

Numerische Simulation der zeitlich variierenden Konzentration in statischen Mixern*

SABINE SULZER** UND MARKUS FLEISCHLI

1 Problemstellung

Im statischen Mischer Typ Sulzer SMI wurden bei turbulenter Strömung transiente Strömungsphänomene beobachtet und mit dem „Laser-Induced-Fluorescence“ (LIF) -Verfahren gemessen. Die Abbn. 2, 3 und 4 zeigen die zeitlichen Schwankungen der mittleren Konzentration von bis zu 20 % in einem Rohrquerschnitt nach dem Mischer an drei ausgewählten Beispielen.

Die Entwicklung statischer Mischer wurde bei SULZER bisher mit stationären Strömungssimulationen unterstützt, um ein Optimum bezüglich zeitlich gemittelter Mischgüte und des Druckabfalls zu erzielen. Transiente Strömungssimulationen konnten aufgrund des erheblich größeren Rechenbedarfs nicht eingesetzt werden. Neben der verfügbaren höheren Rechenleistung sind es vor allem neu entwickelte Turbulenzmodelle, die heute den Einsatz numerischer Strömungssimulationen auch zur Minimierung der zeitlichen Schwankungen attraktiv machen.

Ziel des vorliegenden Beitrags ist es, abzuschätzen, ob numerische Strömungssimulationen zur Optimierung der Mischer hinsichtlich transients Phänomene geeignet sind. Der Schwerpunkt in dieser Studie wurde in der Evaluation geeigneter Turbulenzmodelle zur Abbildung der zeitlichen Schwankungen der Konzentration gelegt. Zur Turbulenzmodellierung wurde hauptsächlich die „Detached-Eddy-Simulation“ (DES) [1] in verschiedenen Formen angewendet.

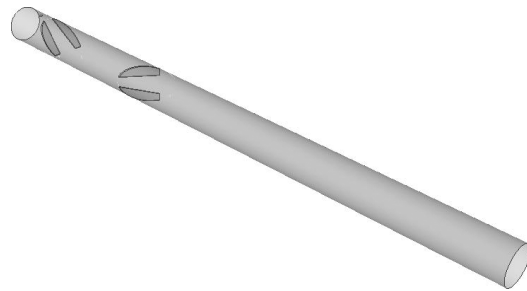
2 Modellierung

2.1 Geometrie, Berechnungsnetz

Untersucht wurde ein Sulzer-Mischer SMI DN 100 mm, bestehend aus zwei im 90°-Winkel zueinander verdrehten Mischelementen. Der Abstand zwischen den Mischelementen betrug 280 mm, die Länge des simulierten Nachlaufes 1100 mm. In Abb. 1 ist die Geometrie des untersuchten Berechnungsgebietes dargestellt.

Die Zudosierung des einzumischenden Additivs erfolgte im ersten untersuchten Beispiel an einem Punkt in der Kanalwand vor dem ersten Mischelement. In den weite-

Abbildung 1.
Geometrie des Sulzer-Mischers SMI mit zwei im 90°-Winkel zueinander verdrehten Mischelementen.



ren zwei Beispielen wurde an zwei Punkten mittels eines zusätzlichen Dosierrohrs zudosiert.

Das Rechenetz sollte einerseits so grob wie möglich sein, um eine möglichst kleine Rechenzeit der transienten Simulationen zu erzielen. Es sollte aber andererseits so fein sein, dass eine weitere Verfeinerung keine Änderung der Resultate mehr zur Folge hat. Um die Netzunabhängigkeit zu überprüfen, wurden die Simulationen auf unterschiedlich feinen Rechenetzen durchgeführt (gröberes Netz ~1 Mio. Zellen, feineres Netz ~2 Mio. Zellen). Im Weiteren wurden zwei unterschiedliche Netzgenerierungsprogramme angewendet: Das Programm ICEM HEXA [2] erzeugt ausschließlich Hexaeder, die aufgrund der Geometrie unterschiedliche Winkel und Seitenverhältnisse haben können. Das Programm ProAM [3] erzeugt orthogonale, isotrope Zellen, die das gesamte Rechengbiet umfassen. Durch das anschließende Schneiden des Netzes mit der Geometrie entstehen zum Teil Zellen, die mehr als sechs Seiten aufweisen und nur mit speziellen CFD-Programmen bearbeitet werden können.

