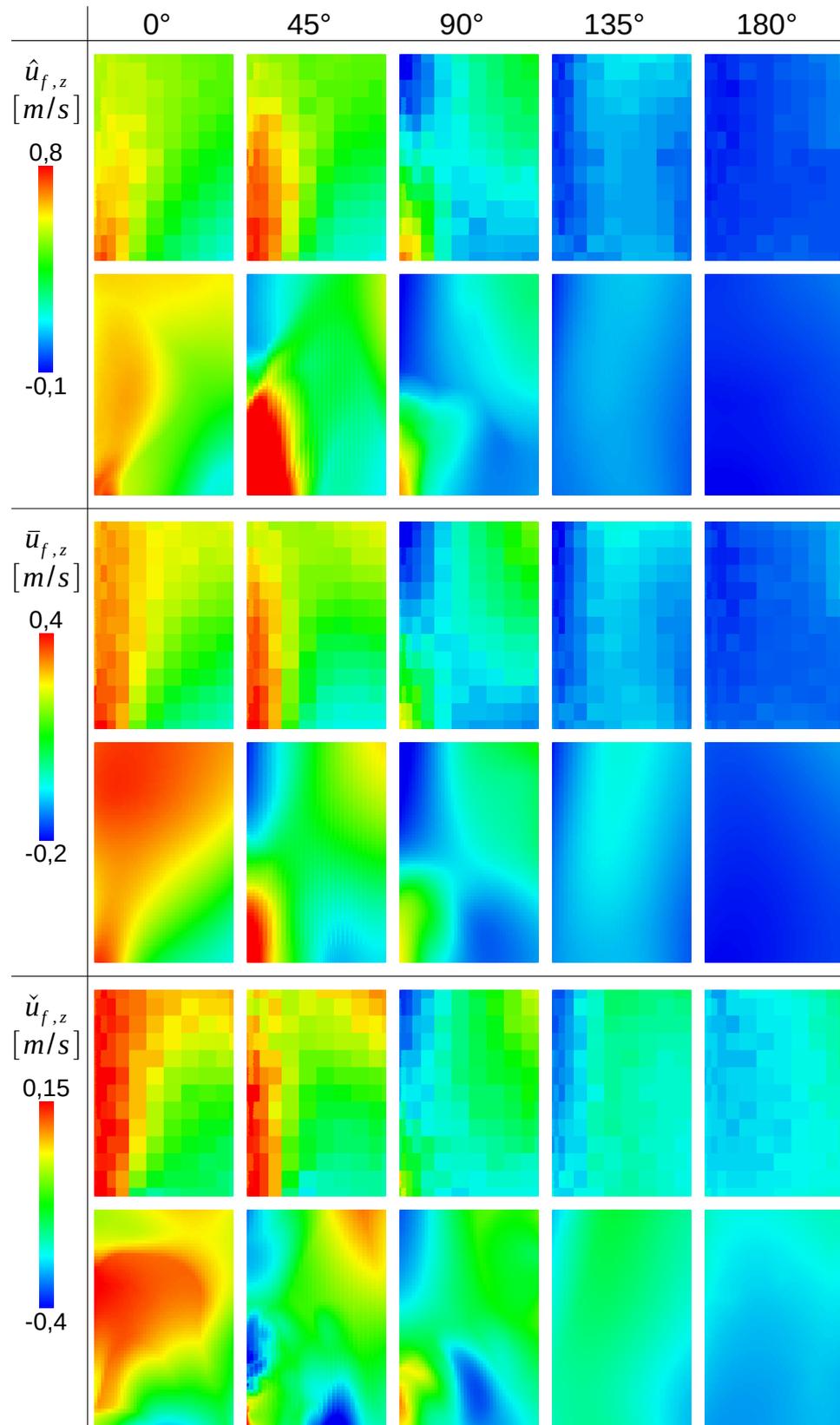


Abbildung 5.10: Vergleich der experimentellen und numerischen Ergebnisse der axialen Geschwindigkeiten am 135°-Steg am Boden; von oben nach unten Maximal-, Durchschnitts-, und Minimalgeschwindigkeiten mit jeweils oben LDA- und darunter CFD-Ergebnissen; v.l.n.r. in den in [Abbildung 5.8](#) definierten Ebenen.

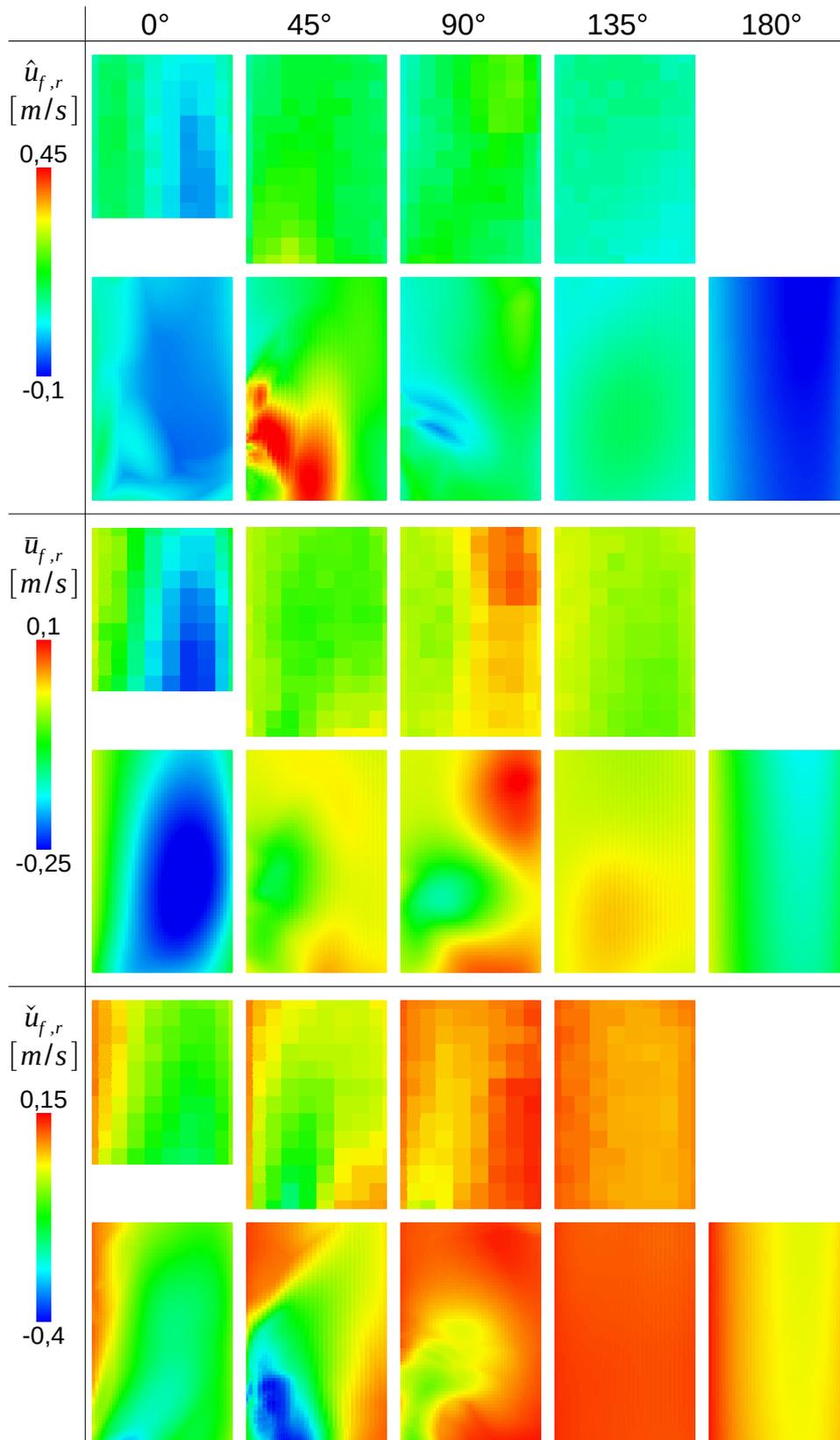


Abbildung 5.11: Vergleich der experimentellen und numerischen Ergebnisse der radialen Geschwindigkeiten am 135°-Steg am Boden; von oben nach unten Maximal-, Durchschnitts-, und Minimalgeschwindigkeiten mit jeweils oben LDA- und darunter CFD-Ergebnissen; v.l.n.r. in den in [Abbildung 5.8](#) definierten Ebenen.

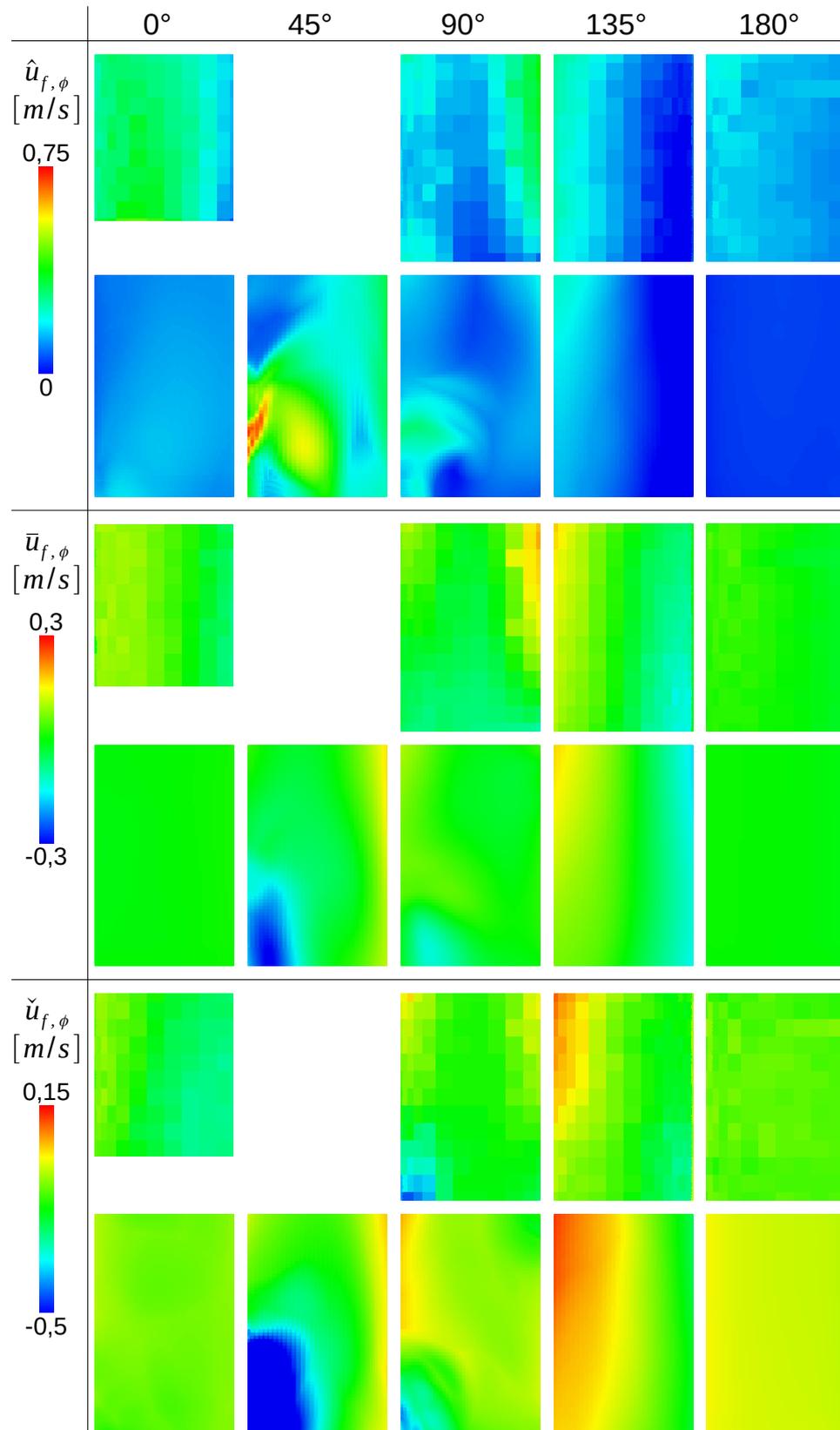


Abbildung 5.12: Vergleich der experimentellen und numerischen Ergebnisse der tangentialen Geschwindigkeiten am 135°-Steg am Boden; von oben nach unten Maximal-, Durchschnitts-, und Minimalgeschwindigkeiten mit jeweils oben LDA- und darunter CFD-Ergebnissen; v.l.n.r. in den in [Abbildung 5.8](#) definierten Ebenen.

Nachdem nun sowohl für die Ausgangsvariante als auch für die modifizierte Variante die Aussagekraft der Strömungssimulationen nachgewiesen ist, sind in [Abbildung 5.13](#) zeitlich gemittelte Werte für die Geschwindigkeitsamplitude und die turbulente kinetische Energie in den beiden Varianten dargestellt, um sie miteinander vergleichen zu können. Der Rechenbereich der Ausgangsvariante wurde hier an der Rotationsachse gespiegelt, um für beide Varianten ähnliche Darstellungen zu erreichen. Für die modifizierte Variante ist die Symmetrieebene als vertikaler Schnitt im Bereich der Flüssigkeit dargestellt, und zusätzlich sind fünf horizontale Schnitte zu sehen.

Zunächst fällt ins Auge, dass bei der neuen Variante das Geschwindigkeitsniveau und die Extremwerte deutlich höher liegen, insbesondere im Rohr, an dessen unterem Ende und an Behälterwänden, die dem Ausschnitt am Rohrende gegenüberliegen. Des Weiteren sind nun alle Bereiche des Behälters in den dargestellten Ebenen von der Strömung erfasst, wenn auch unterschiedlich stark, und es sind keine voneinander isolierten Wirbel mehr auszumachen. Die Bereiche mit niedrigen Geschwindigkeiten am Behälterboden konnten ebenfalls reduziert werden. Einzig im Bereich hinter dem Steg des Rohres sind die Geschwindigkeiten noch recht niedrig. Insgesamt sprechen die Ergebnisse für eine deutlich verbesserte Strömung im Behälter, vor allem da in der neuen Variante die Füllhöhe deutlich größer ist.

Betrachtet man die zeitlich gemittelten vertikalen bzw. axialen Geschwindigkeiten in den neuen Varianten in [Abbildung 5.14](#), so fällt unter anderem auf, dass die Varianten mit dem Tauchrohr am Boden höhere Werte von 0.2 m/s bis 0.3 m/s auch in größeren Höhen noch erreichen. Die Varianten mit dem Tauchrohr am Boden kommen hier nur auf 0.1 m/s bis 0.2 m/s. Das dürfte an den höheren Rohraustrittsgeschwindigkeiten bei den Boden-Varianten liegen. Das gesamte Flüssigkeitsvolumen wird hier durch den schmalen Ausschnitt gepresst, während bei den erhöhten Varianten am unteren Rohrende eine deutlich größere Querschnittsfläche zum Durchströmen vorhanden ist. Es ist also zu erwarten, dass die Varianten am Boden schneller Mischen und dass diese auch Partikel mit höheren Stokeszahlen gut mischen.

5.3 ZUSAMMENFASSUNG

Es wurde ein grundlegendes Simulationssetup gefunden, das die Strömungsverhältnisse im Mischbehälter gut abbildet. Die Kombination aus

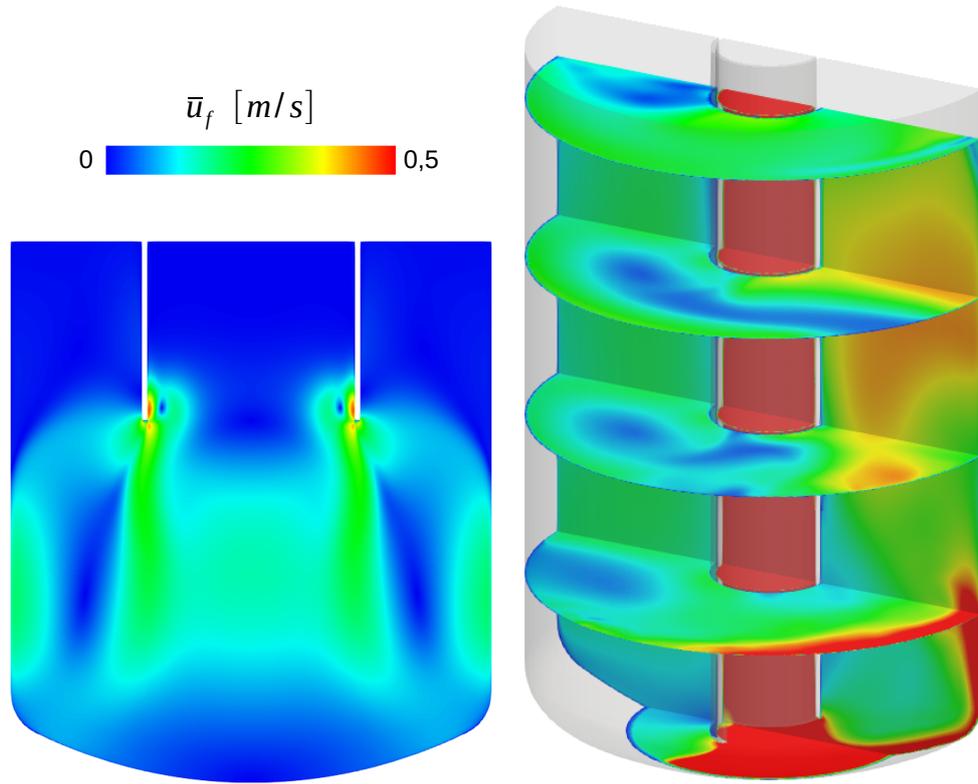


Abbildung 5.13: Vergleich des Betrags der zeitlich gemittelten Geschwindigkeitsmagnitude in der Ausgangsvariante (links) und einer neuen Variante (rechts).

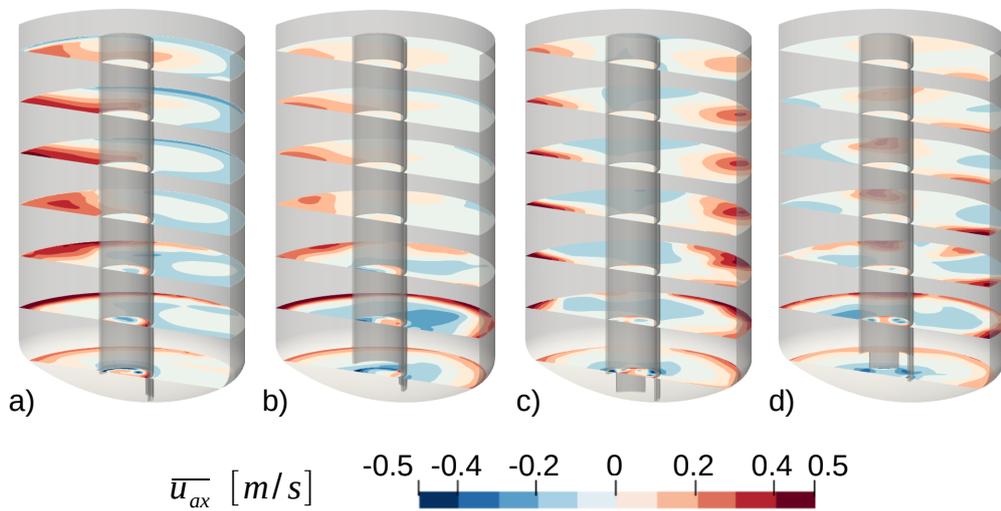


Abbildung 5.14: Vergleich der zeitlich gemittelten axialen, bzw. vertikalen, Geschwindigkeitskomponente \bar{u}_{ax} : a) 135°-Steg am Boden; b) 135°-Steg erhöht; c) Dreifuß am Boden; d) Dreifuß erhöht.

VoF-Solver und k - ω -SST-Turbulenzmodell liefert Ergebnisse, die sehr gut mit LDA-Messungen übereinstimmen. Dies gilt sowohl für den Ausgangsfall mit einer rotationssymmetrischen Geometrie und der dafür genutzten 2D-Simulation, als auch für die verbesserte Variante, für die eine 3D-Simulation notwendig war. Es ist aufgrund der Daten davon auszugehen, dass die Modifikationen die Mischeignung deutlich verbessert haben.

Damit ist ein erstes Ziel der Arbeit bereits erreicht: Die Eignung von numerischen Strömungssimulationen zur realitätsnahen Berechnung der komplexen, turbulenten, und instationären Strömung in einem FPR-Mischbehälter wurde demonstriert. Und aus den gewonnenen Erkenntnissen konnten erfolgreich Ideen zur Verbesserung der Ausgangsvariante entwickelt werden. Mit moderner Rechentechnik lassen sich also unter Umständen teure Versuche (zumindest im Technikumsmaßstab) reduzieren.

Aufbauend auf den gewonnenen Erkenntnissen sollen im nächsten Kapitel mehrere Varianten eingehender hinsichtlich ihrer tatsächlichen Mischeigenschaften numerisch untersucht werden.

MISCHEIGENSCHAFTEN DER VERBESSERTEN VARIANTEN

In Erweiterung der im vorigen Kapitel begonnenen Modifikationen sollen in diesem Kapitel insgesamt vier Geometrien untersucht werden. Dazu gehört ein weiteres Rohrende, dargestellt in [Abbildung 6.1](#). Diese Variante wird im folgenden „Dreifuß“ genannt. Sie besteht aus drei 60°-Grad-Stegen am Rohrumfang, zwischen denen sich jeweils ein 4 cm tiefer Ausschnitt von ebenfalls 60° befindet. Zusätzlich sollen die beiden Rohrenden jeweils einmal auf dem Boden aufsitzen und sich einmal um 2 cm erhöht über dem Boden befinden, sodass sich insgesamt vier Kombinationen ergeben.

Für jede der drei zusätzlichen Geometrien wurden Simulationen analog zu der für den 135°-Steg am Boden durchgeführt und alle vier wurden hinsichtlich verschiedener Gesichtspunkte analysiert, um den Einfluss der Rohrendgeometrie auf die Strömungsverhältnisse zu visualisieren. Zusätzlich wurde die Variante „Dreifuß am Boden“ gewählt, um daran den Einfluss der Antriebsfrequenz zu untersuchen. Mit dieser Variante wurden zusätzlich Simulationen mit $f_A = 1,5$ Hz und $f_A = 2,0$ Hz durchgeführt, wobei 1,5 Hz in etwa der Resonanzfrequenz des Systems entsprechen und 2,0 Hz deutlich darüber liegen.

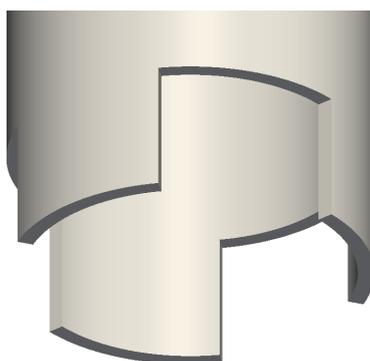


Abbildung 6.1: Modifiziertes Rohrende der verbesserten Variante „Dreifuß“.

