

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis

xvii

1 Einleitung	1
2 Transport in einphasigen Systemen	7
2.1 Grundbegriffe	8
2.1.1 Stoffwerte	8
2.1.2 Systemgrößen	8
2.1.3 Bilanzgrößen	8
2.1.4 Transportgrößen	8
2.1.5 Unabhängige Variablen	9
2.2 Bilanzgleichungen	9
2.2.1 Kontinuitätsgleichung	11
2.2.2 Impulsbilanz	12
2.2.3 Navier-Stokes-Gleichung	14
2.2.4 Massenbilanzen in Mehrstoffsystemen	15
2.2.5 Energiebilanz	17
2.2.5.1 Innere Energie	17
2.2.5.2 Kinetische Energie	18
2.2.5.3 Potentielle Energie	18
2.2.5.4 Enthalpie	18
2.2.5.5 Wärme und Arbeit	19
2.2.5.6 Wärmekapazität	19
2.2.5.7 Wärmeleitfähigkeit	20
2.2.5.8 Bilanzierung	21
2.2.5.9 Herleitung der Temperatur-Gleichung	21
2.2.6 Kontrollfragen	23
2.3 Rand- und Anfangsbedingungen	24
2.3.1 Übersicht über Randbedingungen	24
2.3.2 Arten von Randbedingungen	26
2.3.2.1 Wände	26
2.3.2.2 Zulauf (inlet)	27
2.3.2.3 Abfluss (outlet)	28

2.3.2.4	Druckrandbedingungen	29
2.3.2.5	Symmetrieebenen	29
2.3.2.6	Periodische Randbedingungen	29
2.3.2.7	Freie Oberflächen	30
2.3.2.8	Lage von Randbedingungen	30
2.3.3	Kontrollfragen	31
2.4	Modellierung turbulenter Strömungen	32
2.4.1	Laminare und turbulente Strömung	32
2.4.2	Reynolds-gemittelte Ansätze	33
2.4.2.1	Wirbelviskosität	35
2.4.2.2	$k - \varepsilon$ -Modelle	37
2.4.2.3	Randbedingungen für k und ε	39
2.4.3	Large-Eddy-Simulationen (LES)	40
2.4.3.1	Subgrid-scale-Modell nach Smagorinsky	41
2.4.3.2	Subgrid-scale-Modelle mit Ähnlichkeitsansatz	42
2.4.3.3	Dynamische Subgrid-scale-Modelle	43
2.4.4	Stoff- und Energietransportbeschreibung mit RANS	43
2.4.4.1	Turbulenter Diffusionskoeffizient	44
2.4.4.2	Turbulente Reaktionsgeschwindigkeit	45
2.4.5	Kontrollfragen	49
3	Populationsbilanzen	51
3.1	Grundbegriffe	52
3.1.1	Eigenschaftskoordinaten	52
3.1.2	Partikelgrößenverteilung	52
3.2	Aufbau der Populationsbilanz	54
3.2.1	Populationsbilanz für Größenverteilungen	56
3.2.1.1	Partikelwachstum	57
3.2.1.2	Turbulente Systeme	58
3.2.2	Randbedingungen	59
3.2.2.1	Kleine Partikeln	59
3.2.2.2	Große Partikeln	60
3.2.3	Kontrollfragen	61
3.3	Agglomeration und Zerbrechen von Partikeln	61
3.3.1	Agglomeration	62
3.3.2	Abrieb und Zerbrechen	65
3.3.3	Kontrollfragen	67
3.4	Systeme mit fluiden Dispersphasen	67
3.4.1	Koaleszenz	69
3.4.2	Zerteilung	70
3.4.3	Kontrollfragen	72
3.5	Stochastische Populationsbilanzen	72