2.2 Turbulenzmodelle

Wie einleitend schon erwähnt, bildet der Vergleich von verschiedenen Turbulenzmodellen den Hauptteil dieser Studie, wobei die folgenden Modelle angewendet wurden:

- $k-\omega$ SST-Modell,
- DES, kombiniert mit $k-\omega$ SST,
- DES, kombiniert mit Spalart-Allmaras (SA).

Für die Simulation mit dem $k-\omega$ SST-Modell wurden im gesamten Strömungsgebiet die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes (RANS) -Gleichungen gelöst¹⁾:

$$\rho \frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \rho \nabla \vec{U} \vec{U} + \underbrace{\rho \nabla \vec{u}' \vec{u}'}_{\text{Reynolds-Spannungen}} = -\nabla P + \rho \vec{g} + \mu_e \Delta \vec{U} \quad (1)$$

mit \vec{U} , den Reynolds-gemittelten Geschwindigkeiten, und \vec{u}' , den turbulenten Schwankungsgrößen der Geschwindigkeit. Die zusätzlich zu den Navier-Stokes-Termen auftretenden Reynolds-Spannungen wurden mit dem Wirbelviskositätsprinzip nach BOUSSINESQ beschrieben, bei welchem die Reynolds-Spannungen proportional zu den Geschwindigkeitsgradienten gesetzt werden.

1) Eine Zusammenstellung der Formelzeichen befindet sich am Schluss des Beitrags.

* Vortrag anlässlich der Sitzung des GVC Fachausschusses „Mischvorgänge“, 16./17. März 2004 in Weimar.
** Dr. S. SULZER (sabine.sulzer@sulzer.com), SULZER INNOTECH, Postfach 65, CH-8401 Winterthur, Switzerland; Dipl.-Ing. M. FLEISCHLI (markus.fleischli@sulzer.com), SULZER CHEMTECH, Postfach, CH-8404 Winterthur, Switzerland.

Das k - ω -Modell liefert bessere Ergebnisse für verzögerte Grenzschichten und abgelöste Strömungen als das bekanntere k - ϵ -Modell. Dieser Ansatz weist jedoch in der Kernströmung eine zu starke Empfindlichkeit gegenüber Außenturbulenzparametern auf. Die Modifikation k - ω SST berücksichtigt in Wandnähe das k - ω -Modell, löst in weiterer Entfernung zur Wand das k - ϵ -Modell und kombiniert daher die Vorteile beider Modelle.

In der Detached-Eddy-Simulation (DES) werden im wandnahen Bereich die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes (RANS) -Gleichungen mit dem entsprechend gewählten Turbulenzmodell gelöst. In der abgelösten Strömung wird dann die Large-Eddy-Simulation (LES) angewendet. Der Vorteil dieses hybriden Modells ist, dass die LES-Simulation die Grobstrukturen der Turbulenz auflöst und nur die Feinstrukturen modelliert, die durch das Rechengitter fallen. Im wandnahen Bereich kann jedoch aufgrund der Verwendung der RANS-Formulierung auf eine aufwändige Verfeinerung, wie sie die LES-Simulation erfordert, verzichtet werden.

Die in dieser Arbeit verwendeten RANS-Techniken (SA, k - ω SST-Modell) werden in der DES-Simulation im wandnahen Bereich angewendet. Für die „Subgrid-Scale“-Modellierung in den Bereichen, wo LES gelöst wird, wurden die entsprechenden RANS-Modelle modifiziert, sie gleichen dem Smagorinski-Modell [5].

2.3 Numerische Behandlung der Zudosierung

Das Medium der Zudosierung wurde als passiver Skalar behandelt, d. h. es besitzt dieselben Stoffeigenschaften wie das Trägerfluid. Der Transport des Skalars C lässt sich mit folgender Gleichung beschreiben:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C) + \nabla(\rho \vec{U} C) = -\nabla \vec{J} \quad (2)$$

Für den Diffusionsfluss \vec{J} in turbulenter Strömung ist folgende Gleichung gültig:

$$\vec{J} = -\left(\rho \cdot D_m + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right) \nabla C \quad (3)$$

D_m ist der Diffusionskoeffizient und Sc_t die turbulente Schmidt-Zahl $\frac{\mu_t}{\rho D_t}$.

Der Diffusionskoeffizient wurde zu 10^{-9} m²/s gesetzt und die turbulente Schmidt-Zahl für Rohrströmungen zu 0,9 angenommen.