6.1 STRÖMUNGSSIMULATIONEN

In [Abbildung 6.2](#) sind zeitlich gemittelte Werte für die Geschwindigkeitsmagnitude u_f , die turbulente kinetische Energie k , die Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie ε , des integralen Längenmaßes der turbulenten Strukturen L_E und deren integrales Zeitmaß T_L als Konturplots in der Symmetrieebene und in fünf horizontalen Schnitten für alle vier Varianten dargestellt. Auf den ersten Blick scheinen sich die verschiedenen Mischer vom Betrag der Ergebnisse nicht stark zu unterscheiden. Die höchsten Geschwindigkeitsbeträge ergeben sich wie in [Kapitel 5](#) schon gesehen im Zentralrohr und im Bereich dessen Endes.

Bei näherer Betrachtung jedoch sind einige Unterschiede auszumachen: Zunächst gibt es beispielsweise Unterschiede zwischen den Varianten mit Rohr am Boden und mit erhöhtem Rohrende. Erstere erzeugen deutlich höhere Geschwindigkeiten sowohl im Bereich des Rohrendes als auch im restlichen Behälter. Vor allem der Bereich hoher Geschwindigkeiten an den Behälterwänden gegenüber den Ausschnitten im Rohrende ist hier deutlich größer. Für die Variante „Dreifuß erhöht“ befindet sich dieser Bereich der hohen Geschwindigkeiten nicht gegenüber eines Ausschnitts im Rohrende, sondern gegenüber eines Stegs. Mit den höheren Geschwindigkeiten der Modelle mit Rohr am Boden einher gehen sowohl eine leicht höhere turbulente kinetische Energie, als auch eine höhere Dissipationsrate – vor allem im hier links dargestellten Bereich der Symmetrieebene. Offensichtlich wird die turbulente Energie durch die Rohrströmung und den engen Querschnitt am Rohrende erzeugt und dann allmählich im Behälter dissipiert. Auch das integrale turbulente Längenmaß ist in den Boden-Varianten etwas geringer. Das Verhalten der Wirbelgröße beim Anheben des Rohres hingegen ist unterschiedlich: Während beim 135°-Steg leicht höhere Werte für die Variante am Boden zu sehen sind, steigen die Werte in der Dreifuß-Variante beim angehobenen Rohr.

Eine Änderung von 135°-Steg zu Dreifuß scheint alles in allem keine so große Rolle zu spielen, der Einfluss der Höhe des Rohrendes über dem Behälterboden hat offensichtlich deutlich größeren Einfluss auf die Strömung.

[Tabelle 6.1](#) listet über das Flüssigkeitsvolumen gemittelte Werte für die zuvor betrachteten zeitlich gemittelten Werte auf. Die tendenziell höheren Geschwindigkeitswerte und damit einhergehende höhere turbulente kinetische Energien und Dissipationsraten finden sich auch hier. Auch die mit dem Anheben des Rohres steigende turbulente Zeitskala

Tabelle 6.1: Volumengemittelte Werte der zeitlichen Mittelwerte der in [Abbildung 6.2](#) betrachteten Größen für die vier FPR-Mischer-Varianten

| | u_f [m/s] | k [m ² /s ²] | ε [m ² /s ³] | L_E [mm] | T_L [s] |
|------------------|----------------|--|--|---------------|--------------|
| 135°-Steg Boden | 0,23 | $9,4 \cdot 10^{-3}$ | 0,051 | 7,9 | 0,13 |
| 135°-Steg erhöht | 0,19 | $6,3 \cdot 10^{-3}$ | 0,046 | 6,7 | 0,16 |
| Dreifuß Boden | 0,19 | $7,7 \cdot 10^{-3}$ | 0,046 | 7,5 | 0,14 |
| Dreifuß erhöht | 0,17 | $5,9 \cdot 10^{-3}$ | 0,045 | 7,7 | 0,16 |
| Dreifuß 1,5 Hz | 0,23 | $12 \cdot 10^{-3}$ | 0,084 | 7,6 | 0,12 |
| Dreifuß 2,0 Hz | 0,053 | $1,0 \cdot 10^{-3}$ | 0,0036 | 12 | 0,54 |

und das ambivalente Verhalten der Längenskala finden sich in diesen Mittelwerten bestätigt. Schätzt man aus den Tabellenwerten den Turbulenzgrad nach $Tu = \sqrt{2/3 \cdot \bar{k}/\bar{u}_f} \cdot 100\%$ ab, ergeben sich Werte um 35%, mithin liegt also eine stark turbulente Strömung vor.

Wie oben bereits erwähnt, wurden für die Variante „Dreifuß am Boden“ zwei weitere Simulationen zum Einfluss der Antriebsfrequenz f_A durchgeführt. Analog zu den obigen Ergebnissen sind in [Abbildung 6.3](#) Ergebnisse für die zeitlich gemittelten Größen dargestellt, die oben schon eingeführte [Tabelle 6.1](#) enthält auch für die beiden zusätzlichen Simulationen die räumlich gemittelten Werte. Sehr deutlich ist sowohl in den Bildern als auch in den integralen Werten zu sehen, dass sich mit Erhöhung auf in etwa Resonanzfrequenz die Geschwindigkeit nochmals erhöht und auch die Turbulenz noch intensiver wird (k steigt um mehr als 50%, ε um mehr als 80%). Die generellen Strömungsmuster bleiben erhalten. D.h. am unteren Ende des Rohres tritt die Strömung mit relativ hoher Geschwindigkeit aus den Dreifuß-Ausschnitten aus und breitet sich an den Behälterwänden entlang nach oben aus. Für die beiden integralen Skalen der Turbulenz gilt, dass sich das Längenmaß kaum ändert, während die Wirbel schneller werden, also eine kleinere Zeitskala aufweisen. Wird die Frequenz nun noch weiter auf einen Wert deutlich oberhalb der Resonanzfrequenz erhöht, so kehren sich obige Beobachtungen um: Das System scheint der hohen Frequenz nicht mehr folgen zu können und die Geschwindigkeiten brechen ein, der integrale Wert sinkt beispielsweise auf etwa ein Viertel. Noch drastischer stellt sich der Rückgang bei den Turbulenzwerten dar: Die turbulente kinetische Ener-

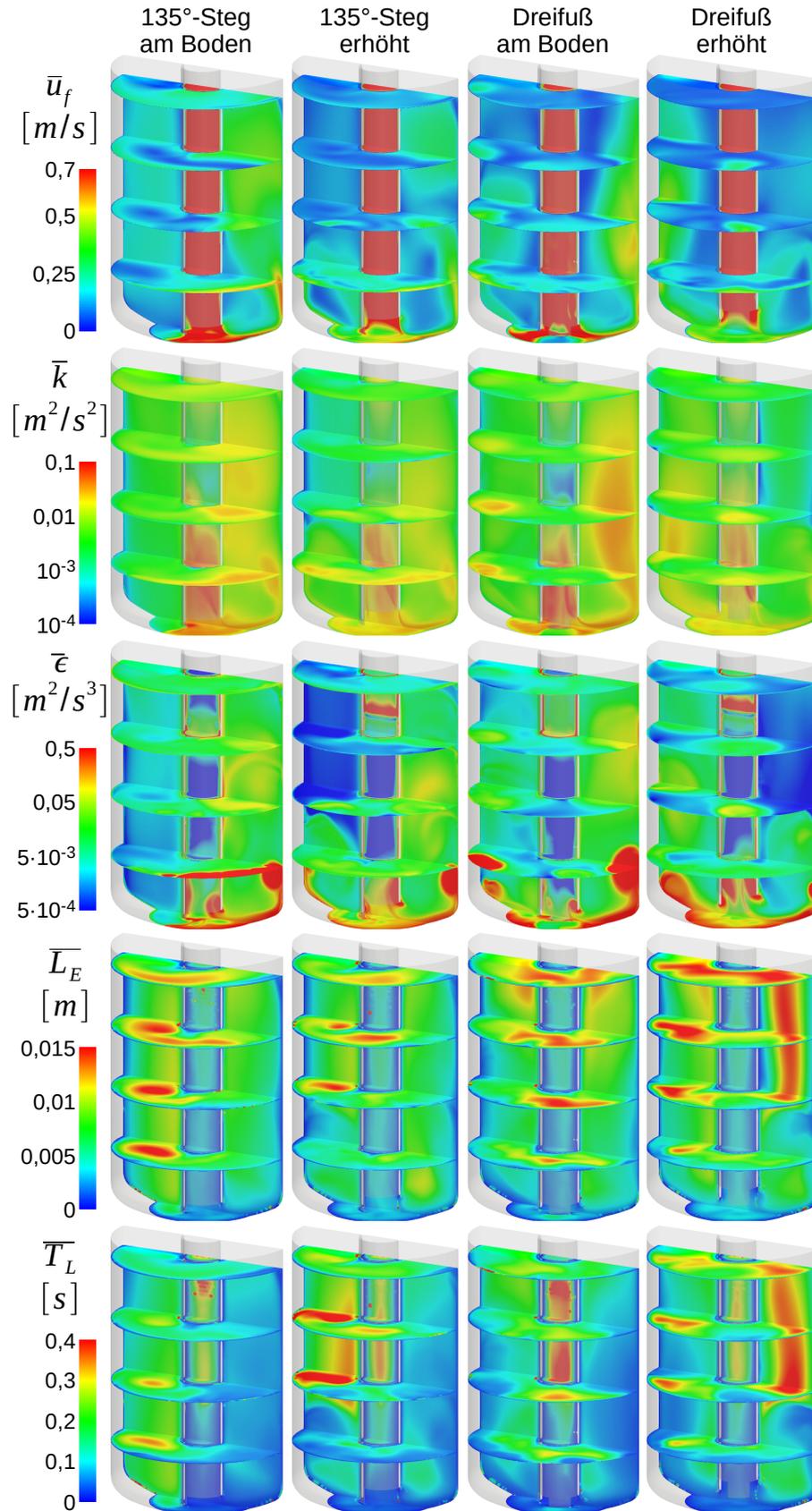


Abbildung 6.2: Vergleich der Simulationsergebnisse für die vier Rohrauslassgeometrien; von oben nach unten: zeitlich gemittelte Werte für Geschwindigkeitsmagnitude, turbulente kinetische Energie, deren Dissipationsrate, und integrale Längen- und Zeitmaße der Turbulenz.

gie sinkt auf weniger als ein Zehntel des 1,5-Hz-Werts, die Dissipationsrate unter ein Zwanzigstel. Die Wirbel scheinen größer zu werden, das Längenmaß steigt um etwa 50%, und gleichzeitig deutlich langsamer, die charakteristische Zeitskala steigt auf das Viereinhalbfache.

6.2 LEISTUNGSEINTRAG UND NEWTONZAHL

Tabelle 6.2 listet die Ergebnisse der in Abschnitt 3.1.3 erläuterten Kennwerte für die kontinuierliche Phase auf. Abbildung 6.4 vergleicht die Ergebnisse für die Newtonzahlen mit denen von Standardrührern (entnommen aus Kraume (2006)). Für die Reynoldszahlen ergibt sich ein etwas anderes Bild als im vorhergehenden Abschnitt: Das Anheben des Rohres führt zur einer höheren Reynoldszahl, was nur eine erhöhte Effektivgeschwindigkeit im Rohrquerschnitt bedeuten kann. Es ist also die kinetische Energie im Rohr bei den erhöhten Varianten zunächst höher. Der Grund hierfür dürfte im deutlich größeren Querschnitt gegenüber den Varianten mit Rohrende am Boden liegen, der der Flüssigkeit zur Verfügung steht, um vom Rohr in den restlichen Behälter zu gelangen. Auf der anderen Seite ergeben sich durch den geringeren Querschnitt bei den Boden-Varianten trotz geringerem Volumenstrom in den Ausschnitten am Rohrende höhere Absolutgeschwindigkeiten, die dann auch stärkere Turbulenz verursachen. Auch ist bei der Reynoldszahl der Einfluss der Höhe des Rohres beim 135°-Steg gering (ca. 8% Anstieg mit angehobenem Rohr), beim Dreifuß jedoch durchaus beträchtlich (ca. 55% Anstieg). Bei der Frequenzabhängigkeit ergibt sich das erwartete Bild: Wird die Antriebsfrequenz auf 1,5 Hz und damit in etwa die Resonanzfrequenz erhöht, erhöht sich die Reynoldszahl ebenfalls, und zwar um etwa 24%. Wird sie noch darüber hinaus auf 2,0 Hz erhöht, sinkt die Reynoldszahl rapide um etwa 69% ab.

Beim Leistungseintrag der beiden 135°-Steg-Varianten liegt bei der Ermittlung per Volumenarbeit die erhöhte Variante ca. 18% höher, bei der Ermittlung über die Dissipationsrate erreicht die Variante am Boden einen 24% höheren Wert. Es scheint, als würde beim 135°-Steg am Boden deutlich mehr der mechanischen Arbeit in Turbulenz umgesetzt. Beim Dreifuß verhält es sich so, dass bei beiden Methoden der Leistungsermittlung die Variante am Boden mit einem erhöhten Leistungsbedarf einhergeht. Insbesondere sticht P_V bei der Variante am Boden heraus, das hier in etwa doppelt so hoch ist wie beim 135°-Steg-Pendant. Das ist dem Umstand geschuldet, dass wesentlich mehr Arbeit aufgewendet

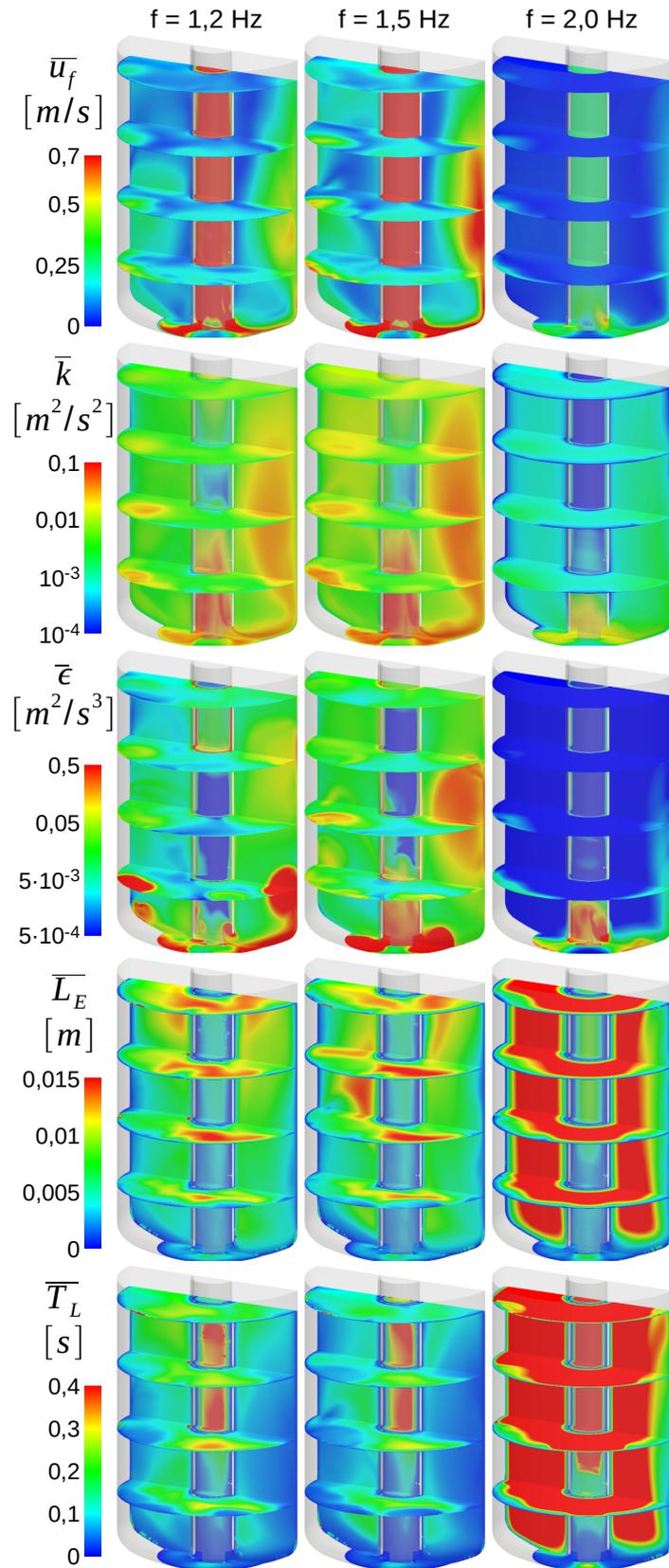


Abbildung 6.3: Vergleich der Simulationsergebnisse für die drei untersuchten Antriebsfrequenzen; von oben nach unten: zeitlich gemittelte Werte für Geschwindigkeitsmagnitude, turbulente kinetische Energie, deren Dissipationsrate, und integrale Längen- und Zeitmaße der Turbulenz.

werden muss, um den Volumenstrom durch drei kleine 60°-Öffnungen zu realisieren, als durch eine große 225°-Öffnung beim 135°-Steg. Die Druckdifferenz über einer Blende weist u.a. folgende Proportionalitäten auf:

$$\Delta p \propto \frac{\dot{V}^2}{C_F \cdot A^2} \quad (6.1)$$

Darin ist \dot{V} der Volumenstrom über der Blende, A deren Querschnittsfläche, und C_F der Durchflusskoeffizient. Nun muss über jede Öffnung beim Dreifuß am Boden nur ein Drittel des Volumenstroms aus dem Rohr fließen, beim 135°Steg der komplette Volumenstrom, sodass gilt:

$$\frac{\dot{V}_{Dreifuss}}{\dot{V}_{Steg}} = \frac{1}{3} \quad (6.2)$$

Andererseits verhalten sich die Flächen der beiden Öffnungen entsprechend ihrer Längen entlang des Rohrumfangs:

$$\frac{A_{Steg}}{A_{Dreifuss}} = \frac{60}{225} = \frac{12}{45} \quad (6.3)$$

Für das Verhältnis der beiden Druckdifferenzen ergibt sich damit

$$\frac{\Delta p_{Dreifuss}}{\Delta p_{Steg}} = \frac{(1/3)^2}{(12/45)^2} = 1,5625 \quad (6.4)$$

Schon daraus lassen sich also etwa 56% der zusätzlich notwendigen Leistung erklären. Dazu ist der in Gl. (6.1) vorkommende Durchflusskoeffizient C_F für die kleineren Öffnungen beim Dreifuß geringer als bei der großen Öffnung am 135°-Steg, was das Verhältnis noch weiter steigen lässt. Mit dem erhöhten Druckabfall lässt sich auch das Verhalten der Reynoldszahl erklären. Er führt zu einem erhöhten Strömungswiderstand, wodurch die Geschwindigkeit im Rohr niedriger wird und damit auch die Reynoldszahl.

Wie auch Decker (2005) beobachtet, liegen die über die Dissipationsrate ermittelten Leistungseinträge durchgängig niedriger als die über die Volumenarbeit berechneten. Dies wird vor allem auf Diskretisierungsfehler zurück geführt, die sich auf die beiden Methoden unterschiedlich stark auswirken. Decker findet relative Abweichungen $((Ne_V - Ne_\epsilon)/Ne_V)$ im Bereich von etwa 0,3 bis 0,4, je nach Zellanzahl und Diskretisierungsverfahren. Die in Tabelle 6.2 gelisteten Ergebnisse liegen bis auf eine Ausnahme im Bereich zwischen etwa 0,2 und 0,5, sind also vergleichbar.

| | Re | P_V | P_ε | Ne_V | Ne_ε |
|------------------|---------|-------|-----------------|--------|------------------|
| | [-] | [W] | [W] | [-] | [-] |
| 135°-Steg Boden | 81 000 | 7,8 | 5,2 | 1,5 | 0,98 |
| 135°-Steg erhöht | 88 000 | 9,2 | 4,2 | 1,4 | 0,62 |
| Dreifuß Boden | 71 000 | 15 | 4,5 | 4,0 | 1,3 |
| Dreifuß erhöht | 110 000 | 8,8 | 4,3 | 0,70 | 0,34 |
| Dreifuß 1,5 Hz | 88 000 | 16 | 8,6 | 2,3 | 1,3 |
| Dreifuß 2,0 Hz | 27 000 | 0,47 | 0,37 | 2,5 | 1,9 |

Tabelle 6.2: Reynoldszahlen Re , die beiden Leistungseinträge P_V und P_ε , und die daraus abgeleiteten Newtonzahlen Ne_V und Ne_ε für die insgesamt sechs Simulationen.

Der Dreifuß am Boden fällt mit einem Wert von 0,7 etwas aus der Reihe. Das ist wahrscheinlich dem oben beschriebenen Umstand geschuldet, dass sich der Volumenstrom durch drei kleine statt durch eine große Öffnung drängt, was die Turbulenz erhöht und die Berechnung der Dissipationsraten noch weniger akkurat werden lässt.

Zum Einfluss der Frequenz lässt sich sagen, dass die bei etwa Resonanzfrequenz betriebene Konfiguration mit 1,5 Hz deutlich effizienter arbeitet als die Variante mit niedriger Frequenz, jedenfalls Ne_V nach zu urteilen. Bei nur leicht erhöhter aufzubringender Leistung steigt so zum Beispiel die Reynoldszahl stark an, oder wie in [Tabelle 6.1](#) zu sehen, verdoppelt sich die turbulente kinetische Energie.

In [Abbildung 6.4](#) sind die ermittelten Werte denen von Standardrührern in einem Re - Ne -Plot gegenübergestellt. Je nachdem, welche Methode zur Ermittlung man betrachtet, sind der erhöhte Dreifuß oder noch zusätzlich der erhöhte 135°-Steg ähnlich effizient wie ein (dreiflügeliger) Propellerrührer, oder sogar leicht effizienter. Es ist also gelungen, effiziente Varianten des FPR-Mischers zu entwickeln und mit Hilfe von CFD-Simulationen zu untersuchen. Im folgenden wird nun untersucht, ob diese auch effektiv in Hinsicht auf Mischvorgänge sind.

6.3 SIMULATION DER MISCHENS MIT TRACERN UND PARTIKELN

Die oben beschriebenen Simulationen werden als Basis für die Berechnung der Mischvorgänge genutzt. Dies soll zunächst mittels eines ska-

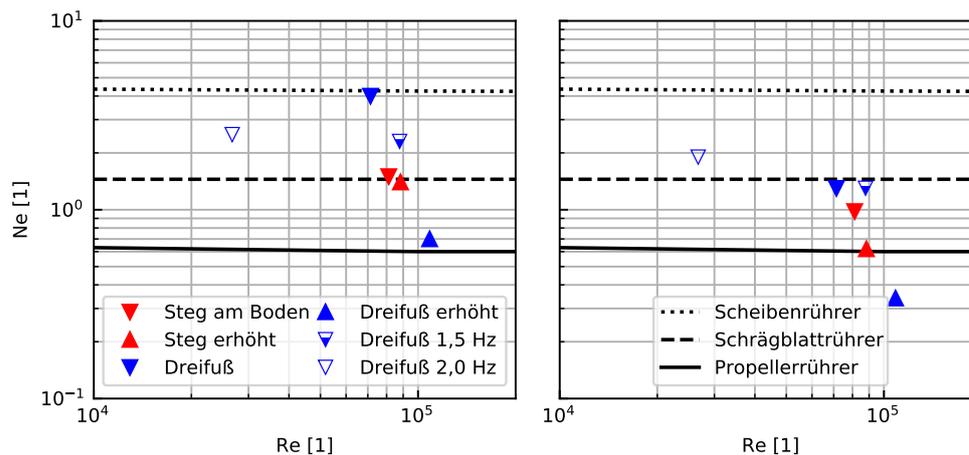


Abbildung 6.4: Vergleich der Newtonzahlen Ne aus den sechs Mischer-Simulationen mit denen von Standardrührern, aufgetragen über der Reynoldszahl Re ; links: Leistungseintrag ermittelt nach Gl. (3.24); rechts: Leistungseintrag ermittelt nach Gl. (3.25).

laren Tracerfeldes geschehen, dessen Ausbreitung vom unteren Bereich des Mixers startend berechnet wird. Daran schließen Lagrange'sche Simulationen für vier Partikelgrößen und drei Partikeldichten. Insgesamt werden für die sechs Varianten also 78 Simulationen durchgeführt. Es würde wie bereits im Methodenteil erwähnt den zeitlichen Rahmen sprengen, für jede dieser Simulationen das Strömungsfeld neu zu berechnen. Deswegen wird so vorgegangen, dass die jeweils letzte volle Periode, die in den oben beschriebenen Simulationen berechnet wurde, als Grundlage für die Mischsimulationen dient. Im zeitlichen Abstand von $\Delta t = 10$ ms liegen für diese letzte Oszillation alle zur Berechnung des Mischens notwendigen Felder vor und werden wiederholt eingelesen. Im Prinzip erfolgt die Berechnung also mittels eines „frozen flow“-Feldes, das sich alle 10 ms ändert. Das reduziert einerseits den Zeit-, Rechen-, und Speicherbedarf, andererseits ist es auf diese Weise aber nicht möglich, Rückwirkungen der Partikel auf die Strömungsfelder einzubeziehen.

