

Modellierung und Simulation der Gas- Flüssigkeitsströmung in strukturierten Packungen mittels CFD-Methoden

zur Erlangung des akademischen Grades
DOKTOR DER INGENIEURSWISSENSCHAFTEN (Dr.-Ing.) der
Fakultät für Maschinenbau
der Universität Paderborn

genehmigte
DISSERTATION

von
M.Sc. René Bertling
aus Gütersloh

Tag des Kolloquiums:	18.09.2024
Referent:	Prof. Dr.-Ing. habil. Eugeny Kenig
Korreferent:	Prof. Dr.-Ing. Thomas Grützner

Danksagung

Die vorliegende Dissertation entstand auf Grundlage meiner Forschungstätigkeit am Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik, an dem ich von 2017 bis 2021 tätig sein durfte. Zunächst möchte ich Prof. Kenig für seine Unterstützung danken. Seine Arbeit und sorgfältige Betreuung haben maßgeblich zu den erzielten Forschungsergebnissen beigetragen. Die große Gestaltungsfreiheit, die er mir einräumte hat, hat es mir ermöglicht, viele eigene Ideen und Ansätze in meiner Arbeit zu verfolgen. Auch nach meiner Zeit am Lehrstuhl hat er sich immer Zeit für mich genommen und unermüdlich für unsere gemeinsamen Publikationen gekämpft.

Ich möchte auch Dr. Marc Wehrli, Dr. Mathias Hack, Dr. Ilja Ausner, Thomas Linder, Bernhard Horschitz und allen weiteren Beteiligten der Fa. Sulzer für unsere außergewöhnliche Zusammenarbeit danken. Ihre wertvollen Beiträge und das regelmäßige und konstruktive Feedback waren von unschätzbarem Wert. Ich bin dankbar für die investierte Zeit und auch für die Gastfreundschaft und die faszinierenden Einblicke in die Arbeit bei der Fa. Sulzer während meines Aufenthalts in Winterthur.

Ich möchte mich auch bei meinen ehemaligen Kolleginnen und Kollegen vom Lehrstuhl bedanken. Ich habe die schöne Zeit genossen, in der wir gemeinsam diskutieren und lachen konnten. Ob auf Konferenzen, in der täglichen Arbeit am Lehrstuhl oder beim gemeinsamen Sport nach Feierabend, habe ich mich immer wohl in unserer starken Gemeinschaft gefühlt. Besonders freue ich mich darüber, dass sich Christopher Dechert und Sören Bernemann, die ich als Studenten betreut habe, ins Team integrieren konnten.

Ein herzliches Dankeschön geht auch an meine Eltern, die mich seit meiner Kindheit gefördert und unterstützt haben.

Last but not least, möchte ich mich bei meiner Frau Jennifer bedanken. Sie hat mir in anstrengenden Zeiten den Rückhalt gegeben, den ich gebraucht habe.

Kurzfassung

In dieser Arbeit wurden Flüssigkeitsströmungen in strukturierten Packungen mittels CFD-Methoden untersucht. Der Fokus lag dabei auf der Fluidodynamik und der Verweilzeitverteilung.

In einer kombinierten experimentellen und numerischen Studie wurden Modellierungsansätze für mikrostrukturierte und perforierte Packungsoberflächen erarbeitet. Hierbei wurden Strömungen auf geneigten, ungefalteten Packungsblechen betrachtet. Die Modellierungsansätze wurden anschließend bei der CFD-Simulation strukturierter Packungen angewandt. Zur Validierung des CFD-Modells wurden Literaturdaten genutzt, welche mittels hochauflösender Computertomographie gewonnen wurden. Effektive Phasengrenzfläche, Holdup und Verweilzeitverteilung konnten gut reproduziert werden. Das validierte CFD-Modell wurde anschließend verwendet, um zwei Flüssigkeiten (Wasser und eine Mischung aus Wasser und Triethylenglykol), sowie zwei Typen der Standardpackung Sulzer Mellapak™ zu untersuchen. Dies ermöglichte es, die Auswirkungen von Flüssigkeitseigenschaften und geometrischer Packungsoberfläche auf die Strömung unter Berücksichtigung von Mikrostruktur und Perforationen zu bewerten.

Abstract

In this work liquid flow in structured packings was investigated using CFD-methods. Along with the fluid dynamics, convective transport of a tracer was studied to determine residence time distributions.

Novel approaches for the consideration of surface microstructure and perforations were developed in a combined experimental and numerical study, using the flow over inclined, non-corrugated packing sheets as a model case. The approaches were then applied to structured packings and validated using literature data obtained with high-resolution computer tomography. Effective interfacial area, holdup and residence time distributions were well reproduced. The model was then applied to investigate two liquid systems (water and a mixture of water and triethyleneglycol), while two types of the standard packing Sulzer Mellapak™ were explored. This allowed to evaluate the effects of liquid properties and geometric packing area on the flow, while taking perforations and surface microstructure into account.

Veröffentlichungen

Ergebnisse dieser Arbeit wurden größtenteils in den unten aufgeführten internationalen Fachzeitschriften sowie in den Tagungsberichten der unten genannten Konferenzen veröffentlicht.

Zeitschriftenartikel

Bertling, R., Hack, M., Ausner, I., Horschitz, B., Bernemann, S., Kenig, E.Y., 2022. Modelling film and rivulet flows on microstructured surfaces using CFD methods. *Chem. Eng. Sci.* 251, 117414.

Bertling, R., Hack, M., Ausner, I., Horschitz, B., Wehrli, M., Kenig, E.Y., 2023. Simulation of liquid flow in structured packings using CFD-methods. *Chem. Eng. Sci.* 269, 118405.

Vorträge

Bertling, R. Hack, M., Ausner, I., Horschitz, B. Kenig, E.Y., 2021. CFD-basierte Untersuchung von Zweiphasenströmungen in strukturierten Packungen. *Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppe Fluidverfahrenstechnik*, online

Bertling, R. Hack, M., Ausner, I., Kenig, E.Y., 2020. CFD-basierte Untersuchung von Zweiphasenströmungen in strukturierten Packungen. *Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppe Fluidverfahrenstechnik*, Berchtesgaden

Bertling, R., Hack, M., Ausner, I., Kenig, E.Y., 2020. CFD Simulation of Film and Rivulet Flows on Microstructured Surfaces. *30th European Symposium on Computer Aided Process Engineering*, online

Poster

R. Bertling, M. Hack, I. Ausner, E. Kenig, in: 2020. CFD-Simulationen von Film- und Rinnsalströmungen auf mikrostrukturierten Oberflächen. *Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppe Computational Fluid Dynamics*, Bamberg

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	xi
Tabellenverzeichnis	xv
Symbolverzeichnis	xvii
1 Einleitung	1
2 Stand des Wissens	3
2.1 Packungskolonnen.....	3
2.1.1 Aufbau	4
2.1.2 Fluiddynamische Betriebsparameter und Kenngrößen	5
2.1.3 Fluiddynamisches Betriebsverhalten	7
2.2 Strukturierte Packungen	10
2.2.1 Aufbau	10
2.2.2 Historische Entwicklung	13
2.3 Experimentelle Untersuchungen lokaler Strömungsphänomene.....	15
2.4 CFD-gestützte Untersuchungen lokaler Strömungsphänomene	16
2.4.1 Computational Fluid Dynamics (CFD).....	17
2.4.2 Effektiver Kontaktwinkel	17
2.4.3 Literaturanalyse: Untersuchungen lokaler Gas-Flüssigkeitsströmungen in Faltblechpackungen mittels CFD.....	18
2.5 Zwischenfazit und Zielsetzung.....	21
3 Grundlagen der Modellierung und Simulation	23
3.1 Erhaltungsgleichungen	23
3.2 Studien zur Implementierung	26
3.2.1 Rechengebiet und Randbedingungen	27
3.2.2 Gitterstudien	29
3.2.3 Studie zu Solver-Einstellungen	31
3.2.4 Zusammenfassung	34
4 Film- und Rinnsalströmungen auf geneigten Packungsblechen	35
4.1 Experimentelle Methode	37
4.2 Rechengebiet, Rand- und Anfangsbedingungen	41
4.3 Datenaufbereitung	44
4.4 Bestimmung effektiver Kontaktwinkel.....	48

4.5 Modellierung von Perforationen	50
4.6 Ergebnisse	52
4.6.1 Einfluss des Kontaktwinkels auf die Strömungsmorphologie	52
4.6.2 Glattes Packungsblech	53
4.6.3 W-rilliertes Packungsblech	55
4.6.4 Perforiertes Packungsblech	57
4.7 Zusammenfassung	58
5 Strömungen in strukturierten Packungen.....	59
5.1 Methode zur Erfassung des Verweilzeitverhaltens	59
5.2 Rechengebiet, Rand- und Anfangsbedingungen	61
5.3 Auswertungsmethode	66
5.4 Modellvalidierung.....	70
5.4.1 Fluidodynamik	71
5.4.2 Tracer-Transport.....	75
5.5 Untersuchungen der Fluidodynamik und des Verweilzeitverhaltens	77
5.5.1 Einflüsse von Packungsgeometrie und Flüssigkeitseigenschaften auf die Fluidodynamik	77
5.5.2 Tracer-Transport in der 500.Y-Packung.....	84
5.6 Zusammenfassung	89
6 Fazit.....	91
Literaturverzeichnis.....	95

Abbildungsverzeichnis

2.1	Aufbau einer Rektifikationskolonne mit strukturierten Packungen (nach Sattler, 2001).	4
2.2	Einfluss der Gas- und Flüssigkeitsbelastung einer Packungskolonne auf Druckverlust (oben) und Holdup (unten) (Goedecke, 2006).	9
2.3	Aufbau und Einbausituation einer Faltblechpackung (nach Stichlmair, 2021). Isometrische Ansicht der Faltblechanordnung (a), seitliche Ansicht der Einbausituation mit drei um je 90° zueinander verdrehten Packungssegmenten (b) und Draufsicht der Packung (c). Der Pfeil in Ansicht (b) zeigt die Blickrichtung in Ansicht (c) an.	11
2.4	Schematische Darstellung der Auswahl eines REUs nach Olenberg (2021).	12
3.1	Visualisierung der in Gleichung (3.7) verwendeten Vektoren.	26
3.2	Rechengebiet und Randbedingungen nach Lan et al. (2010).	28
3.3	Volumenanteil der Flüssigphase α_L berechnet mithilfe eines adaptiv verfeinerten Gitters. (Das Gitter mit weißen Linien dargestellt).	30
3.4	Mit verschiedenen Gittereinstellungen berechnete Filmdickenprofile und experimentelle Werte von Lan et al. (2010) ($\dot{V} = 20,25$ ml/s, glatte, nicht perforierte Platte). Studie zur Gitterauflösung normal zur Platte (links), Studie zum maximalen Seitenverhältnis (rechts).	31
3.5	Filmdickenprofile für verschiedene Solver-Einstellungen nach. Variierender Glättungsrelaxationsfaktor (links) und variierendes Diskretisierungsschema zur Lösung der VoF-Transportgleichung (rechts).	33
3.6	VoF-Feld bei $x = 138,1$ mm. PLIC-Schema (oben) und HRIC-Schema (unten).	34
4.1	Experimenteller Aufbau	38
4.2	Foto eines Rinnsals auf W-rilliertem Blech (links) und vergrößerte schematische Darstellung der Mikrostruktur (rechts).	38

4.3	Rechengebiet zur Simulation der Strömungen über geneigte Packungsbleche.....	41
4.4	Geschwindigkeit (oben) und Volumenanteil der Flüssigphase (unten) am Eintritt des Rechengebiets.	43
4.5	Fotos vor der Datenverarbeitung. Strömungen auf einem W-rillierten Blech (links) und einem glatten Blech (rechts). Der Volumenstrom beträgt 300 ml/min.	44
4.6	Transformation eines Bildes in eine Farbintensitätsmatrix. Originalbild (links), diskretisiertes Bild (Mitte) und Intensitätsmatrix (rechts).....	45
4.7	Datenauswertungsverfahren zum Vergleich der Ergebnisse aus Experimenten und CFD-Simulationen.....	47
4.8	Algorithmus zur automatisierten Ermittlung effektiver Kontaktwinkel.	48
4.9	γ -Profil zur Modellierung von Perforationen.	50
4.10	Verlauf der Triplelinien bei verschiedenen Kontaktwinkeln ($\dot{V}_L = 300$ ml/min).	53
4.11	Verlauf der Triplelinien auf einem glatten, nicht perforierten Packungsblech.	54
4.12	Normierte Intensitätsprofile für das experimentell untersuchte glatte Packungsblech und normierte simulierte Flimickenprofile ($\gamma = 35^\circ$, $\dot{V}_L = 300$ ml/min).....	54
4.13	Verlauf der Triplelinien auf einem W-rillierten, nicht perforierten Packungsblech.....	55
4.14	Normierte Intensitätsprofile für das experimentell untersuchte W-rillierte Packungsblech und normierte simulierte Flimickenprofile ($\gamma_{eff} = 19,4^\circ$, $\dot{V}_L = 300$ ml/min).....	56
4.15	Strömung über ein glattes perforiertes Packungsblech. Experiment (links) und Simulationsergebnis (rechts). Die Farbskala im rechten Bild zeigt das Kontaktwinkelfeld auf dem Packungsblech. Die simulierte Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche wird in einem transparenten Grau dargestellt (die Farbskala gilt hier nicht).....	57
5.1	Kanalquerschnitt (links), Packungssegment (7 REUs) mit Schnittebene (Mitte), Packungssegment ohne Schnittebene (rechts). Die Packungslagen sind in transparentem Grau dargestellt, die orange Schnittebene wird zur Visualisierung der Ergebnisse genutzt.....	61
5.2	Rechengebiet. Die Farben entsprechen den Randbedingungen gemäß Tabelle 5.2.	62

5.3	Am Eintritt verwendete Profile. Flüssigkeits-Volumenanteil (links), Geschwindigkeit normal zum Eintritt (rechts).....	64
5.4	Visualisierung der Tracer-Aufgabe.	65
5.5	Teile des Rechenbereichs, die für die Studie zur Quantifizierung von Einlaufeffekten berücksichtigt wurden. Die schwarzen Linien kennzeichnen die ausgewerteten Bereiche. Rechengebiet ohne die obersten drei REUs (links), Rechengebiet ohne das oberste REU (Mitte), gesamtes Rechengebiet (rechts).....	67
5.6	Quantifizierung der Einlaufeffekte für die 500.Y-Packung mit Wasser. Relative Benetzung (links), Holdup (rechts).....	68
5.7	Beispiel für die Visualisierung der Strömungsmorphologie anhand der 250.Y-Packung: Seitenansicht des zweiten REUs (links), isometrische Ansicht der gesamten Packung (Mitte), Schnittansicht mit nur einem sichtbaren Packungsblech (rechts). Die magentafarbenen Linien zeigen die Kanten der Schnittebene und der Pfeil die Perspektive, aus der die Schnittansicht gezeigt wird. Die Farbskala zeigt die Filmdicke, der Kern der Flüssigphase ist schwarz dargestellt.....	69
5.8	Experimenteller Aufbau für tomographische Messungen nach Kögl et al. (2023).	70
5.9	Strömungs-morphologie in der 500.Y-Packung. Nicht perforierte Packung mit $\gamma = 70^\circ$ (links), nicht perforierte Packung mit $\gamma_{eff} = 8^\circ$ (Mitte), perforierte Packung mit $\gamma_{eff} = 8^\circ$ und $\gamma_{perf} = 100^\circ$ (rechts). Die Farbskala zeigt die Filmdicke auf der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche, der Kern der Flüssigphase ist schwarz dargestellt.....	72
5.10	CFD-Ergebnisse dieser Arbeit und CT-Daten von Schug, 2018 für die 500.Y-Packung mit Wasser: Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche (links), Holdup (rechts).	73
5.11	Tracer-Profile in der 500.Y-Packung. Tomographische Messungen von Kögl et al. (2023) sind entsprechend der in Abbildung 5.8 gezeigten Messtellen mit HP1 bis HP6 benannt. In den CFD-Simulationen wurden die experimentell ermittelten Profile an den Stellen HP1, HP3 und HP5 als Tracer-Einlassbedingung verwendet.....	76
5.12	Ergebnisse der CFD-Simulationen mit Wasser. Effektive Phasengrenzfläche (links), Holdup (rechts).	78
5.13	Ergebnisse der CFD-Simulationen mit Wasser-TEG-Gemisch. Effektive Phasengrenzfläche (links), Holdup (rechts).	78
5.14	Durch CFD-Simulationen bestimmte mittlere Filmdicke. Wasser (links), Wasser-TEG-Gemisch (rechts).	79

5.15	Wasserströmung in strukturierten Packungen. 250.Y-Packung (links), 500.Y-Packung (rechts). Die Farbskala zeigt die Filmdicke an der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche, die Packung ist in grau und der Kern der Flüssigphase in schwarz dargestellt.....	80
5.16	Strömung der Wasser-TEG-Mischung in strukturierten Packungen. 250.Y-Packung (links), 500.Y-Packung (rechts). Die Farbskala zeigt die Filmdicke an der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche, die Packung ist in grau und der Kern der Flüssigphase in schwarz dargestellt.	81
5.17	Schematische Darstellung der Kanalquerschnitte der 250.Y-Packung (links) und der 500.Y-Packung (rechts). Die Packungsbleche sind als schwarze Linien illustriert, die Flüssigphase ist in blau und die Gasphase in weiß dargestellt. Die Topologien der Gas-Flüssigkeits-Grenzflächen sind zu Kreissegmenten vereinfacht.	82
5.18	Tracer-Verteilungen in der 500.Y-Packung. Packungsblech hinter der Schnittebene bei $y = 0$ (links), Packungsblech vor der Schnittebene bei $y = 0$ (rechts). Die magentafarbenen Rechtecke zeigen einen Punkt, an dem die Flüssigkeit von einem Blech zum anderen wechselt. Die Farbskala zeigt den Massenanteil des Tracers an der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche. Oberhalb des Tracer-Aufgabepunktes (vgl. Abbildung 5.4) ist die Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche in dunkelgrau dargestellt. Die Packung ist in hellgrau visualisiert.	85
5.19	Tracer-Verteilungen in der 500.Y-Packung für unterschiedliche Abstände zum Tracer-Einlass mit $u_L = 14 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$	86
5.20	Verweilzeitverteilungen in der 500.Y-Packung für unterschiedliche Abstände zum Tracer-Eintritt mit $u_L = 14 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. Die schwarzen Kurven zeigen die zeitlichen Ableitungen der CFD-Ergebnisse in Abbildung 5.19, die blauen Kurven wurden mit dem Dispersionsmodell (Levenspiel, 1998) bestimmt.	86

Tabellenverzeichnis

3.1	Eigenschaften der Flüssigphase in der Arbeit von Lan et al. (2010).....	27
3.2	Randbedingungen (Nummerierung entsprechend Abbildung 4.1).....	28
4.1	Fluideigenschaften bei 20°C (Literaturwerte sind mit einem Sternchen gekennzeichnet).	39
4.2	Randbedingungen (Nummerierung entsprechend Abbildung 4.3).	42
5.1	Geometrieparameter der Packungskanäle (abgeleitet von Sulzer Mellapak™ Packungen).	62
5.2	Randbedingungen.	63
5.3	Profile für Eintrittsgeschwindigkeit und Flüssigkeitsvolumenanteil.....	64
5.4	Flüssigkeitseigenschaften und verwendete Kontaktwinkel.	64
5.5	Effektive Phasengrenzfläche und Holdup (500.Y-Packung mit Wasser).	72
5.6	Parameter zur Charakterisierung der Verweilzeitverteilungen an verschiedenen Messorten.....	87

Symbolverzeichnis

Lateinische Buchstaben

Symbol	Bedeutung	Einheit
a	spezifische Oberfläche	m^2/m^3
ar	Seitenlängenverhältnis	-
A	Fläche	m^2
B	Packungskanalbreite	m
Bo	Bodenstein-Zahl	-
CFL	Courant-Zahl	-
d	Rinnsalbreite	m
d^*	Abstand zum Packungsblech	m
D	Dispersionskoeffizient	m^2/s
f_σ	Quellterm für Oberflächenspannung	N/m^3
F	Gasbelastungsfaktor	$\text{Pa}^{0,5}$
g	Gravitationskonstante	m/s^2
h	Holdup	-
H	Höhe	m
m	Masse	kg
n	Einheitsnormalenvektor	-
p	Druck	Pa
P	Pixelkonglomerat	-
r	Relaxationsfaktor	-
R	Radius	m
s	radiale Koordinate	m
t	Zeit	s
\mathbf{t}	Einheitstangentialvektor	-
u_L	Flüssigkeitsbelastung	$\text{m}^3/\text{m}^2\text{h}$
\mathbf{u}	Geschwindigkeitsvektor	m/s
v	Betrag der Geschwindigkeit normal zum Eintritt des Rechengebiets	m/s
w	Geschwindigkeit in z-Richtung	m/s
\dot{V}	Volumenstrom	m^3/s

x	x -Koordinate	m
y	y -Koordinate	m
z	z -Koordinate	m

Griechische Buchstaben

Symbol	Bedeutung	Einheit
α	Volumenanteil	-
β	Kanalneigungswinkel	°
γ	Kontaktwinkel	°
η	dynamische Viskosität	Pa s
θ	normierte Zeit	-
κ	Krümmung	1/m
ρ	Dichte	kg/m ³
σ	Oberflächenspannung	N/m
τ	mittlere Verweilzeit	s
Φ	Tracer-Massenanteil	-

Indizes

Symbol	Bedeutung
A	Aufgaberohr
B	Blech
CFD	CFD-Simulation
eff	effektiv
exp	experimentell
$Film$	Flüssigkeitsfilm
G	Gasphase
GF	Grenzfläche
i	Zeilenindex
in	Eintritt
j	Spaltenindex
K	Kolonne
L	Flüssigphase
max	maximal
min	minimal
n	Anzahl durchlaufener Iterationen
P	Packung
$Perf$	Perforation
PK	Packungskanal
Q	Querschnitt
S	Seite
W	Wand

Abkürzungen

Kürzel	Bedeutung
CFD	Computational Fluid Dynamics
CICSAM	Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes
CSF	Continuum Surface Force
HRIC	High Resolution Interface Capturing
MEA	Monoethanolamin
PLIC	Piecewise Linear Interface Construction
REU	Representative Elementary Unit
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations
TEG	Triethylenglykol
VoF	Volume of Fluid

1 Einleitung

Strukturierte Packungen finden aufgrund ihrer hervorragenden Stoffaustauscheigenschaften in Kombination mit einem geringen spezifischen Druckverlust breite Anwendung in Gas-Flüssigkeits-Trennprozessen. Zur genaueren Dimensionierung der Apparate und zur Optimierung der Packungsgeometrie wird die Aufklärung der vorherrschenden Fluidodynamik angestrebt. Die Zweiphasenströmungen mit freier Phasengrenzfläche in Packungskolonnen sind jedoch komplex und ihre Erfassung stellt sowohl für experimentelle als auch für numerische Methoden eine Herausforderung dar.

Eine direkte experimentelle Erfassung der Phasengrenzfläche und lokaler Strömungsphänomene ist bisher nur mittels tomografischer Messungen möglich. Diese haben bereits die Annahme widerlegt, dass die Packungsoberfläche stets vollständig benetzt sei. Es konnte gezeigt werden, dass insbesondere bei niedrigen Flüssigkeitsbelastungen und Flüssigkeiten mit hoher Oberflächenspannung nicht nur Flüssigkeitsfilme, sondern auch Rinnsal- und Tropfenströmungen auftreten (Janzen et al., 2013, Schug und Arlt, 2016, Bolenz et al., 2021). Durch tomographische Messungen wurde weiterhin bestätigt, dass neben den makroskopischen Geometrieparametern der Packungen auch Mikrostruktur und Perforationen einen erheblichen Einfluss auf die Strömung der flüssigen Phase ausüben (Schug, 2018).

Ergänzend wird auch *Computational Fluid Dynamics* (CFD) zur Aufklärung der lokalen Strömungsverhältnisse in kleinen Packungsabschnitten eingesetzt (z.B. Olenberg und Kenig, 2020, Singh et al., 2020). In dieser Dissertation werden Methoden vorgestellt und angewandt, mit denen dabei erstmals auch die bedeutenden Einflüsse von Mikrostruktur und Perforationen adäquat berücksichtigt werden können.

Die Dissertation ist wie folgt aufgebaut: Zunächst wird der Stand des Wissens zu Packungskolonnen und strukturierten Packungen dargelegt, wobei besonders auf die Fluidodynamik der Flüssigphase und die Möglichkeiten zur Erfassung der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche mit experimentellen und numerischen Methoden

eingegangen wird. Im Kapitel „Grundlagen der Modellierung und Simulation“ werden die zugrundeliegenden Erhaltungsgleichungen und das numerische Modell zur Simulation der Zweiphasenströmungen beschrieben. Es wird vertiefend auf die Implementierung des Modells eingegangen. In diesem Zuge werden am Beispiel einer Filmströmung mit ähnlichen Eigenschaften wie die später betrachteten Probleme Studien zum numerischen Gitter und zu Solver-Einstellungen diskutiert. Das Kapitel „Film- und Rinnsalströmungen auf geneigten Packungsblechen“ behandelt zunächst eigene Experimente mit mikrostrukturierten und gelochten Einzelblechen. Es werden dann Methoden zur numerischen Modellierung von mikrostrukturierten Oberflächen und Perforationen vorgestellt. Mit Hilfe dieser Methoden wurden die Experimente durch CFD-Simulationen abgebildet. Die durch die Experimente und Simulationen ermittelten Strömungsmorphologien werden im direkten Vergleich gegenübergestellt. Im Kapitel „Strömungen in strukturierten Packungen“ werden schließlich Simulationsergebnisse zu Strömungen in zwei Typen der Standardpackung Sulzer Mellapak™ dargestellt. Es werden jeweils Simulationsergebnisse mit Wasser und einer Mischung aus Wasser und Triethylenglykol (TEG) als Flüssigphase diskutiert.