2.4 Zeit- und Raumdiskretisierung

Die Zeit wurde mit einem impliziten Schema erster Ordnung diskretisiert. Dieses Schema zeichnet sich durch eine hohe Robustheit aus und weist eine genügende Genauigkeit im zu erwartenden Frequenzspektrum auf. Der Zeitschritt wurde in den Simulationen auf dem gröberen Netz zu $\Delta t = 2 \cdot 10^{-3}$ Sekunden gesetzt. In den Simulationen auf dem feineren Netz war der Zeitschritt halb so groß – also $\Delta t = 10^{-3}$ Sekunden. In den Simulationen mit kleiner Reynolds-Zahl wurde der Zeitschritt auf 10^{-2} Sekunden gesetzt.

Das gewählte räumliche Diskretisierungsschema ist abhängig vom jeweils gewählten Turbulenzmodell. In den reinen RANS-Simulationen wurde das Schema zweiter Ordnung MARS verwendet. In den Bereichen, wo LES gelöst wird, wurde ein zentrales Differenzschema gewählt, das ebenfalls ein Schema zweiter Ordnung ist. In den DES-Rechnungen ist also nicht nur zwischen den Turbulenzmodellen, sondern auch zwischen dem Diskretisierungsschema umgeschaltet worden. Das Umschalten erfolgte mit einer Blending-Funktion.

2.5 Anfangs- und Randbedingungen

Anfangsbedingung war das Resultat aus der stationären Rechnung. In den DES-Rechnungen diente die stationäre Rechnung des RANS-Modells – mit dem kombiniert wurde – als Anfangsbedingung.

Am Eintritt des Hauptstromes wurde ein voll ausgebildetes, turbulentes Geschwindigkeitsprofil vorausgesetzt, wobei dieses vorher in einem Vorlauf ermittelt worden ist. Am Eintritt der Zudosierung wurde ein uniformes Geschwindigkeitsprofil angenommen. Die turbulente Intensität wurde auf 5 % und die Längenskala zu 1/10 des Eintrittsdurchmessers geschätzt. Am Austritt wurde eine Druckrandbedingung vorgegeben, wobei eine Neumann-Randbedingung für die Turbulenzvariablen und die Konzentration definiert wurde. Die Wände und die Misch-elemente sind als glatt angenommen worden. Bei der Simulation turbulenter Strömung wird der wandnahe Strömungsbereich oft mit einer logarithmischen Wandfunktion überbrückt. Dies ist in Bereichen zulässig, wo der dimensionslose Wandabstand Y^+ der wandnächsten Zelle zwischen 30 und 300 liegt. In Ingenieur Anwendungen mit komplexen Geometrien kann diese Bedingung oft nicht eingehalten werden; eine Auflösung der semi-viskosen Grenzschicht bis $Y^+ \sim 1$ im gesamten Rechengebiet führt jedoch zu einem wesentlich feineren Rechengitter. In dieser Arbeit wurde ein neuer Ansatz mit hybriden Wandfunktionen angewendet, der sich in Abhängigkeit des Y^+ -Wertes zwischen dem Verwenden der Wandfunktion und dem Auflösen der Grenzschicht bewegt [6].