6.3.1 Tracersimulationen

Für die Tracersimulationen wurde das Tracerfeld als homogen bis zur Höhe von 0,1 m (d.h. etwa $0,14 \cdot h_W$) initialisiert und die Ausbreitung im weiteren Verlauf durch Lösen einer skalaren Transportgleichung verfolgt

(siehe [Abschnitt 3.2](#)). Die Felder sind, wie oben erwähnt, mit einer zeitlichen Auflösung von 10 ms gespeichert. Zusätzlich wird die Zeitspanne innerhalb der „gefrorenen“ Felder in Zwischenschritte von 2 ms geteilt. Pro gespeichertem Zeitschritt werden also fünf Zwischenzustände berechnet, insgesamt werden 30 Oszillationen simuliert.

Der Mischvorgang ist in [Abbildung 6.5](#) illustriert. Hier ist der Verlauf der Tracerausbreitung über etwa sieben Schwingungen in der Variante „Dreifuß am Boden“ zu sehen. Der sich anfangs am Boden befindende Tracer wird von der Strömung erfasst und im Behälter verteilt. Wie zu erwarten, folgt der Tracer der Strömung, sodass er vom Rohrende an die Behälterwände gegenüber der Ausschnitte des Dreifuß' strömt, dort nach oben abgelenkt wird, um sich dann nach und nach im kompletten Behälter auszubreiten.

In [Abbildung 6.6](#) ist der zeitliche Verlauf der relativen Mischgüte $M_{G,2,rel}$ für alle sechs Varianten dargestellt, [Tabelle 6.3](#) listet die Werte für die Mischdauer und die Mischgüte am Ende der Simulationen auf. Bis auf die 2,0-Hz-Variante erreichen alle Konfigurationen einen recht stabilen Durchmischungszustand innerhalb der 30 Schwingungen. Bezüglich der relativen Mischdauer, also der Anzahl der Schwingungen, ist der erhöhte Dreifuß die beste der untersuchten Varianten mit $f_A = 1,2$ Hz. Der erhöhte 135°-Steg hingegen ergibt die schlechteste Mischqualität und benötigt dafür sogar am längsten. Die beiden Versionen mit dem Rohr am Boden haben innerhalb der betrachteten Zeitspanne die beste Mischqualität erreicht, wobei der 135°-Steg etwas besser abschneidet.

Eine Erhöhung der Antriebsfrequenz f_A auf 1,5 Hz hat leicht negative Auswirkungen sowohl auf die Mischqualität als auch auf die (relative) Mischdauer. Bezüglich der absoluten Mischdauer ist die 1,5-Hz-Variante die beste Wahl. Die 2,0-Hz-Variante ist bei beiden Kriterien mit Abstand die schlechteste.

6.3.2 Partikelsimulationen

Für jede der sechs Varianten wurden Partikelsimulationen mit drei verschiedenen Partikeldichten $\rho_P = (1,05, 1,5, 2,5)$ g/cm³ und vier verschiedenen Durchmessern $d_P = (0,08, 0,5, 1,5, 2,5)$ mm durchgeführt. Jeweils 100.000 Partikel wurden initial im Bereich des Behälterbodens verteilt und für 15 Oszillationen auf ihrem Weg durch den Mischbehälter getrackt. Für die Simulationen in diesem Kapitel werden alle im Methodenteil beschriebenen Partikelkräfte berechnet und berücksichtigt. Die

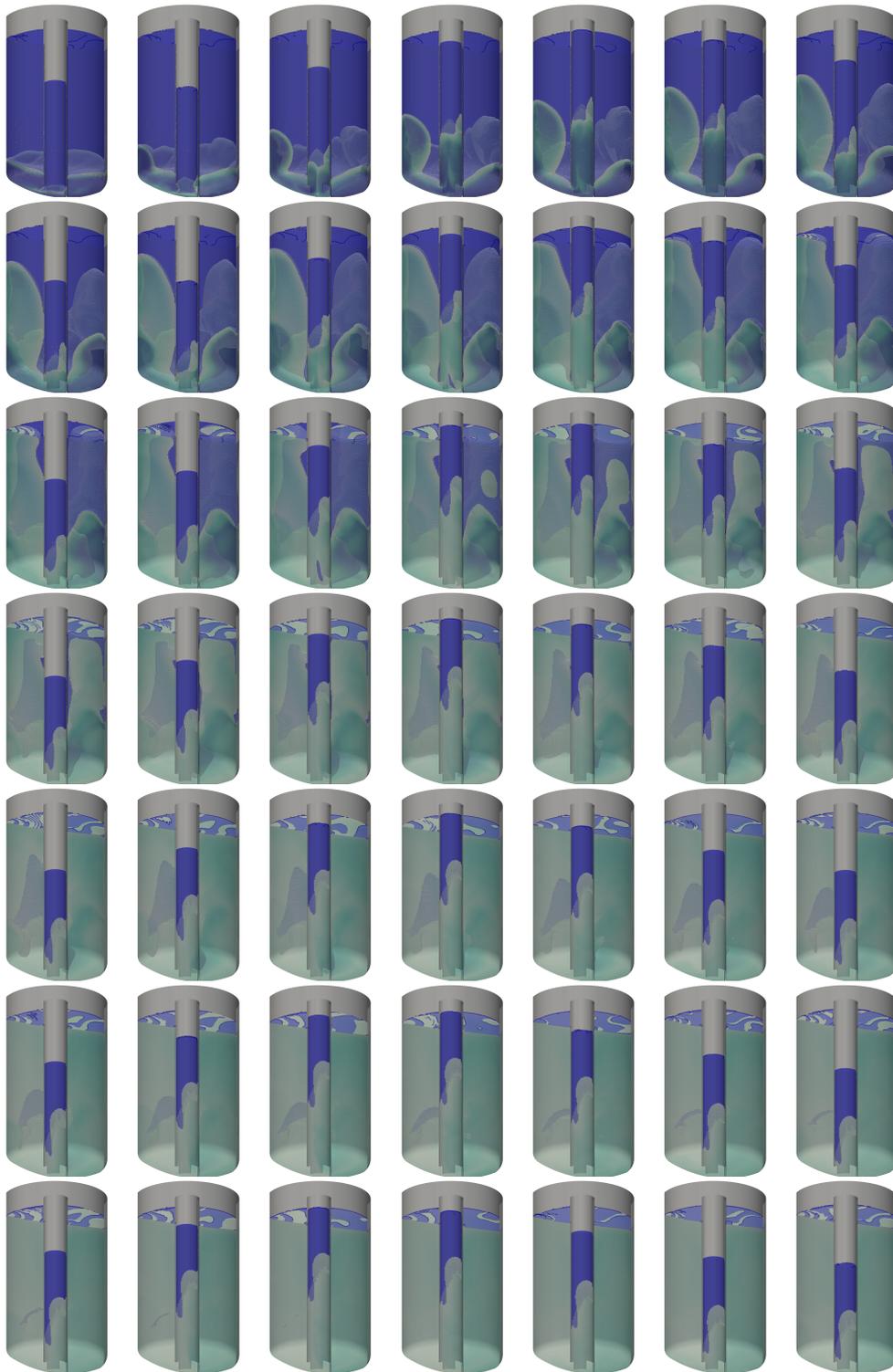


Abbildung 6.5: Zeitlicher Verlauf des Mischens eines skalaren Tracers im „Dreifuß am Boden“ über etwa sieben Perioden; in blau dargestellt ist das Wasser, in dem im Verlauf der Schwingungen der grün dargestellte Tracer verteilt wird; gut zu sehen ist die Auf- und Abbewegung im inneren des Zentralrohres.

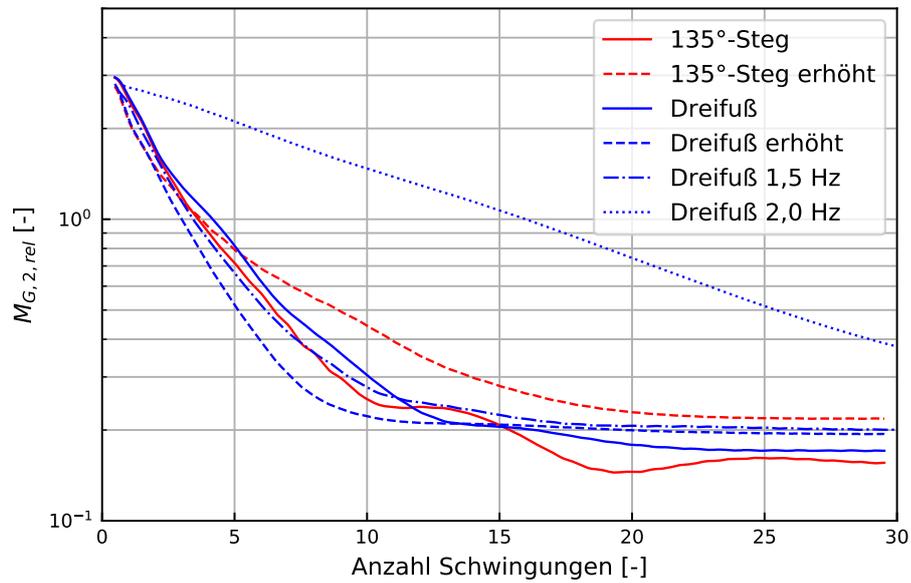


Abbildung 6.6: Zeitlicher Verlauf der relativen Mischgüte $M_{G,2,rel}$ für die Tracersimulationen der sechs Varianten im Verlauf von 30 Schwingungen.

Tabelle 6.3: Absolute Mischdauern in Sekunden, relative Mischdauern in Anzahl der Perioden, und relative Mischgüten für die Tracersimulationen.

| | $t_{90\%}$ [s] | $t_{90\%} \cdot f_A$ [-] | $M_{G,2,rel}(t_{end})$ [-] |
|------------------|-------------------|-----------------------------|-------------------------------|
| 135°-Steg Boden | 1,3 | 1,6 | 0,15 |
| 135°-Steg erhöht | 1,5 | 1,8 | 0,22 |
| Dreifuß Boden | 1,1 | 1,3 | 0,17 |
| Dreifuß erhöht | 1,2 | 1,4 | 0,19 |
| Dreifuß 1,5 Hz | 1,0 | 1,5 | 0,20 |
| Dreifuß 2,0 Hz | 3,2 | 6,4 | 0,37 |

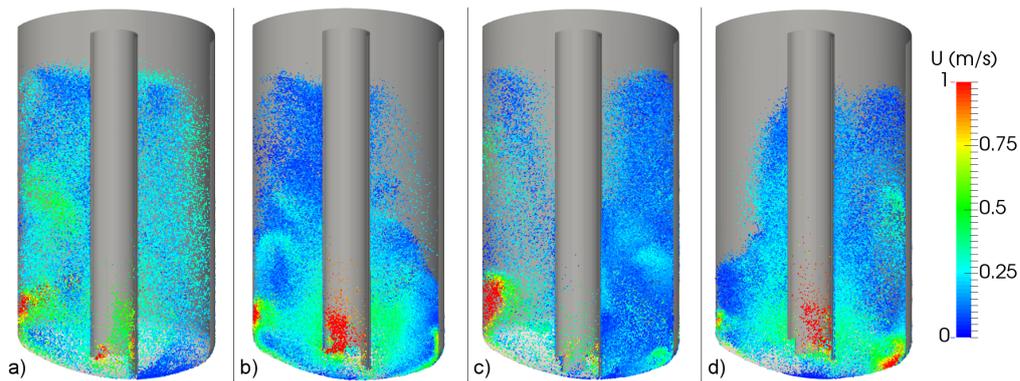


Abbildung 6.7: Vergleich der Partikelpositionen nach zehn vollständigen Schwingungen für die vier Varianten bei $\rho_P = 1500 \text{ kg/m}^3$ und $d_P = 1.5 \text{ mm}$; a) 135° -Steg am Boden; b) 135° -Steg erhöht; c) Dreifuß am Boden; d) Dreifuß erhöht.

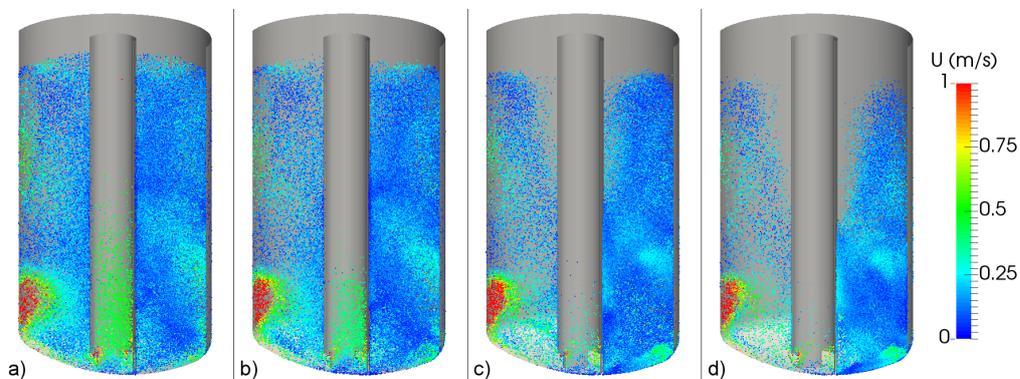


Abbildung 6.8: Vergleich der Partikelpositionen nach zehn vollständigen Schwingungen für die Variante Dreifuß am Boden und $\rho_P = 1500 \text{ kg/m}^3$; a) $d_P = 0.08 \text{ mm}$; b) $d_P = 0.5 \text{ mm}$; c) $d_P = 1.5 \text{ mm}$; d) $d_P = 2.5 \text{ mm}$.

Partikelcourantzahl wird auf 0,5 begrenzt. D.h., dass ein Partikel pro Lagrange-Subzeitschritt maximal die Hälfte einer Rechenzelle durchqueren darf. Beispielfhafte sind in [Abbildung 6.7](#) und [Abbildung 6.8](#) die Partikelpositionen nach 10 vollständigen Schwingungen dargestellt. [Abbildung 6.7](#) zeigt einen Vergleich der Positionen für die vier verschiedenen Varianten, [Abbildung 6.8](#) zeigt einen Vergleich für vier verschiedene Durchmesser bei einer Variante.

6.3.2.1 Einfluss der Geometrie

In den Diagrammen in [Abbildung 6.9](#), [Abbildung 6.10](#), und [Abbildung 6.11](#) sind die Ergebnisse für die relative Mischgüte $M_{G,2,rel}$ und die relative

Mischdauer $t_{90\%,rel}$ für die Mischer mit der Antriebsfrequenz $f_A = 1,2$ Hz in Abhängigkeit von der Stokeszahl St dargestellt. Simulationen mit gleichem Dichteverhältnis ρ_P/ρ_F sind jeweils in einem Diagramm zusammengefasst. Die Stokeszahl ist dabei entsprechend [Gleichung 3.37](#) für alle Partikel ermittelt worden, und ist sowohl über alle Partikel als auch über die komplette Zeit der beiden letzten vollen Schwingungen gemittelt.

Schaut man sich zunächst für einen Vergleich mit den Tracersimulationen leichte, kleine Partikel an, also mit $\rho_P/\rho_F = 1,05$ und der niedrigsten Stokeszahl, finden sich recht gute Übereinstimmungen sowohl in Mischdauer als auch Mischgüte. Bei den Tracersimulationen ergaben sich für $M_{G,2,rel}$ Werte um 0,2, hier liegen die Werte etwa zwischen 0,2 und 0,3 vor. Bei den relativen Mischdauern $T_{90\%,rel}$ lagen die Tracersimulationen bei etwa 1,3 bis 1,8, was auch ziemlich genau dem Wertebereich von 1,25 bis 1,75 der Partikelsimulationen entspricht.

Ein genauere Blick auf [Abbildung 6.9](#) zeigt, dass für die kleinsten auftretenden Stokeszahlen, also für die Partikel mit $d_P = 0,08$ mm, das Dichteverhältnis ρ_P/ρ_F für die Mischgüten keine große Rolle spielt. Bei den nächstgrößeren Partikeln, die mit einer Stokeszahl zwischen etwa 0,15 für $\rho_P/\rho_F = 1,05$ und 0,3 für $\rho_P/\rho_F = 2,5$ schon im Bereich nicht zu vernachlässigender Trägheitseffekte liegen, ist vor allem für die Varianten am Boden ein deutlicher Einfluss des Dichteverhältnisses wahrzunehmen. Deren Mischgüte verschlechtert sich bis auf einen Wert von 3. Dabei ist der 135° -Steg am Boden noch einmal sensitiver und weist schon bei $\rho_P/\rho_F = 1,05$ einen leicht erhöhten Wert auf, der Dreifuß am Boden verschlechtert sich erst ab $\rho_P/\rho_F = 1,5$. Bei noch höheren Stokeszahlen weisen alle Geometrievarianten eine starke Abhängigkeit der Mischgüte von ρ_P/ρ_F auf. Bei gleichbleibenden Dichteverhältnissen ergibt sich das zu erwartende Bild: Größere Partikel führen zu schlechterer Mischqualität, da sie zu schwer sind und sich deshalb in Bodennähe stärker konzentrieren.

Nahezu durchgängig bringen die erhöhten Varianten eine bessere Durchmischung hervor als ihre Gegenstücke mit den Rohrenden am Boden. Eine mögliche Ursache hierfür ist, dass sich um die Bereiche, in denen die Rohrenden am Boden aufsitzen, Totwassergebiete bilden, sodass sich dort Partikel ansammeln können. Gut zu sehen ist dies in [Abbildung 6.12](#). Dort sind die normierten Konzentrationen c/c_{ziel} entlang der normierten Höhen h/h_W für die durchgeführten Simulationen aufgetragen. An diesen Höhenprofilen ist gut zu erkennen, dass sich bei den Varianten mit Rohrende am Boden (durchgezogene Linien) durchweg eine

überhöhte Konzentration im unteren Bereich einstellt. Der Konzentrationsanstieg zum Boden hin geschieht dort auch relativ abrupt, während er bei den Varianten mit angehobenem Rohr etwas allmählicher vonstatten geht.

Das neue Konzept der „Voronoi-Konzentrationen“ liefert zu $M_{G,2}$ vergleichbare Ergebnisse, siehe [Abbildung 6.10](#). Ein Unterschied, der etwas für diese Methode spricht, zeigt sich für $\rho_P/\rho_F = 2,5$ und die beiden größten Stokeszahlen: Mit obiger Argumentation (Partikelansammlungen im Totwasserbereich hinter den Stegen) wäre zu erwarten, dass die Mischqualität beim erhöhten Dreifuß besser ist als beim 135° -Steg am Boden. Bei $M_{G,2}$ ist dies nicht der Fall, mit der Voronoi-Methode schneiden die erhöhten Varianten durchgängig besser ab als die Pendants mit dem Rohr am Boden.

Bezüglich der Mischdauern ist zu beobachten, dass Konfigurationen mit Rohrenden am Boden die Partikel schneller aufwirbeln. Der Unterschied wird umso deutlicher, je größer und schwerer die Partikel werden. Die Ursache hierfür dürfte in den höheren Geschwindigkeiten liegen, die an den kleinen Öffnungen am Rohrende am Boden auftreten und letztlich den gesamten Behälter durchziehen (siehe auch [Tabelle 6.1](#)). Es ist außerdem noch anzumerken, dass das 90%-Kriterium von allen Varianten außer dem 135° -Steg am Boden bei hohen Dichteverhältnissen und Stokeszahlen nicht mehr erfüllt wird. Bei $\rho_P/\rho_F = 1,5$ schafft es der erhöhte Dreifuß nicht mehr, Partikel mit einem Durchmesser von 2,5 mm ausreichend aufzuwirbeln. Für das größte untersuchte Dichteverhältnis von 2,5 gelingt es nur noch dem 135° -Steg am Boden, die Partikel bis in 90% der Füllhöhe zu transportieren. Für den Dreifuß am Boden sind hier die größten Partikel mit $d_P = 2,5$ mm zu schwer, für die beiden erhöhten Varianten auch noch die Partikel mit 1,5 mm Durchmesser. Dieses Ergebnis passt auch zu [Abbildung 5.14](#): Die nach oben gerichteten vertikalen Geschwindigkeiten sind in den Boden-Varianten deutlich höher. In den oberen Bereichen des Flüssigkeitsvolumens liegen diese bei maximal noch 0,3 m/s bis 0,4 m/s, bei den erhöhten Varianten etwa 0,1 m/s niedriger. Die Partikel mit Dichte-Durchmesser-Kombinationen, für die das 90%-Kriterium nicht mehr erfüllt werden konnte, haben Fallgeschwindigkeiten von etwa 0,2 m/s bis 0,34 m/s. Die Varianten mit dem erhöhten Tauchrohr erzeugen schlicht nicht genug kinetische Energie, um die Partikel in 90% der Füllhöhe zu transportieren.

Der Vergleich der Ergebnisse für die leichtesten Partikel ($d_P = 0,08$ mm, $\rho_P = 1050$ kg/m³) mit den Tracersimulationen ([Abschnitt 6.3.1](#)) zeigt, dass die Mischdauern mit den Tracersimulationen etwas niedriger ge-

schätzt werden, aber dennoch sowohl qualitativ als auch quantitativ eine recht gute Übereinstimmung vorliegt.

Zur Validität der Ergebnisse der Partikelsimulationen muss hier folgendes angemerkt werden: Insbesondere für die Simulation von Partikeln hoher Dichte und Stokeszahlen ist mit großen Konzentrationen in begrenzten Gebieten die Annahme nicht mehr gültig, dass dort eine stark verdünnte Mehrphasenströmung vorliegt. Es müssten zumindest dort Partikelkollisionen und Effekte der dispersen Phase auf die kontinuierliche Phase berücksichtigt werden. Es ist davon auszugehen, dass dann die Konzentrationen am Behälterboden wohl etwas niedriger wären, da dann zum Beispiel Partikel an schon dort befindlichen Partikeln abprallen, oder, wenn sie auf diesen zu liegen kommen, leichter wieder aufgewirbelt werden können, da sie sich weiter in der Strömung befinden und nicht mehr in einem eventuell ruhigeren Wandbereich.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die erhöhten Varianten eine bessere Mischqualität erzielen, aber langsamer mischen und für hohe Dichteverhältnisse und große Durchmesser bzw. Stokeszahlen schlecht geeignet sind. Die Dreifuß-Konfigurationen liefern außer für sehr schwere und große Partikel eine bessere Mischqualität als die 135°-Steg-Varianten und in der Regel auch bessere, zumindest aber vergleichbare Mischdauern.