2 Stand des Wissens

In diesem Kapitel werden zunächst der Aufbau sowie das fluiddynamische Betriebsverhalten von Packungskolonnen beschrieben. Es wird dann auf die Geometrie und die historische Entwicklung strukturierter Packungen eingegangen. Des Weiteren wird der Stand des Wissens zu numerischen Simulationen von Gas-Flüssigkeits-Strömungen in Faltblechpackungen dargelegt.

2.1 Packungskolonnen

Packungskolonnen werden zumeist in Rektifikations-, Absorptions- und Desorptionsprozessen eingesetzt. Diese Trennprozesse werden überwiegend im Gegenstrom betrieben, wobei eine Flüssigphase den Apparat gravitationsgetrieben von oben nach unten durchströmt. Die entgegengesetzte Gasströmung ist druckgetrieben, wobei der benötigte Druck durch einen Verdampfer bzw. ein Gebläse am Fuß der Kolonne erzeugt wird.

Es gibt zwei Arten trennwirksamer Einbauten, mit denen der Stoffübergang in Packungskolonnen realisiert wird: Die fest angeordneten strukturierten Packungen einerseits und Schüttungen regelloser Füllkörper andererseits. Der wesentliche Unterschied besteht darin, dass in strukturierten Packungen eine periodisch wiederkehrende Form von Strömungskanälen existiert, was in Füllkörperschüttungen nicht der Fall ist. In dieser Dissertation werden ausschließlich strukturierte Packungen behandelt.

2.1.1 Aufbau

Abbildung 2.1 zeigt den typischen Aufbau einer Packungskolonne:

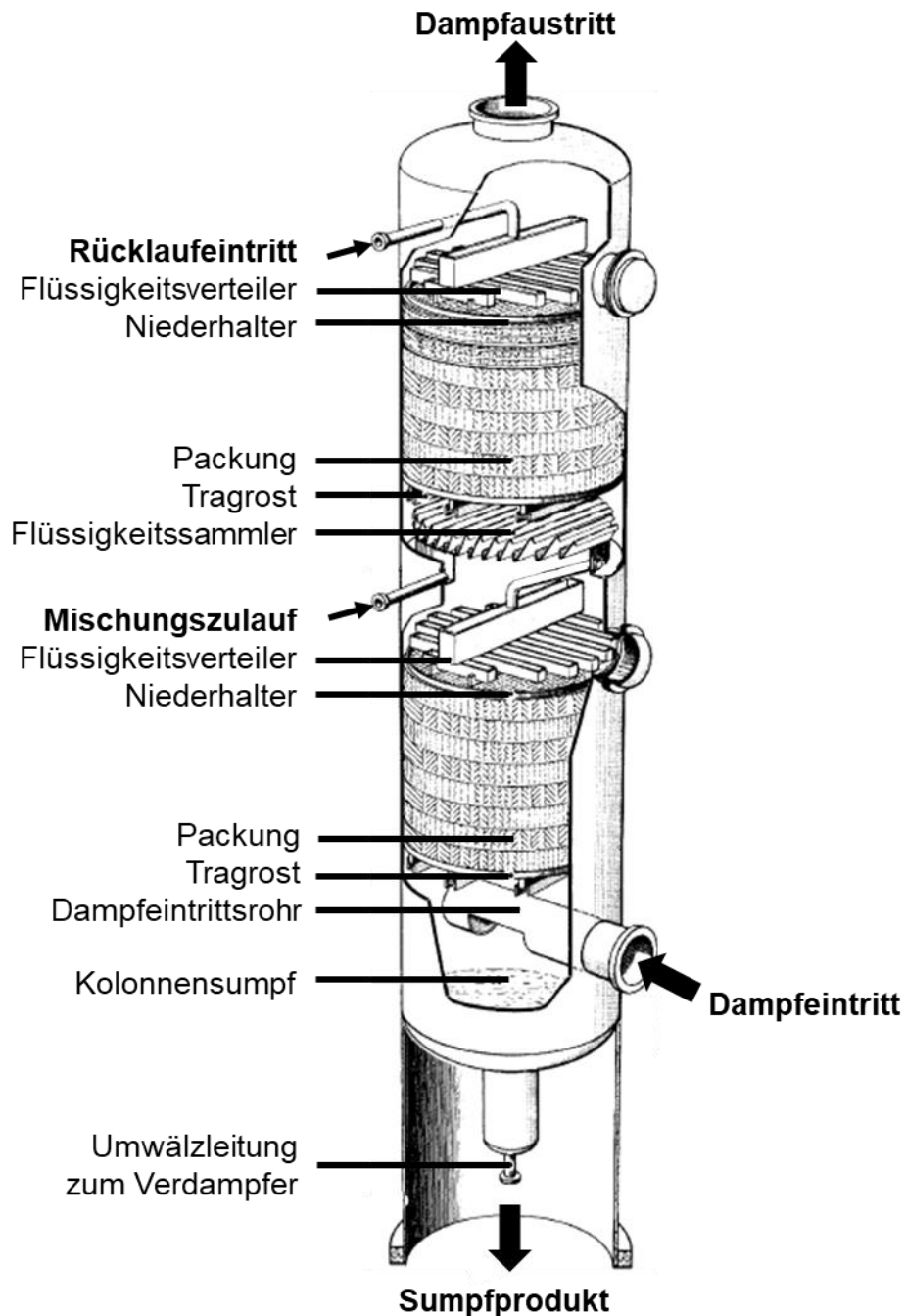


Abbildung 2.1: Aufbau einer Rektifikationskolonne mit strukturierten Packungen (nach Sattler, 2001).

Der Großteil des Kolonnenvolumens wird von der Packung eingenommen, welche eine große Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche erzeugen soll, um den Stoffaustausch zwischen den Phasen zu intensivieren. Tragroste und Niederhalter sorgen dafür, dass die Packung während des Betriebs nicht verschoben wird (Sattler, 2001).

Damit die Packung ihre Aufgabe erfüllen kann, ist es notwendig, dass beide Phasen gleichmäßig über den Kolonnenquerschnitt verteilt werden. Zu diesem Zweck werden am Kolonnenkopf Flüssigkeitsverteiler und, in einigen Prozessen, am Kolonnenfuß Gasverteiler eingesetzt. Die Flüssigkeit neigt jedoch dazu, wieder eine ungleiche Verteilung anzunehmen (sog. Maldistribution). Eine flüssigseitige Maldistribution äußert sich darin, dass Teile der Packung schlecht benetzt sind, während andere Teile der Packung stark durchströmt werden. Hierdurch wird die Trennleistung der Kolonne beeinträchtigt (Olujć und Jansen, 2015).

Um der flüssigseitigen Maldistribution entgegenzuwirken, werden in regelmäßigen Abständen Flüssigkeitssammler in Kombination mit Flüssigkeitswiederverteilern verbaut. Auch die Verteilungswirkung der Packung kann der Maldistribution entgegenwirken, sodass weniger Flüssigkeitssammler und Verteiler benötigt werden. Tragroste, Niederhalter, Flüssigkeitsverteiler, Sammelböden und Tropfenabscheider werden als nicht-trennwirksame Einbauten bezeichnet. Auch die nicht-trennwirksamen Einbauten müssen für die Prozessbedingungen ausgelegt werden und zu der gewählten Packung passen. Unter dieser Voraussetzung ist die Trennleistung der Kolonne neben den Betriebsbedingungen und Stoffeigenschaften nur durch die Packung als solche begrenzt (Mersmann und Deixler, 1986).

2.1.2 Fluiddynamische Betriebsparameter und Kenngrößen

Der Gasbelastungsfaktor F und die Flüssigkeitsbelastung u_L bestimmen den fluiddynamischen Betriebspunkt einer Kolonne. Sie sind folgendermaßen definiert:

$$F = \frac{\dot{V}_{G,K}}{A_{Q,K}} \sqrt{\rho_G} \quad (2.1)$$

$$u_L = \frac{\dot{V}_{L,K}}{A_{Q,K}} \quad (2.2)$$

Beide Größen beinhalten den Volumenstrom der jeweiligen Phasen ($\dot{V}_{G,K}$ für die Gas- und $\dot{V}_{L,K}$ für die Flüssigphase) bezogen auf die Querschnittsfläche der Kolonne $A_{Q,K}$, sodass der Betriebspunkt verschiedener Kolonnen unabhängig vom Durchmesser

verglichen werden kann. Viele der im Folgenden beschriebenen Größen sind abhängig vom Betriebspunkt, worauf im Abschnitt 2.1.3 detailliert eingegangen wird.

Die Größe der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche A_{GF} (vereinfachend auch als Phasengrenzfläche bezeichnet) ist entscheidend für die Trennleistung und somit auch für die benötigte Kolonnenhöhe. Um eine von der Gesamtgröße der Kolonne unabhängige Größe zu erhalten, wird häufig die spezifische Phasengrenzfläche a_{GF} genutzt. Diese ist die Phasengrenzfläche bezogen auf das Gesamtvolumen der Packung V_P :

$$a_{GF} = \frac{A_{GF}}{V_P} \quad (2.3)$$

Das Verhältnis von a_{GF} zur spezifischen geometrischen Packungsoberfläche a_P beschreibt die Benetzung der Packung. Dieser Wert wird durch Geometrie, Werkstoff und Oberflächenbeschaffenheit der Packung beeinflusst, er hängt aber auch wesentlich vom betrachteten Stoffsystem und den Betriebsbedingungen ab (Maćkowiak, 2010).

Der Wert des Druckverlusts Δp zwischen Kopf und Fuß der Kolonne ist relevant für die benötigte Leistung des Verdampfers bzw. des Gebläses (je höher der Druckverlust, desto mehr Leistung wird benötigt). Er hat somit einen direkten Einfluss auf die Betriebskosten. Insbesondere in der Vakuumdestillation ist ein niedriger Druckverlust darüber hinaus entscheidend für die Realisierbarkeit der Trennaufgabe. Der Druckverlust wächst mit der Kolonnenhöhe und ist maßgeblich von der verwendeten Packung abhängig (Sattler, 2001).

Der Holdup h_L bezeichnet das Volumen der in der Packung befindlichen Flüssigkeit V_L bezogen auf das Packungsvolumen V_P :

$$h_L = \frac{V_L}{V_P} \quad (2.4)$$

Er ist unter anderem für die Kapazität, den Druckverlust und das Verweilzeitverhalten von Bedeutung. Wichtige Einflussgrößen für h_L sind neben dem Betriebspunkt die Stoffeigenschaften der Flüssigphase sowie die Geometrie der Packung (Maćkowiak, 2010).

Die mittlere Verweilzeit der Flüssigkeit τ charakterisiert die Zeit, die die Fluidelemente der Flüssigphase durchschnittlich in der Kolonne verbringen. Sie kann näherungsweise durch folgende Formel beschrieben werden:

$$\tau = \frac{V_L}{\dot{V}_L} \quad (2.5)$$

Je nach Prozess können hohe oder niedrige Verweilzeiten gewünscht sein. Die Rektifikation temperaturempfindlicher Stoffsysteme (z.B. Ethylbenzol/Styrol) erfordert möglichst kurze Verweilzeiten. Ein entgegengesetztes Beispiel ist eine Absorption mit einer langsamen chemischen Reaktion, bei der die mittlere Verweilzeit groß genug sein muss (Mersmann und Deixler, 1986).

2.1.3 Fluidodynamisches Betriebsverhalten

Die Zusammenhänge, die beim Betrieb von Packungskolonnen zwischen den in Abschnitt 2.1.2 genannten Größen bestehen, sollen im Folgenden kurz beschrieben werden. Zu diesem Zweck wird zunächst ein Betrieb bei konstanter Gasbelastung betrachtet, bei dem die Flüssigkeitsbelastung ausgehend von der trockenen Packung immer weiter erhöht wird.

Bei sehr geringen Flüssigkeitsbelastungen liegen große Teile der Packung im unbenetzten Zustand vor und die ausgebildete Phasengrenzfläche ist entsprechend klein. Ist auch die Gasbelastung gering, so ist die Beeinflussung der Flüssigphase durch den Gegenstrom der Gasphase zu vernachlässigen (Sattler, 2001). Bei diesem Betriebspunkt binden Kapillarkräfte einzelne Tröpfchen und Flüssigkeitsbrücken so stark, dass die Gravitation nicht ausreicht, um sie von der Packung zu lösen. Diese Anteile des Holdups können somit vollständig von der Strömung abgeschnitten sein und eine sehr hohe Verweilzeit aufweisen. Hierdurch befinden sie sich schließlich im stofflichen Gleichgewicht mit der Gasphase und tragen nicht mehr zum Trennprozess bei. Daher wird dieser Anteil des Holdups als „passiv“ bezeichnet.

Wird die Flüssigkeitsbelastung erhöht, nimmt der passive Holdup infolge der zunehmenden Durchströmung ab. Benetzung und Trennleistung der Packung wachsen zunächst rasch an und auch der Holdup erhöht sich (Mersmann und Deixler, 1986). Bei weiterer Erhöhung der Flüssigkeitsbelastung verlangsamt sich die Zunahme der Phasengrenzfläche immer weiter, bis die Packung weitestgehend benetzt ist (Billet und Schultes, 1999, Tsai et al., 2011, Schug und Arlt, 2016). Der Holdup nimmt weiterhin kontinuierlich zu. Durch die Zunahme des Holdups verringert sich das freie Volumen in den Packungskanälen, welches der Gasphase zur Verfügung steht. Somit resultieren trotz konstant bleibender Gasbelastung immer

höhere Gasgeschwindigkeiten in den Packungskanälen. Dies erhöht die Reibung zwischen Gas und Packung, sowie zwischen den fluiden Phasen. Die zunehmende Reibung erhöht den gasseitigen Druckverlust und behindert die Flüssigphase auf ihrem Weg nach unten. Am Staupunkt wird die Reibung zwischen den Phasen erstmals so stark, dass eine Erhöhung der Gasbelastung einen Anstieg des Holdups hervorruft (Sattler, 2001).

Eine weitere Erhöhung der Flüssigkeitsbelastung ausgehend vom Staupunkt führt zu einem deutlich schnelleren Anstieg des Flüssigkeitsinhalts als zuvor, bis zum Fluten der Kolonne. Beim Fluten wird der Großteil des Kolonnenvolumens durch die Flüssigphase gefüllt und die Gas- bzw. Dampfphase steigt nur noch in Form von Blasen nach oben. Die Trennleistung bricht hierdurch ein und der Druckverlust steigt stark an. Das Fluten kennzeichnet daher die obere Grenze des Belastungsbereichs (Maćkowiak, 2010).

Die oben beschriebenen Zusammenhänge zwischen der Gas- und Flüssigkeitsbelastung mit dem Holdup und dem spezifischen Druckverlust sind in Abbildung 2.2 graphisch dargestellt.

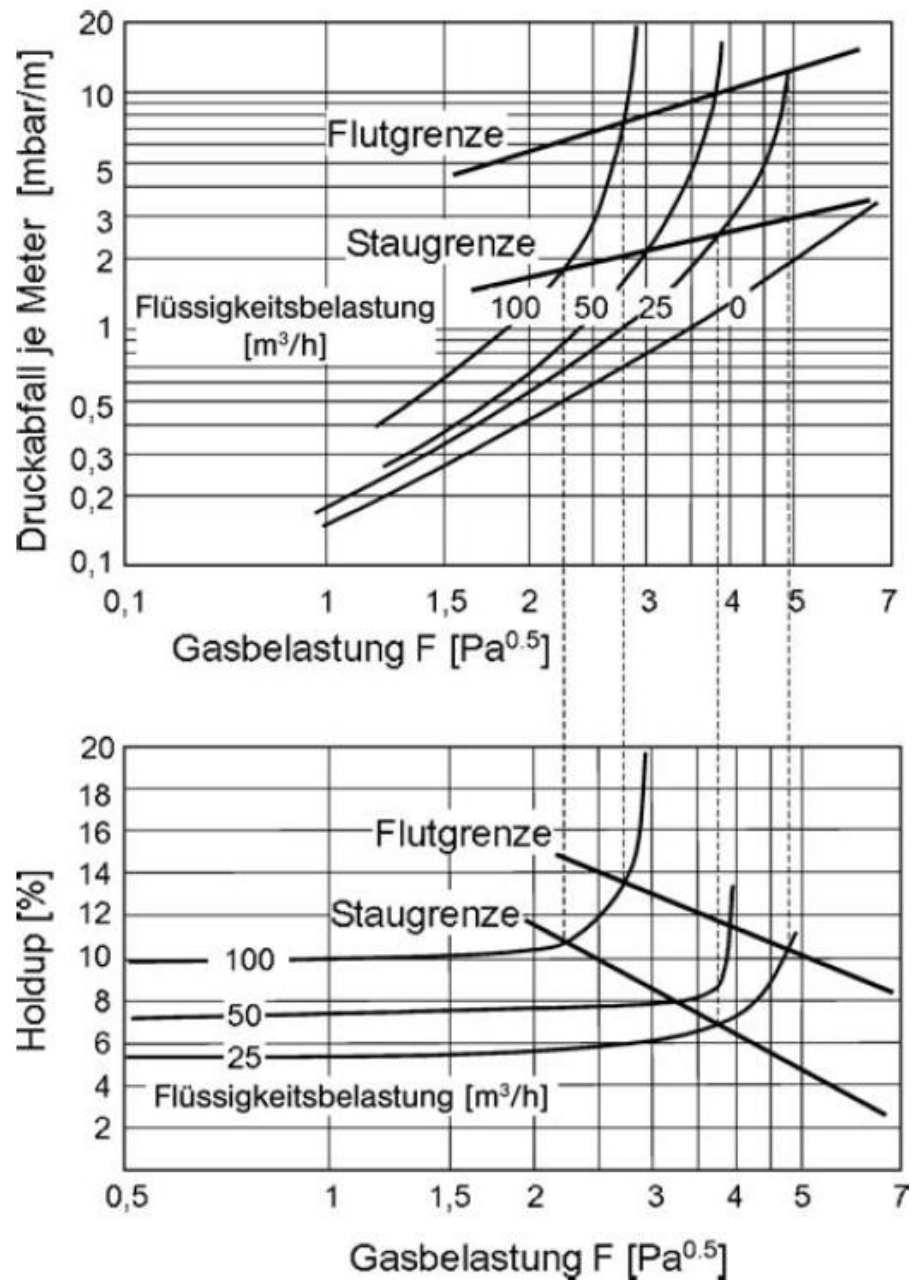


Abbildung 2.2: Einfluss der Gas- und Flüssigkeitsbelastung einer Packungskolonne auf Druckverlust (oben) und Holdup (unten) (Düssel und Stichelmair, 2006).

2.2 Strukturierte Packungen

Bei der Entwicklung strukturierter Packungen werden eine möglichst große effektive Phasengrenzfläche, ein möglichst geringer spezifischer Druckverlust und eine gute Verteilungswirkung angestrebt. Weiterhin sind praktische Aspekte wie mechanische Stabilität und Fertigungskosten zu berücksichtigen. Diese Zielsetzung wird von Faltblechpackungen in guter Weise erfüllt, weshalb sie sich heute in vielen Anwendungen durchgesetzt haben. Es wird im Folgenden auf Aufbau und historische Entwicklung dieses Packungstyps eingegangen.

2.2.1 Aufbau

Faltblechpackungen sind aus einer Vielzahl von wellenförmig gefalteten Einzelblechen aufgebaut. Die Bleche sind vertikal und parallel zueinander angeordnet (vgl. Abbildung 2.3 (a) und (c)). Durch die Faltungen werden Kanäle gebildet, welche schräg zur Kolonnenachse verlaufen. Wie in Abbildung 2.3 (a) gezeigt, ist die Orientierung der Faltungen zwischen benachbarten Blechen stets alternierend, sodass sich die Kanäle an ihrer offenen Seite ständig kreuzen. Dies sorgt für eine intensive Durchmischung der Phasen. Des Weiteren sind die Packungen entlang der Kolonnenachse in Segmente mit einer Höhe von 20 cm bis 25 cm unterteilt. Diese Segmente werden zur Förderung der Querverteilung der Phasen um je 90° zueinander verdreht eingebaut (vgl. Abbildung 2.3 (b)).

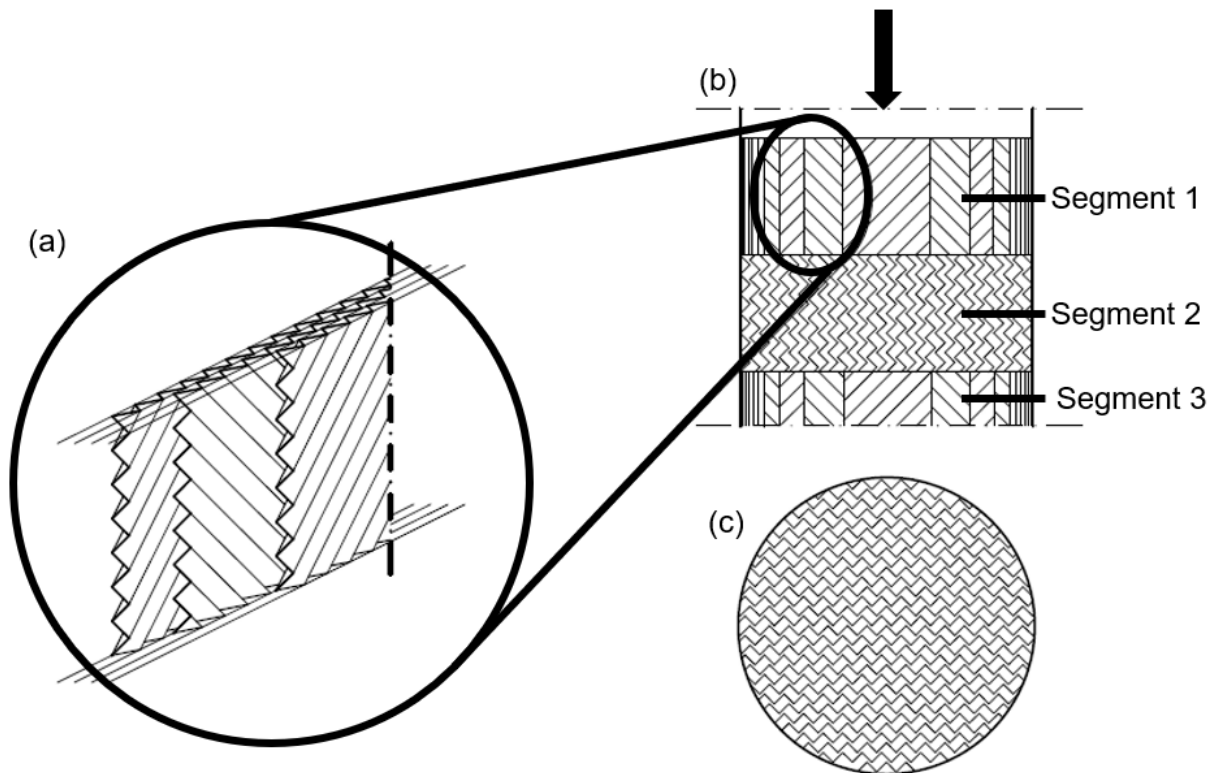


Abbildung 2.3: Aufbau und Einbausituation einer Faltblechpackung (nach Stichlmair et al., 2021). Isometrische Ansicht der Faltblechanordnung (a), seitliche Ansicht der Einbausituation mit drei um je 90° zueinander verdrehten Packungssegmenten (b) und Draufsicht der Packung (c). Der Pfeil in Ansicht (b) zeigt die Blickrichtung in Ansicht (c) an.

Die Packungskanäle haben eine periodisch wiederkehrende Struktur. Diese Struktur kann als dreidimensionale Anordnung aus einzelnen periodischen Einheitszellen, sogenannten *REUs* (*Representative Elementary Units*) betrachtet werden (vgl. Abbildung 2.4). Die Vorstellung, dass strukturierte Packungen aus REUs aufgebaut sind, ist von großer Bedeutung hinsichtlich der numerischen Strömungssimulation, da hierbei häufig anstelle der gesamten Packung einzelne REUs betrachtet werden. Ursprünglich eingeführt wurde das Konzept der REUs in der Arbeit von Petre et al. (2003). Später wurde es häufig aufgegriffen und verfeinert (z.B. Haroun et al., 2014, Olenberg und Kenig, 2020).

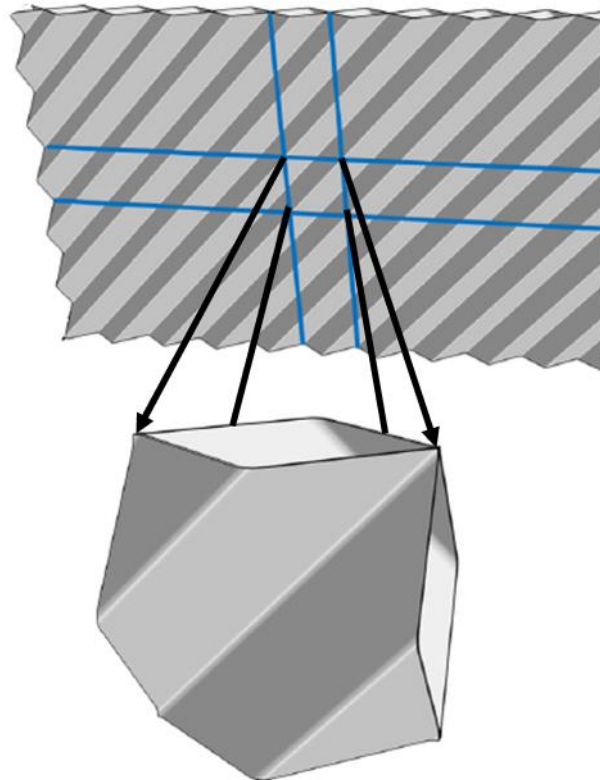


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der Auswahl eines REUs nach Olenberg (2021).