3 Ergebnisse

3.1 Allgemeine Bemerkungen

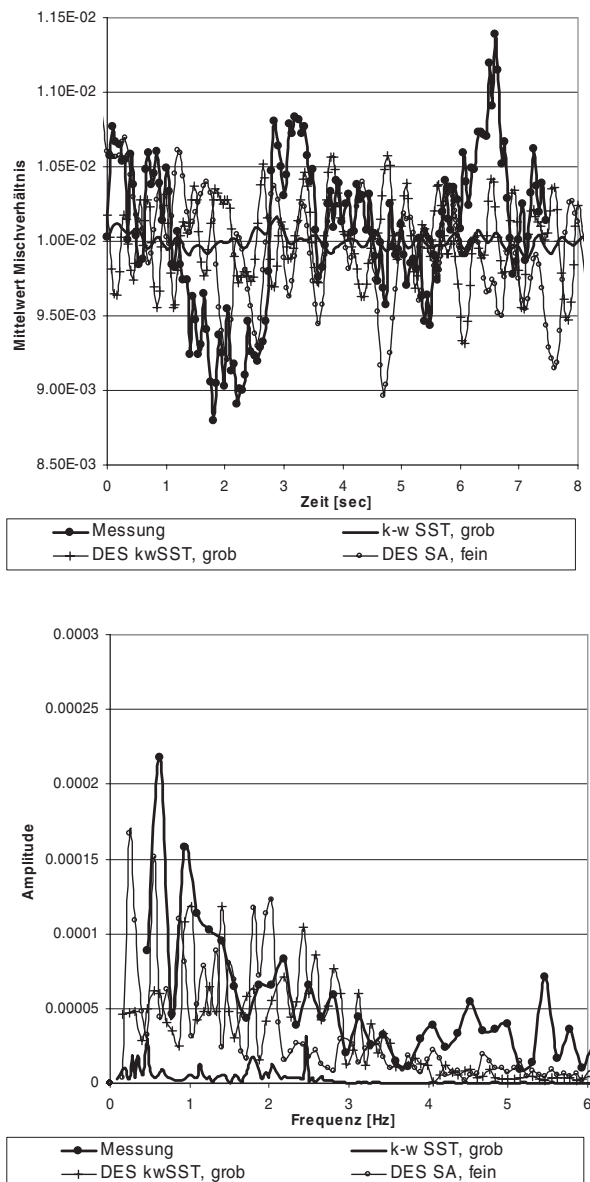
Für den untersuchten Mischer sind transiente „Laser-Induced Fluorescence“ (LIF) -Messungen der Firma BHR SOLUTIONS vorhanden [7]. Dabei wurde mit einer Abtastrate von 20 Hz die Konzentrationsverteilung in einer Querschnittsebene nach dem zweiten Mischelement während 7,5 Sekunden gemessen. Von diesem Messquerschnitt sind 33 Punkte ausgewählt worden, die für die Auswertungen der Messungen und der Simulationen identisch waren. Aus den Messungen mit unterschiedlichen Mischverhältnissen wurde diejenige mit Verhältnis 1:100 zwischen Zudosierung und Hauptstrom bei einer Durchflussmenge des Wassers von $Q_w = 3$ L s⁻¹ für die Analyse der 1-Punkt-Zudosierung aus-

gewählt (entspricht einer Reynolds-Zahl von $Re = 42\,000$). Bei der 2-Punkt-Zudosierung ist bei gleichem Mischverhältnis neben der Durchflussmenge von $Q_w = 3\text{ L s}^{-1}$ auch $Q_w = 0,5\text{ L s}^{-1}$ ($Re = 7000$) untersucht worden.

Das Frequenzspektrum der zeitlichen Schwankungen in der Konzentration wurde mit der Fast-Fourier-Transformation (FFT) basierend auf den NETLIB-Routinen [8] analysiert. Die Zeitreihe der Messungen von 7,5 Sekunden erlaubt die Analyse der Frequenzen ab ~ 1 Hertz, wodurch 7,5 Perioden für die FFT-Analyse berücksichtigt wurden. Demgegenüber können Frequenzen bis $\sim 3,5$ Hertz aufgrund der Abtastrate von 20 Hertz berücksichtigt werden, wenn davon ausgegangen wird, dass eine Periode mit mindestens 6 Punkten abgebildet werden sollte.

Sämtliche Simulationen wurden mit dem Programm StarCD, Version 3.15 [9], durchgeführt. Die DES-Modelle sowie auch die hybriden Wandfunktionen sind in dieser Version als Beta-Version implementiert.

Abbildung 2. Zeitliche Schwankungen der Konzentration (oben) und entsprechende Frequenzreihe (unten) für die 1-Punkt-Zudosierung, $Re = 42\,000$.



3.2 1-Punkt-Zudosierung bei $Re = 42\,000$

Die 1-Punkt Zudosierung ist mit dem folgenden Simulationen untersucht worden:

- reine $k-\omega$ SST auf grobem ICEM-Netz,
- DES $k-\omega$ SST auf grobem ICEM-Netz,
- DES $k-\omega$ SST auf feinem ICEM-Netz,
- DES SA auf feinem ICEM-Netz.

Abb. 2 zeigt die zeitlichen Schwankungen sowie die Frequenzanalyse der querschnittsgemittelten Konzentration aus den Simulationen und der Messung.