6.3.2.2 Frequenzeinfluss

Die Simulationen für die drei verschiedenen Antriebsfrequenzen sind auf die gleiche Art ausgewertet worden, wie die Simulationen zur Geometrieabhängigkeit im vorherigen [Abschnitt 6.3.2.1](#). In [Abbildung 6.13](#) sind die Mischgüten $M_{G,2,rel}$ über der Partikelstokeszahl St_p für den „Dreifuß am Boden“ dargestellt. Generell lässt sich zunächst feststellen, dass bei einer Antriebsfrequenz f_A von 2 Hz durchgängig die schlechtesten Mischgüten vorzufinden sind. Aufgrund der sehr ungünstigen Strömungsverhältnisse (siehe [Abschnitt 6.1](#)) war dies zu erwarten. Unerwartet hingegen ist, dass bei einem kleinen Dichteverhältnis von 1,05 die Mischgüte bei 1,2 Hz besser als bei 1,5 Hz ist. Allerdings befinden sich beide auf ähnlich niedrigem Niveau. Bei größeren Dichteverhältnissen zeigt sich hingegen, dass die Mischgüte bei $f_A = 1,5$ Hz in der Regel etwas besser ist als bei $f_A = 1,2$ Hz. Allerdings sind auch hier die Unterschiede nur marginal.

In [Abbildung 6.14](#) sind die Mischdauern $t_{90\%,rel}$ im „Dreifuß am Boden“ bei den verschiedenen Frequenzen dargestellt, wiederum über der

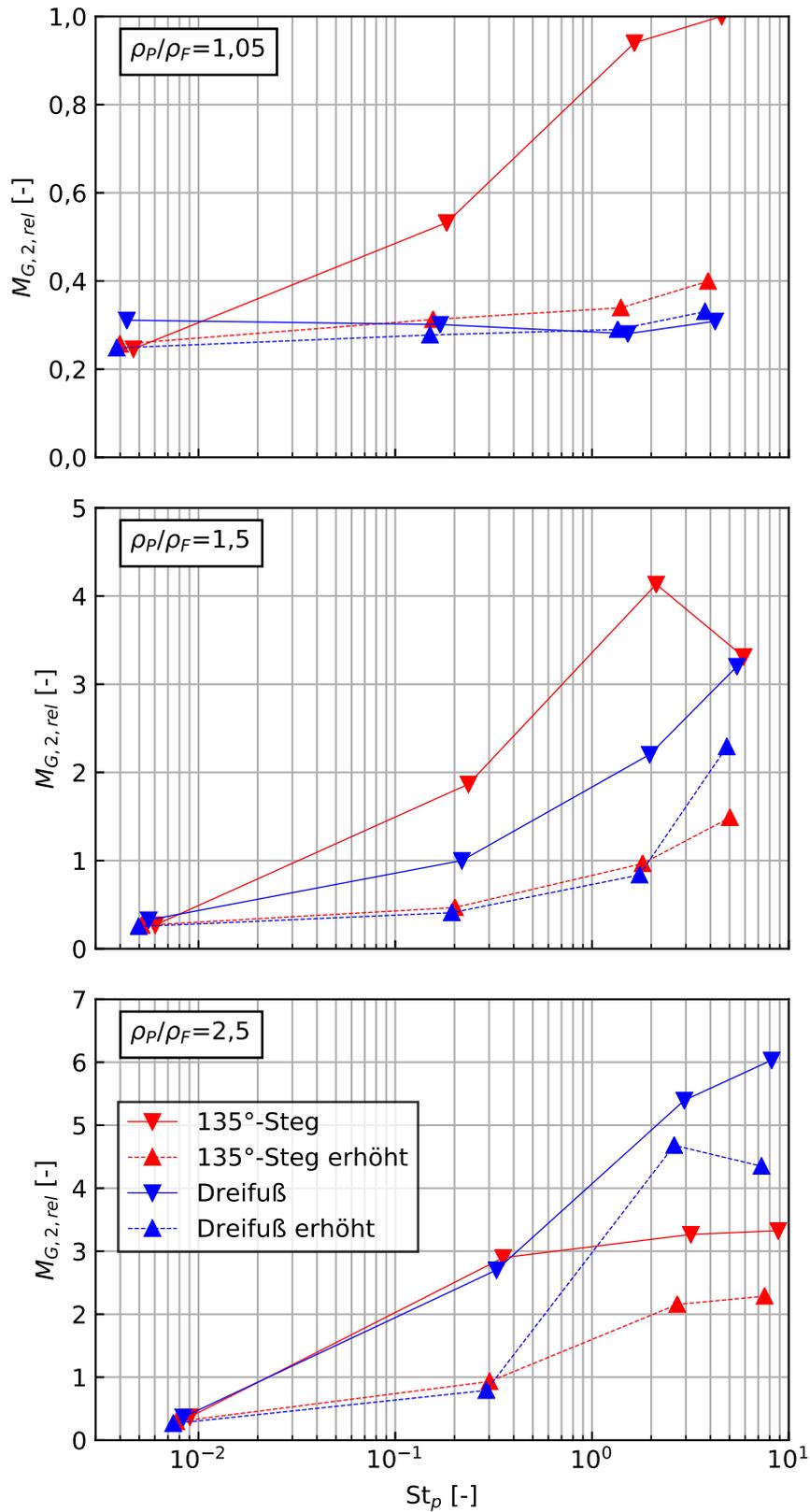


Abbildung 6.9: Relative Mischgüten $M_{G,2,rel}$ am Ende der Simulationen der vier Geometrievarianten für die drei Dichteverhältnisse ρ_P/ρ_F in Abhängigkeit von der Stokeszahl St .

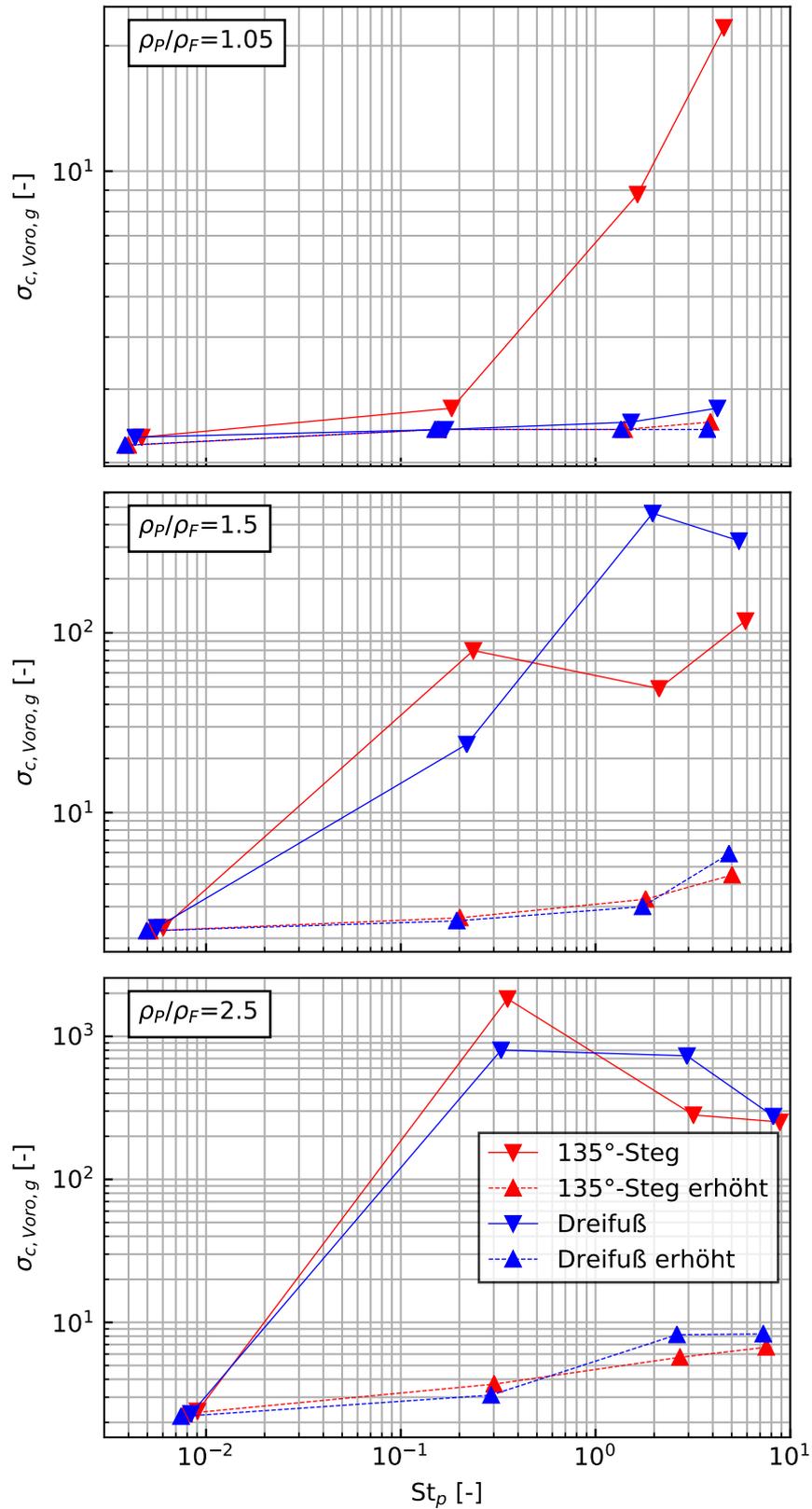


Abbildung 6.10: Geometrische Standardabweichungen der aus den Voronoi-Volumina berechneten lokalen Konzentrationen $\sigma_{c,g,Voro}$ am Ende der Simulationen der vier Geometrievarianten für die drei Dichteverhältnisse ρ_P/ρ_F in Abhängigkeit von der Stokeszahl St .

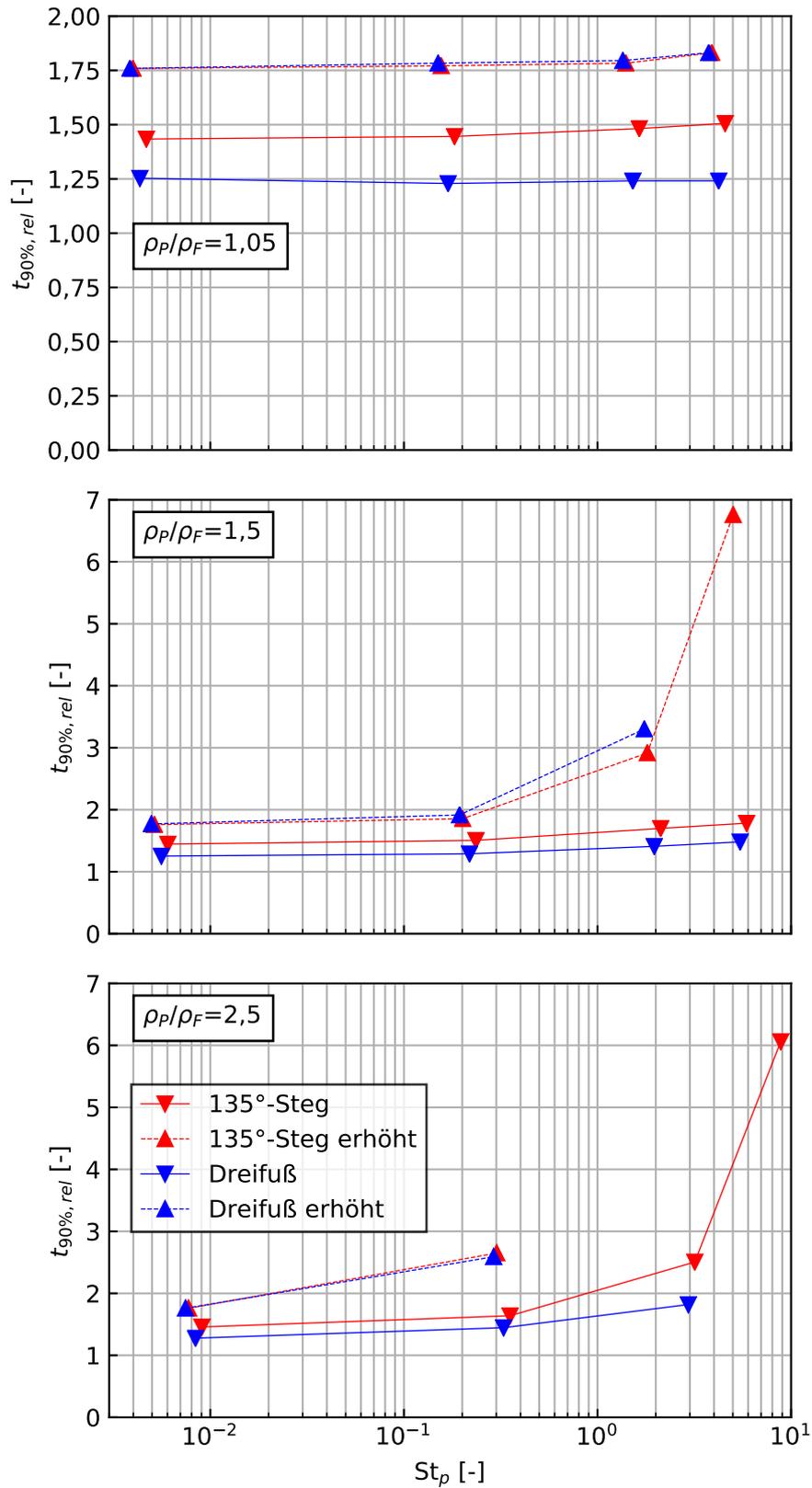


Abbildung 6.11: Relative Mischdauern als 90%-Kriterium $t_{90\%,rel}$ der vier Geometrievarianten für die drei Dichteverhältnisse ρ_P/ρ_F in Abhängigkeit von der Stokeszahl St_p .

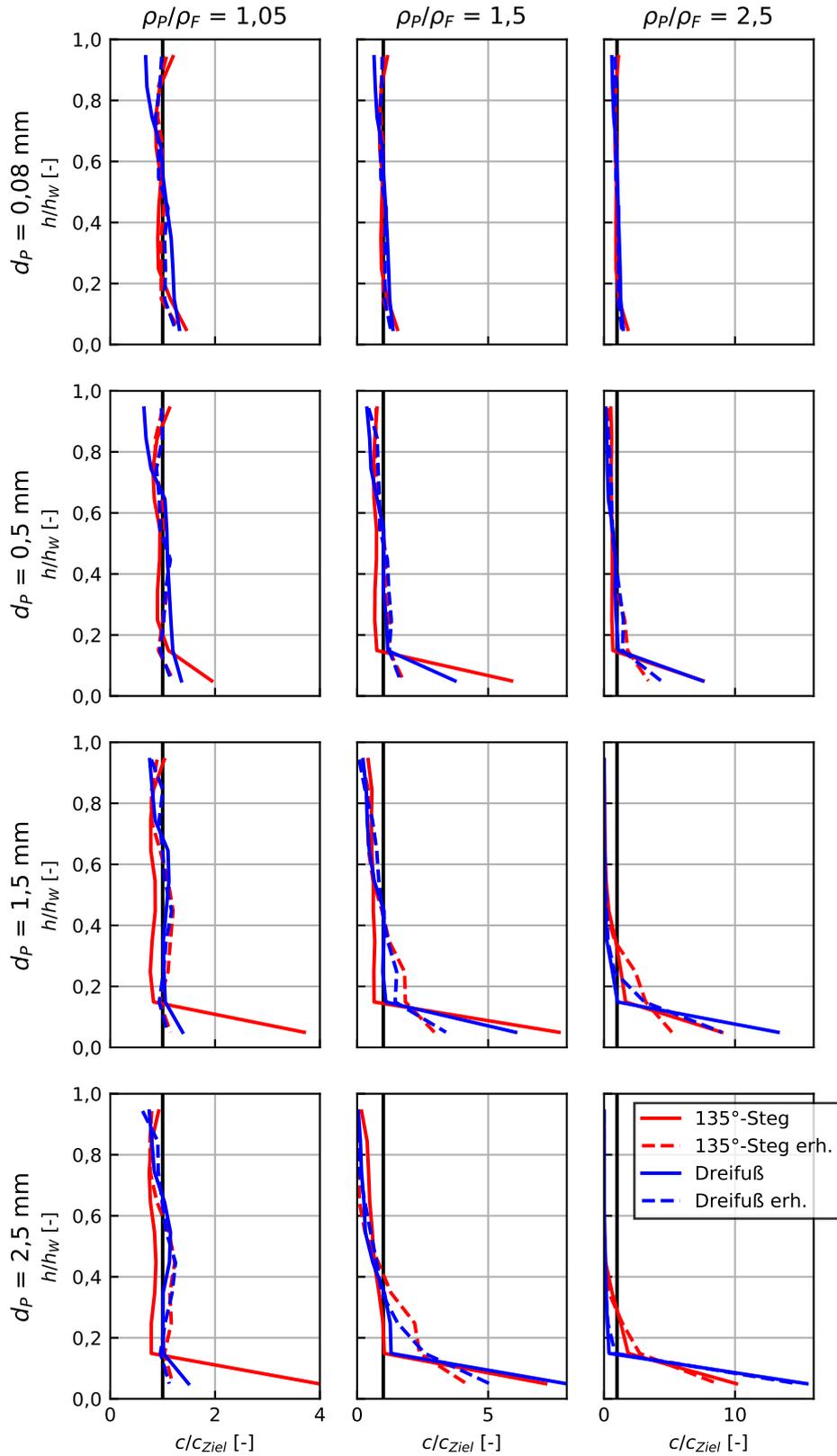


Abbildung 6.12: Vertikale Profile der normierten Partikelkonzentrationen c/c_{Ziel} der vier Geometrievarianten für die drei Dichteverhältnisse ρ_p/ρ_F und die vier Durchmesser d_p ; für $c/c_{Ziel} = 1$ ist in jedem Plot eine senkrechte schwarze Linie eingezeichnet.

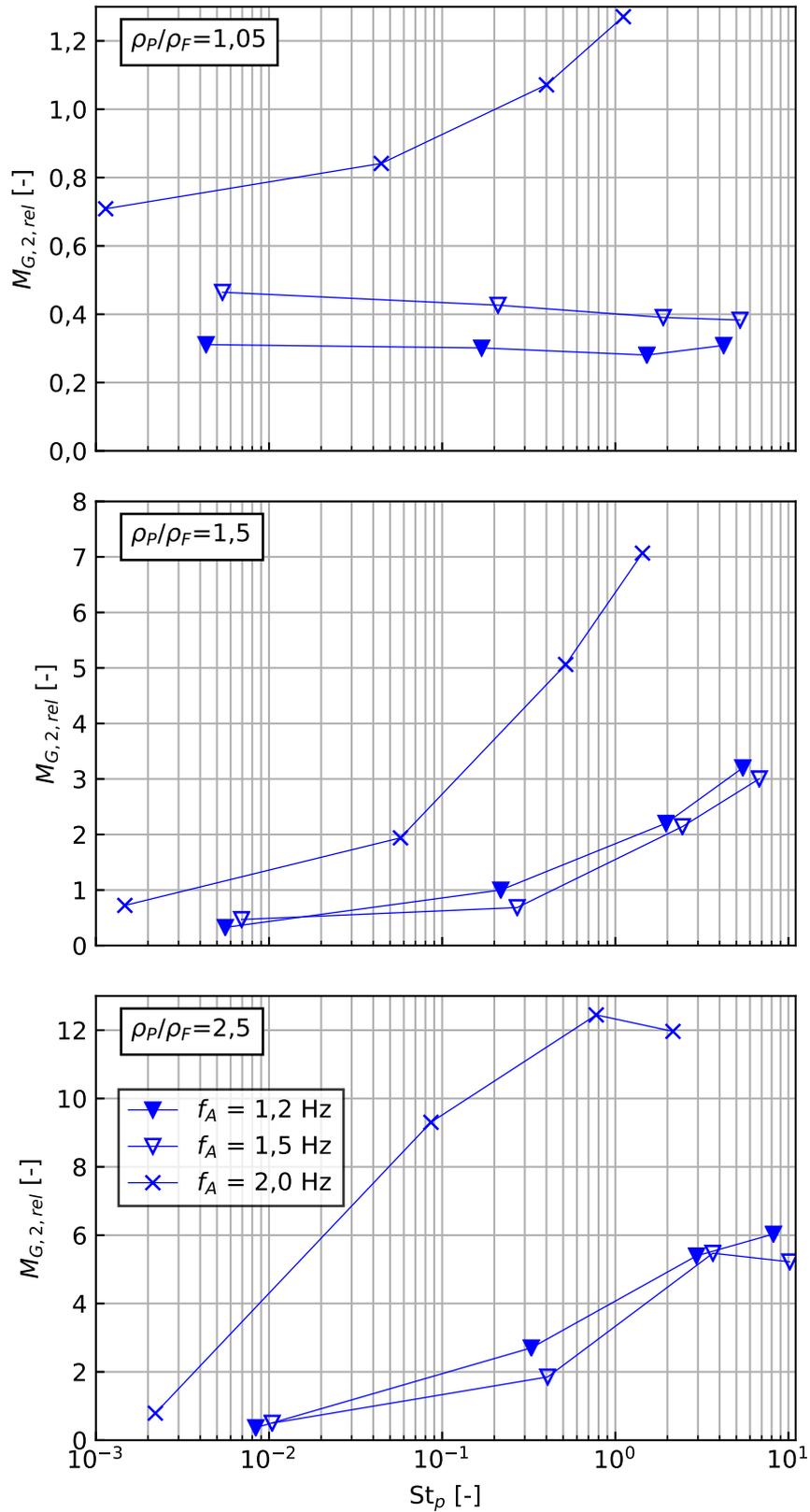


Abbildung 6.13: Darstellung der relativen Mischgüten $M_{G,2,rel}$ am Ende der Simulationen für drei verschiedene Frequenzen beim Dreifuß am Boden in Abhängigkeit von der Stokeszahl St_p , von oben nach unten für die drei Dichteverhältnisse ρ_P/ρ_F .

Partikelstokeszahl und für die drei genutzten Dichteverhältnisse. Auch hier schneidet die höchste Antriebsfrequenz 2,0 Hz am schlechtesten ab. In den Fällen, in denen das 90%-Kriterium erfüllt wurde, liegt die relative Mischzeit bei etwa dem Sechs- bis Siebenfachen der beiden niedrigeren Frequenzen. Für diese lässt sich sagen, dass die Ergebnisse den Erwartungen entsprechen: Durchgängig wird das Kriterium bei 1,5 Hz schneller erfüllt als bei 1,2 Hz. Zusätzlich ist zu sehen, dass selbst für die schwersten und größten Partikel mit der leicht erhöhten Frequenz das Mischkriterium noch erfüllt werden konnte, während das bei 1,2 Hz nicht der Fall ist.