Es existieren diverse Varianten von Faltblechpackungen, bei denen häufig Lochungen und eine Mikrostruktur in die Bleche eingebracht werden, um eine gleichmäßige Verteilung der Flüssigkeit auf den Packungsoberflächen zu fördern. Die Packungsvarianten lassen sich anhand der geometrischen Oberfläche, des Winkels der Kanäle zur Kolonnenachse, der Mikrostruktur sowie der Größe und Anordnung von Lochungen unterscheiden.

Es werden neben Blech auch Kunststoff oder dünnwandige Keramik eingesetzt, um Packungen mit analogem Aufbau zu fertigen. Die Wahl des Materials richtet sich in erster Linie nach der Beständigkeit gegenüber den verwendeten Stoffsystemen sowie der Benetzbarkeit (Mersmann und Deixler, 1986).

2.2.2 Historische Entwicklung

Die Faltblattstruktur, welche die Grundlage für die Entwicklung moderner Packungen bildet, findet sich bereits in den Drahtgewebepackungen wie der Goodloe Hyperfil und den Sulzer BX-Packungen, die in den späten 1950-er Jahren eingeführt wurden. Die zylindrische Form der Drahtgewebepackungen wurde durch das Aufrollen der Packungslagen erzielt. Die resultierenden Kanäle hatten daher einen gewundenen Verlauf (Bragg, 1957).

Zum Zeitpunkt der Einführung von Drahtgewebepackungen war der Einfluss der Maldistribution noch unbekannt, sodass auch keine Gegenmaßnahmen getroffen wurden. Die hohe Effizienz, welche in Versuchsanlagen erzielt wurde, konnte so in der Praxis bei größeren Kolonnen zunächst nicht erreicht werden. Erst Untersuchungen der Firma Sulzer, durch die die Problematik der Maldistribution bekannt wurde, ermöglichten eine erfolgreiche Realisierung des Scale-ups. Somit konnten sich Gewebepackungen insbesondere in der Vakuumrektifikation durchsetzen. Auf anderen Gebieten wurde die Verbreitung durch hohe Kosten bei geringer Belastbarkeit und hoher Verschmutzungsempfindlichkeit gehemmt. Dies änderte sich, als Sulzer in den 70-er Jahren mit der Mellapak™ die ersten Faltblechstrukturen auf den Markt brachte. Durch die Verwendung von Blechen anstelle von Drahtgewebe konnten die Kosten und die Verschmutzungsempfindlichkeit deutlich reduziert werden. Diese Vorteile überwiegen in vielen Anwendungen die, im Vergleich zu Drahtgewebepackungen, etwas schlechtere Trennleistung der Faltblechpackungen. Strukturierte Packungen waren ab diesem Zeitpunkt auch außerhalb der Vakuumrektifikation konkurrenzfähig im Vergleich zu damaligen konventionellen Einbauten (Kister, 1992).

Faltblechstrukturen wurden nach ihrer Einführung häufig nur geringfügig für spezielle Anwendungen angepasst, aber es konnten dennoch z.T. große Änderungen der Eigenschaften erzielt werden. Beispielsweise konnten Olujić et al. (2000) in einer experimentellen Untersuchung durch einen steileren Kanalneigungswinkel den Druckverlust einer Versuchsanlage senken und die Kapazität erhöhen, wobei sich aber die Trennleistung etwas verschlechterte. Ähnliche Resultate erzielten auch Kenig et al. (2014).

Den nächsten Entwicklungsschritt stellten die sogenannten „Hochleistungspackungen“ dar. Durch Messungen der Holdup-Verteilung in Packungskolonnen konnte festgestellt

werden, dass beim Fluten der Holdup zunächst an den Übergängen der um 90° versetzten Packungselemente anwächst, bevor sich auch der Rest der Packung mit Flüssigkeit füllt (Suess und Spiegel, (1992). Diese Erkenntnisse wurden bei der Entwicklung der Sulzer Mellapak™-Plus genutzt. Die Kanäle dieser Packung verlaufen an den Übergängen der Packungssegmente parallel zur Kolonnenachse. Dadurch reduzieren sich die Umlenkung der Gasphase sowie die lokale Gasgeschwindigkeit. Als Resultat dieser Änderungen konnte der spezifische Druckverlust reduziert und die Kapazität deutlich gesteigert werden. Dagegen wurde die Trennwirkung nicht wesentlich beeinflusst, da sich die Änderungen auf den Bereich der Packungsübergänge beschränkten (Moser und Kessler, 2000). Andere Hersteller entwickelten ähnliche Geometrien, wie beispielsweise die Montz-Pak M oder die Flexipak-HC (Koch-Glitsch) (Olujić et al., 2001).

2.3 Experimentelle Untersuchungen lokaler Strömungsphänomene

In diesem Abschnitt soll kurz auf experimentelle Möglichkeiten zur detaillierten Erfassung der lokalen Strömungsphänomene in strukturierten Packungen eingegangen werden. Diese haben auch großen Einfluss auf das makroskopische Betriebsverhalten einer Kolonne (vgl. Abschnitt 2.1.3). Der Fokus liegt hier auf der Flüssigphase und der Topologie der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche.

Auf einzelnen Packungsblechen können Untersuchungen der Flüssigkeitsströmung mit optischen Methoden wie der *Particle Tracking Velocimetry* zur Erfassung des Geschwindigkeitsfelds (z.B. Veerapaneni et al., 2000) und *Light Induced Fluorescence* (z.B. Ho und Hummel, 1970) oder *Laser Focus Displacement* (z.B. Takamasa und Hazuku, 2000, Lan et al., 2010) zur Ermittlung von Filmdickenprofilen durchgeführt werden. Messungen dieser Art konnten beispielsweise zeigen, dass die in der Theorie gemachten Annahmen (glatter und wellenfreier Film, kreisförmige Rinnsalquerschnitte, etc.) häufig nicht mit der Realität übereinstimmen (Ausner, 2006). Zudem konnte nachgewiesen werden, dass Mikrostrukturen Sekundärströmungen innerhalb von Flüssigkeitsfilmen induzieren und so eine erhöhte Reibung bewirken. Dadurch nimmt zum einen die Filmdicke zu und zum anderen wird die mittlere Geschwindigkeit reduziert (Paschke, 2011). Es ist jedoch zu beachten, dass die verbreiteten Packungsgeometrien deutlich von der Form eines Einzelblechs abweichen, was zwangsläufig auch die Strömung beeinflusst. Eine Übertragung der Ergebnisse auf reale Anwendungen in Packungskolonnen ist daher nur eingeschränkt möglich.

Tomographische Messungen sind aktuell die einzige Möglichkeit für eine nicht invasive experimentelle Erfassung der Strömung im Inneren von Packungskolonnen. Mit dieser Methode konnte gezeigt werden, dass der Holdup sowohl in axialer als auch in radialer Richtung ungleichmäßig verteilt ist (vgl. Aferka et al., 2011). Des Weiteren konnten an den Kontaktstellen der Packungslagen Flüssigkeitsbrücken (sog. Zwickel) nachgewiesen werden (Green et al., 2007). Janzen et al. (2013) veröffentlichten eine quantitative Analyse der auftretenden Strömungsmorphologien, wobei gezeigt werden konnte, dass Rinnsale und Zwickel einen erheblichen Anteil der Strömung ausmachen. In jüngeren Untersuchungen wurde die Phasengrenzfläche aus tomographischen Bildern rekonstruiert und quantifiziert. Hierdurch konnte gezeigt werden, dass die Flüssigphase verstärkt innerhalb der Faltungskanten der

Packungskanäle strömt, was zu einer unvollständigen Benetzung führt (Wehrli et al., 2018). Durch den Vergleich perforierter und nicht perforierter Packungen (mit ansonsten gleicher Geometrie) konnte Schug (2018) zeigen, dass Perforationen erheblichen Einfluss auf die Flüssigkeitsströmung haben und sowohl den Holdup als auch die Phasengrenzfläche beeinflussen.

Trotz der umfangreichen Erkenntnisse, die mittels Tomographie gewonnen werden konnten, weist diese Methode einige Nachteile auf. Insbesondere für eine genaue Erfassung der Phänomene mittels Tomographie ist ein enormer apparativer Aufwand notwendig, da die Erfassung dünner Filme und transienter Effekte (z.B. heruntertropfen von Flüssigkeit) sehr hohe örtliche und zeitliche Auflösungen erfordern. Weiterhin ist der Durchmesser der Kolonnen stark begrenzt, sodass mit deutlichen Wandeinflüssen gerechnet werden muss.

Globale Stoffaustauschmessungen, auf denen die meisten bestehenden Korrelationen für die effektive Phasengrenzfläche beruhen, ermöglichen lediglich die Bestimmung eines kombinierten Wertes aus Stoffaustauschfläche und Stofftransportkoeffizienten für die gesamte Kolonne. Die verfügbaren Korrelationen für die Stoffaustauschfläche unterliegen erheblichen Streuungen, sowohl hinsichtlich der Größenordnung der effektiven Austauschfläche als auch bezüglich ihrer Abhängigkeit von konstruktiven, betrieblichen und stofflichen Parametern (Mersmann et al., 2005). Somit sind sie für ein besseres Verständnis der lokalen Strömungsverhältnisse nicht geeignet. Auch der Holdup wird in der Regel für die gesamte Kolonne ermittelt und es werden keine lokalen Werte erfasst. Da sich diese Dissertation mit lokalen Phänomenen befasst, wird hier nicht weiter auf globale Messungen bzw. die daraus abgeleiteten Korrelationen eingegangen.

2.4 CFD-gestützte Untersuchungen lokaler Strömungsphänomene

Im Folgenden wird eine kurze allgemeine Einführung in das Thema der CFD gegeben. Anschließend erfolgt eine Literaturanalyse zum Thema der numerischen Simulation der Gas-Flüssigkeits-Strömungen in strukturierten Packungen, wobei besonders die Behandlung mikrostrukturierter und perforierter Packungsoberflächen betrachtet wird.

2.4.1 Computational Fluid Dynamics (CFD)

Zur mathematischen Beschreibung von Strömungen werden Differentialgleichungen genutzt, die auf fundamentalen Erhaltungssätzen, wie der Massen- und Impulserhaltung, basieren. Diese sind analytisch jedoch nur für einfache physikalische Systeme und simple Geometrien lösbar (z.B. eingelaufene, laminare Strömung in einem glatten Rohr). Für komplexere Strömungsprobleme werden daher numerische Methoden (CFD) eingesetzt. In der CFD werden die Transportgleichungen für diskrete Punkte gelöst (räumlich und zeitlich), d.h. die genauen Differentialgleichungen werden *diskretisiert*. Hieraus resultieren algebraische Beziehungen, die die ursprünglichen Gleichungen näherungsweise Beschreiben. Das System der algebraischen Gleichungen kann dann durch Matrix-Operationen gelöst werden (Ferziger und Perić, 2008).

Die *finite-Volumen-Methode* stellt die am häufigsten in CFD-Solvern verwendete Diskretisierungsmethode dar. Dabei wird das Rechengebiet in eine endliche Anzahl nicht überlappender Kontrollvolumina (sog. *Zellen*, welche in ihrer Gesamtheit ein *numerisches Gitter* bilden) unterteilt. Die Flüsse über die Zellgrenzen werden zur lokalen Bilanzierung der Erhaltungsgrößen genutzt. Auf der Seitenfläche zwischen zwei Zellen 1 und 2 entspricht der von Zelle 1 ausströmende Fluss dem in Zelle 2 einströmenden Fluss. Die differentiellen Erhaltungsgleichungen werden über die Zellen integriert. Dabei werden die Werte der unabhängigen Variablen auf Rechenknoten berechnet, welche im Mittelpunkt der Zellen liegen (Schwarze, 2013). Durch die Fortschritte im Bereich der Numerik sowie die wachsende Leistung von Computern und Rechenclustern gewinnen CFD-Methoden in der Ergänzung zu experimentellen Untersuchungen kontinuierlich an Bedeutung.

2.4.2 Effektiver Kontaktwinkel

Bei der Simulation von Gas-Flüssigkeits-Strömungen in strukturierten Packungen ist zu beachten, dass die korrekte Abbildung von Mehrphasenströmungen generell anspruchsvoll ist. Zudem erhöht die Auflösung der Flüssigkeitsströmung über typische Packungsoberflächen die Komplexität zusätzlich. Unter anderem bereiten die großen Skalenunterschiede Probleme. Aufgrund der kleinen Dimensionen der Mikrostruktur und der scharfen Kanten der Perforationen ist es nur mit erheblichem Rechenaufwand möglich, die Packungsgeometrie vollständig mit einem numerischen Gitter aufzulösen.

Aus diesem Grund wurden Perforationen in den meisten der veröffentlichten CFD-Studien ignoriert. Jedoch haben sowohl Mikrostruktur als auch Perforationen einen bedeutenden Einfluss auf die Flüssigkeitsverteilung und sollten entsprechend berücksichtigt werden. Der Einfluss der Mikrostruktur kann durch so genannte *effektive Kontaktwinkel* abgebildet werden. Durch Verwendung eines effektiven Kontaktwinkels sollen glatte Oberflächen dasselbe Benetzungsverhalten annehmen, wie die mikrostrukturierten Oberflächen einer realen Packung. Dies erlaubt es, das verbesserte Benetzungsverhalten der mikrostrukturierten Oberflächen wiederzugeben und gleichzeitig übermäßig hohe Gitterauflösungen zu vermeiden. Obwohl dieser Modellierungsansatz bereits häufig angewendet wurde, existiert derzeit keine Literaturquelle, die das Konzept ausführlich beschreibt. In der nachfolgenden Literaturanalyse wird besonders auf die Ermittlung und Verwendung effektiver Kontaktwinkel in bisherigen CFD-Arbeiten eingegangen.

Die Nutzung lokal angepasster Kontaktwinkelwerte zur Berücksichtigung von Perforationen stellt eine Erweiterung der Anwendung effektiver Kontaktwinkel dar und wurde im Rahmen dieser Arbeit erstmalig geprüft.

2.4.3 Literaturanalyse: Untersuchungen lokaler Gas-Flüssigkeitsströmungen in Faltblechpackungen mittels CFD

In den letzten Jahren haben verschiedene Gruppen CFD-basierte Untersuchungen der Gas-Flüssigkeits-Strömung in strukturierten Packungen publiziert (vgl. Amini und Esfahany, 2018, Macfarlan et al., 2022). In den Untersuchungen wurden entweder gefaltete Einzelbleche oder periodische Elemente unterschiedlicher Faltblechpackungen betrachtet. Um die Bewegung der freien Phasengrenzfläche zu beschreiben, wurde in allen Arbeiten die *Volume of Fluid*-Methode (VoF) (Hirt und Nichols, 1981) angewandt. Die effektiven Kontaktwinkel wurden mit Ausnahme der Arbeit von Singh et al. (2020), in welcher dynamische Kontaktwinkel verwendet wurden, als statische Kontaktwinkel implementiert.

Haroun et al. (2014) untersuchten die Strömung einer wässrigen Lösung von Monoethanolamin (MEA) über eine Einzellage der Mellapak™ 250.Y Packung. Der Kontaktwinkel wurde so angepasst, dass die effektive Phasengrenzfläche der Vorhersage durch die Korrelation von Tsai et al. (2011) entsprach. Die beste Übereinstimmung wurde mit einem Kontaktwinkel $\gamma_{eff} = 10^\circ$ erreicht. Bei der Variation

des Kontaktwinkels wurde ein starker Einfluss dieses Parameters auf die Größe der Phasengrenzfläche gefunden.

Basden (2014) untersuchte die Einflüsse von Dichte, Viskosität, Oberflächenspannung und Kontaktwinkel auf die Benetzung verschiedener Packungen. Es wurden Kontaktwinkel von 0° , 30° und 75° für eine wässrige NaOH-Lösung ($0,1 \text{ mol/l}$) geprüft. Der Kontaktwinkel $\gamma_{eff} = 0^\circ$ lieferte die beste Übereinstimmung zu tomographischen Untersuchungen (Basden et al., 2013), die als Referenz genutzt wurden. Wie auch in der Arbeit von Haroun et al. (2014), wurde also eine anderweitige Methode für die Vorhersage der effektiven Phasengrenzfläche genutzt und der Kontaktwinkel als Anpassungsparameter verwendet. Dies bedeutet, dass die effektive Phasengrenzfläche, eine der wichtigsten fluiddynamischen Kenngrößen, nicht unabhängig durch die CFD-Simulationen vorhergesagt werden konnte.

Sebastia-Saez et al. (2015) simulierten die Strömung einer wässrigen MEA-Lösung in einem REU einer Montz B1.250 Packung mit Kontaktwinkeln von 10° , 40° und 70° . Schlussendlich wurde der Kontaktwinkel 70° gewählt, welcher dem Literaturwert von reinem Wasser auf Stahloberflächen entspricht. Da die Packung jedoch eine Mikrostruktur aufweist und MEA-Lösungen ein anderes Benetzungsverhalten haben als reines Wasser, erscheint dieser Ansatz fragwürdig.

Singh et al. (2017) führten eine umfangreiche Studie zu der Benetzung eines Einzelblechs mit Faltungen durch. Dabei wurde der Kontaktwinkel so lange variiert, bis die Resultate optisch mit von Subramanian und Wozny (2012) publizierten Photographien übereinstimmten. Dieser Ansatz ermöglicht keine unabhängige Bewertung der Einflüsse von Faltungen und Mikrostruktur.

Olenberg und Kenig (2020) simulierten die Strömung von Wasser in der Montz B1.250 Packung. In der Arbeit wurde das Auftreten von Flüssigkeitszwickeln an den Kontaktpunkten der Packungslagen bestätigt, welches zuvor bereits durch tomographische Messungen gezeigt worden war (vgl. Abschnitt 2.3). Es wurde festgestellt, dass die Zwickel einen signifikanten Einfluss auf die Strömung haben und die Durchmischung und Wiederverteilung der Flüssigphase fördern. Diese Effekte wurden in o.g. CFD-Arbeiten nicht erfasst, da der Abstand der Packungsbleche zu groß angenommen wurde, um die Bildung von Flüssigkeitsbrücken zu erlauben. Der effektive Kontaktwinkel wurde in der Arbeit von Olenberg und Kenig (2020) aus einer Photographie eines statischen Einzeltropfens auf einer Packungsoberfläche abgeleitet. Diese Methode ist Fehleranfällig, da die Tropfenform auf einer Packungsoberfläche

kaum reproduzierbar ist (die Position der Tropfen müsste exakt dieselbe sein). Des Weiteren ist die Tripellinie, an welcher der Kontaktwinkel ermittelt wird, teilweise durch die Mikrostruktur verdeckt.

Singh et al. (2020) untersuchten die Strömungen wässriger Lösungen von NaOH und MEA in der Mellapak™ 250.Y Packung sowie Rinnsalströmungen auf einer glatten geneigten Platte. Dabei wurden sowohl statische als auch dynamische effektive Kontaktwinkel verwendet. Bei der Gegenüberstellung der resultierenden Phasengrenzflächen zeigte sich, dass die maximale Abweichung zwischen den Implementierungen im Falle der geneigten Platte 10% betrug. Im Falle der Packung war der Unterschied noch geringer.

2.5 Zwischenfazit und Zielsetzung

Trennleistung und Betriebsverhalten von Packungskolonnen werden von der lokalen Fluidodynamik in der Packung geprägt. Aufgrund der Komplexität und der schlechten experimentellen Zugänglichkeit der lokalen Strömungsverhältnisse ist die Auslegung auch nach jahrzehntelanger Forschung weiterhin schwierig. Die Fortschritte im Bereich der numerischen Methoden sowie die wachsende Leistung von Computern und Rechenclustern machen die Nutzung numerischer Methoden in diesem Zusammenhang zunehmend attraktiver. Problematisch bleibt dabei aber die Berücksichtigung von Mikrostruktur und Perforationen.

Die Literaturanalyse in Abschnitt 2.4.3 zeigt, dass die Anwendung effektiver Kontaktwinkel die einzige etablierte Methode zur Modellierung des Benetzungsverhaltens mikrostrukturierter Packungsoberflächen ist. Es gibt derzeit keine publizierten Arbeiten, in denen die Mikrostruktur explizit durch das numerische Gitter aufgelöst werden. Der gewählte Wert des effektiven Kontaktwinkels hat einen starken Einfluss auf die Simulationsergebnisse (Haroun et al., 2014, Olenberg und Kenig, 2020). Im Gegensatz dazu hat die Verwendung dynamischer statt statischer Kontaktwinkel keinen nennenswerten Einfluss auf die Ergebnisse (Singh et al., 2020). Es ist zu beachten, dass es sich bei der Verwendung effektiver Kontaktwinkel um einen sehr einfachen Ansatz handelt, bei dem nur ein Modellparameter angepasst wird, um komplexe Strömungsphänomene zu modellieren. Eine detaillierte Untersuchung der daraus resultierenden Fehler lag zu Beginn der Promotion noch nicht vor. Des Weiteren wurde zuvor noch keine verlässliche und schlüssige Methode, zur Ermittlung effektiver Kontaktwinkel veröffentlicht.

Mittels Computertomographie konnte gezeigt werden, dass die Strömungsmorphologie durch Perforationen substanziell beeinflusst wird (Schug, 2018). Ein geeigneter Modellierungsansatz zur Berücksichtigung dieses Einflusses in CFD-Simulationen wurde bisher nicht publiziert.

Es war das übergeordnete Ziel der Promotion, die oben genannten Lücken zu schließen. Dazu solle eine einfache und verlässliche Methode zur Bestimmung effektiver Kontaktwinkel entwickelt werden. Weiterhin sollte eine Möglichkeit geschaffen werden, auch Perforationen bei moderaten Rechenanforderungen zu berücksichtigen. Das Vorgehen im Rahmen der Promotion gliederte sich in drei Schritte, welche auch den Aufbau der Dissertation definieren:

Im ersten Schritt wurden Film- und Rinnsalströmungen auf einer glatten geneigten Platte ohne Mikrostruktur oder Perforationen behandelt. Hierbei dienten experimentelle Ergebnisse aus der Arbeit von Lan et al. (2010) als Referenz. Anhand dieser Studie wurden Untersuchungen zur Implementierung des Modells durchgeführt. Da im weiteren Verlauf der Arbeit mikrostrukturierte Oberflächen mit effektiven Kontaktwinkeln modelliert wurden (die Mikrostruktur wurde also nicht durch das numerische Gitter aufgelöst), waren die Anforderungen an die Implementierung ähnlich, wie für die hier betrachtete Strömung über eine glatte Oberfläche. Grundlegende Erkenntnisse ließen sich somit übertragen. Ziel dieses Schritts war es, geeignete Lösungsmethoden und Gittereinstellungen für die weiteren Untersuchungen zu identifizieren. Es wurden dazu zunächst Gitterstudien durchgeführt. Anschließend wurden verschiedene Lösungsmethoden verglichen.

Im zweiten Schritt wurden experimentelle und numerische Untersuchungen zu Zweiphasenströmungen über geneigte, ungefaltete Packungsbleche behandelt. Dabei wurden die Einflüsse von Mikrostruktur und Perforationen auf die Strömung isoliert betrachtet. Ziel war es, eine Methode zur Identifikation geeigneter effektiver Kontaktwinkel und einen numerischen Modellierungsansatz zu erarbeiten, welcher die Berücksichtigung von Perforationen erlaubt.

Im dritten Schritt wurden schließlich gravitationsgetriebene Gas-Flüssigkeitsströmungen in strukturierten Packungen betrachtet. Das Modell beinhaltete die zuvor gewonnenen Erkenntnisse für die Berücksichtigung von Mikrostruktur und Perforationen. Zusätzlich wurde mit Hilfe eines numerischen Tracers das Verweilzeitverhalten der Flüssigphase charakterisiert. Eine Modellvalidierung erfolgte anhand tomographischer Daten von Schug (2018) und Kögl et al. (2023). Im Anschluss wurden Untersuchungen zweier Typen der Sulzer MellapakTM-Packung mit geometrischen Oberflächen von 250 m²/m³ und 500 m²/m³ durchgeführt. Es wurden zwei verschiedene Flüssigkeiten (Wasser und eine Mischung aus Wasser und TEG) verwendet. Im Vergleich zu vorangegangenen CFD-basierten Arbeiten zur Zweiphasenströmung in strukturierten Packungen (z.B. Olenberg und Kenig, 2020, Singh et. al, 2020), wurde in dieser Untersuchung das Ziel verfolgt, neue Erkenntnisse in Bezug auf die Beeinflussung der Strömungsverhältnisse durch Perforationen sowie das Verweilzeitverhalten der Flüssigphase zu gewinnen.

3 Grundlagen der Modellierung und Simulation

In diesem Kapitel werden die Modelle und Methoden beschrieben, die allen später gezeigten Simulationsergebnissen zugrunde liegen. Es wird dabei auch auf die Implementierung und die Diskretisierung der Modellgleichungen eingegangen. Dabei werden Studien zu verschiedenen Lösungsmethoden sowie Gitterstudien diskutiert. Methoden, welche speziell für einzelne Untersuchungen verwendet wurden, werden direkt im Kontext ihres Anwendungsfalls beschrieben. Gleiches gilt für die jeweiligen Rechengebiete und Randbedingungen.