Die Amplituden sind in der reinen RANS-Simulation mit dem $k-\omega$ SST-Modell um eine knappe Größenordnung kleiner als in den Messungen. Im Bereich zwischen 1 und 4 Hertz sind die Amplituden der mittleren Konzentration im untersuchten Querschnitt aus den DES-Simulationen von derselben Größenordnung wie die der Messungen. Für größere Frequenzen sind die Amplituden aller Simulationen generell kleiner als in den Messungen. Die Resultate der DES $k-\omega$ SST-Simulationen auf den unterschiedlich feinen Netzen sind vergleichbar, das gröbere Netz bildet somit die Strömungsphänomene mit genügender Genauigkeit ab (die Resultate der DES $k-\omega$ SST-Simulation auf dem feinen Netz sind zur besseren Übersicht nicht in der Grafik enthalten).

3.3 2-Punkt-Zudosierung, $Re = 42\,000$

Aufgrund der guten Übereinstimmungen der DES $k-\omega$ SST-Simulationen bei der 1-Punkt-Zudosierung wurde für die 2-Punkt-Zudosierung dieselbe Turbulenzmodellierung angewendet. Als Rechenetz diente zum einen ein HEXA-Netz mit einer ähnlichen Auflösung wie das grobe Netz der 1-Punkt Zudosierung. Dieses Netz weist jedoch Verfeinerungen aufgrund des zusätzlichen Zudosierrohres im Querschnitt auf ($\sim 1,5$ Mio. Zellen). Zum anderen wurde ein PRO-AM-Netz verwendet ($\sim 1,2$ Mio. Zellen). Abb. 3 zeigt die zeitlichen Schwankungen sowie die Frequenzanalyse in der querschnittsgemittelten Konzentration aus den Simulationen und der Messung.

Die Amplituden der Konzentrationsschwankungen für die Hauptfrequenzen können in beiden Simulationen gut erfasst werden. Die Simulation auf dem HEXA-Netz unterschätzt jedoch die Schwankungen mit höherer Frequenz. Dieses Netz weist aufgrund der Verfeinerung um das Zudosierrohr Zellen mit stark unterschiedlichen Längenverhältnissen auf. Möglicherweise wurde dadurch in den Bereichen, wo LES angewendet wurde, die Diffusion überschätzt, was zu einer Dämpfung der höherskaligen turbulenten Schwankungen führt. Die Hauptfrequenzen mit den größten Amplituden haben ihren Ursprung in den grobskaligen Strömungsverhältnissen aufgrund der Mischelemente und sind somit nicht betroffen.

3.4 2-Punkt-Zudosierung, $Re = 7000$

Das Strömungsverhalten ist in diesem Fall mit einer Reynolds-Zahl von $Re = 7000$ nur schwach turbulent, wodurch

Abbildung 3.
Zeitliche Schwankungen der Konzentration (oben) und entsprechende Frequenzreihe (unten) für die 2-Punkt-Zudosierung, $Re = 42\,000$.