Abbildung 6.15 zeigt schließlich die Konzentrationsprofile über der Behälterhöhe für die drei Frequenzen und die verschiedenen Durchmesser und Dichteverhältnisse. Durchgängig ist zu sehen, dass die Konzentration in Bodennähe mit Dichte und Durchmesser der Partikel für alle Varianten ansteigt. Für $f_A = 2,0$ Hz ist dieses Verhalten allerdings auch schon bei den kleinen ($d_p = 0,08$ mm) und den sehr leichten ($\rho_p/\rho_f = 1,05$) Partikeln zu beobachten und generell ist es hier auch deutlicher ausgeprägt als bei den beiden niedrigeren Frequenzen. Bei den beiden niedrigen Frequenzen gibt es keine ausgeprägten Unterschiede, wobei in größeren Höhen leichte Vorteile für $f_A = 1,5$ Hz zu Tage treten.

Es lässt sich insgesamt festhalten, dass das Erhöhen der Antriebsfrequenz auf 1,5 Hz und damit auf etwa Resonanzfrequenz leichte Vorteile sowohl hinsichtlich Mischdauer als auch hinsichtlich Mischgüte mit sich bringt. Und wie zu erwarten, verschlechtert sich das Mischergebnis sehr deutlich bei weiterer Erhöhung von f_A über die Resonanzfrequenz hinaus auf 2,0 Hz.

6.4 ZUSAMMENFASSUNG

In diesem Kapitel wurden ausgehend von den Erkenntnissen in Kapitel 5 weitere Varianten erstellt. Für diese Varianten wurden ebenfalls Strömungssimulationen durchgeführt und diese hinsichtlich verschiedener Parameter untersucht. Eine wichtige Erkenntnis ist, dass eine Änderung von 135°-Steg zu Dreifuß keine so große Rolle zu spielen scheint, wie die Höhe des Rohrendes über dem Behälterboden. Es konnte außerdem gezeigt werden, dass der Einfluss der Frequenz mit dem genutzten CFD-Modell gut beschrieben wird. Eine Erhöhung der Antriebsfrequenz auf etwa Resonanzfrequenz bringt eine deutliche Erhöhung des Geschwindigkeits- und Turbulenzniveaus mit sich. Beides fällt wie-

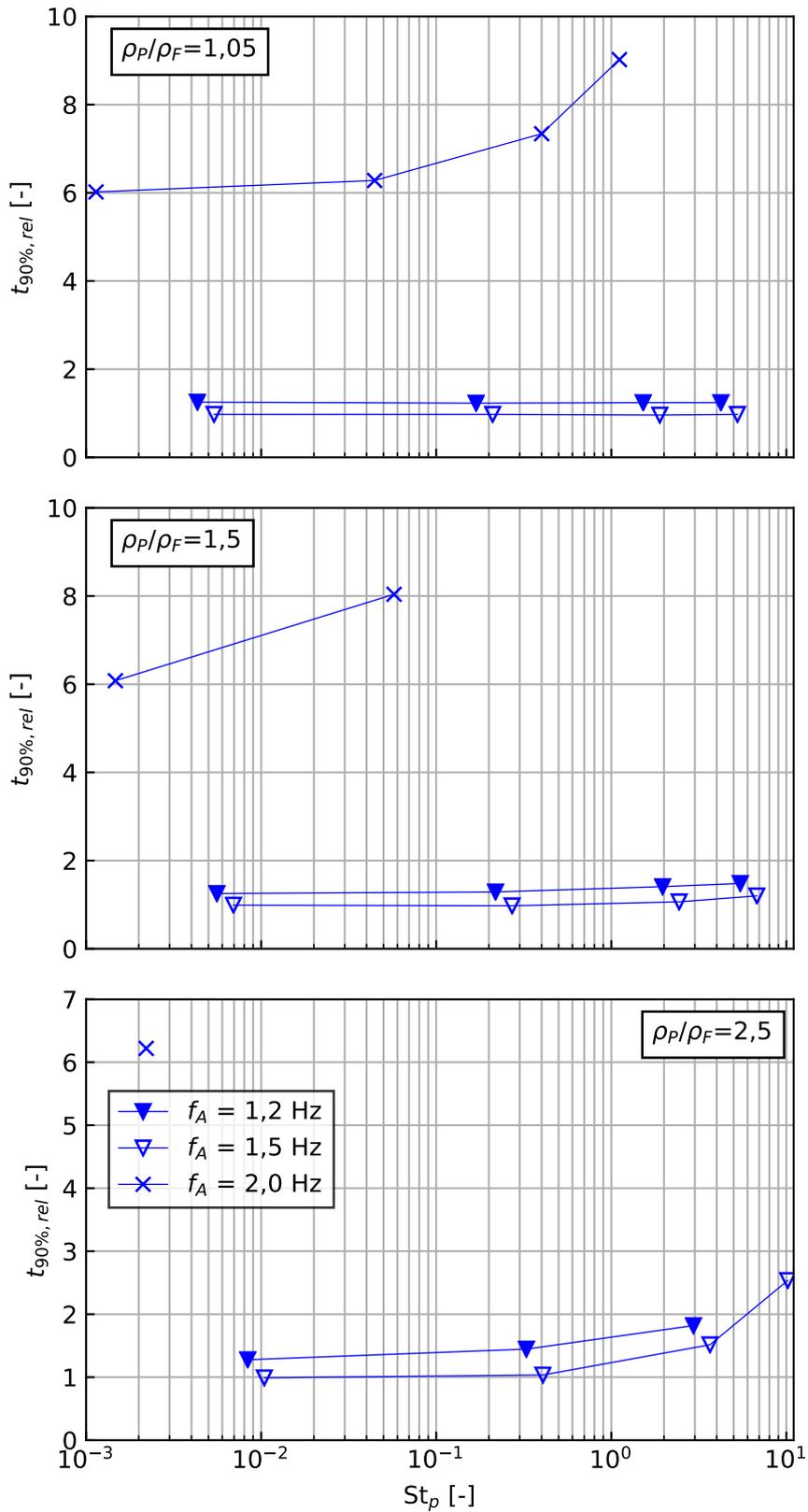


Abbildung 6.14: Darstellung der relativen Mischdauern als 90%-Kriterium $t_{90\%,rel}$ für die drei untersuchten Antriebsfrequenzen f_A in Abhängigkeit von der Stokeszahl St .

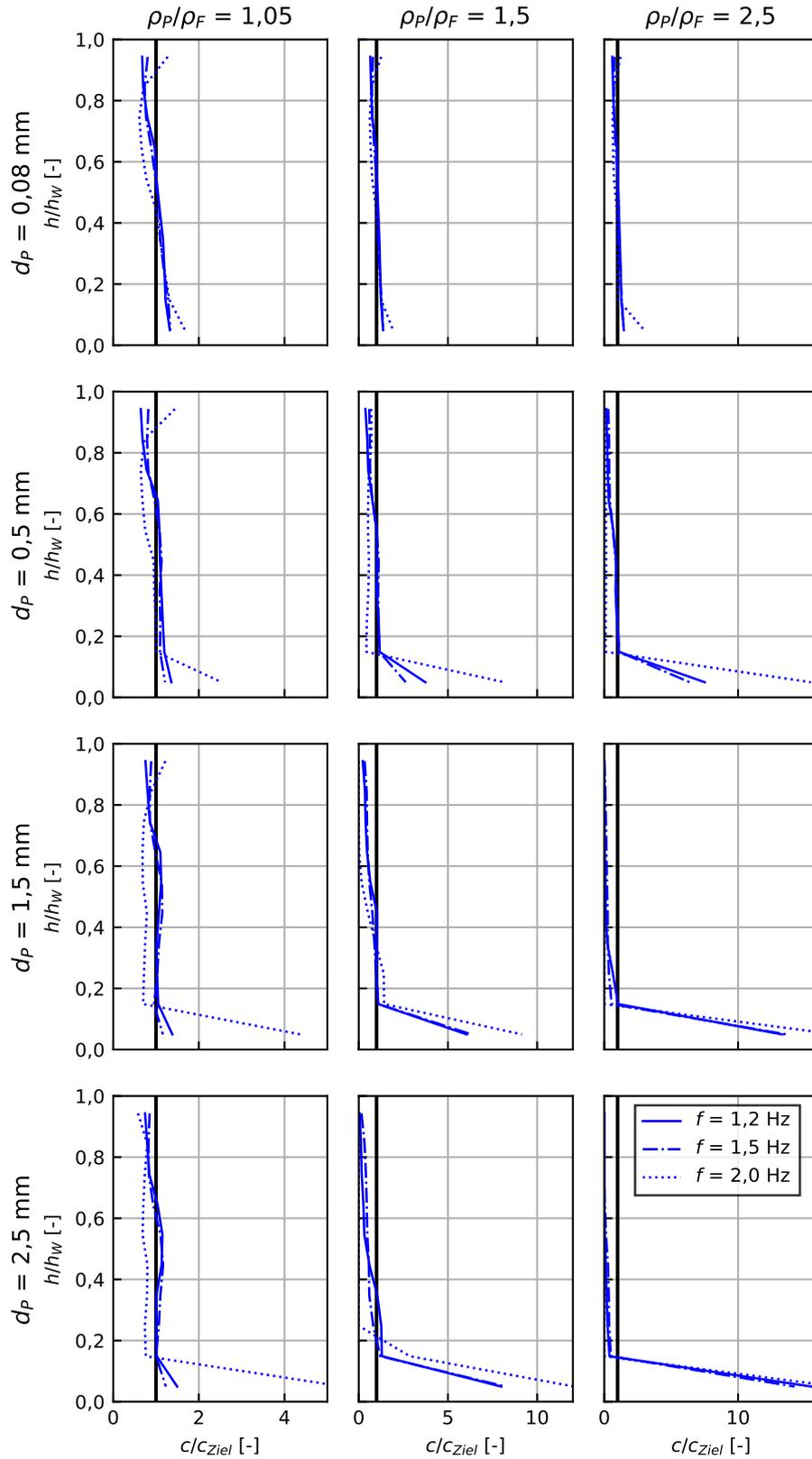


Abbildung 6.15: Vertikale Profile der normierten Partikelkonzentrationen c/c_{Ziel} für die drei Dichteverhältnisse ρ_P/ρ_F und die vier Durchmesser d_P ; für $c/c_{Ziel} = 1$ ist in jedem Plot eine senkrechte schwarze Linie eingezeichnet.

der ab, wenn die Antriebsfrequenz über die Resonanzfrequenz hinaus erhöht wird. Hinsichtlich des Leistungseintrags schneidet die Variante „erhöhter Dreifuß“ am besten ab. Sie liegt in etwa auf dem Niveau der sehr effizienten Propellerrührer.

Auf Basis der Strömungssimulationen wurden schließlich Mischvorgänge in FPR-Mischern als Tracer- und Partikelsimulationen numerisch nachgebildet. Hinsichtlich der Mischgüte $M_{G,2,rel}$ haben sich die Varianten mit erhöhtem Rohr als vorteilhaft herausgestellt. Im Gegenzug ist die Mischdauer bei Varianten mit Rohr am Boden generell niedriger. Die Anwendung der Voronoï-Zerlegung für die Beurteilung der Mischgüte erwies sich als recht vorteilhaft. Es ergaben sich generell die gleichen Tendenzen wie bei der Mischgüte $M_{G,2,rel}$. Jedoch sind die Ergebnisse in der Hinsicht konsistenter, dass die Varianten mit erhöhtem Rohr durchgängig bessere Werte erzielen, als die Varianten mit Rohr am Boden.

Eine Erhöhung der Antriebsfrequenz auf die Resonanzfrequenz des Systems bringt Vorteile hinsichtlich der Mischdauer, während die Mischgüte in etwa gleich bleibt. Wird die Frequenz weiter erhöht, verschlechtern sich diese Werte deutlich.

Insgesamt bleibt festzuhalten, dass der erhöhte Dreifuß die Vorzugsvariante ist, wenn es um Mischgüte und Leistungseintrag geht. Der Dreifuß am Boden ist zu bevorzugen, wenn die Mischdauer im Vordergrund steht.

EINFLUSS DER AUF DIE PARTIKEL WIRKENDEN KRÄFTE

Die in [Kapitel 6](#) durchgeführten Partikelsimulationen werden in diesem Kapitel hinsichtlich der Bedeutung der auf die Partikel wirkenden Einzelkräfte (siehe [Abschnitt 3.2.2](#)) untersucht. Im ersten Abschnitt wird die relative Größe der einzelnen Kräfte im gesamten Behälter näher beleuchtet. Der zweite Abschnitt widmet sich den Kräfteverhältnissen über der Höhe des Mischbehälters und der dritte Abschnitt untersucht den Einfluss der transversalen Auftriebskräfte und der Basset-Kraft auf die Mischeigenschaften.

7.1 RELATIVE GRÖSSE DER PARTIKELKRÄFTE IM GESAMTEN BEHÄLTER

Zur Auswertung wurde in den letzten beiden vollen Schwingungen für Zeitschritte von 1 ms die Magnitude jeder Einzelkraft am Partikel $F_{p,i}$ mit der Magnitude der Widerstandskraft F_W normiert und dann über alle Zeitschritte und Partikel gemittelt (zu den Kräften siehe [Abschnitt 3.2.2](#)). Die Widerstandskraft F_W wurde zur Normierung herangezogen, da sie üblicherweise die relevanteste der auf die Partikel wirkenden Kräfte ist. Die so berechneten Werte sind für die drei genutzten Dichteverhältnisse ρ_p/ρ_f in [Abbildung 7.1](#) über der ebenfalls zeitlich und über alle Partikel gemittelten Partikel-Stokeszahl $St_p = \tau_p/\tau_f$ aufgetragen. Als Fluid-Zeitkonstante τ_p wird das gemittelte integrale Zeitmaß T_L genutzt. Weil sich zwischen den einzelnen Geometrien (bei gleicher Antriebsfrequenz $f_A = 1,2$ Hz) keine nennenswerten Unterschiede zeigten, wurden die Werte zusätzlich über die vier Geometrien hinweg gemittelt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind diese Werte hier als durchgezogene Linien dargestellt. Die Einzelwerte für die vier Geometrien sind der Vollständigkeit halber zusätzlich als Kreuze abgebildet. Bei $F_{p,i}/F_W = 1$ ist zur Orientierung eine schwarze Linie eingezeichnet. Diese verdeutlicht die Größe der Widerstandskraft.

Die Druckgradientenkraft steigt mit steigendem Partikeldurchmesser bzw. steigender Stokeszahl. Das Dichteverhältnis ρ_p/ρ_f hat keinen nennenswerten Einfluss. Dies deckt sich damit, dass sich im Verhältnis F_{PG}/F_D

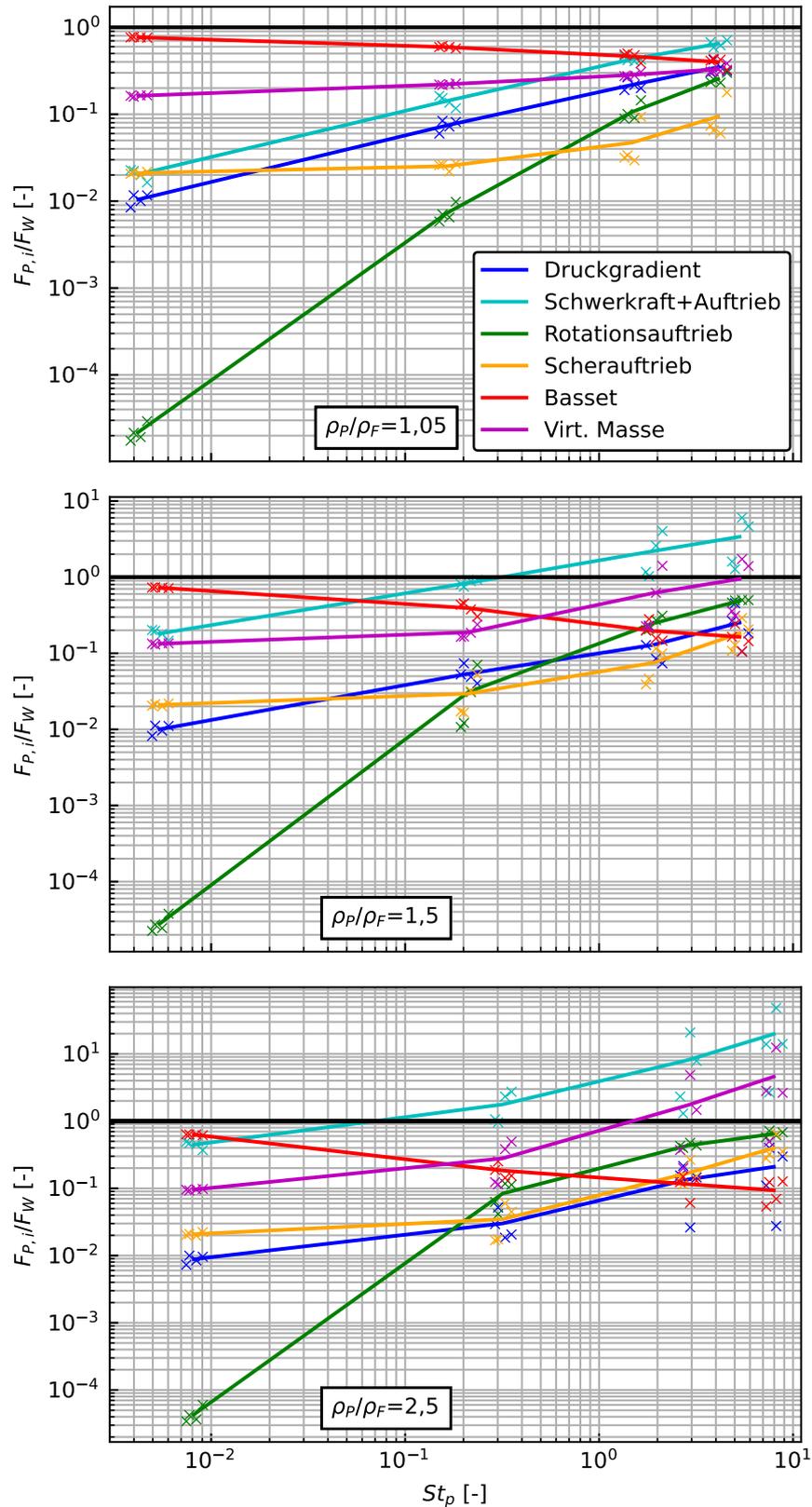


Abbildung 7.1: Lokale Größen der berücksichtigten Einzelkräfte $F_{p,i}$, normiert mit der Widerstandskraft F_W , gemittelt über zwei Schwingungen und alle Partikel, aufgetragen über der Stokeszahl St_p ; durchgezogene Linien zusätzlich gemittelt über die vier Geometrien, Einzelwerte als Kreuze; von oben nach unten aufsteigende Dichteverhältnisse ρ_p/ρ_f .

sowohl Partikelmasse als auch das Dichteverhältnis kürzen lassen und als einzige hier betrachtete Abhängigkeit der Durchmesser bleibt.

Wie zu erwarten steigt der Schwerkräfteinfluss ebenfalls mit steigender Stokeszahl und zusätzlich mit steigendem Dichteverhältnis, da beides mit steigender Masse einhergeht. Für große und schwere Partikel wird diese Kraft schließlich zur bestimmenden Kraft mit Werten von bis über dem Zehnfachen der Widerstandskraft. Dies hat sich auch in der Betrachtung der Mischeigenschaften widerspiegelt, wo sich große und schwere Partikel kaum mehr vom unteren Behälterbereich lösen konnten.

Der Rotationsauftrieb steigt sehr stark mit steigendem Durchmesser an, bleibt jedoch meist unter einem Betrag von 10% von F_W , für kleine Durchmesser im Bereich von 0,01% von F_W . Wandkollisionen treten bei kleinen Partikeln wahrscheinlich seltener auf als bei größeren, und die dennoch durch die ohnehin wenigen Kollisionen hervorgerufenen Relativrotationen werden aufgrund des geringen Trägheitsmoments bei kleinen Partikeln recht schnell gedämpft. Für die beiden großen genutzten Partikeldurchmesser steigt aber auch diese Kraft bis etwa 70% F_W an.

Ähnlich verhält es sich mit dem Scherauftrieb, nur das hier der Anstieg geringer ausfällt und sein Betrag nicht unter $\approx 0,02 \cdot F_W$ fällt. Für sehr träge Partikel steigt jedoch auch hier der Wert über die Grenze von 10% und erreicht bis zu $0,4 \cdot F_W$.

Die Basset-Kraft sticht etwas heraus in dieser Betrachtung. Ihre relative Bedeutung sinkt mit zunehmender Stokeszahl, während die aller anderen Kräfte steigt. Dabei bewegt sich das Verhältnis F_B/F_W zwischen etwa 0,1 für große Stokeszahlen und Dichteverhältnisse bis zu knapp 0,8 für die kleinsten und leichtesten Partikel. Eine mögliche Erklärung hierzu: Schaut man sich die Kräfte in [Abschnitt 3.2.2](#) an, so sieht man, dass das Verhältnis $F_{p,i}/F_W$ für die Bassetkraft nicht vom Partikeldurchmesser abhängig ist, für alle anderen Kräfte hingegen schon. Ein weiterer erwähnenswerter Aspekt ist, dass die Bassetkraft für kleine St_p und ρ_p/ρ_f nach der Widerstandskraft die relevanteste Kraft ist.

Die Beträge der virtuellen Masse sind ähnlich der Basset-Kraft stets höher als 10% von F_W , steigen jedoch mit steigender Stokeszahl St_p an, für große Dichteverhältnisse stärker als für kleine. Der Einfluss des Dichteverhältnisses scheint bei kleinen Stokeszahlen gering zu sein. Für große Stokeszahlen steigt der relative Betrag der virtuellen Masse mit ρ_p/ρ_f und sie wird zur wichtigsten Kraft nach der Widerstandskraft und der

Tabelle 7.1: Zusammenfassung der Partikel-Stokeszahlen bei Gleichheit von Basset-Kraft und virtueller Masse ($St_{p,BxVM}$) bzw. Rotations- und Scherauftrieb ($St_{p,LRxLS}$) und die zugehörigen Kraftverhältnisse F_B/F_W bzw. F_{LS}/F_W bei den entsprechenden Stokeszahlen.

| ρ_p/ρ_f | $St_{p,LRxLS}$ | F_{LS}/F_W | $St_{p,BxVM}$ | F_B/F_W |
|-----------------|----------------|--------------|---------------|-----------|
| 1,05 | 0,65 | 0,04 | 5,0 | 0,4 |
| 1,5 | 0,22 | 0,03 | 0,5 | 0,3 |
| 2,5 | 0,20 | 0,03 | 0,2 | 0,2 |

kombinierten Schwer- und Auftriebskraft bei den beiden höheren Dichteverhältnissen.

In [Tabelle 7.1](#) sind die ungefähren Werte der Stokeszahlen zusammengefasst, oberhalb derer der Rotations- größer als der Scherauftrieb ist bzw. die virtuelle Masse den Betrag der Bassetkraft überschreitet. Die Werte von St_p liegen bei den beiden transversalen Auftriebskräften zwischen 0,2 und 0,65. Die Kräfte betragen hier in etwa das 0,03- bis 0,04-fache der Widerstandskraft. Bei Bassetkraft und virtueller Masse liegen diese Kreuzungspunkte zwischen $St_p \approx 0,2$ für $\rho_p/\rho_f = 2,5$ und $St_p > 5,0$ für $\rho_p/\rho_f = 2,5$. Diese Kräfte erreichen hier etwa 20% bis 40% des Betrags der Widerstandskraft.