3.1 Erhaltungsgleichungen

Alle in dieser Arbeit behandelten Zweiphasenströmungen werden als inkompressibel und laminar angenommen. Es wird eine *Ein-Feld-Formulierung* angewendet, was bedeutet, dass die untenstehenden Differentialgleichungen sowohl für die Flüssigkeit als auch für die Gasphase gelten. Dabei werden die Eigenschaften der Fluide mit den Volumenanteilen der entsprechenden Phasen gewichtet.

Die Massenerhaltung wird durch die Kontinuitätsgleichung ausgedrückt:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.1)$$

Die Impulserhaltung wird beschrieben durch:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \eta \Delta \mathbf{u} + \mathbf{f}_\sigma \quad (3.2)$$

Die lokalen Volumenanteile der Phasen und die Position der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche werden mit der VoF-Methode bestimmt. Es handelt sich dabei um eine numerische Methode, bei der eine Indikatorfunktion α_L den Volumenanteil der Flüssigkeit repräsentiert. Die Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche wird bei dieser Methode

nicht als ein vollkommen scharfer Übergang zwischen den Phasen modelliert. Stattdessen wird sie über ein gewisses Volumen verteilt. Innerhalb dieses Volumens gilt für den Volumenanteil der Flüssigphase: $0 < \alpha_L < 1$. Weil keine scharfe Grenzfläche existiert, wird der Quellterm \mathbf{f}_σ in Gleichung (3.2), welcher den Einfluss der Oberflächenspannung an der freien Grenzfläche beschreibt, als Volumenkraft definiert.

Für α_L wird die folgende Transportgleichung angewendet:

$$\frac{\partial \alpha_L}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha_L = 0 \quad (3.3)$$

Der Term \mathbf{f}_σ wird durch das *Continuum Surface Force* (CSF) Modell beschrieben (Brackbill et al., 1992):

$$\mathbf{f}_\sigma = \sigma \kappa \mathbf{n} \quad (3.4)$$

mit dem Flächennormalenvektor

$$\mathbf{n} = \nabla \alpha_L \quad (3.5)$$

und der Oberflächenkrümmung

$$\kappa = -\nabla \cdot \frac{\mathbf{n}}{|\mathbf{n}|} \quad (3.6)$$

In den Zellen, welche an die Packungsbleche angrenzen, wird der Vektor \mathbf{n} bestimmt durch:

$$\mathbf{n} = \mathbf{n}_W \cos(\gamma) + \mathbf{t}_W \sin(\gamma) \quad (3.7)$$

Hier bezeichnet γ den Kontaktwinkel und \mathbf{n}_W und \mathbf{t}_W sind Einheitsvektoren normal und tangential zu den Packungsblechen (vgl. Abbildung 3.1).

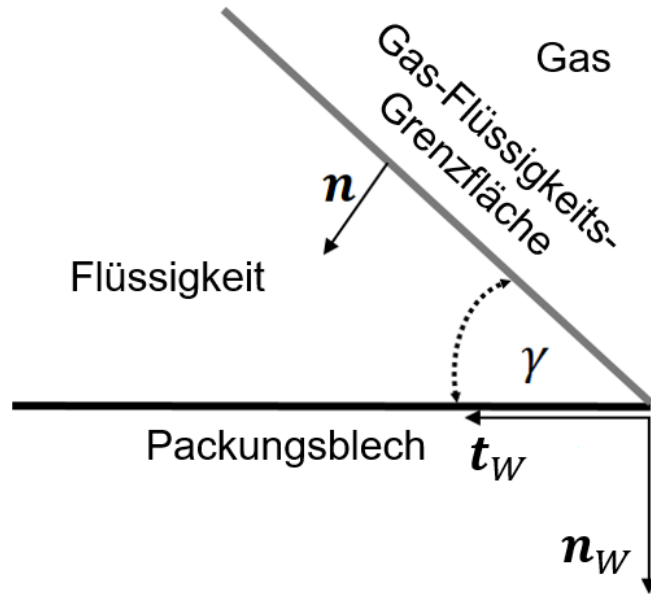


Abbildung 3.1: Visualisierung der in Gleichung (3.7) verwendeten Vektoren.

Zur Charakterisierung des Verweilzeitverhaltens der Flüssigphase wird ein Tracer mit dem Massenanteil ϕ verwendet. Der Transport von ϕ wird mit einer zusätzlichen Gleichung beschrieben:

$$\frac{\partial \alpha_L \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_L \rho \mathbf{u} \phi) = 0 \quad (3.8)$$

ϕ ist ein sogenannter *passiver Skalar*, er wird nur formal als Massenanteil behandelt und hat keinen Einfluss auf die Fluideigenschaften. Da angenommen wird, dass der konvektive Transport gegenüber der Diffusion dominant ist, wird der diffusive Transport vernachlässigt. Die Annahme basiert darauf, dass in dieser Arbeit ausschließlich kurze Zeitspannen behandelt werden.

3.2 Studien zur Implementierung

Die Modellgleichungen wurden für alle CFD-Untersuchungen mit Hilfe des Tools ANSYS Fluent 20.1 gelöst, welches auf der finite-Volumen-Methode basiert.

Um einige Aspekte der Implementierung zu illustrieren, wird in diesem Kapitel eine Filmströmung betrachtet, die ähnliche Strömungsbedingungen aufweist wie die im späteren Verlauf der Arbeit betrachteten Probleme. Es werden zunächst Ergebnisse mit verschiedenen numerischen Gittern gezeigt. Da aus vorangegangenen Arbeiten (z.B. Inguva et al., 2020) bekannt ist, dass das für Gleichung (3.3) verwendete Diskretisierungsschema einen erheblichen Einfluss auf die Lösung haben kann, werden auch Lösungen mit unterschiedlichen Methoden zur räumlichen Diskretisierung von Gleichung (3.3) gezeigt und verglichen.

Für alle im späteren Verlauf der Dissertation gezeigten Simulationsergebnisse wurden die folgenden Einstellungen verwendet: Für die zeitliche Diskretisierung wurde ein implizites Diskretisierungsschema erster Ordnung gewählt. Die maximale Courant-Zahl wurde auf den Wert zwei begrenzt (dieser Wert wurde in einer eigenen Konvergenzstudie ermittelt). Die Begrenzung wurde durch einen variablen Zeitschritt erreicht, der in jeder Iteration entsprechend angepasst wurde. Für die räumliche Diskretisierung von Gleichung (3.1) wurde das *Rhie-Chow* Interpolationsschema (Rhie und Chow, 1983) verwendet. Für Gleichung (3.2) wurde ein Upwind-Schema zweiter Ordnung genutzt. Die Druck-Geschwindigkeits-Kopplung wurde mit der SIMPLE-Methode (*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*) realisiert (vgl. Ferziger et al., 2020).

3.2.1 Rechengebiet und Randbedingungen

Die in den Abschnitten 3.2.2 und 3.2.3 diskutierten Simulationen bilden ein Experiment ab, welches in der Arbeit von Lan et al. (2010) untersucht wurde. In dem Experiment wurden Flüssigkeitsströmungen auf einer geneigten Platte ohne Mikrostruktur und ohne Perforationen behandelt. Dabei wurden Filmdickenprofile experimentell mittels Laser Focus Displacement bestimmt. Dieses Experiment wurde als Referenz gewählt, da das untersuchte Problem ähnliche Anforderungen an das Rechengitter stellt, wie die numerischen Untersuchungen im weiteren Verlauf der Arbeit. (Die Gitteranforderungen der Simulationen sind vergleichbar, da in dieser Arbeit ausschließlich effektive Kontaktwinkel genutzt wurden und die Mikrostruktur nicht durch das numerische Gitter aufgelöst wurde.)

Die Flüssigkeit, welche von Lan et al. (2010) verwendet wurde, war eine Wasser- Lipid Mischung. Die Stoffeigenschaften dieser Mischung werden in Tabelle 3.1 aufgeführt. Für die Simulationen wurden Daten zu Dichte und Viskosität der Mischung benötigt, welche in der Arbeit von Lan et al. (2010) nicht spezifiziert sind. Es wurde angenommen, dass beide Werte den Eigenschaften von reinem Wasser bei Umgebungsbedingungen entsprechen. Diese Annahme ist darin begründet, dass die Lipidkonzentration in der betrachteten Mischung sehr gering war.

Tabelle 3.1: Eigenschaften der Flüssigphase in der Arbeit von Lan et al. (2010)

Eigenschaft	Wert
Massenanteil des Lipids [%]	0,1
γ [°]	30
σ [N/m]	0,042

Das Rechengebiet und die Randbedingungen sind in Abbildung 3.2 dargestellt und in Tabelle 3.2 beschrieben. Eintrittsgeschwindigkeit normal zum Eintritt wird mit v bezeichnet. An der Oberseite des Rechengebiets (hier nicht gezeigt) wurde ein Druck von 1 bar angenommen.

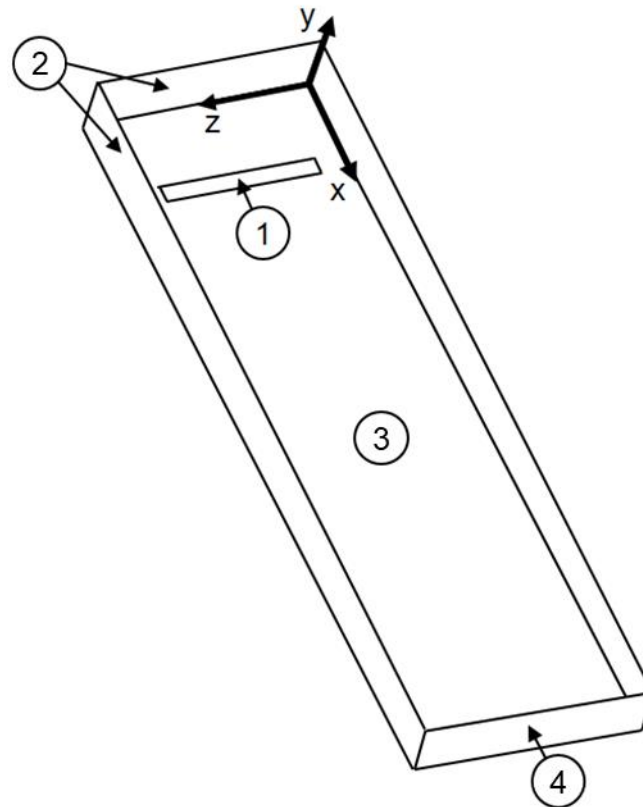


Abbildung 3.2: Rechengebiet und Randbedingungen nach Lan et al. (2010).

Tabelle 3.1 Randbedingungen (Nummerierung entsprechend Abbildung 4.1)

Nr.	Beschreibung	mathematische Formulierung
1	Eintritt	$v = 4,2 \text{ cm/s}, \alpha_L = 1$
2	seitliche Grenzen	$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_s = 0$
3	geneigte Platte	$\mathbf{u} = 0$
4	Austritt	$p = 1 \text{ bar}$

3.2.2 Gitterstudien

Feine Gitter werden immer dort benötigt, wo hohe Gradienten auftreten. In den hier betrachteten Problemen bedeutet dies, dass die Gitterauflösung in der Nähe der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche und in der Scherschicht des Flüssigkeitsfilms besonders hoch sein sollte. Da die in dieser Arbeit betrachteten Filme in der Regel dünn waren, war es notwendig den gesamten Flüssigkeitsfilm sowie einen Teil der angrenzenden Gasphase mit einem feinen Gitter aufzulösen. Jedoch war die genaue Position der Flüssigphase vor den Simulationen nicht bekannt. Aus diesem Grund wurde das Gitter zwischen den Iterationen adaptiv verfeinert. Alle acht Zeitschritte wurden alle Zellen mit $\alpha_L \geq 0,5$, sowie acht benachbarte Zellschichten in der anliegenden Gasphase zweifach verfeinert. Dies bedeutet, dass jede verfeinerte Zelle in jede Raumrichtung vierfach geschnitten wurde, sodass 64 neue Zellen erzeugt wurden. Ein Beispiel eines daraus resultierenden Gitters ist in 2D in Abbildung 3.3 zu sehen. Es ist zu beachten, dass alle im weiteren Verlauf dieses Abschnitts genannten Zahlen auf die verfeinerten Zellen im Flüssigkeitsfilm bezogen sind.

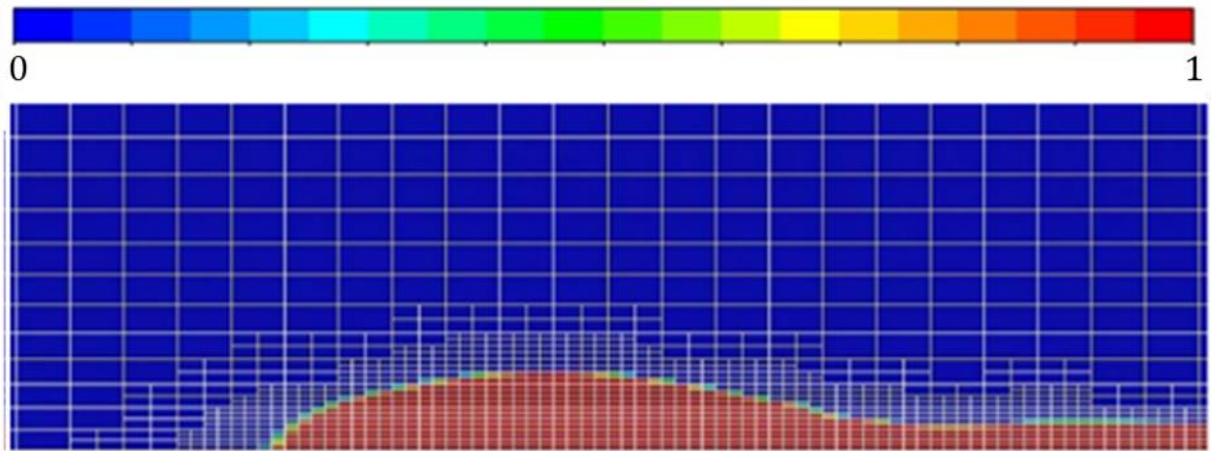


Abbildung 3.3: Volumenanteil der Flüssigphase α_L berechnet mithilfe eines adaptiv verfeinerten Gitters. Das Gitter ist durch weiße Linien dargestellt.

Im Folgenden werden die Einflüsse zweier wichtiger Gittereigenschaften auf die Lösung diskutiert: Erstens die Gitterauflösung in wandnormaler Richtung, welche durch die Höhe der direkt an die Blechoberfläche grenzenden Zellen Δy_w charakterisiert wird. Zweitens das maximale Seitenlängenverhältnis (sog. *aspect ratio*) der Zellen welches definiert ist als:

$$ar_{max} = \frac{Max(\Delta x, \Delta y, \Delta z)}{Min(\Delta x, \Delta y, \Delta z)} \quad (3.9)$$

Aus dieser Definition folgt, dass eine ideal würfelförmige Zelle einen Wert von $ar_{max} = 1$ aufweist. Je höher der Wert von ar_{max} ist, desto geringer die Qualität des Gitters. In den betrachteten Problemen treten die höchsten Geschwindigkeitsgradienten in Wandnormaler Richtung auf, was der y -Richtung entspricht. Daher wurde die Zellgröße in y -Richtung stets ein kleinerer Wert zugewiesen als in den wandparallelen Richtungen. Die Zellgrößen in den wandparallelen Richtungen Δx und Δz wurden immer gleichgesetzt. Außerdem waren die Werte von Δx und Δz unabhängig vom Wandabstand, während für Δy von der Wand ausgehend in y -Richtung ein geometrisches Wachstum mit dem Faktor 1,1 festgelegt wurde. Somit kann Gleichung (3.9) umformuliert werden zu:

$$ar_{max} = \frac{\Delta x}{\Delta y_W} \quad (3.10)$$

Zusammen definieren ar_{max} und Δy_W die Gesamtzahl der Gitterzellen im Rechenggebiet vor der adaptiven Gitterverfeinerung.

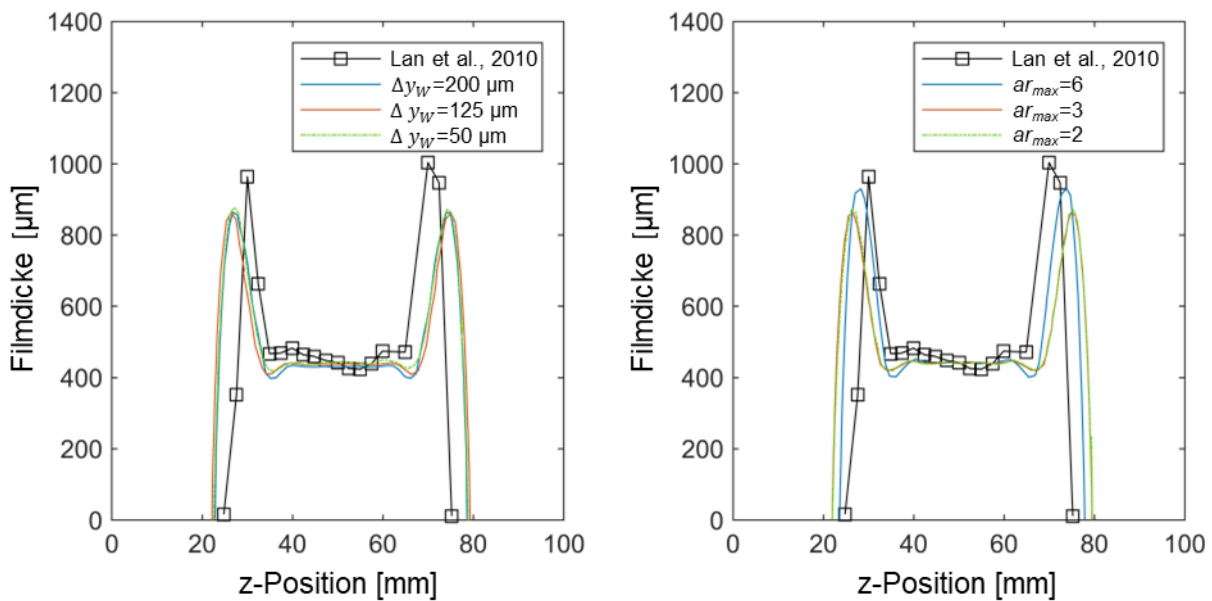


Abbildung 3.4: Mit verschiedenen Gittereinstellungen berechnete Filmdickenprofile und experimentelle Werte von Lan et al. (2010) ($\dot{V} = 20,25$ ml/s, glatte, nicht perforierte Platte). Studie zur Gitterauflösung normal zur Platte (links), Studie zum maximalen Seitenverhältnis (rechts).

Um die Lösung zu bewerten, wurden entsprechend des Messorts in der Arbeit von Lan et al. (2010) die Filmdickenprofile bei $x = 138,1$ mm genutzt. Die linke Seite der Abbildung 3.4 zeigt die Profile, welche bei verschiedenen Wandauflösungen bestimmt wurden. Um eine getrennte Bewertung der Einflüsse von ar_{max} und Δy_W zu ermöglichen, wurde ar_{max} für diese Studie konstant bei einem Wert von drei belassen,

d.h. Δx und Δz wurden entsprechend angepasst, wenn Δy_w verändert wurde. Es ist kein signifikanter Effekt auf das resultierende Filmdickenprofil zu erkennen. Dies lässt darauf schließen, dass die Lösung bereits für die geringste getestete Auflösung Gitterunabhängig ist. Jedoch war die Anzahl der Zellen über die Dicke des Flüssigkeitsfilms mit $\Delta y_w = 0,125$ mm bereits sehr niedrig. Diese Auflösung entsprach im Zentrum des Films nur vier Zellen in wandnormaler Richtung. Aus diesem Grund wurde eine feinere Auflösung von $\Delta y_w = 0,075$ mm für die weiteren Untersuchungen gewählt.

Die Ergebnisse der Gitterunabhängigkeitsstudie im rechten Teil der Abbildung 3.4 zeigen einen moderaten Einfluss von ar_{max} auf das Filmdickenprofil. Die Unterschiede zwischen den Lösungen mit $ar_{max} = 2$ und $ar_{max} = 3$ sind nur marginal und folglich wurde für die weiteren Simulationen der Wert $ar_{max} = 3$ festgelegt, da mit $ar_{max} = 3$ weniger Gitterzellen benötigt wurden. Alle Simulationsergebnisse stimmen gut mit dem experimentell ermittelten Filmdickenprofil überein.

3.2.3 Studie zu Solver-Einstellungen

An der Phasengrenzfläche entstehen durch Fehler in der Berechnung von f_σ gemäß Gleichung (3.4) nicht physikalisch begründete Strömungsphänomene (sog. *parasitäre Strömungen*). Um dieses Problem zu reduzieren, wird eine Glättung auf die Feldvariable α_L angewandt. Eine detaillierte Beschreibung eines solchen Glättungsprozesses ist in Ubbink (1997) zu finden, die Implementierung in Ansys Fluent 20.1 ist jedoch nicht vollständig ersichtlich. Der Benutzer kann die Anzahl der Glättungsschritte sowie einen Relaxationsfaktor vorgeben, um die Intensität der Glättung zu steuern. Eine zu starke Glättung kann dazu führen, dass nicht nur parasitäre Strömungen, sondern auch physikalische Effekte, wie zum Beispiel die Ausbildung von Kapillarwellen, unterdrückt werden. Daher sollte die Intensität der Glättung möglichst gering gehalten werden, solange die Stabilität der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche noch gewährleistet werden kann.

Um die Einflüsse des Glättungsvorgangs auf die Lösung zu quantifizieren, wurden drei verschiedene Fälle untersucht: Eine Simulation gänzlich ohne Glättung, eine Simulation mit einem Glättungsschritt und einem Relaxationsfaktor $r = 0,5$ und eine Simulation mit einem Glättungsschritt und einem Relaxationsfaktor $r = 1$.

Die Simulation gänzlich ohne Glättung führte zu einem Resultat, welches deutlich vom experimentellen Ergebnis sowie den anderen beiden Simulationsergebnissen abwich. Der Film breitete sich über die Platte aus, ohne sich wieder zu kontrahieren. In den anderen beiden Simulationen und auch im Experiment wurde dagegen eine deutliche Kontraktion des Films festgestellt. Dies weist darauf hin, dass die Oberflächenkräfte ohne Glättung nicht korrekt abgebildet wurden und stattdessen parasitäre Effekte die Strömung dominierten. Da parasitäre Strömungen ungerichtet sind und in der Intensität örtlich und zeitlich stark variieren, verschwamm die Phasengrenzfläche mit weiteren Iterationen über ein immer größeres Volumen. Dies sind klare Indizien, dass das Ergebnis der Simulation ohne Anwendung der Glättung nicht korrekt war.

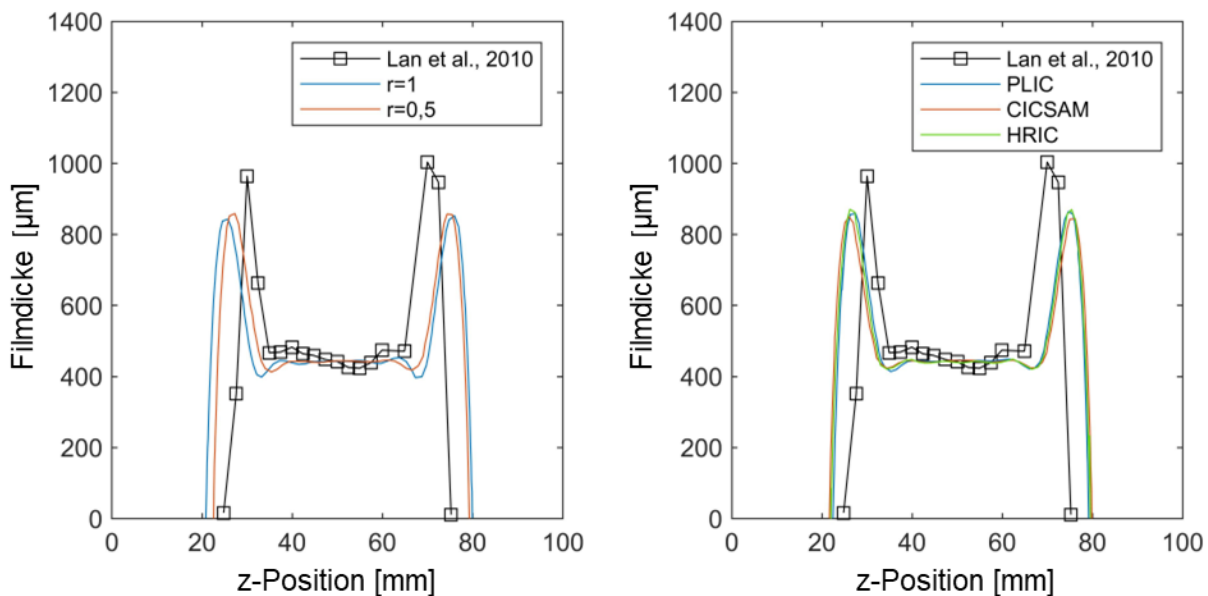


Abbildung 3.5: Filmdickenprofile für verschiedene Solver-Einstellungen. Variierender Glättungsrelaxationsfaktor (links) und variierendes Diskretisierungsschema zur Lösung der VoF-Transportgleichung (rechts).

In Abbildung 3.5 sind die resultierenden Filmdickenprofile für die beiden Fälle mit Glättung gezeigt. Sie zeigen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen. Die Abweichungen der Ergebnisse untereinander sind marginal. Da die Intensität der Glättung generell gering zu halten ist (Inguva et al., 2020), wurden alle weiteren Simulationen mit einem Relaxationsfaktor $r = 0,5$ durchgeführt.