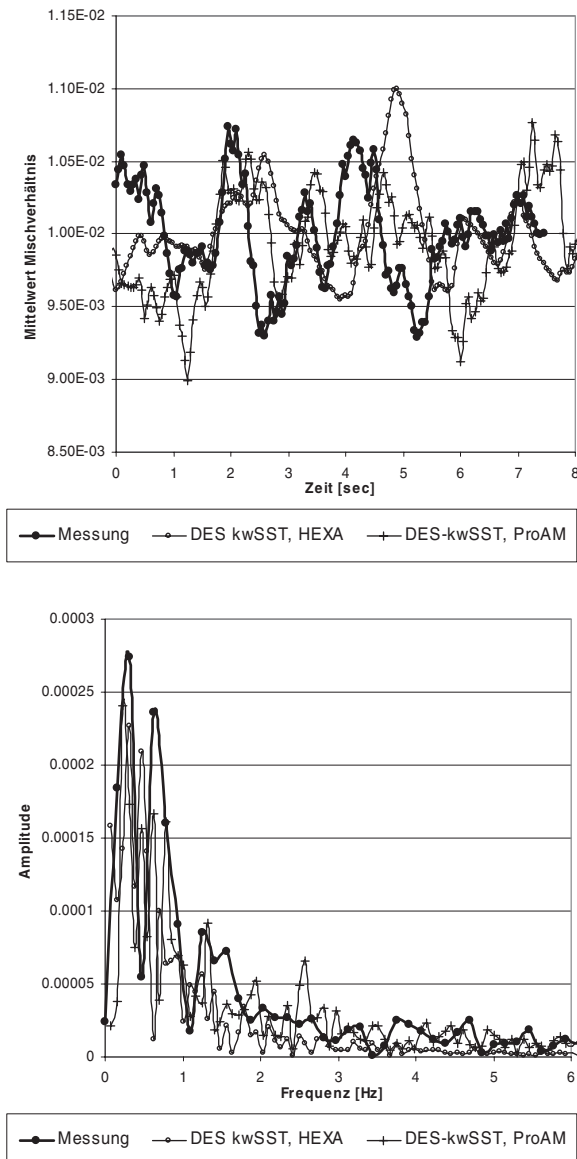
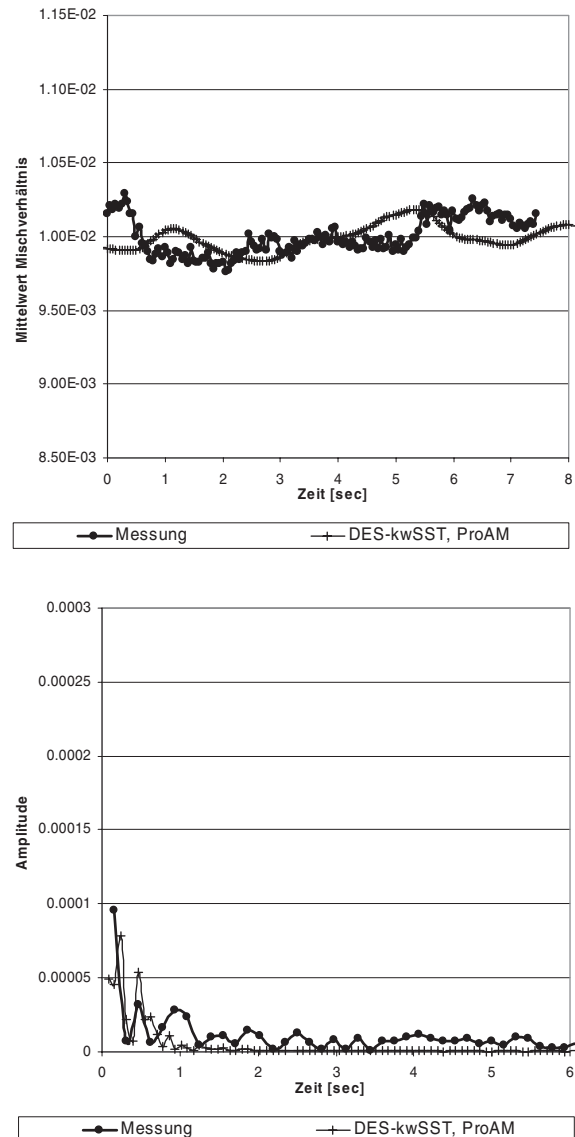


Abbildung 4.
Zeitliche Schwankungen der Konzentration (oben) und entsprechende Frequenzreihe (unten) für die 2-Punkt-Zudosierung, $Re = 7000$.



die zeitlichen Schwankungen der Konzentration im Auswertequerschnitt signifikant kleiner sind als in den vorher besprochenen Fällen.

Für die Simulation wurde dasselbe ProAM-Netz wie für die größere Reynolds-Zahl verwendet. Die Detached-Eddy-Simulation ist ebenfalls mit dem $k-\omega$ SST-Modell kombiniert worden.

In Abb. 4 sind der zeitlich variierende Mittelwert und die Resultate der entsprechenden Frequenzanalyse aufgetragen. Die wesentlich geringere zeitliche Variation des Mittelwertes gegenüber dem Beispiel mit höherer Reynolds-Zahl konnte gut wiedergegeben werden. Die Hauptfrequenz der Variation liegt unter 0,5 Hertz und konnte in der kurzen Messreihe nicht richtig analysiert werden. Qualitativ konnte jedoch ein ähnliches Verhalten über die Zeit nachgebildet werden. In den Messungen sind hochfrequente Schwankungen enthalten, die in den Berechnungen nicht wiedergegeben werden konnten. Unklar ist, ob diese Schwankungen physikalischer Natur sind oder von Messun-

genauigkeiten herrühren. Im Bereich zwischen 1 und 3 Hertz treten deutlich kleinere Amplituden in der Simulation auf als in der Messung.