4 Transport in mehrphasigen Systemen	73
4.1 Systematik	74
4.2 Disperse Systeme	76
4.2.1 Euler/Lagrange-Verfahren	78
4.2.1.1 Bilanzen der kontinuierlichen Phase	80
4.2.1.2 Partikelgleichungen	81
4.2.1.3 Phasenwechselwirkungskräfte	82
4.2.1.4 Drehimpuls der Partikeln	86
4.2.1.5 Partikel-Wand-Wechselwirkungen	87
4.2.1.6 Größenverteilte Dispersphasen	88
4.2.1.7 Stoff- und Energietransport	89
4.2.1.8 Turbulente Strömungen	90
4.2.2 Euler/Euler-Verfahren	93
4.2.2.1 Phasenwechselwirkungskräfte	95
4.2.2.2 Größenverteilte Dispersphasen	97
4.2.2.3 Stoff- und Energietransport	98
4.2.2.4 Turbulente Strömungen	99
4.2.3 Kontrollfragen	102
4.3 Diskontinuierliche Mehrphasensysteme	103
4.3.1 Ortsfeste Phasengrenzflächen ohne signifikanten Stoffübergang	106
4.3.1.1 Impulsbilanz	106
4.3.1.2 Massenbilanz	109
4.3.1.3 Energiebilanz	110
4.3.2 Nicht ortsfeste Phasengrenzflächen mit Stoffübergang	111
4.3.2.1 Impulsbilanz	112
4.3.2.2 Massenbilanz	113
4.3.2.3 Energiebilanz	114
4.3.3 Marangoni-Konvektion	115
4.3.4 Verfahrenstechnische Kennzahlen	117
4.3.5 Kontrollfragen	117
5 Numerische Methoden für einphasige Systeme	119
5.1 Lösungsverfahren für Bilanzgleichungen	120
5.1.1 Methode der Finiten Differenzen	120
5.1.2 Methode der Finiten Volumina (Übersicht)	122
5.1.3 Methode der Finiten Elemente	123
5.1.4 Lattice-Boltzmann-Methode	126
5.1.5 Kontrollfragen	129
5.2 Methode der Finiten Volumina	129
5.2.1 Gitter	129
5.2.2 Nomenklatur für FVM	135
5.2.3 Diskretisierung der diffusiven Terme	136
5.2.4 Diskretisierung der Quellterme	138
5.2.5 Diskretisierung der konvektiven Terme	139
5.2.5.1 Zentrales Verfahren	140

5.2.5.2	Upwind-Verfahren	141
5.2.5.3	Verfahren höherer Ordnung und hybride Verfahren . . .	143
5.2.5.4	Limiter	144
5.2.6	Zusammenführung der Terme	145
5.2.7	Einbindung der Randbedingungen	146
5.2.8	Geschwindigkeits-Druck-Kopplung	146
5.2.8.1	Ansätze	146
5.2.8.2	SIMPLE-Algorithmus	148
5.2.8.3	Randbedingungen	152
5.2.9	Zeitliche Diskretisierung	153
5.2.9.1	Explizites Verfahren	156
5.2.9.2	Voll implizites Verfahren	156
5.2.9.3	Crank-Nicolson-Verfahren	157
5.2.9.4	Stabilitätskriterien	157
5.2.10	Kontrollfragen	158
5.3	Lineare Gleichungssysteme	159
5.3.1	Iterative Lösungsverfahren	159
5.3.2	Mehrgitter-Methode	160
5.3.3	Kontrollfragen	161
6	Numerische Methoden für mehrphasige Systeme	163
6.1	Lösungsverfahren für Populationsbilanzen	163
6.1.1	Klassenmethode	164
6.1.2	Momentenmethode	168
6.1.3	Monte-Carlo-Methode	170
6.1.4	Kontrollfragen	171
6.2	Disperse Systeme	171
6.2.1	Euler/Lagrange-Verfahren	171
6.2.2	Euler/Euler-Verfahren	174
6.2.3	Kontrollfragen	175
6.3	Diskontinuierliche Mehrphasensysteme	175
6.3.1	Bewegliche ortsfeste Phasengrenzflächen	175
6.3.2	Anpassung des Gitters an die bewegliche Phasengrenze	178
6.3.3	Bestimmung der Phasengrenze im festen Gitter	180
6.3.3.1	Volume-of-Fluid-Methode	181
6.3.3.2	Level-set-Methode	184
6.3.4	Kontrollfragen	185
7	CFD in der Praxis	187
7.1	Wann sollte CFD verwendet werden?	187
7.2	Einteilung von CFD-Codes	188
7.2.1	Selbstgeschriebene Programme	188
7.2.2	Nicht-kommerzielle Programme	189
7.2.3	Kommerzielle Programme	189
7.3	Verwendung kommerzieller CFD-Codes	190