Eine wichtige Entscheidung, die bei Anwendung der VoF-Methode getroffen werden muss, ist die Wahl der Diskretisierungsmethode um Gleichung (3.3) zu lösen. In dieser Arbeit wurden das PLIC (*Piecewise Linear Interface Construction* Youngs, 1982) Schema, das CICSAM Schema (*Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes*, Ubbink und Issa, 1999) und das HRIC Schema (*High Resolution*

Interface Capturing, Muzaferija und Perić, 1999) verglichen. Die Lösungen sind in Abbildung 3.5, rechts dargestellt. Alle drei Methoden sind gut für die Lösung des Problems geeignet. Während das CICSAM-Schema für die Lösung von Problemen empfohlen wird, die eine hohe Differenz in der Viskosität der fluiden Phasen aufweisen (Ubbink, 1997), bietet die PLIC-Methode eine hohe Genauigkeit bezüglich der Flüsse über die Phasengrenzfläche (Rider and Kothe, 1998). Das HRIC-Schema wurde bereits erfolgreich in ähnlichen Problemen verwendet (z.B. Olenberg und Kenig, 2020). Im Gegensatz zu den anderen beiden Methoden erlaubt die Implementierung dieses Schemas in Ansys Fluent 20.1 auch eine implizite zeitliche Diskretisierung. Jedoch zeigte das HRIC-Schema eine deutlich stärkere Verschmierung der Phasengrenzfläche als die PLIC-Methoden (siehe Abbildung 3.6). Die Verwendung des PLIC- und des CICSAM-Schemas führte zu äquivalenten Ergebnissen. Für alle weiteren Untersuchungen wurde deshalb die PLIC-Methode verwendet.

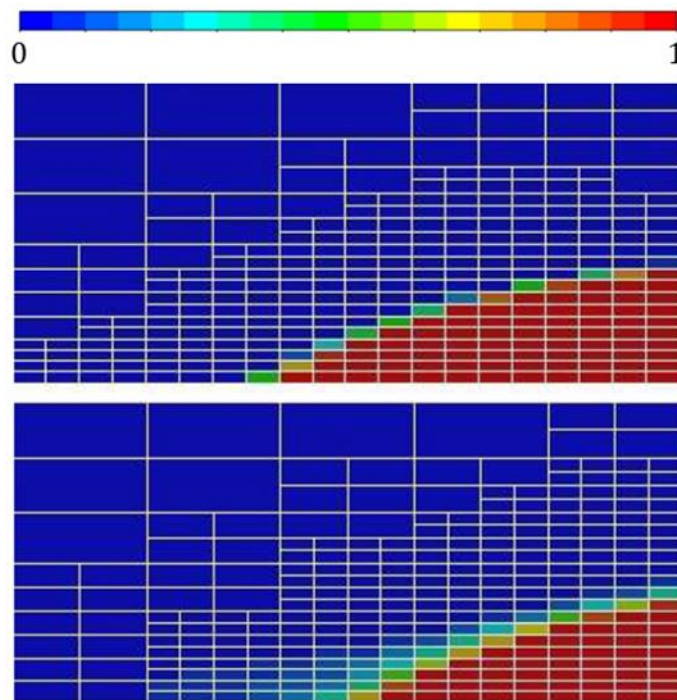


Abbildung 3.6: VoF-Feld bei $x = 138,1$ mm. PLIC-Schema (oben) und HRIC-Schema (unten).

3.2.4 Zusammenfassung

Es wurde die Strömung über eine geneigte Platte ohne Mikrostruktur und Perforationen betrachtet, wobei ein in Lan et al. (2010) beschriebener experimenteller Aufbau durch CFD-Simulationen abgebildet wurde. Anhand dieses Falls wurden Unabhängigkeitsstudien in Bezug auf Gitterdimensionen und Solvereinstellungen durchgeführt. Der hierbei verwendete statische Kontaktwinkel wurde in der o.g. Literaturquelle angegeben. Die Simulationsergebnisse zeigten nur geringfügige Abhängigkeiten von den untersuchten numerischen Parametern und Gitterdimensionen und konnten das in Lan et al. (2010) publizierte experimentelle Filmdickenprofil gut reproduzieren. Basierend auf den Ergebnissen wurde für die weiteren Untersuchungen das PLIC-Schema zur räumlichen Diskretisierung von Gleichung (3.3) festgelegt.

4 Film- und Rinnsalströmungen auf geneigten Packungsblechen

In diesem Teil der Dissertation werden experimentelle und numerische Untersuchungen zu Zweiphasenströmungen über geneigte, ungefaltete Packungsbleche vorgestellt. Um die Einflüsse von Mikrostruktur und Perforationen auf die Strömung getrennt bewerten zu können, wurden drei verschiedene Bleche untersucht: Ein glattes Packungsblech ohne Perforationen und Mikrostruktur, ein Blech mit Mikrostruktur und ohne Perforationen, sowie ein gelochtes Blech ohne Mikrostruktur. Anhand dieser Fälle wurden eine Methode zur Identifikation geeigneter effektiver Kontaktwinkel und ein numerischer Modellierungsansatz zur Berücksichtigung von Perforationen erarbeitet.

Das Vorgehen lässt sich in zwei Schritte unterteilen: Zunächst wurden mit Hilfe von Experimenten Daten zum Benetzungsverhalten verschiedener Oberflächen ermittelt, dann wurden CFD-Simulationen durchgeführt, welche die experimentellen Ergebnisse reproduzieren sollten. Dieses Vorgehen, hier am Beispiel des Stoffgemisches Wasser/TEG erläutert, wurde analog auch für Wasser als Flüssigphase angewandt.

Neben der Berücksichtigung von Perforationen liegt die Innovation des beschriebenen Vorgehens darin, dass die Ermittlung der effektiven Kontaktwinkel, im Gegensatz zu vielen der vorangegangenen Arbeiten (vgl. Abschnitt 2.4.3), unabhängig von der Packungsgeometrie erfolgt. Somit wird sichergestellt, dass dieser Modellparameter ausschließlich den Einfluss der Benetzbarkeit der Oberflächen abbildet. Zudem werden die durch die Vereinfachung der Packungsoberfläche entstehenden Fehler erstmals deutlich.

Auf Grundlage der Untersuchungen in Abschnitt 3.2 wurde das maximale Seitenlängenverhältnis der Gitterzellen stets auf den Wert drei beschränkt. Um zu überprüfen, ob die Auflösung mit $\Delta y_W = 0,075$ mm (ebenfalls auf Grundlage der

Ergebnisse in Abschnitt 3.2 gewählt) ausreichend war, wurde eine Simulation durchgeführt, bei der die Auflösung um den Faktor zwei verfeinert wurde. Dies wurde für den Fall mit dem niedrigsten betrachteten Kontaktwinkel ($\gamma = 8^\circ$) bei einer Flüssigkeitsbelastung von $\dot{V}_L = 100 \text{ ml/min}$ durchgeführt. In diesem Fall wurde der simulierte Film am dünnsten, was bedeutet, dass die Gitteranforderungen am höchsten waren. Da die Ergebnisse durch die erhöhte Auflösung nicht verändert wurden, wurde die Annahme getroffen, dass $\Delta y_W = 0,075 \text{ mm}$ für alle betrachteten Fälle zu gitterunabhängigen Ergebnissen führte.

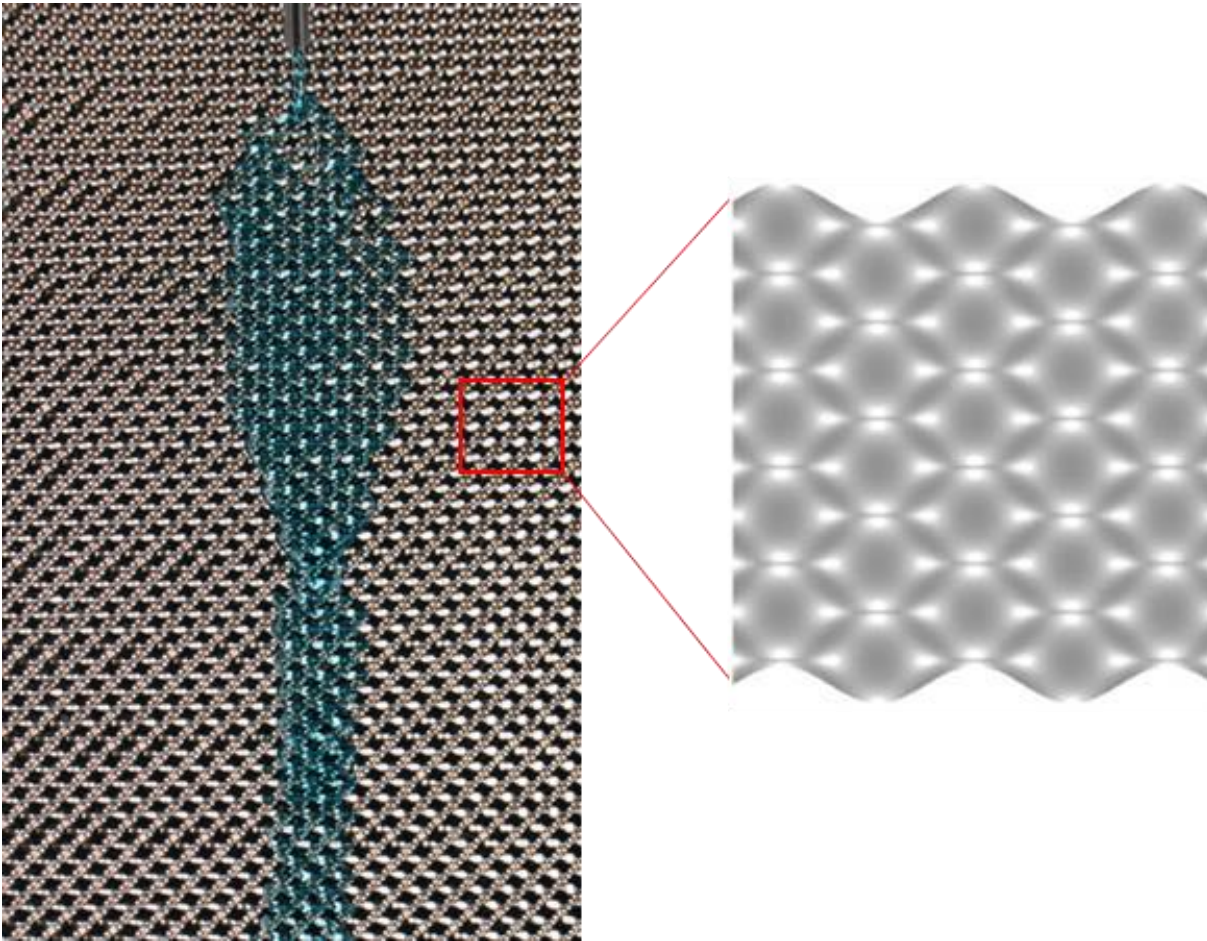


Abbildung 4.2: Foto eines Rinnsals auf W-rilliertem Blech (links) und vergrößerte schematische Darstellung der Mikrostruktur (rechts).

Eine Kamera (CANON EOS 77D) wurde normal zum Packungsblech installiert, um die Strömungsmorphologie zu fotografieren. Zur Erhöhung des optischen Kontrasts zwischen Flüssigkeit und Packungsblech wurde Lebensmittelfarbe (Indigotin, E132) mit einem Massenanteil von 2% zur Flüssigkeit hinzugegeben. Dies erlaubte im Zuge der Auswertung eine Trennung der benetzten und unbenetzten Flächenanteile der Packungsbleche. Zusätzlich konnte über die Farbtintensität die Filmdicke qualitativ abgeschätzt werden, da dünne Filme blasser erschienen als Regionen mit hoher Filmdicke. Eine Quantifizierung der Filmdicke war mit dieser Methode jedoch nicht möglich (vgl. Abschnitt 4.3).

Die untersuchte Flüssigkeit war eine binäre Mischung aus Wasser und TEG. Da bekannt ist, dass die Zugabe von Lebensmittelfarbstoff die Flüssigkeitseigenschaften verändert, wurden Oberflächenspannung, Viskosität und Dichte nach Zugabe des Farbstoffs gemessen. Tabelle 4.1 fasst die Messwerte zusammen, auch in den CFD-Simulationen verwendet wurden.

Tabelle 4.1 Fluideigenschaften bei 20°C (Literaturwerte sind mit einem Sternchen gekennzeichnet).

Fluid	σ [mN/m]	ρ [kg/m ³]	η [mPa s]
Wasser/TEG-Gemisch	38,7	1021,2	8,6
Luft	-	1,2*	0,0179*

Zur Messung der Oberflächenspannung wurde ein Blasentensiometer genutzt, und die Viskosität wurde mit Hilfe eines Rotationsviskosimeters ermittelt. In den Viskositätsmessungen wurden jeweils mehrere Rotationsgeschwindigkeiten eingestellt. Somit konnte verifiziert werden, dass die Flüssigkeit ein Newtonsches Fließverhalten aufwies (d.h. die Viskosität war unabhängig von der Scherrate).

Es wurde angestrebt, dass der in den Versuchen aufgegebene Volumenstrom zu den Strömungsbedingungen in einer Packungskolonne passt. Zu diesem Zweck wurden Flüssigkeitsbelastungen von $u_L = 15 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ und $u_L = 45 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ gewählt. Dies sind typische Flüssigkeitsbelastungen, bei denen Sulzer Mellapak™ 250.Y Packungen eingesetzt werden. Sie mussten für die experimentelle Umsetzung in Volumenströme umgerechnet werden. Im Folgenden wird diese Konvertierung beschrieben.

Der gesamte Volumenstrom der Flüssigphase $\dot{V}_{L,K}$ in einer Kolonne durchfließt ein Packungselement mit dem Volumen V_P , der Höhe H_P und der geometrischen Oberfläche A_P . Dabei ist H_P identisch zu der Höhe H_B der gefalteten Bleche, welche die Packung bilden. Unter der Annahme einer gleichmäßigen Flüssigkeitsverteilung auf den Packungsblechen folgt für ein einzelnes Blech mit der Fläche A_B :

$$\frac{\dot{V}_{L,K}}{\dot{V}_{L,B}} = \frac{A_P}{A_B} \quad (4.1)$$

Mit Gleichung (4.1) kann die folgende Beziehung für die Flüssigkeitsbelastung auf einem einzelnen Blech bestimmt werden:

$$u_L = \frac{\dot{V}_{L,K}}{A_{Q,K}} = \frac{\dot{V}_{L,K} H_P}{V_P} = \frac{\dot{V}_{L,K} H_P A_P}{A_P} = \frac{\dot{V}_{L,B} H_B A_P}{A_B} \quad (4.2)$$

Hierbei ist A_Q die Querschnittsfläche der Kolonne, welche der Querschnittsfläche des Packungselements entspricht (Spalten zwischen Kolonnenwand und Packung werden hier vernachlässigt).

Für ein ungefaltetes, rechteckiges Blech mit der gleichen Fläche A_B und der gleichen Höhe H_B wie ein Packungsblech gilt: $A_B = H_B B_B$. Mit der Breite des Blechs B_B . Unter der Annahme, dass die Flüssigkeitsbelastung auf diesem Blech der Flüssigkeitsbelastung der Packung entspricht, lässt sich diese Beziehung in die rechte Seite von Gleichung (4.2) einsetzen:

$$u_L = \frac{\dot{V}_{L,B} H_B a_P}{A_B} = \frac{\dot{V}_{L,B} a_P}{B_B} \quad (4.3)$$

Dabei ist a_P weiterhin die spezifische Oberfläche der Packung (d.h. $250 \text{ m}^3/\text{m}^2$). Die Verwendung von a_P für ein ebenes Blech ist unter der Annahme möglich, dass eine gegebene Blechoberfläche mit einem bestimmten Volumen umgeben ist (das Oberflächen-zu-Volumen-Verhältnis entspricht dabei a_P). Basierend auf Gleichung (4.3) können die Volumenströme für ein Blech der Breite $B_B = 10 \text{ cm}$ bestimmt werden. Es ergeben sich $\dot{V}_{L,B} = 100 \text{ ml/min}$ für $u_L = 15 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ und $\dot{V}_{L,B} = 300 \text{ ml/min}$ für $u_L = 45 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$.

4.2 Rechengebiet, Rand- und Anfangsbedingungen

Das in Abbildung 4.3 dargestellte Rechengebiet hat eine Länge von 20 cm und eine Breite von 10 cm. Die Randbedingungen sind entsprechend der Nummerierung in Abbildung 4.3 in Tabelle 4.2 angegeben.

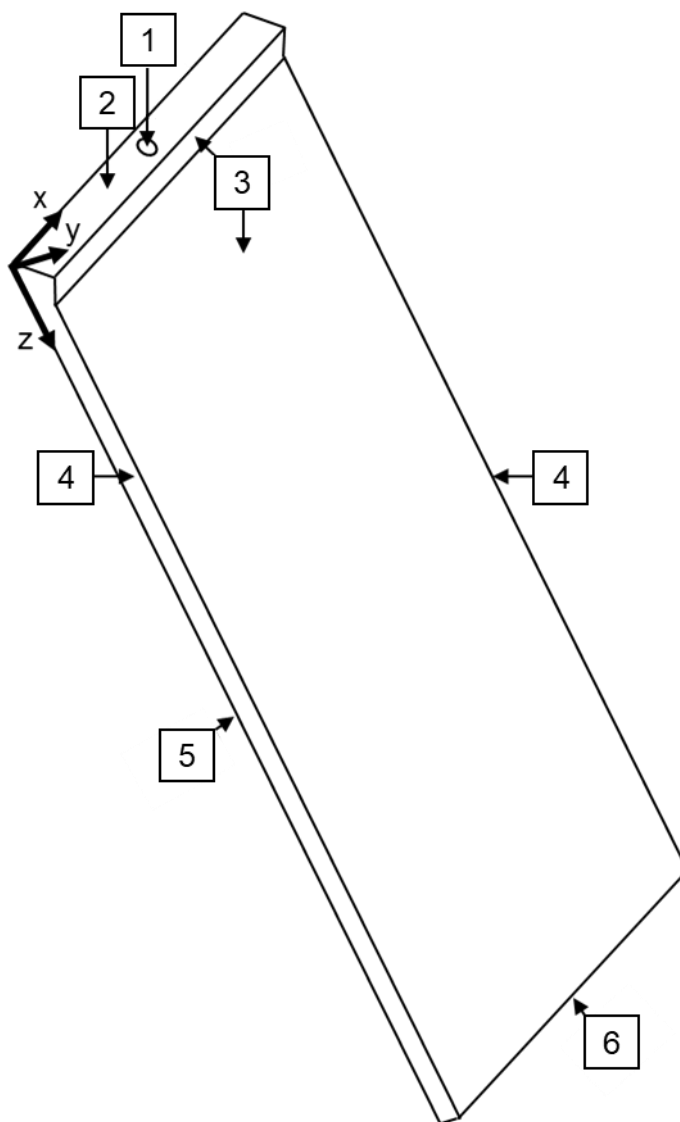


Abbildung 4.3: Rechengebiet zur Simulation der Strömungen über geneigte Packungsbleche.

Tabelle 4.2: Randbedingungen (Nummerierung entsprechend Abbildung 4.3).

Nr.	Beschreibung	mathematische Formulierung
1	Eintritt (Flüssigkeit)	Verteilung für \mathbf{u} nach Gl. (4.4)-(4.6), $\alpha_L = 1$
2	Eintritt (Gas)	$\mathbf{u} = 0$, $\alpha_L = 0$
3	obere Grenzen	$p = 1 \text{ bar}$
4	seitliche Grenzen	$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_W = 0$
5	Packungsblech (Rückseite des gezeigten Volumens)	$\mathbf{u} = 0$
6	Austritt	$p = 1 \text{ bar}$

Die Einflüsse der Mikrostruktur und Perforationen wurden ausschließlich mit Hilfe effektiver Kontaktwinkel berücksichtigt. Dies bedeutet, dass die Blechoberfläche unabhängig davon, ob ein glattes, mikrostrukturiertes oder perforiertes Blech betrachtet wird, durch eine glatte Fläche repräsentiert wird. Somit konnte für alle untersuchten Bleche das gleiche Rechenggebiet genutzt werden.

Die Fläche, welche das geneigte Blech repräsentiert, ist in Abbildung 4.3 mit der Nummer 5 bezeichnet. Entsprechend wurde hier eine no-slip-Bedingung ($\mathbf{u} = 0$) verwendet.

Der eintretende Flüssigkeitsstrahl wurde mit Hilfe von Profilen modelliert, welche auf dem Eintritt (Fläche 1 in Abbildung 4.3) definiert wurden. Sie sind in Abbildung 4.4 dargestellt. Das parabolische Profil, welches für v (den Betrag der Eintrittsgeschwindigkeit) vorgegeben wurde, entspricht der analytischen Lösung für eine ausgebildete laminare Rohrströmung (*Hagen-Poiseuille Gleichung*):

$$v(s) = \frac{2\dot{V}_L}{\pi R_A^4} (R_A^2 - s^2) \quad (4.4)$$

Wobei R_A dem Radius des Aufgaberohrs entspricht, welches in den Experimenten verwendet wurde. Die Variable s ist eine radiale Koordinate, welche definiert ist durch:

$$s = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y^* - y_0^*)^2} \quad (4.5)$$

Mit

$$y^* = y \cos(30^\circ) \quad (4.6)$$

Die Konstanten $x_0 = 50 \text{ mm}$ und $y_0^* = 5 \text{ mm}$ entsprechen den Koordinaten des Flächenmittelpunkts des Eintritts. Durch diese Definitionen wurde erreicht, dass der

eintretende Strahl relativ zur geneigten Platte die gleiche Position hatte, wie im Experiment. Für $s \geq R$ wird die Geschwindigkeit zu null gesetzt. Die Randbedingungen für die Volumenanteile der Flüssigphase sind $\alpha_L = 1$ für $s \leq R$ und $\alpha_L = 0$ für $s > R$.

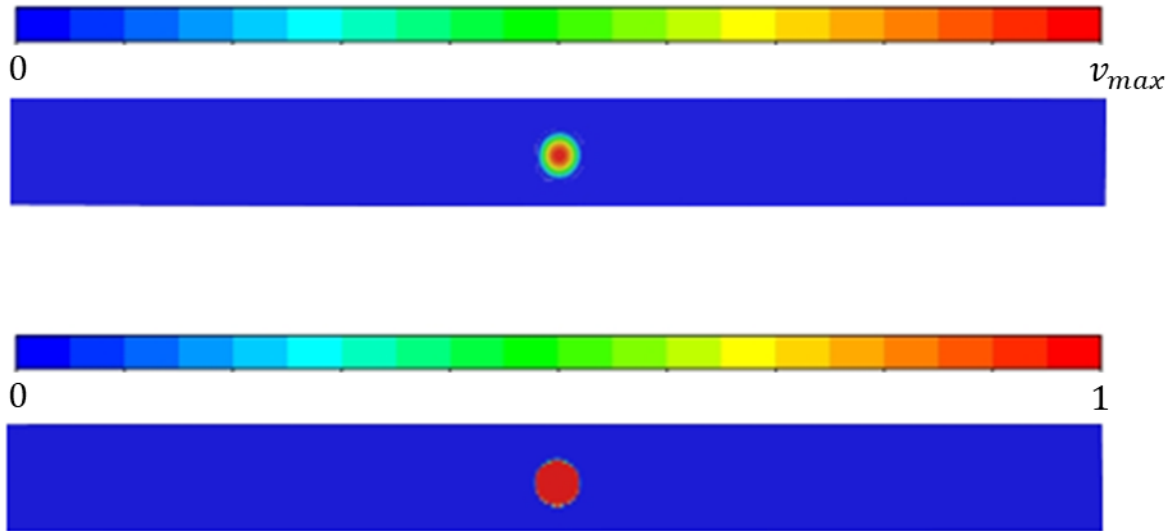


Abbildung 4.4: Geschwindigkeit (oben) und Volumenanteil der Flüssigphase (unten) am Eintritt des Rechengebiets.

Die Randbedingungen mit ortsabhängigen Werten sowie ein Algorithmus zur adaptiven Gitterverfeinerung wurden mit Hilfe benutzerdefinierter Funktionen realisiert, welche in der Programmiersprache C++ geschrieben wurden.

Die Anfangsbedingungen waren $\alpha_L = 0$ und $\mathbf{u} = 0$ bei Umgebungsdruck im gesamten Rechengebiet.

4.3 Datenaufbereitung

In den Experimenten wurden die Strömungsmorphologie und die Größe der benetzten Fläche mit einer neu entwickelten Bildverarbeitungsroutine evaluiert. Abbildung 4.5 zeigt zwei Beispielfotos vor Anwendung der Auswertungsroutine.