4 Schlussfolgerungen

Für den Sulzer-Mischer SMI wurden transiente Simulationen für zwei unterschiedliche Zudosierungen (1- und 2-Punkt-Zudosierung) sowie zwei unterschiedliche Anströmverhältnisse (Reynolds-Zahl) durchgeführt.

Die Resultate dieser Studie zeigen in allen drei untersuchten Fällen eine gute Übereinstimmung der zeitlichen Schwankungen im Mittelwert bei Verwendung einer Detached-Eddy-Simulation. Ferner konnte deutlich gezeigt werden, dass eine reine RANS-Simulation die zeitlichen Schwankungen um eine knappe Größenordnung unterschätzt. Im Weiteren konnte die Notwendigkeit eines möglichst isotropen Netzes für eine DES-Simulation verdeut-

licht werden, da die simulierte Turbulenz keine bevorzugte Strömungsrichtung aufweist.

Die durchgeführten Validierungen zeigen die Anwendbarkeit der numerischen Strömungssimulation für die Optimierung statischer Mischer auch im Hinblick auf die nicht erwünschten zeitlichen Schwankungen. Erkenntnisse aus den transienten Strömungssimulationen sollen die Optimierung der Mischer basierend auf den stationären Simulationen ergänzen.

Eingegangen am 28. Mai 2004 [K 3436]

Formelzeichen

C	[kg kg ⁻¹]	Konzentration des zudosierten Skalars
D_m	[m ² s ⁻¹]	Diffusionskoeffizient
D_t	[m ² s ⁻¹]	turbulenter Diffusionskoeffizient
g	[m s ⁻²]	Erdbeschleunigung
\vec{J}	[kg m ⁻² s ⁻¹]	Diffusionsfluss
k	[m ² s ⁻²]	turbulente kinetische Energie
L	[m]	charakteristische Länge (z. B. Rohrdurchmesser)
P	[Pa]	Druck
Q_w	[m ³ s ⁻¹]	Durchfluss
Re	[-]	Reynolds-Zahl ($= \frac{\bar{U} L \rho}{\mu_e}$)
Sc_t	[-]	turbulente Schmidt-Zahl ($= \frac{\mu_t}{\rho D_t}$)
\bar{U}	[m s ⁻¹]	Reynolds-gemittelte Geschwindigkeit
\bar{U}'	[m s ⁻¹]	turbulente Schwankungsgröße der Geschwindigkeit
t	[s]	Zeit
Y^+	[-]	dimensionsloser Wandabstand

griechische Buchstaben

ε	[m ² s ⁻³]	turbulente Dissipationsrate
μ_e	[kg m ⁻¹ s ⁻¹]	dynamische Viskosität
μ_t	[kg m ⁻¹ s ⁻¹]	dynamische Wirbelviskosität
ρ	[kg m ⁻³]	Dichte des Fluids
ω	[s ⁻¹]	spezifische Dissipationsrate

Literatur

- [1] M. Shur, P. R. Spalart, M. Strelets, A. Travin, Detached-Eddy Simulation of an Airfoil at High Angle of Attack, 4th International Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements (Eds: W. Rodi, D. Laurence), Elsevier, Amsterdam 1999, 669.
- [2] ICEM Hexa, Version 4.3.1, ANSYS Inc., Canonsburg 2003.
- [3] ProAM, Version 3.15, Computational Dynamics Limited, London 2003.
- [4] D. C. Wilcox, Turbulence Modeling for CFD, DCW Industries, Inc., La Canada, California, 1998.
- [5] A. Travin, M. Shur, M. Strelets, P.R. Spalart, Physical and Numerical Upgrades in the Detached-eddy Simulation of Complex Turbulent Flows, in Advances in LES of Complex Flows, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 2002, 239.
- [6] T. Rung, Formulierung universeller Wandrandbedingungen für Transportgleichungs-Turbulenzmodelle, Hermann-Föttiger-Institut für Strömungsmechanik, TU Berlin, Technical Report 02/99, Berlin 1999.
- [7] Confidential Report, BHR Group Limited, The Fluid Engineering Centre, Cranfield (UK) 2002.
- [8] AT&T Bell Laboratories, University of Tennessee, Oak Ridge National Laboratory, NetLIB, <http://www.netlib.org/misc/fft.f>
- [9] Star-CD, Version 3.15.028, Computational Dynamics Limited, London 2003.