7.4	Vom Problem zum Simulationsergebnis	193
7.4.1	Problembeschreibung	193
7.4.2	Präprozessing	194
7.4.3	Berechnung	195
7.4.4	Postprozessing / Graphik	196
7.4.4.1	Datenreduktion	197
7.4.4.2	Darstellungsarten	201
7.4.5	Ergebnisinterpretation	203
7.4.6	Kontrollfragen	204
7.5	Fehlerbetrachtung	204
7.5.1	Fehlerarten	205
7.5.2	Modellfehler	206
7.5.3	Diskretisierungsfehler	206
7.5.4	Abbruchfehler iterativer Verfahren	207
7.5.5	Rundungsfehler im Rechner	208
7.5.6	Kontrollfragen	209
8	Ausgewählte Apparate der Verfahrenstechnik	211
8.1	Strömungsrohr	212
8.2	Blasensäulen	213
8.3	Rührkessel	215
8.4	Membranmodule	218
9	Stoffübergang am umströmten Einzeltropfen	221
9.1	Motivation	221
9.2	Problembeschreibung	222
9.3	Vorgehen	227
9.4	Verwendete Software	229
9.5	Gebiet und Gitter	230
9.6	Bilanzgleichungen, Rand- und Anfangsbedingungen	232
9.7	Dimensionslose Größen	238
9.8	Diskretisierung	241
9.8.1	Diskretisierung der konvektiven Terme	242
9.8.2	Diskretisierung der Übergangsbedingungen	242
9.8.3	Zeitdiskretisierung	246
9.9	Validierungsdaten	247
9.9.1	Experimentelle Untersuchungen	248
9.9.2	Analytische Ansätze	250
9.9.3	Numerische Lösungen	251
9.10	Ergebnisse	253
9.10.1	Validierung mit analytischen Ergebnissen	253
9.10.2	Validierung mit experimentellen Ergebnissen	255
9.10.3	Additionsregel	257
9.10.4	Parameterstudie	258
9.10.5	Marangoni-Konvektion	262

10 Fällung von Bariumsulfat	265
10.1 Motivation	265
10.2 Problembeschreibung	266
10.2.1 Begriffe	266
10.2.1.1 Fällung	266
10.2.1.2 Übersättigung	267
10.2.1.3 Keim	268
10.2.2 Fragestellung	268
10.3 Vorgehen	270
10.4 Modellierung	273
10.4.1 Bilanzen	273
10.4.2 Kinetiken von Keimbildung und Partikelwachstum	275
10.4.2.1 Keimbildung	275
10.4.2.2 Partikelwachstum	279
10.4.2.3 Turbulente Wachstumsdispersion	283
10.4.3 Kinetische Ansätze für die Agglomeration	285
10.5 Validierungsdaten	285
10.6 Verwendete Software	287
10.7 Gebiet und Gitter	287
10.8 Diskretisierung	288
10.9 Ergebnisse	290
10.9.1 Geschwindigkeitsfeld	290
10.9.2 Keimbildung und Partikelwachstum	292
10.9.3 Agglomeration	297
11 Perspektive	299
Literaturverzeichnis	303
Index	323