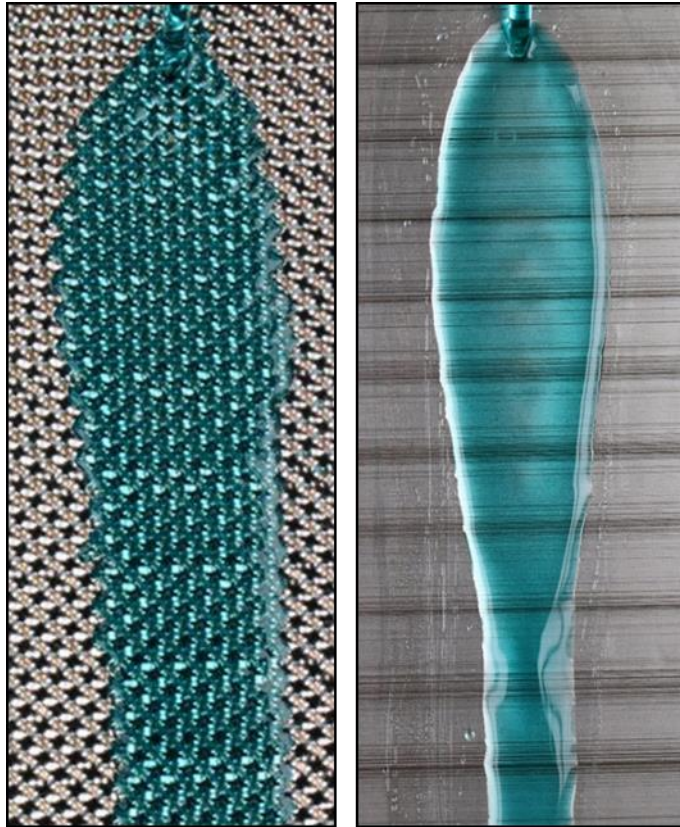


Abbildung 4.5: Fotos vor der Datenverarbeitung. Strömungen auf einem W-rillierten Blech (links) und einem glatten Blech (rechts). Der Volumenstrom beträgt 300 ml/min.

Die Fotos lagen als digitale Rastergrafiken vor, welche aus einzelnen Bildpunkten (Pixeln) aufgebaut sind. Zunächst wurde ein rot-grün-blau (RGB) Farbmodell auf die Bilder angewandt. Der Unterschied zwischen den roten und grünen Anteilen der Aufnahmen zeigte den besten Kontrast zwischen Flüssigkeit und Blech und wird im weiteren Verlauf als Farbintensität bezeichnet. Ein auf der Farbintensität basierendes Filter- und Schwellwertverfahren ermöglichte die Trennung der benetzten und trockenen Bereiche des Blechs. Für den benetzten Bereich wurde die Farbintensität auf das Intervall $[0,1]$ normiert. Im Anschluss wurden die Bilder in eine diskretisierte Form überführt. Hierbei wurde, wie auch im CFD-Modell, das in Abbildung 4.3 gezeigte Koordinatensystem zugrunde gelegt. Die Platte wurde in x -Richtung in n Zeilen und in

z -Richtung in m Spalten unterteilt. Der Index i bezeichnet im Folgenden den Zeilenindex und j den Spaltenindex. Es wurden Intervalle $\Delta x = 0,25$ mm und $\Delta z = 3$ mm gewählt. Für Δz wurde ein wesentlich größerer Wert definiert als für Δx , da in den Filmdickenprofilen in x -Richtung deutlich höhere Gradienten erwartet wurden als in z -Richtung. Im nächsten Schritt wurden jedem Pixel Koordinaten x und z zugewiesen, welche die jeweilige Position auf der Platte bestimmten. Danach wurden aus den Pixeln des ursprünglichen Bildes Pixelkonglomerate $P_{i,j}$ mit den Koordinaten $x_i = (i - \frac{1}{2})\Delta x$ und $z_j = (j - \frac{1}{2})\Delta z$ gebildet. Dabei wurden für $P_{i,j}$ alle Pixel des ursprünglichen Bildes mit $x_i - \frac{\Delta x}{2} < x \leq x_i + \frac{\Delta x}{2}$ und $z_i - \frac{\Delta z}{2} < z \leq z_i + \frac{\Delta z}{2}$ verwendet. Der Farbintensitätswert, der $P_{i,j}$ zugewiesen wurde, war der Mittelwert der Intensitäten aller Pixel, aus denen $P_{i,j}$ gebildet wurde.

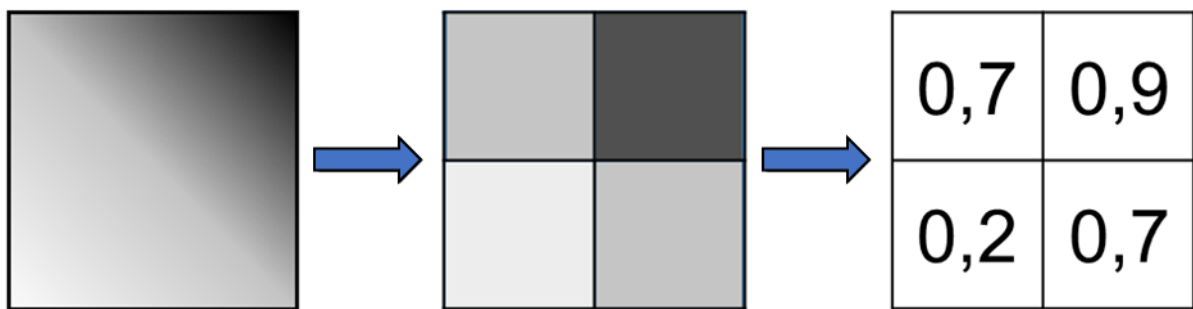


Abbildung 4.6: Transformation eines Bildes in eine Farbintensitätsmatrix. Originalbild (links), diskretisiertes Bild (Mitte) und Intensitätsmatrix (rechts).

Abbildung 4.6 zeigt, wie ein Bild in eine Farbintensitätsmatrix überführt werden kann (das gezeigte Bild dient nur als Beispiel und hat keinen direkten Bezug zum betrachteten Problem). Die einzelnen Pixel des ursprünglichen Bildes (links) können mit bloßem Auge nicht unterschieden werden. Die vier Zonen des diskretisierten Bildes (Mitte) repräsentieren $P_{1,1}$ bis $P_{2,2}$. Im finalen Schritt werden die Intensitätswerte der Pixelkonglomerate als Elemente einer Matrix genutzt (zweiter Schritt des in Abbildung 4.6 gezeigten Prozesses). Eine solche Matrix wird im weiteren Verlauf der Arbeit als Intensitätsmatrix bezeichnet. Jedes Element einer Intensitätsmatrix entspricht einem Pixelkonglomerat $P_{i,j}$ mit dem entsprechenden Intensitätswert und definierter Position auf dem Blech.

Dieses Vorgehen ergab Matrizen mit Elementen zwischen 0 und 1, wobei Werte größer null anzeigten, dass an der entsprechenden Position auf dem Blech Flüssigkeit vorhanden war.

Jedes einzelne Strömungsexperiment wurde mindestens drei Mal fotografiert, nachdem sich ein stationärer Zustand ausgebildet hatte.

Die Filme und Rinnsale zeigten geringfügige, zufällig auftretende Asymmetrien. Um diesen Effekt zu korrigieren, wurden die Matrixelemente so angepasst, dass die benetzte Fläche in den Bildern symmetrisch wurde. Die Farbintensitätswerte sowie die Größe der benetzten Oberfläche blieben hiervon unberührt.

Schließlich wurden die Intensitätsmatrizen für jedes Experiment mit gleicher Flüssigkeitsbelastung und gleichem Stoffsystem gemittelt, um Störungen durch Wellen oder sonstige kleinskalige Fluktuationen zu minimieren. Die Superposition wurde erreicht, indem alle Matrixelemente addiert und durch die Anzahl der Matrizen geteilt wurden.

Eine ähnliche Prozedur wurde auch auf die CFD-Ergebnisse angewandt. Die Filmdicke wurde als Abstand in wandnormaler Richtung zwischen der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche (mit $\alpha_L = 0,5$) und dem Blech definiert. An den Stellen, wo keine Flüssigkeit vorhanden war, wurde die Filmdicke zu null gesetzt. Die resultierenden Filmdickenprofile wurden zur Auswertung auf dasselbe Gitter interpoliert wie die Dickenprofile aus den Experimenten. Die Filmdickenwerte wurden dann ebenfalls auf das Intervall $[0,1]$ normiert, wobei der Wert eins dem größten Filmdickenwert im Rechengebiet entsprach.

All dies wurde getan, um einen direkten qualitativen Vergleich der aus den Experimenten und CFD-Simulationen gewonnenen Strömungsmorphologien zu ermöglichen. Der gesamte Prozess ist in Abbildung 4.7 illustriert.

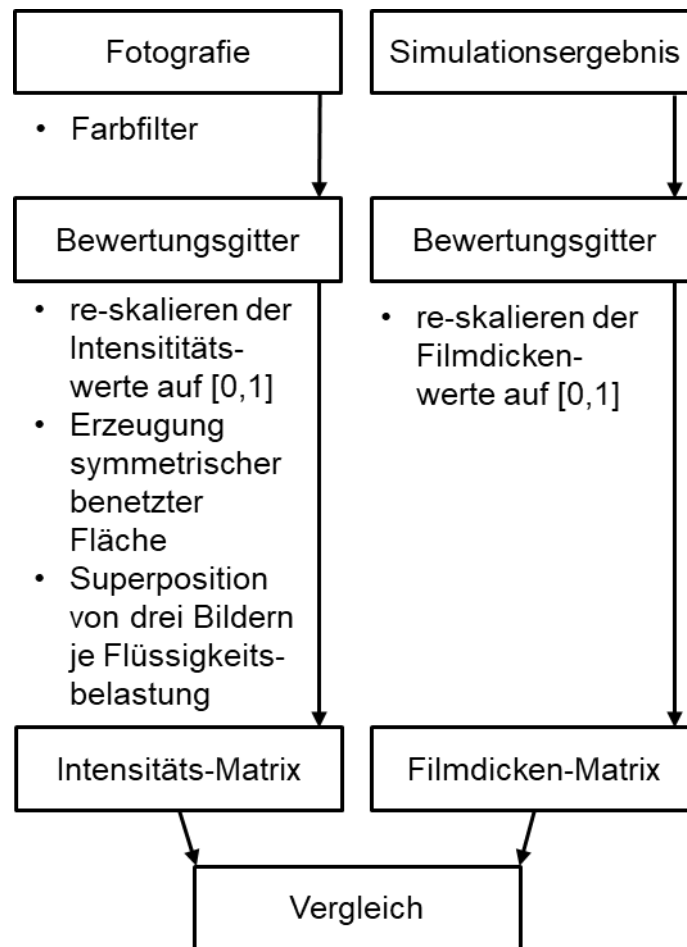


Abbildung 4.7: Datenauswertungsverfahren zum Vergleich der Ergebnisse aus Experimenten und CFD-Simulationen.

4.4 Bestimmung effektiver Kontaktwinkel

Um den Kontaktwinkel γ_{eff} zu bestimmen, welcher eine bestimmte Mikrostruktur bestmöglich charakterisiert, wurde der in Abbildung 4.8 gezeigte Algorithmus implementiert. Hierbei kennzeichnet der Index n die Zahl der im Algorithmus durchgeführten Iterationen.

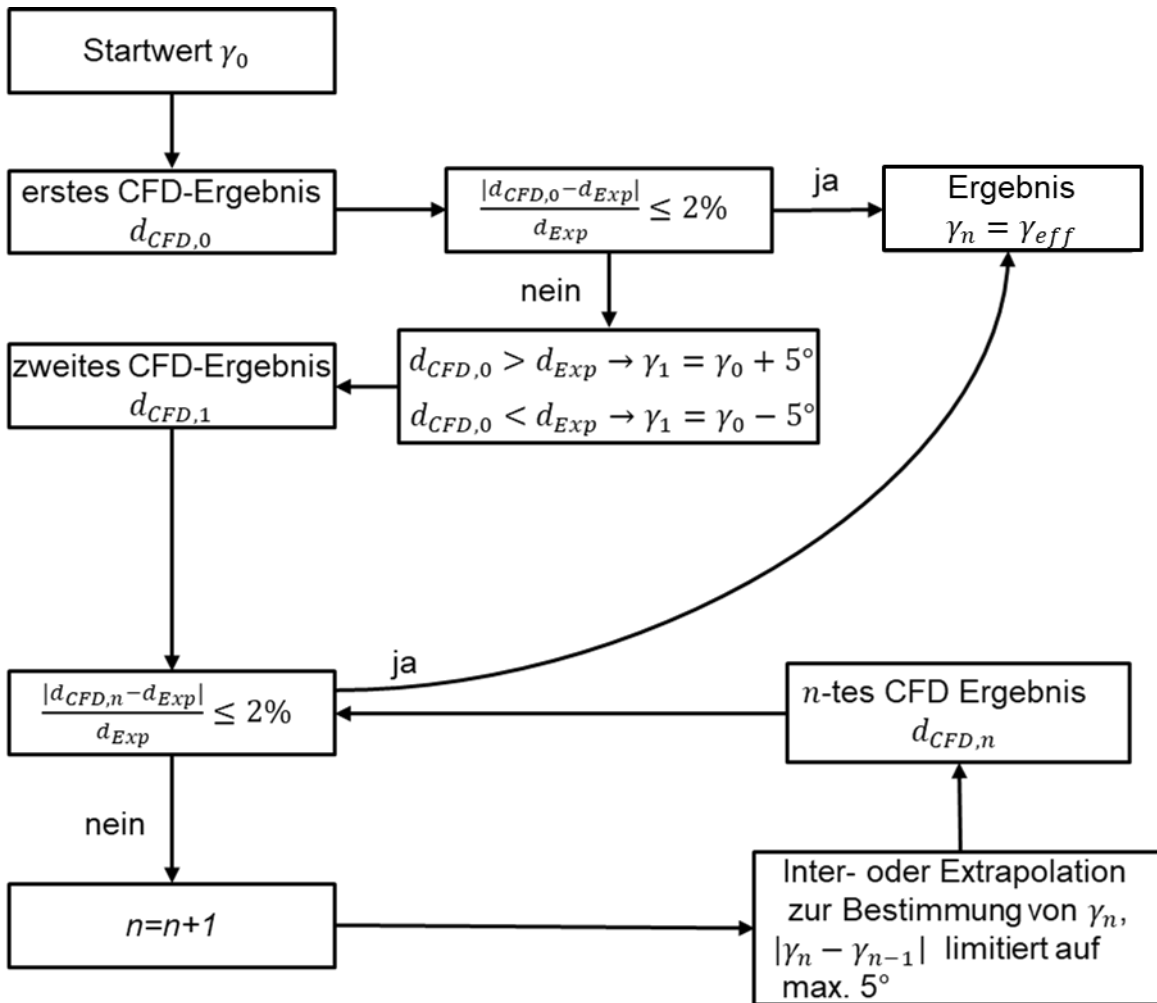


Abbildung 4.8: Algorithmus zur automatisierten Ermittlung effektiver Kontaktwinkel.

Ein erster Kontaktwinkel γ_0 musste abgeschätzt werden (bspw. durch Messungen an einem statischen Tropfen oder durch Kontaktwinkel, welche bei der Untersuchung anderer Flüssigkeiten mit ähnlichen Eigenschaften bestimmt wurden). Mit diesem Startwert wurde die erste CFD-Simulation durchgeführt und die Breite des resultierenden Rinnsals oder Films wurde an einer definierten Stelle ermittelt. Um Einlaufeffekte zu vermeiden, war es erforderlich, dass die Rinnsalbreite d in ausreichender Entfernung vom Auftreffpunkt des Flüssigkeitsstrahls ermittelt wurde. In

dieser Arbeit wurde der Abstand des Messorts der Rinnsalbreite vom Auftreffpunkt des Flüssigkeitsstrahls auf 130 mm festgelegt. Die relative Abweichung zwischen der Breite des simulierten Rinnsals d_{CFD} und der gemessenen Rinnsalbreite d_{exp} wurde dann bestimmt und als Abbruchkriterium verwendet. Dieses Kriterium wurde so definiert, dass der Algorithmus beendet wurde, sobald die Abweichung unterhalb von 2% lag. In diesem Fall wurde die Übereinstimmung als hinreichend genau angesehen und der effektive Kontaktwinkel des betrachteten Blechs nahm den Wert von γ_n an. Sofern das Abbruchkriterium nicht erfüllt war, wurde der Kontaktwinkel um $+5^\circ$ angepasst, falls $d_{CFD} > d_{exp}$ war. Im umgekehrten Fall wurde der Wert um -5° geändert. Wurde die Abbruchbedingung durch die CFD-Simulation mit dem Wert von γ_1 nicht erfüllt, so wurde der nächste Wert γ_2 mit Hilfe der vorherigen CFD-Ergebnisse $d_{CFD,0}$ und $d_{CFD,1}$ sowie dem aus dem Experiment bekannten Wert d_{exp} abgeschätzt. Lag d_{exp} zwischen $d_{CFD,0}$ und $d_{CFD,1}$, so wurde linear interpoliert. Andernfalls wurde eine lineare Extrapolation durchgeführt. Beides wird durch folgende Gleichung beschrieben:

$$\gamma_n = \gamma_{n-1} + (\gamma_{n-2} - \gamma_{n-1}) \frac{d_{exp} - d_{CFD,n-1}}{d_{CFD,n-2} - d_{CFD,n-1}} \quad (4.7)$$

Bei allen Änderungen von γ wurde die Bedingung $0^\circ < \gamma < 180^\circ$ (entspricht dem physikalisch möglichen Wertebereich) stets eingehalten. Außerdem wurde die Änderung des Kontaktwinkels zwischen zwei Iterationen auf $\pm 5^\circ$ beschränkt. Der Grund hierfür besteht darin, dass die Lösung der vorherigen CFD-Simulation unter Verwendung des Werts γ_{n-1} als Initialisierung für die Simulation mit dem neu geschätzten Wert γ_n diene und die CFD-Simulation instabil wurde, falls $\Delta\gamma = |\gamma_n - \gamma_{n-1}|$ zu groß wurde. Die Ursache dieses Problems ist der abrupte Wechsel des Kontaktwinkels, der einer plötzlichen Änderung der Oberflächenkraft an der Triplelinie gleichkommt. Die Prozedur der linearen Approximation des nächsten γ -Wertes wurde so lange wiederholt, bis die Abbruchbedingung erfüllt war. Es sollte beachtet werden, dass dieser Algorithmus nur verlässlich funktioniert, wenn d_{CFD} mit steigenden Werten für γ_{eff} streng monoton abnimmt. Entsprechend der an der Triplelinie wirkenden Kräfte sollte dies immer der Fall sein. Für alle in dieser Arbeit betrachteten Fälle wurde die Abbruchbedingung in maximal vier Iterationen erreicht.

Der Algorithmus wurde mit Hilfe von benutzerdefinierten Funktionen implementiert, welche in der Programmiersprache C++ geschrieben wurden.

4.5 Modellierung von Perforationen

Zur Abbildung von Perforationen wurde zunächst die naheliegende Methode, die Perforationen als Teil der Geometrie zu betrachten und durch das numerische Gitter aufzulösen, geprüft. Das in den Experimenten gefundene Verhalten, dass Rinnsale die Perforationen überbrückten, sofern sie nicht seitlich abgelenkt wurden, konnte mit dieser Methode auch unter Verwendung sehr feiner lokaler Gitter nicht reproduziert werden. Stattdessen floss die Flüssigkeit in den Simulationen stets durch die Perforationen hindurch auf die andere Seite des Blechs (vgl. Bertling et al., 2022). Zur Modellierung perforierter Packungsbleche wurde daher der alternative Ansatz verfolgt, den Kontaktwinkel am Ort der Perforationen lokal anzupassen.

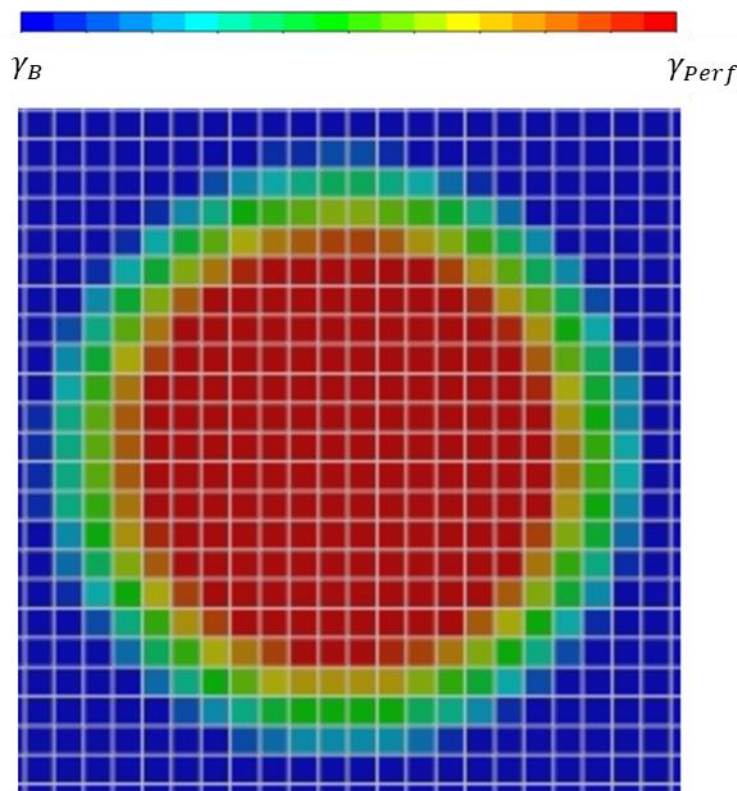


Abbildung 4.9: γ -Profil zur Modellierung von Perforationen. (γ_B : Kontaktwinkelwert des Blechs, γ_{Perf} : Kontaktwinkelwert der Perforation. Beide Werte sind abhängig von Stoffeigenschaften.)

Das Kontaktwinkelprofil, welches am Blech angewandt wurde, ist in Abbildung 4.9 gezeigt. Am Ort der Perforationen wurde ein höherer Wert für den Kontaktwinkel

verwendet als für den Rest des Blechs, was an diesen Stellen zu einem hydrophoberen Verhalten führte. Um Stabilitätsprobleme aufgrund einer abrupten lokalen Änderung des Kontaktwinkels zu vermeiden, wurde ein linearer Übergang zwischen den Werten von γ_B und γ_{perf} implementiert.

Die benötigte Rechenleistung blieb durch diesen Ansatz im Vergleich zur Simulation der Strömungen über nicht perforierte Bleche unverändert. Zudem ist der manuelle Aufwand der Methode gering, da das Rechengebiet und das verwendete Gitter nicht angepasst werden müssen. Strömungen durch die Perforationen hindurch wurden von vornherein ausgeschlossen, da auch an den Stellen der Perforationen noch eine no-slip Bedingung gesetzt wurde.

Der Wert des lokalen Kontaktwinkels am Ort der Perforationen γ_{perf} musste in einem iterativen Verfahren, ähnlich dem in Abschnitt 4.4 beschriebenen Algorithmus, ermittelt werden. Hier musste jedoch die optische Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation als Kriterium für die Wahl des geeigneten Wertes herangezogen werden, da die in Abschnitt 4.3 beschriebene Auswertungsmethode in diesem Zusammenhang nicht anwendbar war.

4.6 Ergebnisse

Bei der Diskussion der Ergebnisse ist zu beachten, dass zunächst mit einem Volumenstrom von $\dot{V}_L = 300$ ml/min gearbeitet wurde, um γ_{eff} gemäß des in Abschnitt 4.4 beschriebenen Vorgehens zu bestimmen. Für die darauffolgenden Simulationen mit $\dot{V}_L = 100$ ml/min wurde der Kontaktwinkel nicht verändert. Dieses Vorgehen erlaubte es zu prüfen, inwieweit ein bei einem bestimmten Volumenstrom ermittelter effektiver Kontaktwinkel auch für die Nutzung bei anderen Volumenströmen geeignet ist.

4.6.1 Einfluss des Kontaktwinkels auf die Strömungsmorphologie

Eine wichtige Voraussetzung für die Anwendung effektiver Kontaktwinkel ist es, dass sich das Strömungsverhalten durch Änderungen des Kontaktwinkels beeinflussen lässt. Abbildung 4.10 zeigt die Verläufe der Triplelinien auf einer geneigten Platte, welche unter Verwendung unterschiedlicher Kontaktwinkel bestimmt wurden. Wie zu sehen ist, ändert sich die Strömungsmorphologie selbst bei kleinen Änderungen des Kontaktwinkels signifikant. Somit ist es möglich, durch Anpassung dieses Modellparameters ein großes Spektrum von Strömungsmorphologien abzubilden.

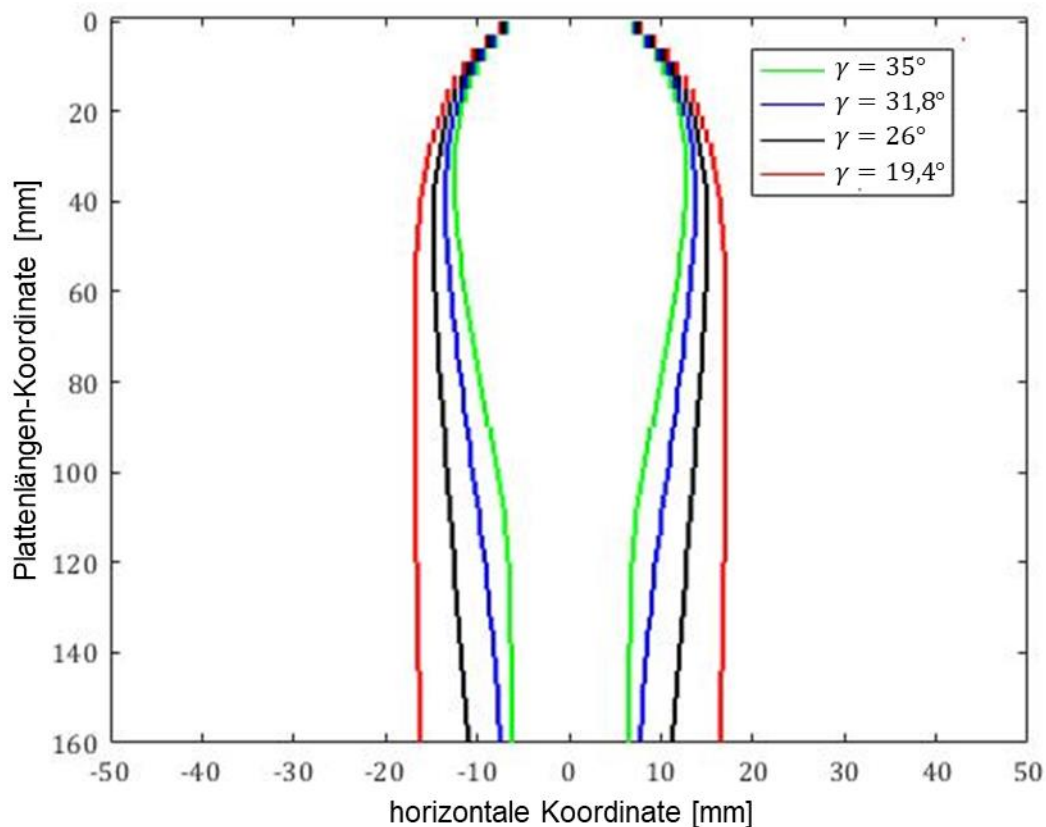


Abbildung 4.10: Verlauf der Triplelinien bei verschiedenen Kontaktwinkeln ($\dot{V}_L = 300$ ml/min).