Geht man davon aus, dass Kräfte unterhalb eines Betrags von ca. 10% F_W vernachlässigt werden können, sind hier im Wesentlichen zwei Bereiche mit unterschiedlichen relevanten Kräften auszumachen. Im Bereich unterhalb von etwa $St_p = 0,3$ sind die neben der Widerstandskraft relevanten Kräfte Bassetkraft, virtuelle Masse und, für trägere Partikel, Schwerkraft und Auftrieb. Ab etwa $St_p = 1$ betragen alle untersuchten Kräfte mehr als 10% der Widerstandskraft, inklusive der häufig vernachlässigten Bassetkraft, virtuellen Masse und Scher- und Rotationsauftrieb.

7.2 RELATIVE GRÖSSE DER PARTIKELKRÄFTE ÜBER DER HÖHE

Nun verhält es sich so, dass in den untersuchten [FPR](#)-Mischern (wie in den meisten Mischbehältern) in verschiedenen Bereichen recht unterschiedliche Strömungen herrschen. Deshalb wurde weiterhin untersucht, wie sich die Kräfteverhältnisse über die Höhe des Behälters ändern. Der Behälter, besser gesagt der Bereich der flüssigen Phase, wurde dazu in zehn horizontale Abschnitte eingeteilt, wie schon in [Abschnitt 6.3.2](#). In je-

der dieser zehn „Scheiben“ wurden nun erneut die gemittelten, relativen Kräfte berechnet. [Abbildung 7.2](#) zeigt die so ermittelten Profile über der normierten Höhe h/h_W am Beispiel des Dreifußes mit einem erhöhten Rohrausgang für alle untersuchten Dichteverhältnisse ρ_p/ρ_f und Partikeldurchmesser d_p . Für $d_p = 0,08$ mm ist die Rotationsauftriebskraft nicht dargestellt, um die Skalen nicht zu stark zu komprimieren. Sie verhält sich dort in etwa wie bei $d_p = 0,5$ mm, nur um etwa drei Größenordnungen nach links verschoben. Zur Veranschaulichung ist auch hier die Widerstandskraft als schwarze Linie bei $F_{p,i}/F_W = 1$ eingezeichnet.

Die Druckgradientenkraft verhält sich in etwa überall gleich, nur auf unterschiedlichen Niveaus. Im unteren Behälterbereich ist sie ungefähr eine Größenordnung größer als im oberen. Am Rohrausgang herrscht eine deutlich intensivere Strömung mit entsprechend großen Druckgradienten, die einen Anstieg der Kraft in diesem Bereich bewirken.

Bei Schwer- und Auftriebskraft verhält es sich zumindest für kleine Durchmesser anders herum: Da diese Kräfte absolut gesehen konstant bleiben, ist im Bereich des Rohrausgangs auf Grund der recht hohen Strömungskräfte und der damit einhergehenden hohen Widerstandskraft der relative Beitrag dieser Kräfte niedriger. In den Bereichen kleinerer Schlupfgeschwindigkeiten im oberen Behälter steigt die relative Bedeutung wieder an. Mit größer und schwerer werdenden Partikeln steigt der Einfluss der Schwerkraft. Für $\rho_p/\rho_f = 2,5$ und Partikel mit $d_p \geq 1,5$ mm ist zu sehen, dass die Schwerkraft im Mittel deutlich größer ist als die Widerstandskraft. Daraus folgt auch, dass die Partikel nicht mehr bis in die größeren Höhen vordringen können, weil sie vorher wieder absinken. Deshalb enden die Profile für diese Partikel auch bei normierten Höhen von etwa 0,6 bzw. 0,8.

Der Rotationsauftrieb verhält sich im Prinzip überall gleich und ist in niedrigeren Höhen größer als weiter oben im Behälter. Die Ursache hierfür dürfte darin liegen, dass zum Einen im unteren Behälterbereich deutlich mehr Wandkollisionen, die im Partikel eine rotatorische Bewegung induzieren, auftreten, da die Partikel hier am Rohrende direkt auf die Behälterwände hin beschleunigt werden. Zum Anderen ist im Bereich des Rohraustritts mit einer höheren Fluidrotation zu rechnen, die über das hydraulische Moment ebenfalls Partikelrotation induziert. In [Abschnitt 6.3.2](#) wurde gezeigt, dass sich vor allem schwerere Partikel in niedrigeren Höhen sammeln. Da dies auch der Bereich mit hohen Werten für den Rotationsauftrieb ist, erklärt dies mit, warum dessen relative Größe in [Abschnitt 7.2](#) mit steigender Stokeszahl so stark ansteigt.

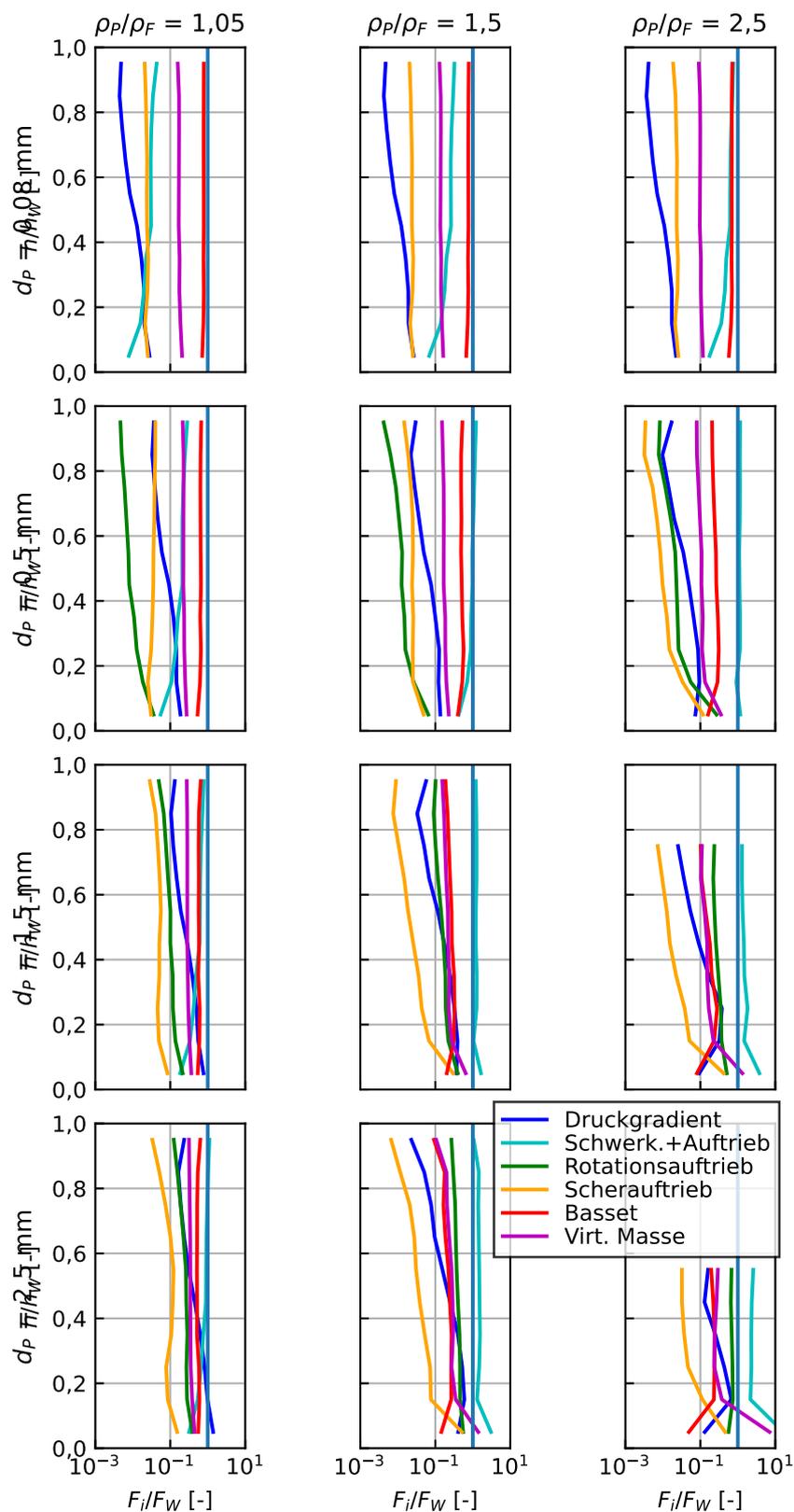


Abbildung 7.2: Lokale Profile der normierten Einzelkräfte $F_{p,i}/F_W$ entlang der normierten Höhe h/h_W , gemittelt über zwei Schwingungen und alle Partikel in den jeweiligen Höhen am Beispiel des erhöhten Dreifußes für alle untersuchten d_p und ρ_p/ρ_f .

Für die kleinsten Partikel ist der Scherauftrieb indifferent sowohl gegenüber dem Dichteverhältnis als auch gegenüber der Höhe und liegt im Größenbereich von etwa 2% der Widerstandskraft. Mit steigender Partikeldichte und -stokeszahl verändert sich das Verhalten dahingehend, dass seine relative Größe in den unteren Bereichen, also Regionen hoher Scherintensität, immer größer wird (bis etwa 50% F_W) und in den oberen Behälterbereichen, in denen eine eher scherarme Strömung herrscht, auf unter 1% F_W sinkt.

Die Bassetkraft ist ebenfalls zu großen Teilen indifferent gegenüber der Höhe, nur für sehr schwere Partikel sinkt ihr Wert in Bodennähe. Dies dürfte daher rühren, dass dort vermehrt Wandkollisionen auftreten, und diese eben am meisten für die trägsten Partikel. In den Berechnungen wird die Bassetkraft nach Wandkollisionen zu 0 gesetzt, wodurch sich ihr Mittelwert bei häufigen Kollisionen natürlich verringert.

Bei der virtuellen Masse verhält es sich nun entgegengesetzt. Diese ist zwar ebenfalls größtenteils konstant über der Höhe, steigt jedoch für große, schwere Partikel in Bodennähe an, mitunter auf das siebenfache der Widerstandskraft. Da die virtuelle Masse von der relativen Beschleunigung abhängt, ist auch zu erwarten, dass diese im Bereich des Rohraustritts mit den starken Geschwindigkeitsgradienten und der hochgradig instationären Strömung am größten ist.

Insgesamt lässt sich sagen, dass die Widerstandskraft vor allem in den oberen Bereichen des Behälters die relevanteste Kraft ist, abgesehen von den Fällen großer, schwerer Partikel, bei denen die Schwerkraft dominiert. Im Bereich des Rohraustritts mit der stark inhomogenen Strömung und großen zeitlichen Variationen der Geschwindigkeit, trifft dies jedoch nicht zu. Teilweise tragen hier sämtliche betrachteten Kräfte einen beträchtlichen Teil zur Gesamtkraft bei.

7.3 EINFLUSS DER KRÄFTE AUF DAS MISCHVERHALTEN

Nachdem nun bereits die Beträge der Kräfte ausführlich untersucht worden, sollen in diesem Abschnitt noch die Auswirkungen auf das Mischen untersucht werden. Dafür wurden weitere Partikelsimulationen durchgeführt und verschiedene Kräfte „abgeschaltet“. Genutzt wurde dafür erneut die Variante Dreifuß mit Rohr am Boden. Nacheinander wurden einmal die Bassetkraft nicht mitberechnet und einmal gleichzeitig die beiden transversalen Auftriebskräfte. Die Simulationen wurden wieder

mit den bekannten vier Dichteverhältnissen und drei Partikeldurchmessern durchgeführt.

Die Ergebnisse für die Mischgüte $M_{G,2,rel}$ sind in [Abbildung 7.3](#) dargestellt. Für die jeweils beiden kleinsten Stokeszahlen hat weder die Vernachlässigung der Bassetkraft noch die der transversalen Auftriebskräfte nennenswerte Auswirkungen auf die Mischgüte $M_{G,2,rel}$. Dies ändert sich mit weiter steigenden Stokeszahlen: für Dichteverhältnisse von 1,05 und 1,5 verschlechtert sich die Mischgüte kontinuierlich. Für das größte untersuchte Dichteverhältnis von 2,5 wird die Mischgüte für die größten Partikel wieder etwas besser. Die Vernachlässigung von Rotations- und Scherlift hat dabei einen deutlich größeren Einfluss als die Vernachlässigung der Bassetkraft.

In [Abbildung 7.4](#) ist der Einfluss auf die Mischdauer $t_{90\%,rel}$ zu sehen. Auch hier ergibt sich ein ähnliches Bild: Für kleine Stokeszahlen hat die Vernachlässigung der Kräfte keinen großen Einfluss. Mit steigender Stokeszahl jedoch vergrößert sich die Mischdauer merklich, und dabei umso stärker, je größer das Dichteverhältnis ist. Jedoch ist hier der Einfluss der Basset-Kraft deutlich größer als der der Auftriebskräfte. Betrachtet man beispielsweise die Partikel mit einem Durchmesser von 1,5 mm, was einer Stokeszahl von etwa 1,5 bis 3 entspricht, so beträgt die Erhöhung der Mischdauer durch nicht-berücksichtigen der Auftriebskräfte etwa 0,9%, 5%, und 17% für die drei Dichteverhältnisse von 1,05, 1,5, und 2,5. Bei Nichtberücksichtigung der Basset-Kraft lauten die Werte 3%, 18%, und 160%, liegen also deutlich darüber.

Zieht man die Betrachtungen in den beiden vorigen Abschnitten mit ein, so fällt ein Widerspruch auf: Die relativen Beträge der Basset-Kraft sind für kleine Stokeszahlen deutlich größer als für hohe. Für die in diesem Abschnitt betrachteten Kriterien zeigt sich nun aber ein genau entgegengesetztes Bild. Eine mögliche Erklärung: Die Basset-Kraft stellt im Prinzip einen zusätzlichen Widerstand gegen eine Beschleunigung dar. Für die kleinen Partikel mit niedrigen Stokeszahlen macht das jedoch nur einen geringen Unterschied, da sie aufgrund ihres guten Folgevermögens der Strömung dennoch gut folgen können. Werden jedoch Partikel größerer Stokeszahl im unteren Bereich des Behälters weniger stark beschleunigt, reicht am Ende unter Umständen die Strömung nicht mehr aus, um diese nach oben mitzureißen. Zusätzlich könnte das Vermindern der Verzögerung in Wandnähe dazu führen, dass größere Partikel häufiger Wandkollisionen erfahren und so zusätzlich Impuls verlieren.

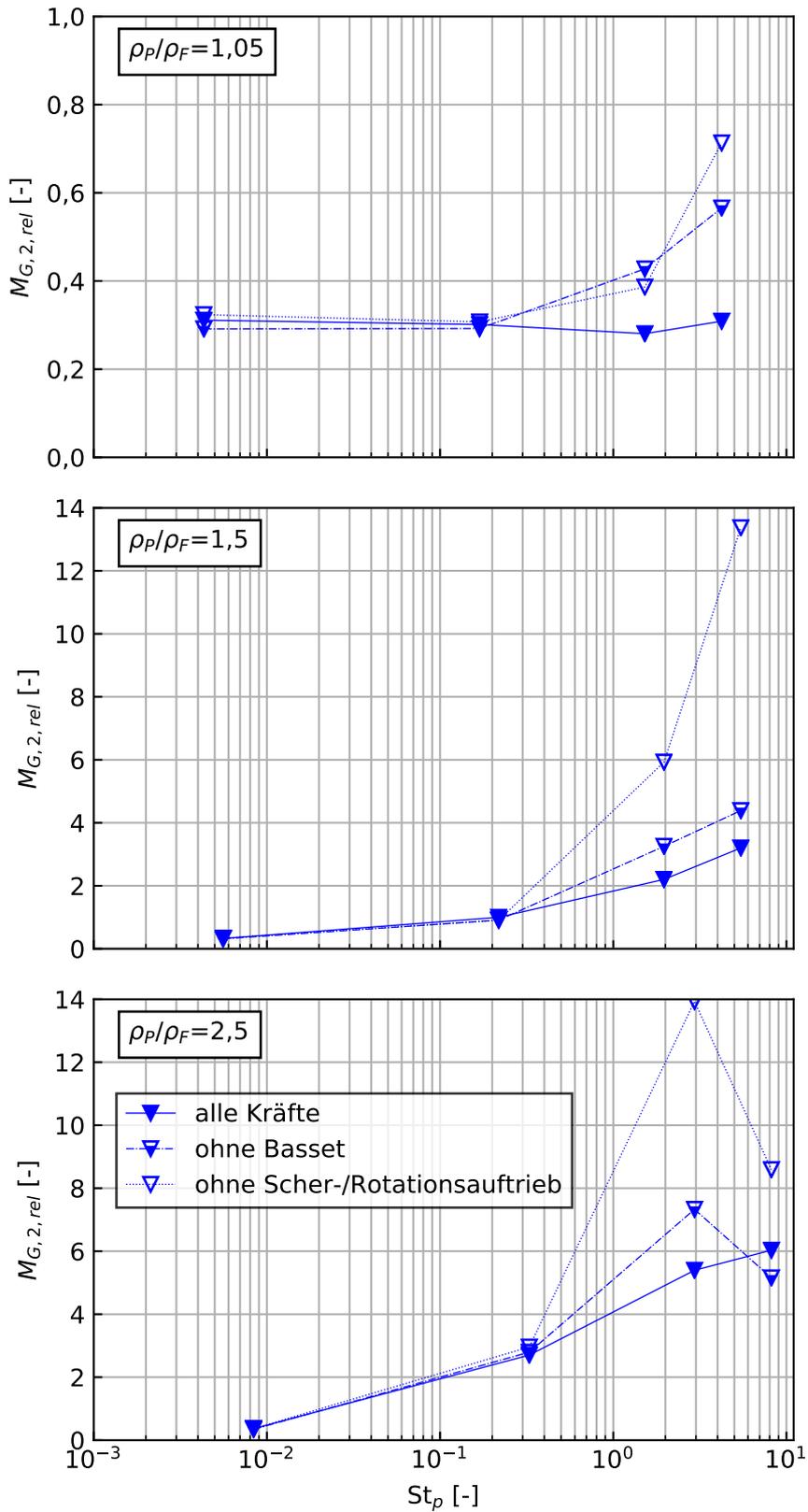


Abbildung 7.3: Die Mischgüte $M_{G,2,rel}$ in Abhängigkeit von der Partikel-Stokeszahl St_p für die verschiedenen Dichteverhältnisse ρ_p/ρ_f und Auswirkungen des nicht-Berücksichtigens von Basset-Kraft bzw. transversalen Auftriebskräften.

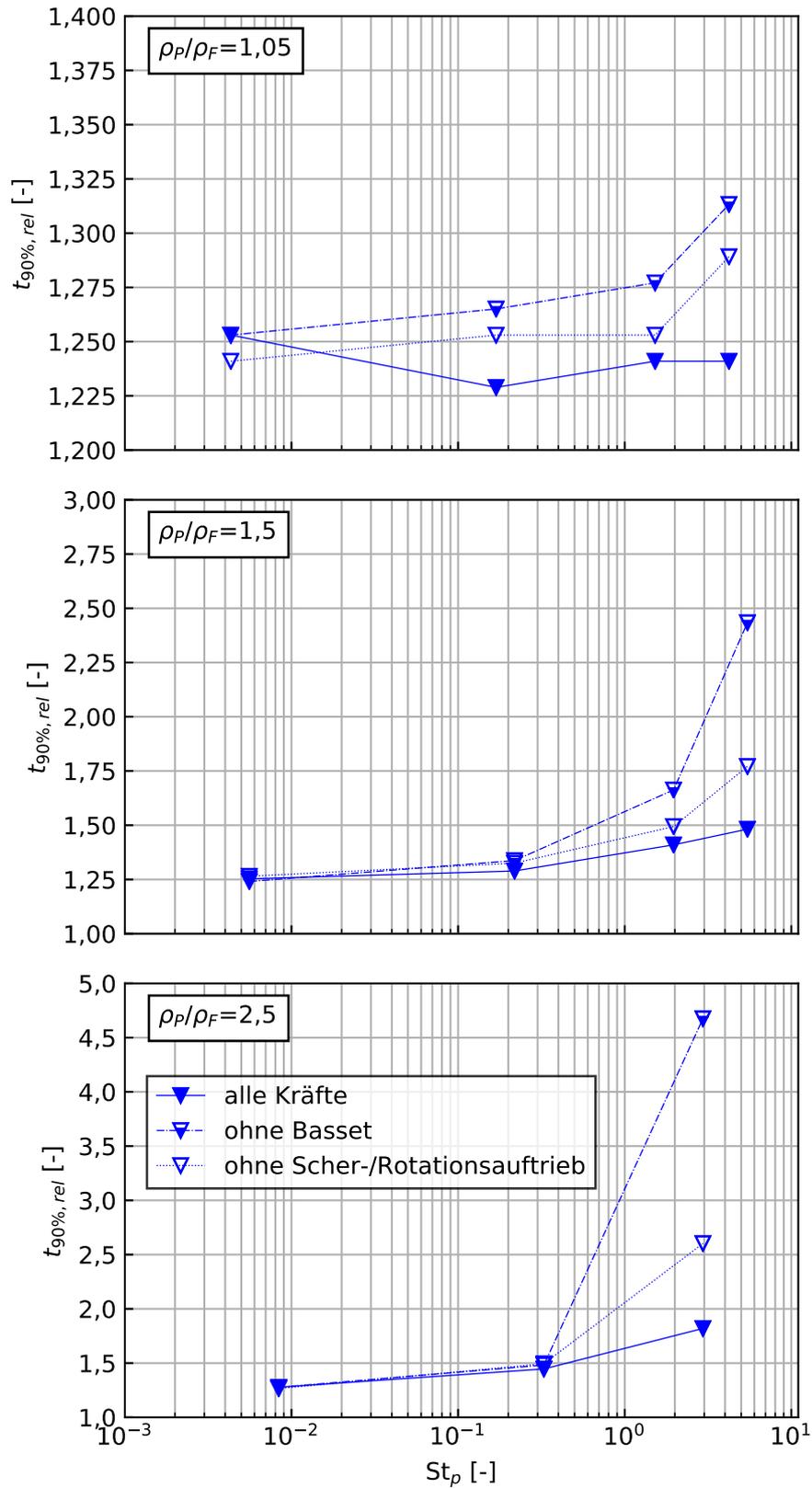


Abbildung 7.4: Die Mischdauer $t_{90\%,rel}$ in Abhängigkeit von der Partikel-Stokeszahl St_p für die verschiedenen Dichteverhältnisse ρ_p/ρ_f und Auswirkungen des nicht-Berücksichtigens von Basset-Kraft bzw. transversalen Auftriebskräften.

7.4 ZUSAMMENFASSUNG

In diesem Kapitel wurde der Einfluss der in den Euler-Lagrange-Simulationen auf die Partikel wirkenden Einzelkräfte untersucht. Der wohl interessanteste Aspekt ist, dass der Betrag der Bassetkraft recht groß ist. Aber auch die Erkenntnis, dass keine der berücksichtigten Kräfte bei den untersuchten Dichte-Durchmesser-Kombinationen stets unter 10% der Widerstandskraft liegt, ist für künftige Simulationen von Mischbehältern – und sicher auch für andere Bereiche der Verfahrenstechnik, in denen ähnliche Verhältnisse auftreten – bedeutend. Wie in den einleitenden Kapiteln erläutert, werden manche dieser Kräfte regelmäßig vernachlässigt. Die Ergebnisse dieses Kapitels legen nahe, dass eine Vernachlässigung für jede einzelne der untersuchten Kräfte stets wohlbegründet sein sollte.

Der Einfluss der Kräfte auf Mischgüte und Mischdauer wurde ebenfalls untersucht. Es zeigte sich, dass bei Vernachlässigung von Bassetkraft bzw. Scher- und Rotationsauftrieb beide Kennwerte teilweise deutlich unterschätzt werden können. Das würde im Umkehrschluss zu einem überdimensionierten Antrieb für den Mischbehälter führen, wenn er mit dieser Methode ausgelegt werden würde. Aus ökonomischer und ökologischer Sicht ist sollten Partikelkräfte also nur vernachlässigt werden, wenn man tatsächlich sicher ist, dass sie keine Auswirkungen auf das Mischen haben. Wenn auch bei Weitem nicht alle Anwendungsfälle abgedeckt werden können, so sind für einige Kombinationen von Durchmesser und Dichteverhältnis hier bereits Zahlen bereit gestellt, die eine Auswahl relevanter Kräfte ermöglichen.

ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

Die beiden Hauptziele der Arbeit – Verbesserung des Mischverhaltens eines FPR-Mischers und Untersuchung der Transportmechanismen – wurden erreicht.

Die Analyse des Mischverhaltens verschiedener auf Basis einer Ausgangskonfiguration entwickelter FPR-Mischer-Varianten zeigte, dass die Variante „erhöhter Dreifuß“ hinsichtlich Mischgüte und Leistungseintrag am besten ist. Im Hinblick auf die Mischdauer erwies sich die Variante „Dreifuß am Boden“ als vorteilhaft. Neben dem eigentlichen Ziel der Verfahrensverbesserung wurde außerdem demonstriert, dass es möglich ist, Mehrphasenprozesse mit Hilfe von numerischen Modellen zu untersuchen und dass das quelloffene OpenFOAM aufgrund der Verfügbarkeit des Quellcodes und der bereits implementierten Grundlagen ein sehr geeignetes Mittel dafür ist.

Das zweite Ziel, die Untersuchung der Transportmechanismen in FPR-Mischern, beruhte im Wesentlichen auf der gerade erwähnten Anpassbarkeit des Quellcodes von OpenFOAM an die jeweiligen Anforderungen. Neben der Entwicklung spezialisierter Solver für die Berechnung der Mehrphasenströmungen, wurden vom Autor vor allem Partikelkräfte und weitere Modelle in OpenFOAM implementiert, darunter die numerisch schwer zu fassende Bassetkraft. Damit ist es dem Wissen des Autors nach erstmals möglich gewesen, Flüssig-Fest-Mehrphasen-Simulationen von Vorgängen im Technikumsmaßstab mit allen relevanten Partikelkräften durchzuführen. Entgegen der üblichen Annahmen, ist der Beitrag der Bassetkraft für alle untersuchten Parameter recht groß. Auch ihr Einfluss auf die ermittelten Mischqualitäten und -dauern ist nicht zu vernachlässigen. Des Weiteren sind alle berücksichtigten Partikelkräfte bei zumindest einem Teil der durchgeführten Simulation größer als 10% der Widerstandskraft. Eine Vernachlässigung einzelner Kräfte ohne eingehendere Betrachtung der Umstände ist also nicht angezeigt.

Weiterführend wären vor allem experimentelle Untersuchungen, insbesondere für schwerere Partikel interessant, um die hier numerisch gefundenen Ergebnisse zu validieren. Ebenso könnte die Implementierung weiterer Modelle, z.B. stochastischer Partikel-Partikel-Kollisionen in Bereichen höherer Partikelkonzentrationen und der Einfluss der Wandnä-

he auf viele Parameter, die Genauigkeit der Simulationen weiter voran treiben.

LITERATUR

- Auton, T., J. Hunt und M Prud'Homme (1988). "The force exerted on a body in inviscid unsteady non-uniform rotational flow". In: *Journal of Fluid Mechanics* 197, S. 241–257. DOI: [10.1017/s0022112088003246](https://doi.org/10.1017/s0022112088003246).
- Baldwin, B. und T. Barth (1991). "A one-equation turbulence transport model for high Reynolds number wall-bounded flows". In: *29th Aerospace Sciences Meeting*, S. 610. DOI: [10.2514/6.1991-610](https://doi.org/10.2514/6.1991-610).
- Baldwin, B. und H. Lomax (1978). "Thin-layer approximation and algebraic model for separated turbulent flows". In: *16th aerospace sciences meeting*, S. 257. DOI: [10.2514/6.1978-257](https://doi.org/10.2514/6.1978-257).
- Barkla, H. und L. Auchterlonie (1971). "The Magnus or Robins effect on rotating spheres". In: *Journal of Fluid Mechanics* 47.3, S. 437–447. DOI: [10.1017/S0022112071001150](https://doi.org/10.1017/S0022112071001150).
- Basset, A. B. (1888). *A treatise on hydrodynamics: with numerous examples*. Bd. 2. Deighton, Bell und Company.
- Bessel, F. W. (1875). "Abhandlungen von Friedrich Wilhelm Bessel, Erster Band". In: Hrsg. von R. Engelmann. Verlag von Wilhelm Engelmann. Kap. Untersuchung des Theils der planetarischen Störungen, welcher aus der Bewegung der Sonne entsteht, S. 84–109.
- Blais, B. und F. Bertrand (2017). "CFD-DEM investigation of viscous solid-liquid mixing: Impact of particle properties and mixer characteristics". In: *Chemical Engineering Research and Design* 118, S. 270–285. DOI: [10.1016/j.cherd.2016.12.018](https://doi.org/10.1016/j.cherd.2016.12.018).
- Blais, B., M. Lassaigne, C. Goniva, L. Fradette und F. Bertrand (2016). "Development of an unresolved CFD-DEM model for the flow of viscous suspensions and its application to solid-liquid mixing". In: *Journal of Computational Physics* 318, S. 201–221. DOI: [10.1016/j.jcp.2016.05.008](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.05.008).
- Blanpain-Avet, P., N. Doubrovine, C. Lafforgue und M. Lalande (1999). "The effect of oscillatory flow on crossflow microfiltration of beer in a tubular mineral membrane system—Membrane fouling resistance decrease and energetic considerations". In: *Journal of Membrane Science* 152.2, S. 151–174. DOI: [10.1016/s0376-7388\(98\)00214-2](https://doi.org/10.1016/s0376-7388(98)00214-2).
- Bombardelli, F. A., A. E. González und Y. I. Niño (2008). "Computation of the particle Basset force with a fractional-derivative approach". In:

- Journal of Hydraulic Engineering* 134.10, S. 1513–1520. DOI: [10.1061/\(asce\)0733-9429\(2008\)134:10\(1513\)](https://doi.org/10.1061/(asce)0733-9429(2008)134:10(1513)).
- Boussinesq, J. V. (1877). "Theorie de l'Écoulement Tourbillant". In: *Mem Presentes par Divers Savants Acad. Sci. Inst. Fr* 23, S. 45–50.
- Boussinesq, J. V. (1885). "Sur la resistance d'une sphere solide". In: *C.R. Hebd. Seanc. Acad. Sci. Paris* 100, S. 935.
- Bradshaw, P., D. Ferriss und N. Atwell (1967). "Calculation of boundary-layer development using the turbulent energy equation". In: *Journal of Fluid Mechanics* 28.3, S. 593–616. DOI: [10.1017/s0022112067002319](https://doi.org/10.1017/s0022112067002319).
- Brenner, H. (1961). "The slow motion of a sphere through a viscous fluid towards a plane surface". In: *Chemical Engineering Science* 16.3-4, S. 242–251. DOI: [10.1016/0009-2509\(61\)80035-3](https://doi.org/10.1016/0009-2509(61)80035-3).
- Broadwell, J. E. (1964). "Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method". In: *Journal of Fluid Mechanics* 19.3, S. 401–414. DOI: [10.1017/s0022112064000817](https://doi.org/10.1017/s0022112064000817).
- Casas, G., A. Ferrer und E. Oñate (2018). "Approximating the Basset force by optimizing the method of van Hinsberg et al." In: *Journal of Computational Physics* 352, S. 142–171. ISSN: 0021-9991. DOI: [10.1016/j.jcp.2017.09.060](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.09.060).
- Cekinski, E., M. Giuliatti und M. M. Seckler (2010). "A new approach to characterize suspensions in stirred vessels based on computational fluid dynamics". In: *Brazilian Journal of Chemical Engineering* 27.2, S. 265–273. DOI: [10.1590/s0104-66322010000200005](https://doi.org/10.1590/s0104-66322010000200005).
- Chou, P. Y. (1945). "On velocity correlations and the solutions of the equations of turbulent fluctuation". In: *Quarterly of Applied Mathematics* 3.1, S. 38–54. DOI: [10.1090/qam/11999](https://doi.org/10.1090/qam/11999).
- Costa, L. F. O., R. Franco und V. Cardoso (2018). "Gravitational Magnus effect". In: *Physical Review D* 98.2, S. 024026. DOI: [10.1103/physrevd.98.024026](https://doi.org/10.1103/physrevd.98.024026).
- Cox, R. G. und H. Brenner (1967). "The slow motion of a sphere through a viscous fluid towards a plane surface—II Small gap widths, including inertial effects". In: *Chemical Engineering Science* 22.12, S. 1753–1777. DOI: [10.1016/0009-2509\(67\)80208-2](https://doi.org/10.1016/0009-2509(67)80208-2).
- Crowe, C. T., J. D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld und Y. Tsuji (2011). *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC press. DOI: [10.1201/b11103](https://doi.org/10.1201/b11103).
- Cundall, P. A. und O. D. Strack (1979). "A discrete numerical model for granular assemblies". In: *Geotechnique* 29.1, S. 47–65. DOI: [10.1680/geot.1979.29.1.47](https://doi.org/10.1680/geot.1979.29.1.47).

- Daitche, A. (2013). "Advection of inertial particles in the presence of the history force: Higher order numerical schemes". In: *Journal of Computational Physics* 254, S. 93–106. DOI: [10.1016/j.jcp.2013.07.024](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2013.07.024).
- Dandy, D. S. und H. A. Dwyer (1990). "A sphere in shear flow at finite Reynolds number: effect of shear on particle lift, drag, and heat transfer". In: *Journal of Fluid Mechanics* 216, S. 381–410. DOI: [10.1017/s0022112090000477](https://doi.org/10.1017/s0022112090000477).
- Decker, S. (2005). "Zur Berechnung von Gerührten Suspensionen mit dem Euler-Lagrange-Verfahren". Diss. Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg. URL: <https://sundoc.bibliothek.uni-halle.de/diss-online/05/06H027/prom.pdf>.
- Dennis, S., S. Singh und D. Ingham (1980). "The steady flow due to a rotating sphere at low and moderate Reynolds numbers". In: *Journal of Fluid Mechanics* 101.2, S. 257–279. DOI: [10.1017/s0022112080001656](https://doi.org/10.1017/s0022112080001656).
- Dorgan, A. und E Loth (2007). "Efficient calculation of the history force at finite Reynolds numbers". In: *International Journal of Multiphase Flow* 33.8, S. 833–848. DOI: [10.1016/j.ijmultiphaseflow.2007.02.005](https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2007.02.005).
- Ernst, M., M. Sommerfeld und S. Laín (2019). "Quantification of preferential concentration of colliding particles in a homogeneous isotropic turbulent flow". In: *International Journal of Multiphase Flow* 117, S. 163–181. DOI: [10.1016/j.ijmultiphaseflow.2019.05.007](https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2019.05.007).
- Feuillebois, F und A Lasek (1978). "On the rotational historic term in non-stationary Stokes flow". In: *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics* 31.4, S. 435–443. DOI: [10.1093/qjmam/31.4.435](https://doi.org/10.1093/qjmam/31.4.435).
- Frisch, U., B. Hasslacher und Y. Pomeau (1986). "Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation". In: *Physical review letters* 56.14, S. 1505. DOI: [10.1103/physrevlett.56.1505](https://doi.org/10.1103/physrevlett.56.1505).
- Gingold, R. A. und J. J. Monaghan (1977). "Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars". In: *Monthly notices of the royal astronomical society* 181.3, S. 375–389. DOI: [10.1093/mnras/181.3.375](https://doi.org/10.1093/mnras/181.3.375).
- Godunov, S. K. (1959). "A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics". In: *Matematicheskii Sbornik* 89.3, S. 271–306. URL: <https://zbmath.org/?q=an:0171.46204>.
- Goldberg, U. (1991). "Derivation and testing of a one-equation model based on two time scales". In: *AIAA journal* 29.8, S. 1337–1340. DOI: [10.2514/3.10741](https://doi.org/10.2514/3.10741).

- Goldman, A., R. Cox und H Brenner (1967a). "Slow viscous motion of a sphere parallel to a plane wall—II Couette flow". In: *Chemical Engineering Science* 22.4, S. 653–660. DOI: [10.1016/0009-2509\(67\)80048-4](https://doi.org/10.1016/0009-2509(67)80048-4).
- Goldman, A. J., R. G. Cox und H. Brenner (1967b). "Slow viscous motion of a sphere parallel to a plane wall—I Motion through a quiescent fluid". In: *Chemical Engineering Science* 22.4, S. 637–651. DOI: [10.1016/0009-2509\(67\)80047-2](https://doi.org/10.1016/0009-2509(67)80047-2).
- Hardy, J, O De Pazzis und Y. Pomeau (1976). "Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions". In: *Physical Review A* 13.5, S. 1949. DOI: [10.1103/physreva.13.1949](https://doi.org/10.1103/physreva.13.1949).
- Harlow, F. H. und J. E. Welch (1965). "Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface". In: *The Physics of Fluids* 8.12, S. 2182–2189. DOI: [10.1063/1.1761178](https://doi.org/10.1063/1.1761178).
- Harvey, P. und M Greaves (1982a). "Turbulent Flow in an Agitated Vessel, Part II: Numerical Solution and Model Predictions". In: *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 60, S. 201–210.
- Harvey, P. und M Greaves (1982b). "Turbulent flow in an agitated vessel. Part I: A predictive model". In: *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 60, S. 195–200.
- Hinsberg, M. van, J. ten Thije Boonkkamp und H. J. Clercx (2011). "An efficient, second order method for the approximation of the Basset history force". In: *Journal of Computational Physics* 230.4, S. 1465–1478. DOI: [10.1016/j.jcp.2010.11.014](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2010.11.014).
- Hirt, C. W. und B. D. Nichols (1981). "Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries". In: *Journal of Computational Physics* 39.1, S. 201–225. DOI: [10.1016/0021-9991\(81\)90145-5](https://doi.org/10.1016/0021-9991(81)90145-5).
- Hjelmfelt, A. und L. Mockros (1966). "Motion of discrete particles in a turbulent fluid". In: *Applied Scientific Research* 16.1, S. 149–161. DOI: [10.1007/bf00384062](https://doi.org/10.1007/bf00384062).
- Huber, N und M Sommerfeld (1998). "Modelling and numerical calculation of dilute-phase pneumatic conveying in pipe systems". In: *Powder Technology* 99.1, S. 90–101. DOI: [10.1016/s0032-5910\(98\)00065-5](https://doi.org/10.1016/s0032-5910(98)00065-5).
- Hussein, B. G. (2004). "Einfluss niederfrequenter Fluidresonanzschwingungen auf den Stoffaustausch in Blasensäulen im System Wasser-Luft". Diss. Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg. URL: <https://sundoc.bibliothek.uni-halle.de/diss-online/04/04H025/prom.pdf>.

- Ibrahim, R. A. (2005). *Liquid sloshing dynamics: theory and applications*. Cambridge University Press. DOI: [10.1017/cbo9780511536656](https://doi.org/10.1017/cbo9780511536656).
- Jasak, H. und H. G. Weller (1995). *Interface tracking capabilities of the inter-gamma differencing scheme*. Internal Report. Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science, Technology und Medicine. URL: <https://www.researchgate.net/publication/230606275>.
- Johnson, D. A. und L. King (1985). "A mathematically simple turbulence closure model for attached and separated turbulent boundary layers". In: *AIAA journal* 23.11, S. 1684–1692. DOI: [10.2514/3.9152](https://doi.org/10.2514/3.9152).
- Jones, T. B. (1979). "Dielectrophoretic force calculation". In: *Journal of Electrostatics* 6.1, S. 69–82. DOI: [10.1016/0304-3886\(79\)90025-1](https://doi.org/10.1016/0304-3886(79)90025-1).
- Karman, T. von und L. Howarth (1938). "On the statistical theory of isotropic turbulence". In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A-Mathematical and Physical Sciences* 164.917, S. 192–215. DOI: [10.1098/rspa.1938.0013](https://doi.org/10.1098/rspa.1938.0013).
- Kipke, K. (1985). "Auslegung von Industrie-Rührwerken". In: *Chemie Ingenieur Technik* 57.10, S. 813–823. DOI: [10.1002/cite.330571002](https://doi.org/10.1002/cite.330571002).
- Kolmogorov, A. (1942). "Equations of turbulent motion of an incompressible fluid". In: *Izvestia Akademia Nauk USSR* 6.1, 2, S. 56–58. DOI: [10.1007/978-94-011-3030-1_48](https://doi.org/10.1007/978-94-011-3030-1_48).
- Krafcik, A., P. Babinec und I. Frollo (2018). "Stokes versus Basset: comparison of forces governing motion of small bodies with high acceleration". In: *European Journal of Physics* 39.3, S. 035805. DOI: [10.1088/1361-6404/aaabc7](https://doi.org/10.1088/1361-6404/aaabc7).
- Kraume, M. (1992). "Mixing times in stirred suspensions". In: *Chemical Engineering & Technology* 15.5, S. 313–318. DOI: [10.1002/ceat.270150505](https://doi.org/10.1002/ceat.270150505).
- Kraume, M. (2006). *Mischen und Rühren: Grundlagen und moderne Verfahren*. John Wiley & Sons. DOI: [10.1002/3527603360](https://doi.org/10.1002/3527603360).
- Kraume, M. (2012). "Disperse Systeme". In: *Transportvorgänge in der Verfahrenstechnik*. Springer, S. 195–246. DOI: [10.1007/978-3-642-25149-8_7](https://doi.org/10.1007/978-3-642-25149-8_7).
- Kussin, J. und M. Sommerfeld (2002). "Experimental studies on particle behaviour and turbulence modification in horizontal channel flow with different wall roughness". In: *Experiments in Fluids* 33.1, S. 143–159. DOI: [10.1007/s00348-002-0485-9](https://doi.org/10.1007/s00348-002-0485-9).
- Lain, S. und M. Sommerfeld (2008). "Euler/Lagrange computations of pneumatic conveying in a horizontal channel with different wall roughness". In: *Powder Technology* 184.1, S. 76–88. DOI: [10.1016/j.powtec.2007.08.013](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2007.08.013).

- Lauder, B. E. und D. B. Spalding (1974). "The numerical computation of turbulent flows". In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 3, S. 269–289. DOI: [10.1016/b978-0-08-030937-8.50016-7](https://doi.org/10.1016/b978-0-08-030937-8.50016-7).
- Li, Z., D. JJ und Z. Gao (2015). "Models and Applications for Simulating Turbulent Solid–Liquid Suspensions in Stirred Tanks". In: *Journal of Chemical Engineering of Japan* 48.5, S. 329–336. DOI: [10.1252/jcej.14we056](https://doi.org/10.1252/jcej.14we056).
- Lucy, L. B. (1977). "A numerical approach to the testing of the fission hypothesis". In: *The Astronomical Journal* 82, S. 1013–1024. DOI: [10.1086/112164](https://doi.org/10.1086/112164).
- Lun, C. und H. Liu (1997). "Numerical simulation of dilute turbulent gas–solid flows in horizontal channels". In: *International Journal of Multiphase Flow* 23.3, S. 575–605. DOI: [10.1016/s0301-9322\(96\)00087-0](https://doi.org/10.1016/s0301-9322(96)00087-0).
- MacCormack, R. und A. Paullay (1972). "Computational efficiency achieved by time splitting of finite difference operators". In: *10th Aerospace Sciences Meeting*, S. 154. DOI: [10.2514/6.1972-154](https://doi.org/10.2514/6.1972-154).
- Magnus, G. (1853). "Über die Abweichung der Geschosse, und: Über eine auffallende Erscheinung bei rotirenden Körpern". In: *Annalen der Physik* 164.1, S. 1–29. DOI: [10.1002/andp.18531640102](https://doi.org/10.1002/andp.18531640102).
- Matsumoto, S. und S. Saito (1970a). "Monte Carlo simulation of horizontal pneumatic conveying based on the rough wall model". In: *Journal of Chemical Engineering of Japan* 3.2, S. 223–230. DOI: [10.1252/jcej.3.223](https://doi.org/10.1252/jcej.3.223).
- Matsumoto, S. und S. Saito (1970b). "On the mechanism of suspension of particles in horizontal pneumatic conveying: Monte Carlo simulation based on the irregular bouncing model". In: *Journal of Chemical Engineering of Japan* 3.1, S. 83–92. DOI: [10.1252/jcej.3.83](https://doi.org/10.1252/jcej.3.83).
- Maxey, M. R. und J. J. Riley (1983). "Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow". In: *The Physics of Fluids* 26.4, S. 883–889. DOI: [10.1063/1.864230](https://doi.org/10.1063/1.864230).
- McDonald, P. (1971). "The computation of transonic flow through two-dimensional gas turbine cascades". In: *International Gas Turbine Conference and Products Show*. Bd. 79825. American Society of Mechanical Engineers. DOI: [10.1115/71-gt-89](https://doi.org/10.1115/71-gt-89).
- McSherry, R. J., K. V. Chua und T. Stoesser (2017). "Large eddy simulation of free-surface flows". In: *Journal of Hydrodynamics* 29.1, S. 1–12. DOI: [10.1016/s1001-6058\(16\)60712-6](https://doi.org/10.1016/s1001-6058(16)60712-6).
- Mei, R. (1992). "An approximate expression for the shear lift force on a spherical particle at finite Reynolds number". In: *International Journal*

- of *Multiphase Flow* 18.1, S. 145–147. DOI: [10.1016/0301-9322\(92\)90012-6](https://doi.org/10.1016/0301-9322(92)90012-6).
- Menter, F. R. (1997). “Eddy viscosity transport equations and their relation to the k- ϵ model”. In: *Journal of Fluids Engineering* 119.4, S. 876–884. DOI: [10.1115/1.2819511](https://doi.org/10.1115/1.2819511).
- Menter, F. R., M. Kuntz und R. Langtry (Okt. 2003). “Ten years of industrial experience with the SST turbulence model”. In: *Turbulence, Heat and Mass Transfer*. Bd. 4, S. 625–632. URL: <https://www.researchgate.net/publication/228742295>.
- Menter, F. (Juli 1993). “Zonal two equation k- ω turbulence model for aerodynamic flows”. In: *23rd Fluid Dynamics, Plasmadynamics, and Lasers Conference*. Paper 1993-2906. AIAA. DOI: [10.2514/6.1993-2906](https://doi.org/10.2514/6.1993-2906).
- Menter, F. und T. Esch (2001). “Elements of industrial heat transfer predictions”. In: *16th Brazilian Congress of Mechanical Engineering (COBEM)*. Bd. 109, S. 117–127. URL: <https://www.researchgate.net/file.PostFileLoader.html?id=58500561b0366d121d756004&assetKey=AS:438841040478208@1481639265395>.
- Mersmann, A und H. Laufhütte (1985). “Scale-up of agitated vessels for different mixing processes”. In: *5th European Conference on Mixing*, S. 273–284.
- Michaelides, E. E. (1992). “A novel way of computing the Basset term in unsteady multiphase flow computations”. In: *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* 4.7, S. 1579–1582. DOI: [10.1063/1.858430](https://doi.org/10.1063/1.858430).
- Michaelides, E. E. (2003). “Hydrodynamic force and heat/mass transfer from particles, bubbles, and drops—the Freeman scholar lecture”. In: *Journal of Fluids Engineering* 125.2, S. 209–238. DOI: [10.1115/1.1537258](https://doi.org/10.1115/1.1537258).
- Michaelides, E. E. und A. Roig (2011). “A reinterpretation of the Odar and Hamilton data on the unsteady equation of motion of particles”. In: *AIChE Journal* 57.11, S. 2997–3002. DOI: [10.1002/aic.12498](https://doi.org/10.1002/aic.12498).
- Michaelides, E., C. T. Crowe und J. D. Schwarzkopf (2016). *Multiphase Flow Handbook*. CRC Press. DOI: [10.1201/9781315371924](https://doi.org/10.1201/9781315371924).
- Monchaux, R., M. Bourgoïn und A. Cartellier (2010). “Preferential concentration of heavy particles: a Voronoï analysis”. In: *Physics of Fluids* 22.10, S. 103304. DOI: [10.1063/1.3489987](https://doi.org/10.1063/1.3489987).
- Moreno-Casas, P. A. und F. A. Bombardelli (2016). “Computation of the Basset force: recent advances and environmental flow applications”. In: *Environmental Fluid Mechanics* 16.1, S. 193–208. DOI: [10.1007/s10652-015-9424-1](https://doi.org/10.1007/s10652-015-9424-1).