4.6.2 Glattes Packungsblech

Für die Strömung der binären Mischung aus Wasser und TEG auf einem glatten Packungsblech wurde mit dem in Abschnitt 4.4 beschriebenen Algorithmus ein Kontaktwinkel von $\gamma = 35^\circ$ identifiziert. Wie in Abbildung 4.11 zu sehen ist, zeigen die Triplelinien aus Experiment und Simulation bei einem Volumenstrom von $\dot{V}_L = 300$ ml/min eine nahezu perfekte Übereinstimmung zueinander, während für den Volumenstrom von $\dot{V}_L = 100$ ml/min in der Simulation ein etwas schmaleres Rinnsal resultiert als im Experiment. Die Dickenprofile (Abbildung 4.12) sind ebenfalls in guter Übereinstimmung zueinander. In der Nähe des Punktes, an dem der Strahl auf das Blech trifft, zeigen beide Profile einen Film mit einem lokalen Minimum der Filmdicke im Filmzentrum. In dieser Region wird die Strömung von Trägheitskräften dominiert, welche durch das Auftreffen des Flüssigkeitsstrahls entstehen. Weiter stromabwärts zieht sich der Film infolge der Oberflächenkräfte zusammen und wird zu einem Rinnsal (vgl. Abbildung 4.11). Insgesamt wird ersichtlich, dass das Modell in der Lage ist, die

Strömung auf glatten geneigten Platten gut abzubilden, obwohl hier mit dem durch Gl. (4.4) – (4.6) beschriebenen eintretenden Flüssigkeitsstrahl eine deutlich komplexere Eintrittsbedingung gewählt wurde als in den in Abschnitt 3.2 diskutierten Untersuchungen.

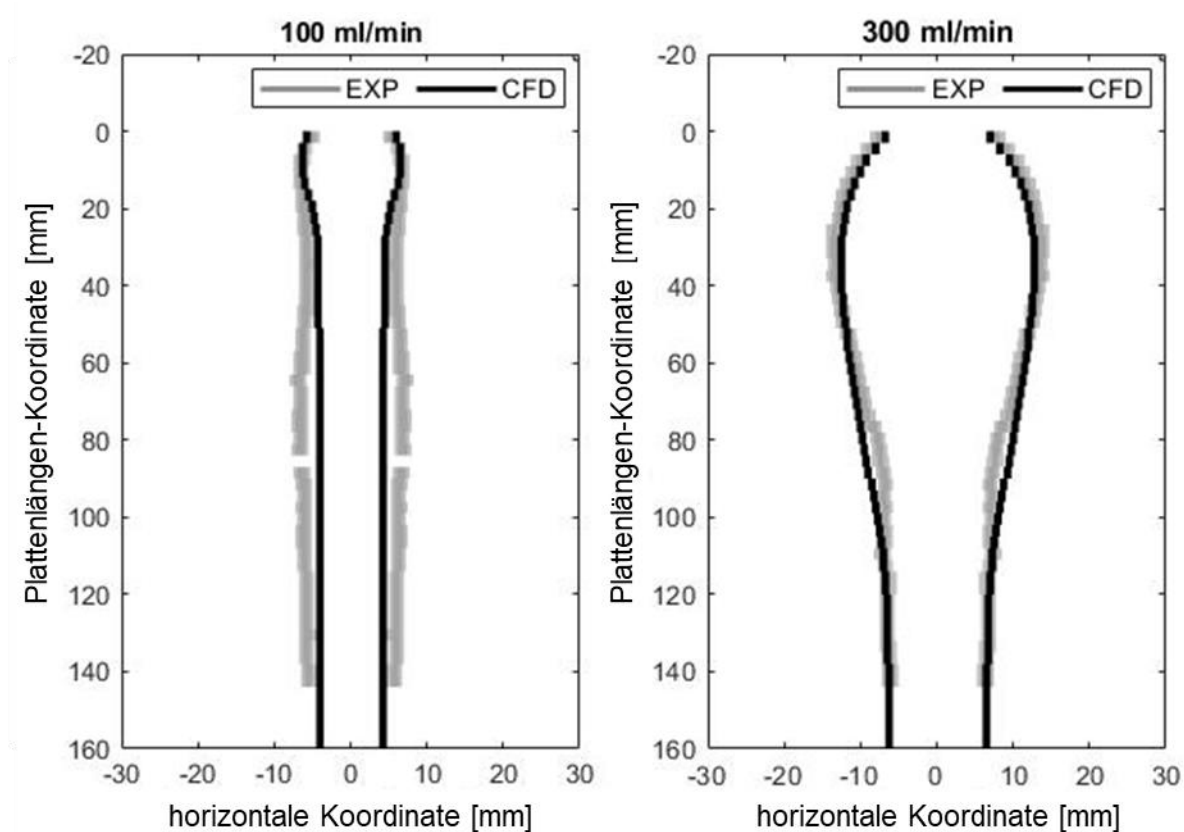


Abbildung 4.11: Verlauf der Triplelinien auf einem glatten, nicht perforierten Packungsblech.

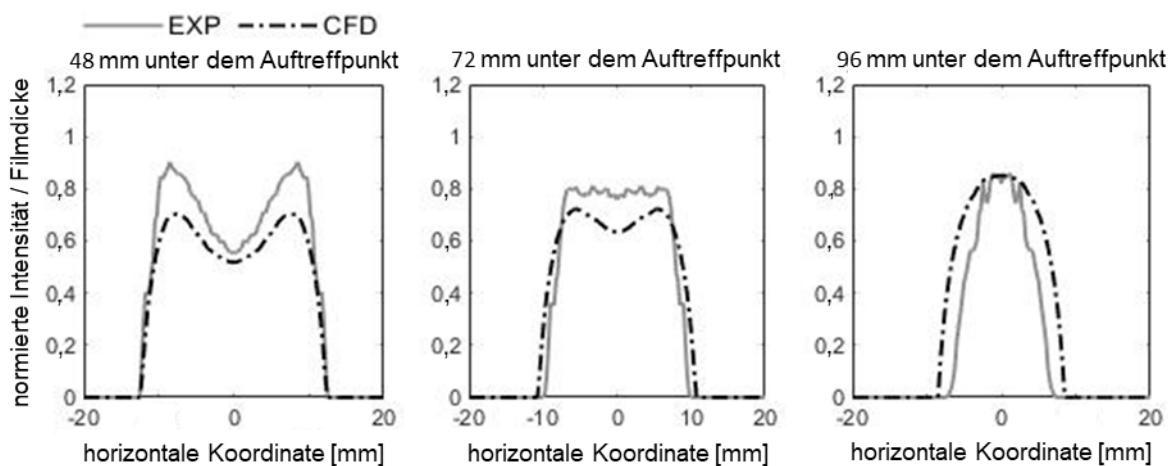


Abbildung 4.12: Normierte Intensitätsprofile für das experimentell untersuchte glatte Packungsblech und normierte simulierte Flindickenprofile ($\gamma = 35^\circ$, $\dot{V}_L = 300 \text{ ml/min}$).

4.6.3 W-rilliertes Packungsblech

Für die Strömung auf dem W-rillierten Packungsblech wurde der Kontaktwinkel $\gamma_{eff} = 19,4^\circ$ identifiziert. Der Vergleich der Triplelinien in Abbildung 4.13 zeigt eine gute Übereinstimmung für den Volumenstrom $\dot{V}_L = 300 \text{ ml/min}$, während das im Experiment ermittelte Dickenprofil eine gleichmäßigere Filmdicke zeigt als das Dickenprofil aus der Simulation (vgl. Abbildung 4.14). Letzteres war aufgrund der Modellannahmen zu erwarten. Die Anpassung des Kontaktwinkels in der Simulation bewirkte lediglich eine Veränderung der Oberflächenkräfte in der Nähe der Triplelinie und somit konnte nur die Ausbreitung der Flüssigkeit beeinflusst werden. Dagegen bewirkte die Mikrostruktur im Experiment auch im Filmzentrum ein verändertes Strömungsverhalten. Für den Volumenstrom $\dot{V}_L = 100 \text{ ml/min}$ ist im Experiment ab einer Distanz von 60 mm zum Auftreffpunkt eine Aufweitung des Films zu beobachten, aber insgesamt bleibt eine akzeptable Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation erhalten.

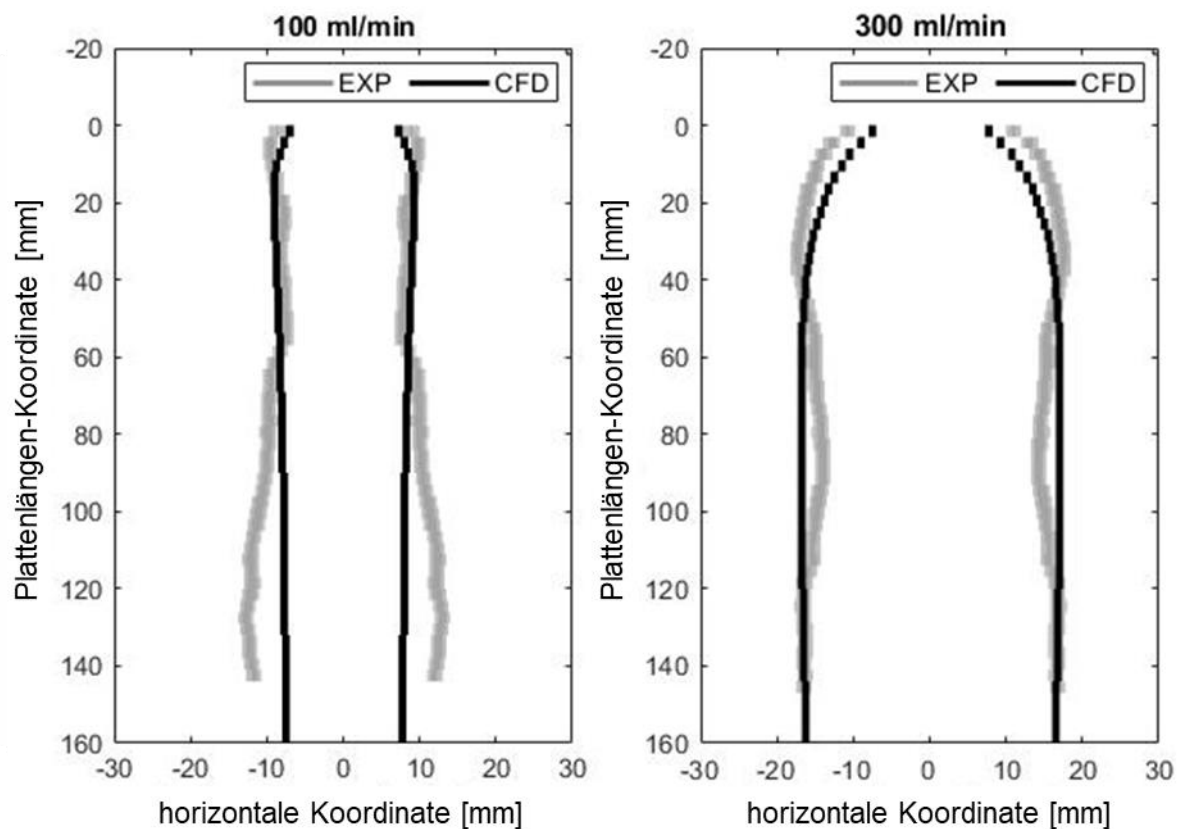


Abbildung 4.13: Verlauf der Triplelinien auf einem W-rillierten, nicht perforierten Packungsblech.

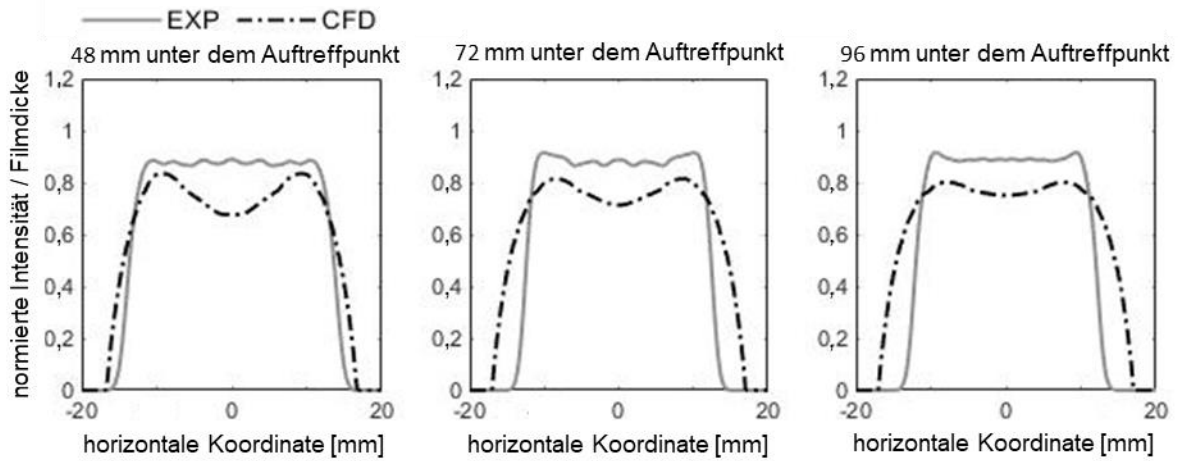


Abbildung 4.14: Normierte Intensitätsprofile für das experimentell untersuchte W-rillierte Packungsblech und normierte simulierte Flimddickenprofile ($\gamma_{eff} = 19,4^\circ$, $\dot{V}_L = 300 \text{ ml/min}$).

4.6.4 Perforiertes Packungsblech

Wie in Abbildung 4.15 gezeigt, konnte durch die Modellierung der Perforationen mittels lokaler Anpassung des Kontaktwinkels eine Strömungsmorphologie erzeugt werden, welche das experimentelle Ergebnis gut wiedergab. Für die Simulation wurden die Werte $\gamma_{Perf} = 70^\circ$ an der Stelle der Perforationen und $\gamma_B = 35^\circ$ auf der Blechoberfläche verwendet.

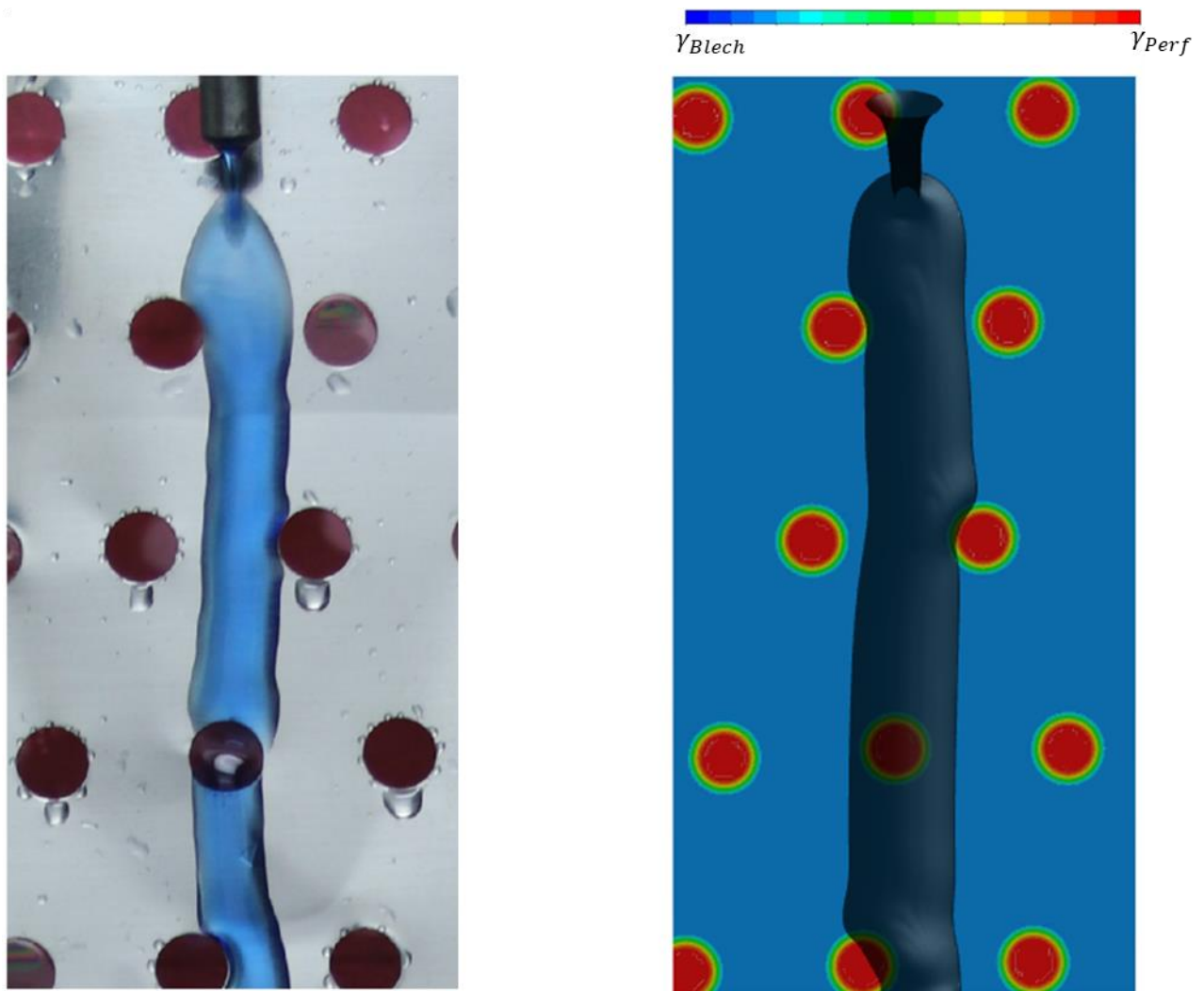


Abbildung 4.15: Strömung über ein glattes perforiertes Packungsblech. Experiment (links) und Simulationsergebnis (rechts). Die Farbskala im rechten Bild zeigt das Kontaktwinkelfeld auf dem Packungsblech. Die simulierte Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche wird in einem transparenten dunkelgrau dargestellt (die Farbskala gilt hier nicht).

4.7 Zusammenfassung

In diesem Teil der Dissertation wurde eine Methode vorgestellt, welche numerische und experimentelle Untersuchungen kombiniert, um geeignete effektive Kontaktwinkel zu ermitteln. Zunächst wurden Experimente zur Untersuchung von Strömungen über geneigte Packungsbleche beschrieben. In den Experimenten wurden Bleche mit der von der Sulzer Chemtech AG verwendeten W-Rillierung eingesetzt. Des Weiteren wurde auch ein perforiertes Packungsblech verwendet. Es wurde dann ein Verfahren erläutert mit dem die Verläufe der Triplelinien (und somit die Benetzung der Bleche) sowie Filmdickenprofile ermittelt werden konnten.

Im nächsten Schritt wurde die Reproduktion der Experimente durch CFD-Simulationen thematisiert. In den Simulationen wurde die Blechoberfläche als glatte Oberfläche angenommen. Der Kontaktwinkel an dieser Fläche wurde in einem iterativen Verfahren angepasst. In jeder Iteration wurde eine Simulation durchgeführt, die Abweichung zwischen der simulierten und der experimentell ermittelten Rinnsalbreite bestimmt und der neue Kontaktwinkelwert für die nächste Simulation basierend auf den zuvor durchgeführten Iterationsschritten approximiert. So konnten diejenigen Kontaktwinkel ermittelt werden, die die Strömungsmorphologie der jeweiligen Strömung am besten reproduzieren konnten. Dieselben Kontaktwinkelwerte wurden dann verwendet, um Strömungen mit einem Drittel der ursprünglichen Flüssigkeitsbelastung zu simulieren und erneut mit dem entsprechenden Experiment zu vergleichen.

Der Vergleich der durch Experimente und Simulationen ermittelten Triplelinien und Filmdickenprofile bestätigte, dass das Konzept der effektiven Kontaktwinkel in der Lage ist, die experimentell beobachteten Strömungsmorphologien, insbesondere was das Benetzungsverhalten betrifft, recht gut zu reproduzieren. Jedoch zeigte das im Experiment ermittelte Dickenprofil eine etwas gleichmäßigere Filmdicke als das Dickenprofil aus der Simulation.

Für die Strömung auf einem perforierten Blech konnte mittels lokal angepasster Kontaktwinkel eine gute optische Übereinstimmung zum Experiment erreicht werden. Diese einfache und robuste Methode erweitert die Anwendung effektiver Kontaktwinkel und kann auf komplexere Geometrien wie Faltblechpackungen übertragen werden.

5 Strömungen in strukturierten Packungen

In diesem Kapitel wird die gravitationsgetriebene Gas-Flüssigkeitsströmung in strukturierten Packungen thematisiert. Das Modell beinhaltet die in Kapitel 4 gewonnenen Erkenntnisse für die Berücksichtigung von Mikrostruktur und Perforationen. Zusätzlich wird eine Methode zur Erfassung des Verweilzeitverhaltens der Flüssigphase vorgestellt. Zunächst werden die Methode zur Erfassung des Verweilzeitverhaltens sowie das Rechengebiet mit den verwendeten Rand- und Anfangsbedingungen beschrieben. Es wird dann auf die Methoden zur Auswertung und Visualisierung der Simulationsergebnisse eingegangen. Die Modellvalidierung erfolgt anhand tomographischer Daten von Schug (2018) und Kögl et al. (2023). Schließlich werden Ergebnisse zu Fluidodynamik und Verweilzeiterhalten der Packungen diskutiert.

5.1 Methode zur Erfassung des Verweilzeitverhaltens

Die Verweilzeitverteilung der Flüssigphase wurde in dieser Arbeit analog zu üblichen experimentellen Methoden ermittelt. Zum Zeitpunkt t_0 erfolgte eine Tracer-Injektion in den in die Packung eintretenden Flüssigkeitsstrom. Anschließend wurde der Tracer-Massenanteil ϕ_{out} an einer definierten Position unterhalb des Injektionspunktes kontinuierlich erfasst. Für die Tracerzugabe wurde die sogenannte *Sprungmethode* angewandt, bei der der Massenanteil des Tracers am Eintritt ϕ_{in} durch folgende Funktion beschrieben wird:

$$\frac{\phi_{in}}{\phi_0} = \begin{cases} 0 & \text{für } t < t_0 \\ 1 & \text{für } t \geq t_0 \end{cases} \quad (5.1)$$

Hierbei ist ϕ_0 ein definierter konstanter Massenanteil am Ort der Tracerzugabe. Für die Erfassung der Verweilzeitverteilung wurde ϕ_{out} so lange ermittelt, bis ϕ_{out} in guter Näherung dem Wert von ϕ_0 entsprach. Es gilt bei der Sprungmethode folgender Zusammenhang zwischen ϕ_{out} und ϕ_0 (Conesa, 2020):

$$\phi_{out}(t) = \phi_0 \int_{t_0}^t E(t) dt \quad (5.2)$$

Die Funktion $E(t)$ ist die Verweilzeitverteilung (auch als Impulsantwortfunktion bezeichnet) und beschreibt die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Fluidelement, welches zum Zeitpunkt t_0 in die Packung eingetreten ist, nach der Zeitspanne $\Delta t = t - t_0$ den Austritt erreicht.

Aus Gleichung (5.2) folgt:

$$E(t) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi_{out}(t)}{\phi_0} \right) \quad (5.3)$$

Die mittlere Verweilzeit τ , die die Fluidelemente durchschnittlich innerhalb der Packung verbringen, ist folgendermaßen definiert (Hertwig et al., 2018):

$$\tau = \int_{t_0}^{\infty} E(t) t dt \quad (5.4)$$

Mit Hilfe der Gleichungen (5.3) und (5.4) können Verweilzeitverteilung und mittlere Verweilzeit direkt aus dem Verlauf von $\phi_{out}(t)$ ermittelt werden.

5.2 Rechengebiet, Rand- und Anfangsbedingungen

Die Sulzer Mellapak™ 250.Y und 500.Y Packungen sind typische Vertreter der in Abschnitt 2.2 beschriebenen Faltblechpackungen. Die Packungsgeometrie und der Querschnitt der durch die Faltungen gebildeten Packungskanäle mit der Breite B_{PK} und der Höhe H_{PK} sind in Abbildung 5.1 dargestellt. R_{PK} ist der Kantenradius und β der Winkel der Packungskanäle zur Horizontalen. Die Werte dieser Parameter sind in Tabelle 5.1 für beide untersuchten Packungen angegeben. Die Perforationen haben feste Abstände zueinander; diese sind unabhängig vom Packungstyp. Die Position der Perforationen relativ zu den Faltungen der Packung ist unregelmäßig.