- Muto, M., M. Tsubokura und N. Oshima (2012). "Negative Magnus lift on a rotating sphere at around the critical Reynolds number". In: *Physics of Fluids* 24.1, S. 014102. DOI: [10.1063/1.3673571](https://doi.org/10.1063/1.3673571).
- Newton, I. (Feb. 1671). "A letter of Mr. Isaac Newton, Professor of the Mathematicks in the University of Cambridge; containing his new theory about light and colors: sent by the author to the publisher from Cambridge, Febr. 6. 1671/72; in order to be communicated to the R. Society". In: *Philosophical Transactions of the Royal Society* 6.80, S. 3075–3087. DOI: [10.1098/rstl.1671.0072](https://doi.org/10.1098/rstl.1671.0072).
- Nobach, H. (1997). *Verarbeitung stochastisch abgetasteter Signale: Anwendung in der Laser-Doppler-Anemometrie*. Shaker. ISBN: 978-3826533327.
- O'Neill, M. und K Stewartson (1967). "On the slow motion of a sphere parallel to a nearby plane wall". In: *Journal of Fluid Mechanics* 27.4, S. 705–724. DOI: [10.1017/s0022112067002551](https://doi.org/10.1017/s0022112067002551).
- Odar, F. und W. S. Hamilton (1964). "Forces on a sphere accelerating in a viscous fluid". In: *Journal of Fluid Mechanics* 18.2, S. 302–314. DOI: [10.1017/s0022112064000210](https://doi.org/10.1017/s0022112064000210).
- Oesterle, B und T Bui Dinh (1998). "Experiments on the lift of a spinning sphere in a range of intermediate Reynolds numbers". In: *Experiments in Fluids* 25.1, S. 16–22. DOI: [10.1007/s003480050203](https://doi.org/10.1007/s003480050203).
- Orszag, S. A. (1969). "Numerical methods for the simulation of turbulence". In: *The Physics of Fluids* 12.12, S. II–250. DOI: [10.1063/1.1692445](https://doi.org/10.1063/1.1692445).
- Oseen, C. (1927). "Neuere Methoden und Ergebnisse in der Hydromechanik". In: *Akademische Verlagsgesellschaft Leipzig*. URL: <https://diglib.uibk.ac.at/download/pdf/303112?name=Neuere%20Methoden%20und%20Ergebnisse%20in%20der%20Hydrodynamik>.
- Osher, S. und J. A. Sethian (1988). "Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations". In: *Journal of Computational Physics* 79.1, S. 12–49. DOI: [10.1016/0021-9991\(88\)90002-2](https://doi.org/10.1016/0021-9991(88)90002-2).
- Ostrovskij, G. M., R. S. Abiev, E. G. Aksenova, B. L. Babintseva und V. I. Losik (Dez. 1993). "Resonance Mixer". Pat. 2004316.
- Paul, E. L., V. A. Atiemo-Obeng und S. M. Kresta (2004). *Handbook of industrial mixing: science and practice*. John Wiley & Sons. ISBN: 9780471451457. DOI: [10.1002/0471451452](https://doi.org/10.1002/0471451452).
- Pflieger, C. (2009). *Resonante Pulsationsfiltration als nachhaltiger Verfahrensschritt in der Membrantechnik*. Projektabschlussbericht. Institut für Bioprozess- und Analysemesstechnik e. V. Heiligenstadt. URL: <https://www.>

- cleaner-production.de/fileadmin/assets/01RI0619A_-_Abschlussbericht.pdf.
- Prandtl, L. und K. Wieghardt (1945). "Über ein neues Formelsystem für die ausgebildete Turbulenz". In: *Nachrichten der Akademie der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-physikalische Klasse*, S. 6–19.
- Quintero Arboleda, B., Z. Qadir, M. Sommerfeld und S. Lain Beatove (2014). "Modelling the wall collision of regular non-spherical particles and experimental validation". In: *ASME 2014 4th Joint US-European Fluids Engineering Division Summer Meeting collocated with the ASME 2014 12th International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels*. American Society of Mechanical Engineers, V01DT31A001–V01DT31A001. DOI: [10.1115/fedsm2014-21610](https://doi.org/10.1115/fedsm2014-21610).
- Rayleigh, L. (1877). "On the irregular flight of a tennis-ball". In: *Messenger of Mathematics* 7.14, S. 14–16. DOI: [10.1017/cbo9780511703966.054](https://doi.org/10.1017/cbo9780511703966.054).
- Reeks, M. und S McKee (1984). "The dispersive effects of Basset history forces on particle motion in a turbulent flow". In: *The Physics of Fluids* 27.7, S. 1573–1582. DOI: [10.1063/1.864812](https://doi.org/10.1063/1.864812).
- Reynolds, O. (1895). "On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion". In: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. (A.)* 186, S. 123–164. DOI: [10.1098/rsta.1895.0004](https://doi.org/10.1098/rsta.1895.0004).
- Richardson, E. und E. Tyler (1929). "The transverse velocity gradient near the mouths of pipes in which an alternating or continuous flow of air is established". In: *Proceedings of the Physical Society* 42.1, S. 1. DOI: [10.1088/0959-5309/42/1/302](https://doi.org/10.1088/0959-5309/42/1/302).
- Rizzi, A. W. und M. Inouye (1973). "Time-split finite-volume method for three-dimensional blunt-body flow". In: *AIAA Journal* 11.11, S. 1478–1485. DOI: [10.2514/3.50614](https://doi.org/10.2514/3.50614).
- Robins, B. (1805). *New Principles of Gunnery*. London: F. Wingrave. URL: <https://books.google.de/books?hl=de&lr=&id=zokXxSnkinIC&oi=fnd&pg=PA1&dq>.
- Rotta, J. (1951). "Statistische Theorie nichthomogener Turbulenz". In: *Zeitschrift für Physik* 129.6, S. 547–572. DOI: [10.1007/bf01329645](https://doi.org/10.1007/bf01329645).
- Rubinow, S. und J. B. Keller (1961). "The transverse force on a spinning sphere moving in a viscous fluid". In: *Journal of Fluid Mechanics* 11.3, S. 447–459. DOI: [10.1017/s0022112061000640](https://doi.org/10.1017/s0022112061000640).
- Rusche, H. (2002). "Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions". Diss. Imperial College London.

- URL: https://spiral.imperial.ac.uk/bitstream/10044/1/8110/1/Henrik_Rusche-2003-PhD-Thesis.pdf.
- Saffman, P. (1965). "The lift on a small sphere in a slow shear flow". In: *Journal of Fluid Mechanics* 22.2, S. 385–400. DOI: [10.1017/s0022112065000824](https://doi.org/10.1017/s0022112065000824).
- Saffman, P. (1968). "The Lift on a Small Sphere in a Slow Shear Flow - Corrigendum". In: *Journal of Fluid Mechanics* 31.3, S. 624. DOI: [10.1017/s0022112068999990](https://doi.org/10.1017/s0022112068999990).
- Saffman, P. G. (1970). "A model for inhomogeneous turbulent flow". In: *Proceedings of the Royal Society of London. A.* 317.1530, S. 417–433. DOI: [10.1098/rspa.1970.0125](https://doi.org/10.1098/rspa.1970.0125).
- Sawatzki, O. (1970). "Das Strömungsfeld um eine rotierende Kugel". In: *Acta Mechanica* 9.3-4, S. 159–214. DOI: [10.1007/BF01179821](https://doi.org/10.1007/BF01179821).
- Schäfer, J. (1996). "Rohrfluss granularer Materie: Theorie und Simulationen". Diss. Gerhard-Mercator-Universität Gesamthochschule Duisburg. URL: <https://core.ac.uk/download/pdf/34995268.pdf>.
- Schiller, L und A Naumann (1933). "Fundamental calculations in gravitational processing". In: *Zeitschrift Des Vereines Deutscher Ingenieure* 77, S. 318–320.
- Sekundov, A. (1971). "Application of a differential equation for turbulent viscosity to the analysis of plane non-self-similar flows". In: *Fluid Dynamics* 6.5, S. 828–840. DOI: [10.1007/bf01013866](https://doi.org/10.1007/bf01013866).
- Sexl, T. (1930). "Über den von E. G. Richardson entdeckten „Annulareffekt“". In: *Zeitschrift für Physik* 61.5, S. 349–362. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01340631>.
- Shah, R. S.S.R. E., B. Sajjadi, A. A. A. Raman und S. Ibrahim (2015). "Solid-liquid mixing analysis in stirred vessels". In: *Reviews in Chemical Engineering* 31.2, S. 119–147. DOI: [10.1515/revce-2014-0028](https://doi.org/10.1515/revce-2014-0028).
- Shah, Y. (1991). "Design parameters for mechanically agitated reactors". In: *Advances in Chemical Engineering*. Bd. 17. Elsevier, S. 1–206. DOI: [10.1016/s0065-2377\(08\)60115-5](https://doi.org/10.1016/s0065-2377(08)60115-5).
- Shih, T.-H., W. W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang und J. Zhu (1995). "A new $k-\epsilon$ eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows". In: *Computers & Fluids* 24.3, S. 227–238. DOI: [10.1016/0045-7930\(94\)00032-T](https://doi.org/10.1016/0045-7930(94)00032-T).
- Smith, A. und T. Cebeci (1967). *Numerical solution of the turbulent-boundary-layer equations*. Techn. Ber. Douglas Aircraft Co., Long Beach, California. DOI: [doi:10.21236/ad0656430](https://doi.org/10.21236/ad0656430).
- Sommerfeld, M (1993). "Some open questions and inconsistencies of Lagrangian particle dispersion models". In: *Proceedings of 9th Symposium on Turbulent Shear Flows*. Bd. 15.

- Sommerfeld, M und S Decker (2004). "State of the art and future trends in CFD simulation of stirred vessel hydrodynamics". In: *Chemical Engineering & Technology: Industrial Chemistry-Plant Equipment-Process Engineering-Biotechnology* 27.3, S. 215–224. DOI: [10.1002/ceat.200402007](https://doi.org/10.1002/ceat.200402007).
- Sommerfeld, M. (1996). *Modellierung und numerische Berechnung von partikelbeladenen turbulenten Strömungen mit Hilfe des Euler-Lagrange-Verfahrens*. Aachen: Shaker. ISBN: 9783826519512.
- Sommerfeld, M. (2001a). "Analyse der Wandkollision von nicht-sphärischen Feststoffpartikeln". In: *Chemie Ingenieur Technik* 73.12, S. 1573–1578. DOI: [10.1002/1522-2640\(200112\)73:12<1573::aid-cite1573>3.0.co;2-c](https://doi.org/10.1002/1522-2640(200112)73:12<1573::aid-cite1573>3.0.co;2-c).
- Sommerfeld, M. (2001b). "Validation of a stochastic Lagrangian modeling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence". In: *International Journal of Multiphase Flow* 27.10, S. 1829–1858. DOI: [10.1016/s0301-9322\(01\)00035-0](https://doi.org/10.1016/s0301-9322(01)00035-0).
- Sommerfeld, M., B. Van Wachem und R. Oliemans (2008). *Best practice guidelines for computational fluid dynamics of dispersed multi-phase flows*. European Research Community on Flow, Turbulence und Combustion (ERCOFTAC). ISBN: 978-91-633-3564-8.
- Spalart, P. und S. Allmaras (1992). "A one-equation turbulence model for aerodynamic flows". In: *30th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. DOI: [10.2514/6.1992-439](https://doi.org/10.2514/6.1992-439).
- Spielman, L. und O. Levenspiel (1965). "A Monte Carlo treatment for reacting and coalescing dispersed phase systems". In: *Chemical Engineering Science* 20.3, S. 247–254. DOI: [10.1016/0009-2509\(65\)80035-5](https://doi.org/10.1016/0009-2509(65)80035-5).
- Stokes, G. G. (1851). *On the effect of the internal friction of fluids on the motion of pendulums*. Bd. 9. Pitt Press Cambridge. DOI: [10.1017/cbo9780511702266.002](https://doi.org/10.1017/cbo9780511702266.002).
- Säuberlich, R. (2012). *Abschlussbericht zum Projekt: „Einführung der Resonanzschwingungstechnologie (RST) in den Apparatebau“*. Techn. Ber. Hochschule Merseburg (FH).
- Takemura, F. und J. Magnaudet (2003). "The transverse force on clean and contaminated bubbles rising near a vertical wall at moderate Reynolds number". In: *Journal of Fluid Mechanics* 495, S. 235. DOI: [10.1017/s0022112003006232](https://doi.org/10.1017/s0022112003006232).
- Talbot, L., R. Cheng, R. Schefer und D. Willis (1980). "Thermophoresis of particles in a heated boundary layer". In: *Journal of Fluid Mechanics* 101.4, S. 737–758. DOI: [10.1017/s0022112080001905](https://doi.org/10.1017/s0022112080001905).

- Tatterson, G. B., R. Brodkey und R. Calabrese (1991). "Move mixing technology into the 21st century". In: *Chemical Engineering Progress* 87.6, S. 45–48.
- Tsuji, Y., N. Shen und Y. Morikawa (1991). "Lagrangian simulation of dilute gas-solid flows in a horizontal pipe". In: *Advanced Powder Technology* 2.1, S. 63–81. DOI: [10.1016/s0921-8831\(08\)60721-9](https://doi.org/10.1016/s0921-8831(08)60721-9).
- Tsuji, Y., Y. Morikawa und O. Mizuno (1985). "Experimental measurement of the Magnus force on a rotating sphere at low Reynolds numbers". In: *Journal of Fluids Engineering* 107.4, S. 484–488. DOI: [10.1115/1.3242517](https://doi.org/10.1115/1.3242517).
- Van Dyke, M. D. (1958). "The supersonic blunt-body problem-review and extension". In: *Journal of the Aerospace Sciences* 25.8, S. 485–496. DOI: [10.2514/8.7744](https://doi.org/10.2514/8.7744).
- Van den Akker, H. E. A. (Nov. 2010). "Toward A Truly Multiscale Computational Strategy For Simulating Turbulent Two-Phase Flow Processes". In: *Industrial & Engineering Chemistry Research* 49.21, S. 10780–10797. DOI: [10.1021/ie1006382](https://doi.org/10.1021/ie1006382).
- Varga, R. S. (1999). *Matrix iterative analysis*. Bd. 27. Springer Science & Business Media. DOI: [10.1007/978-3-642-05156-2](https://doi.org/10.1007/978-3-642-05156-2).
- Wang, Q., K. Squires, M. Chen und J. McLaughlin (1997). "On the role of the lift force in turbulence simulations of particle deposition". In: *International Journal of Multiphase Flow* 23.4, S. 749–763. DOI: [10.1016/s0301-9322\(97\)00014-1](https://doi.org/10.1016/s0301-9322(97)00014-1).
- Wilcox, D. C. (2006). *Turbulence Modeling for CFD*. 3. Aufl. D C W Industries. ISBN: 978-1928729082.
- Wolfshtein, M. (Nov. 1967). "Convection processes in turbulent impinging jets". Diss. University of London. URL: <https://spiral.imperial.ac.uk/bitstream/10044/1/22761/2/Wolfshtein-M-1968-PhD-Thesis.pdf>.
- Yakhot, V., S. A. Orszag, S. Thangam, T. B. Gatski und C. G. Speziale (1992). "Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique". In: *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* 4.7, S. 1510–1520. DOI: [10.1063/1.858424](https://doi.org/10.1063/1.858424).
- Yeh, Y. und H. Cummins (1964). "Localized fluid flow measurements with an He-Ne laser spectrometer". In: *Applied Physics Letters* 4.10, S. 176–178. DOI: [10.1063/1.1753925](https://doi.org/10.1063/1.1753925).
- Yu, C. (1977). "Precipitation of unipolarly charged particles in cylindrical and spherical vessels". In: *Journal of Aerosol Science* 8.4, S. 237–241. DOI: [10.1016/0021-8502\(77\)90043-x](https://doi.org/10.1016/0021-8502(77)90043-x).

EIGENE VERÖFFENTLICHUNGEN

Ein großer Teil der Erkenntnisse und Daten, die sich im Verlauf der Arbeit ergaben, wurden bereits in Form von Artikeln und Konferenzbeiträgen veröffentlicht. Diese sind nachfolgend aufgelistet.

BEGUTACHTETE ARTIKEL

Schmalfuß, S., R. Säuberlich und M. Sommerfeld (2012). "CFD-Simulation und LDA-Messung der Strömungsvorgänge beim Fluidphasenresonanzmischen". In: *Chemie Ingenieur Technik* 84.4, S. 547-552.

Schmalfuß, S., M. Sommerfeld und R. Säuberlich (2013). "Partikelverhalten in einem Fluidphasenresonanzmischer". In: *Chemie Ingenieur Technik* 85.9, S. 1378-1379.

Schmalfuß, S., R. Säuberlich und M. Sommerfeld (2013). "Verbesserung des Fluidphasenresonanzmischens mit OpenFOAM". In: *Chemie Ingenieur Technik* 85.12, S. 1934-1940.

Schmalfuß, S. und M. Sommerfeld (2017). "Numerical and experimental analysis of Fluid Phase Resonance mixers". In: *Chemical Engineering Science* 173, S. 570-577.

Sommerfeld, M. und S. Schmalfuß (2020). "Analysis and optimisation of particle mixing performance in fluid phase resonance mixers based on Euler/Lagrange calculations". In: *Advanced Powder Technology* 31.1, S. 139-157.

IN PROCEEDINGS VERÖFFENTLICHTE KONFERENZBEITRÄGE

Schmalfuß, S., M. Sommerfeld, M. und R. Säuberlich (2013). "Simulation of the Influence of Particle Properties on Fluid Phase Resonance Mixing". In: *Proceedings of the 8th International Conference on Multiphase Flow* (CD-ROM), Jeju, Korea.

Schmalfuß, S. und M. Sommerfeld (2017). "Particle dispersion in fluid phase resonance mixers". In *3rd International Symposium on Multiscale Multiphase Process Engineering (MMPE)*, Toyama, Japan, 8.-11. Mai, S. 196-203.

Schmalfuß, S. und M. Sommerfeld (2017). "Importance of the different fluid forces on particle dispersion in fluid phase resonance mixers".

In: *Progress in Applied CFD. Selected papers from 10th International Conference on Computational Fluid Dynamics in the Oil & Gas, Metallurgical and Process Industries*, Trondheim, Norwegen, 30. Mai - 1. Juni, S. 791-797.

KONFERENZBEITRÄGE OHNE PROCEEDINGS

- Schmalfuß, S., R. Säuberlich und M. Sommerfeld (2011). "CFD-Simulation des Fluidphasenresonanzmischers mit OpenFOAM". *Jahrestreffen der Fachausschüsse Computational Fluid Dynamics und Mischvorgänge*, Dortmund, Deutschland, 21.-23. Februar.
- Schmalfuß, S., R. Säuberlich und M. Sommerfeld (2012). "Geometrie-Optimierung beim Fluidphasenresonanzmischen mit OpenFOAM". *Jahrestreffen der Fachgruppen Computational Fluid Dynamics und Fluidverfahrenstechnik*, Weimar, Deutschland, 12.-14. März.
- Schmalfuß, S., R. Säuberlich und M. Sommerfeld (2012). "Simulation and implementation of fluid phase resonance mixing with OpenFOAM". *7th International OpenFOAM Workshop*, Darmstadt, Deutschland, 25.-28. Juni.
- Schmalfuß, S. und M. Sommerfeld (2013). "Partikelverhalten in einem Fluidphasenresonanzmischer". *ProcessNet Jahrestreffen der Fachgemeinschaft Fluidodynamik und Trenntechnik*, Würzburg, Deutschland, 25.-27. September.
- Schmalfuß, S., R. Säuberlich und M. Sommerfeld (2014). "Strömungs- und Partikelverhalten in Fluidphasenresonanzmischern". *IAB-Wissenschaftstage*, Institut für Angewandte Bauforschung Weimar, Deutschland, 12.-13. November.
- Schmalfuß, S., M. Sommerfeld und R. Säuberlich (2015). "Einfluss der Tauchrohrgeometrie auf Strömungs- und Partikelverhalten in Fluidphasenresonanzmischern". *Jahrestreffen der Fachgruppen Computational Fluid Dynamics und Mehrphasenströmungen*, Lüneburg, Deutschland, 19.-20. März.
- Schmalfuß, S., M. Sommerfeld und R. Säuberlich (2016). "Einfluss verschiedener Kräfte auf Partikel in instationären Strömungen in Fluidphasenresonanzmischern". *Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen Agglomerations- und Schüttguttechnik, Computational Fluid Dynamics und Mehrphasenströmungen*, Bingen, Deutschland, 29. Februar - 2. März.
- Schmalfuß, S. und M. Sommerfeld (2016). "Influence of particle forces on particles in Fluid Phase Resonance mixers". *9th International Conference on Multiphase Flow, ICMF2016*, Florenz, Italien, 22.-27. Mai.

- Schmalfuß, S. und M. Sommerfeld (2016). "Numerical and experimental analysis of particle behaviour in Fluid Phase Resonance Mixers". *14th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*, Halle (Saale), Deutschland, 7.-10. September.
- Schmalfuß, S. und M. Sommerfeld (2017). "Mischzeit, Mischgüte und Leistungseintrag von Fluidphasenresonanzmischern". *Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen Mehrphasen-strömungen, Partikelmesstechnik, Zerkleinern und Klassieren, Computational Fluid Dynamics, Mischvorgänge und dem TAK Aerosoltechnologie*, Dresden, Deutschland, 14.-17. März.