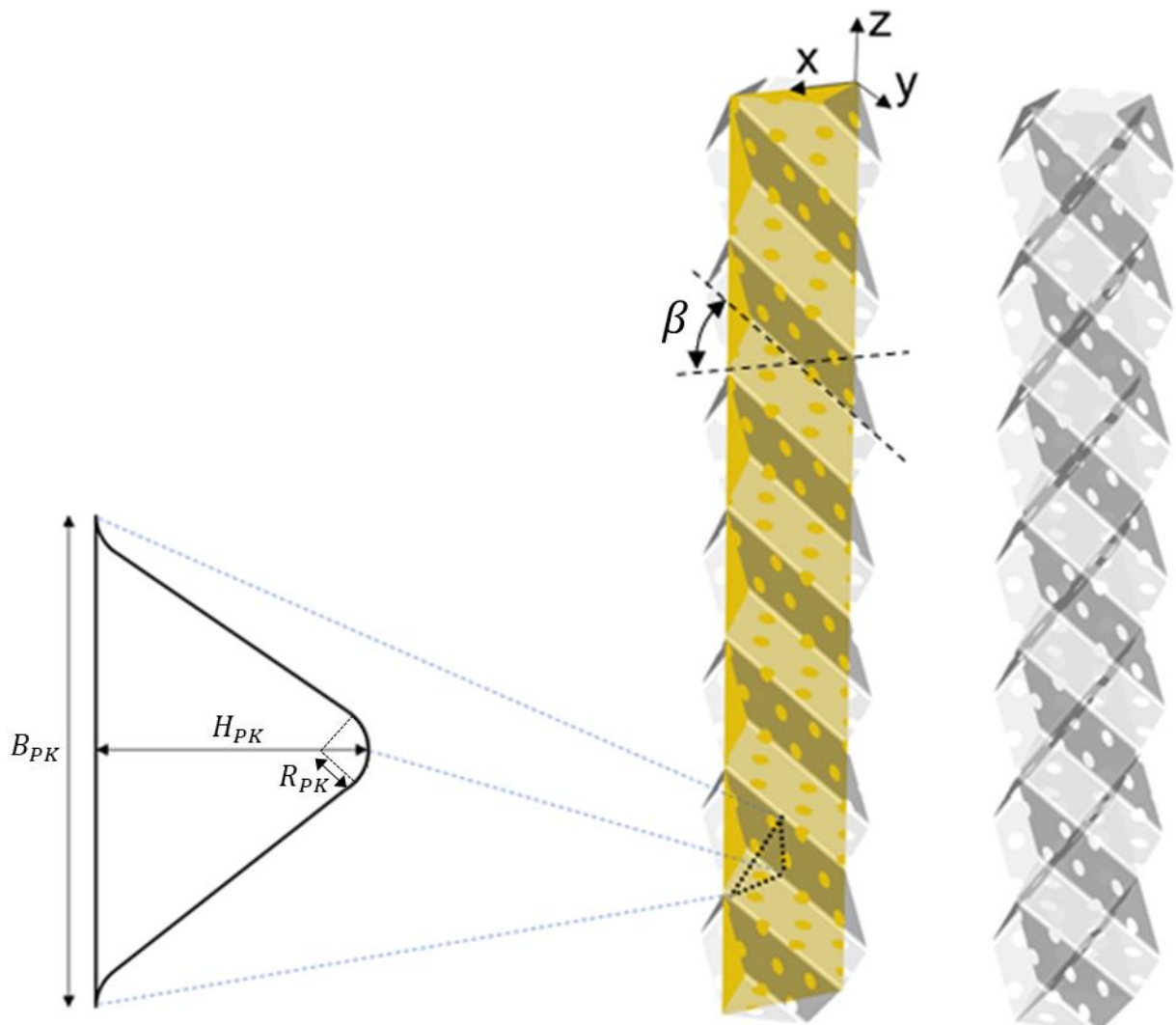


Abbildung 5.1: Kanalquerschnitt (links), Packungssegment (7 REUs) mit Schnittebene (Mitte), Packungssegment ohne Schnittebene (rechts). Die Packungslagen sind in transparentem Grau dargestellt, die orange Schnittebene wird zur Visualisierung der Ergebnisse genutzt.

Tabelle 5.1. Geometrieparameter der Packungskanäle (abgeleitet von Sulzer Mellapak™ Packungen).

Packung	B_{PK} [mm]	H_{PK} [mm]	R_{PK} [mm]	β [°]
250.Y	22,5	12,1	2	45
500.Y	11,25	6,05	1	45

Die Rechengebiete werden durch den Zwischenraum zweier benachbarter Packungsbleche definiert. Die Größe der Rechengebiete entspricht sieben REUs der jeweiligen Packungen. Dies führt zu einer Gesamthöhe von 22,2 cm für die 250.Y-Packung. Die 500.Y-Packung hat eine Höhe von 11,1 cm. Dieser Unterschied ist darauf zurückzuführen, dass ein REU der 500.Y-Packung halb so hoch ist, wie ein REU der 250.Y-Packung. Es wird in Abschnitt 5.3 gezeigt, dass die Berücksichtigung von zusätzlichen REUs keine signifikante Veränderung im spezifischen Holdup und der effektiven Phasengrenzfläche mit sich bringt.

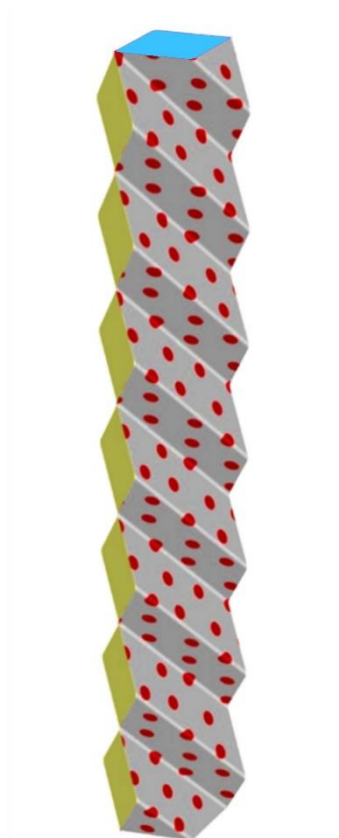


Abbildung 5.2: Rechengebiet. Die Farben entsprechen den Randbedingungen gemäß Tabelle 5.2.

Tabelle 5.2: Randbedingungen.

Bezeichnung	Formulierung	Beschreibung
Eintritt (blau)	$\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, y)$ $\alpha_L = \alpha_L(x, y)$	Profile für \mathbf{u} und α_L gemäß Tabelle 5.3
Seiten (gelb)	periodisch gekoppelt	Übertragung der Werte von einer Seite des Rechengebiets zur anderen
Packungsbleche (grau)	$\mathbf{u} = 0$	$\gamma = \gamma_{eff}$
Perforationen (rot)	$\mathbf{u} = 0$	$\gamma = \gamma_{Perf}$
Austritt (unten, nicht sichtbar)	$p = 1 \text{ bar}$	-

In Tabelle 5.2 sind die verwendeten Randbedingungen beschrieben (die angegebenen Farben dienen der Zuordnung der Randbedingungen zu den Randflächen des in Abbildung 5.2 gezeigten Rechengebiets).

Am Einlass werden Profile für Geschwindigkeit und Flüssigkeitsvolumenanteil verwendet (vgl. Tabelle 5.3 und Abbildung 5.3). Das Profil des Flüssigkeitsvolumenanteils ist so definiert, dass auf den Packungsblechen ein Flüssigkeitsfilm mit einer konstanten Dicke von 1 mm vorliegt (d.h. der Abstand der Phasengrenzfläche zum Packungsblech beträgt $d_{Film}^* = 1 \text{ mm}$). Die Geschwindigkeit im Film ist konstant ($v = v_{Film}$) und wird angepasst, wenn unterschiedliche Flüssigkeitsbelastungen untersucht werden.

Es gilt:

$$v_{Film} = \frac{\dot{V}_{L,P}}{A_{Q,Film}} = \frac{u_L A_{Q,P}}{A_{Q,Film}} \quad (5.5)$$

Mit dem in die Packung eintretenden Flüssigkeitsvolumenstrom $\dot{V}_{L,P}$, der Querschnittsfläche des eintretenden Flüssigkeitsfilms $A_{Q,Film}$ (Abbildung 5.3 (links), roter Teil der Fläche) und der Querschnittsfläche der Packung $A_{Q,P}$ (gesamte in Abbildung 5.3 (links) dargestellte Fläche).

Außerhalb des Flüssigkeitsfilms nimmt die Geschwindigkeit kontinuierlich bis zum Wert null ab. Der fließende Übergang von v_{Film} zu null in der an den Flüssigkeitsfilm

angrenzenden Gasphase wurde implementiert, um eine abrupte Änderung des Geschwindigkeitsfeldes (und somit gemäß Gleichung (3.2) hohe Scherkräfte) an der Phasengrenzfläche zu vermeiden. Die Geschwindigkeit nimmt entsprechend der Gleichungen in Tabelle 5.3 über einen Abstand von 1 mm ab.

Tabelle 5.3: Profile für Eintrittsgeschwindigkeit und Flüssigkeitsvolumenanteil.

Abstand zum Packungsblech d^*	Eintrittsgeschwindigkeit v	α_L
$d^* \leq d_{Film}^*$	$v = v_{Film}$	1
$d_{Film}^* < d^* \leq 2d_{Film}^*$	$v = -\frac{v_{Film}}{3 d_{Film}^{*2}} d^{*2} + \frac{4}{3} v_{Film}$	0
$d^* > 2d_{Film}^*$	$v = 0$	0

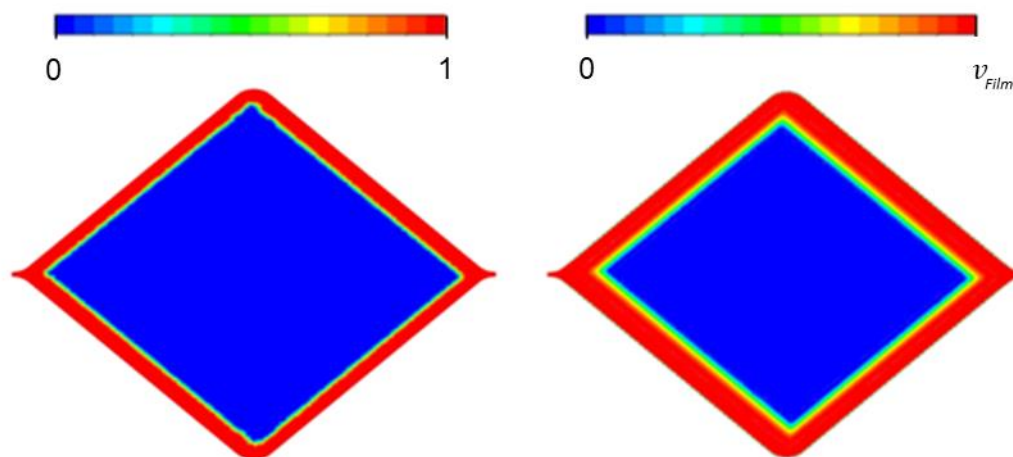


Abbildung 5.3: Am Eintritt verwendete Profile. Flüssigkeits-Volumenanteil (links), Geschwindigkeit normal zum Eintritt (rechts).

Tabelle 5.4: Flüssigkeitseigenschaften und verwendete Kontaktwinkel.

Flüssigkeit	σ [mN/m]	ρ [kg/m ³]	η [mPas]	γ_{eff} [°]	γ_{Perf} [°]
Wasser-TEG-Mischung	38,7	1021,2	8,6	19,4	70
Wasser	73	1000,0	1,0	8	100

Tabelle 5.4 führt die Flüssigkeitseigenschaften, die zur Berücksichtigung der Mikrostruktur verwendeten Kontaktwinkelwerte γ_{eff} und die zur Modellierung der Perforationen verwendeten Kontaktwinkelwerte γ_{Perf} für beide Flüssigkeiten auf.

Für den Massenanteil des Tracers ϕ wurde eine Dirichlet-Randbedingung auf der Höhe von $z = -16,1$ mm verwendet, was dem Beginn des zweiten REUs in der 500.Y-Packung entspricht.

Die Aufgabe des Tracers erfolgte unterhalb des ersten REUs der 500.Y-Packung (vgl. Abbildung 5.4). An dieser Stelle wurde ein konstanter Wert $\phi = \phi_{in}$ definiert. Die örtliche Trennung der Tracer-Aufgabe vom Flüssigkeitseintritt wurde vorgenommen, um den Tracer-Transport in einer ausgebildeten Strömung zu untersuchen. (Im ersten REU unterhalb des Eintritts treten Einlaufeffekte auf, vgl. Abschnitt 5.3). Des Weiteren ist der Tracer-Fluss normal zu den Packungsblechen null.

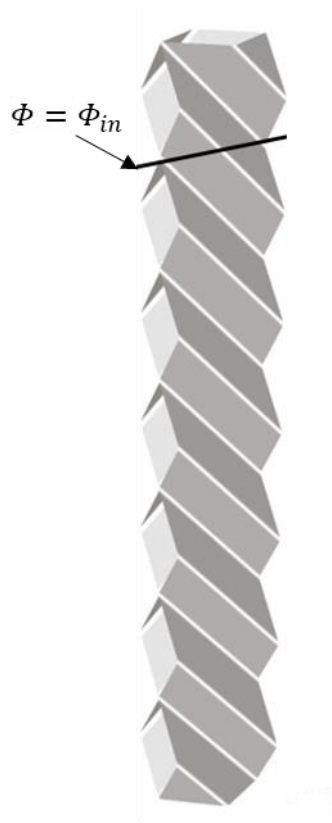


Abbildung 5.4: Visualisierung der Tracer-Aufgabe.

Bei der Initialisierung sind die Geschwindigkeit und der Tracer-Massenanteil im gesamten Rechengebiet null und der Druck entspricht dem Umgebungsdruck. In industriellen Anwendungen werden Packungskolonnen beim Anfahren von Trennprozessen häufig vorbenetzt. Dieser Vorbenetzung wird in den Simulationen entsprochen, indem die Lösung mit einem Flüssigkeits-Volumenanteil von $\alpha_L = 1$ im

gesamten Rechengebiet initialisiert wird (d.h. die Packung ist zu Beginn der Simulationen vollständig geflutet).

Die Gittereinstellungen wurden anhand von Unabhängigkeitsstudien ermittelt. Mit Wasser wurde ein Polyedergitter mit 5 Millionen Zellen verwendet, um gitterunabhängige Ergebnisse zu erzielen. Aufgrund der höheren Viskosität und der damit einhergehenden geringeren Geschwindigkeitsgradienten benötigte das Wasser/TEG-Gemisch weniger Zellen und die Strömung konnte mit 1,6 Millionen Zellen simuliert werden.

5.3 Auswertungsmethode

Die Lage und Größe der Phasengrenzfläche wurde durch die Isofläche bei $\alpha_L = 0,5$ bestimmt, welche auch für die Visualisierung der Strömungsmorphologie verwendet wird.

Am Eintritt wurde eine geschlossene Filmströmung angenommen (vgl. Abbildung 5.3), d.h. die Strömungsverhältnisse wurden an dieser Stelle idealisiert. Dies führt zu Einlaufeffekten, die die Simulationsergebnisse beeinflussen können. Um diese Effekte zu quantifizieren, wurden die spezifische Phasengrenzfläche und der Holdup für drei verschiedene Teile des Rechengebiets bestimmt und verglichen: Für das gesamte Rechengebiet, für das Rechengebiet abzüglich des ersten REUs unterhalb des Eintritts und schließlich für das Rechengebiet ohne die ersten drei REUs unterhalb des Eintritts. Abbildung 5.5 veranschaulicht die verschiedenen Teile des Rechengebiets, die für die drei Fälle in Betracht gezogen wurden.

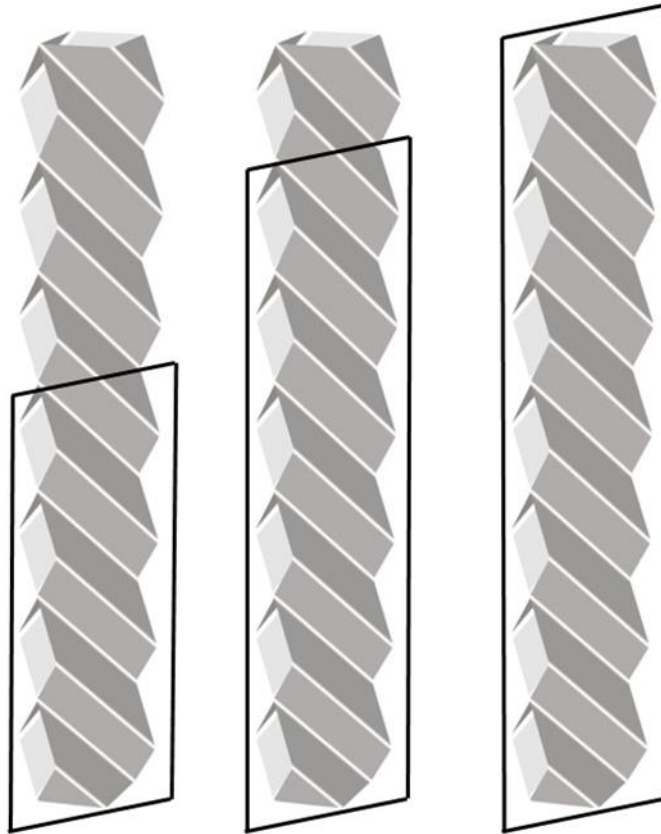


Abbildung 5.5: Teile des Rechenbereichs, die für die Studie zur Quantifizierung von Einlaufeffekten berücksichtigt wurden. Die schwarzen Linien kennzeichnen die ausgewerteten Bereiche. Rechengebiet ohne die obersten drei REUs (links), Rechengebiet ohne das oberste REU (Mitte), gesamtes Rechengebiet (rechts).

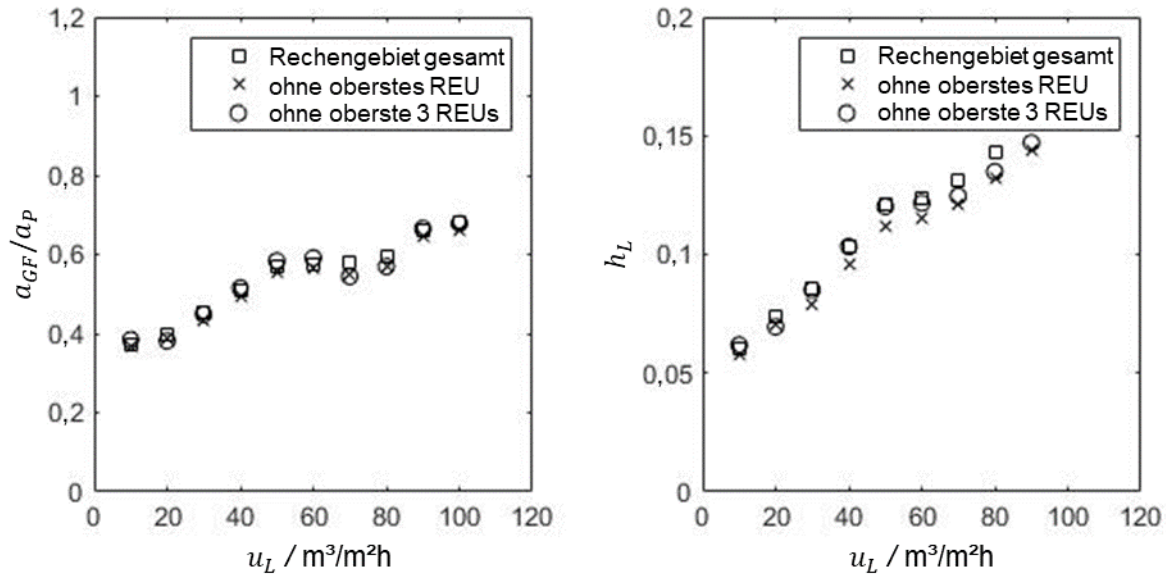


Abbildung 5.6: Quantifizierung der Einlaufeffekte für die 500.Y-Packung mit Wasser. Relative Benetzung (links), Holdup (rechts).

Die Unterschiede zwischen den Ergebnissen der drei Auswertungsmethoden sind als geringfügig zu bezeichnen (vgl. Abbildung 5.6). Für das gesamte Rechengebiet werden etwas höhere Holdup-Werte ermittelt als für die beiden anderen Fälle. Dies deutet darauf hin, dass im oberen Teil der Packung Einlaufeffekte zu einem überdurchschnittlichen Holdup führen, welcher im Bereich des ersten REU am stärksten ausgeprägt ist. Daher wird dieses REU im weiteren Verlauf der Arbeit von der Datenauswertung ausgeschlossen.

Aufgrund der Komplexität der untersuchten Strömungsmorphologien ist die Visualisierung der Ergebnisse nicht trivial. Zum besseren Verständnis zeigt Abbildung 5.7 ein Beispiel, bei dem die Morphologie der Flüssigkeitsströmung und die Packungsbleche aus unterschiedlichen Perspektiven zu sehen sind.

Im mittleren Teil von Abbildung 5.7 sind die Topologie der Flüssigphase und die Packungsbleche in einer isometrischen Ansicht gezeigt. Das Packungsblech im Vordergrund versperrt die Sicht auf einen großen Teil der Strömung im Inneren der Packung. Abhilfe kann eine Schnittansicht wie in Abbildung 5.7 (rechts) schaffen. Hier ist nur die Strömung in dem Bereich dargestellt, der hinter der in Abbildung 5.7 (Mitte) gezeigten Schnittebene liegt. Im weiteren Verlauf der Arbeit werden die Ergebnisse analog zu Abbildung 5.7 (rechts) dargestellt.

In Abbildung 5.7 (links) ist zu sehen, dass die Flüssigkeit Kapillarbrücken zwischen den Packungsblechen bildet. Solche Brücken sind in Abbildung 5.7 (rechts) schwarz visualisiert. Die schwarze Farbe wurde gewählt, da die Filmdicke im Inneren der Flüssigphase nicht definiert ist und die Farbskala dort somit nicht angewendet werden kann. Im linken und mittleren Teil von Abbildung 5.7 zeigen die schwarzen Bereiche ebenfalls den Kernbereich der Flüssigphase.

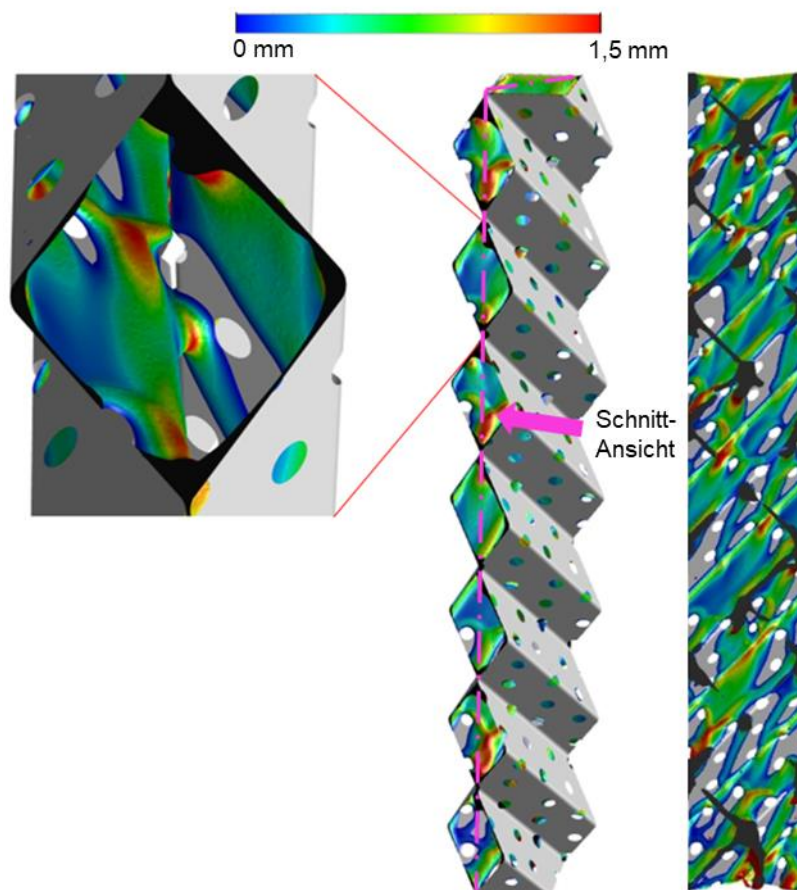


Abbildung 5.7: Beispiel für die Visualisierung der Strömungsmorphologie anhand der 250.Y-Packung: Seitenansicht des zweiten REUs (links), isometrische Ansicht der gesamten Packung (Mitte), Schnittansicht mit nur einem sichtbaren Packungsblech (rechts). Die magentafarbenen Linien zeigen die Kanten der Schnittebene und der Pfeil die Perspektive, aus der die Schnittansicht gezeigt wird. Die Farbskala zeigt die Filmdicke, der Kern der Flüssigphase ist schwarz dargestellt.

5.4 Modellvalidierung

Die zur Validierung des Fluidodynamik-Modells genutzten Daten (Schug, 2018) wurden mittels hochauflösender CT-Messungen ermittelt. Für die Validierung des Tracer-Transportmodells wurden weitere CT-Daten von Kögl et al. (2023) verwendet. Die Messungen beider Arbeiten wurden in derselben Kolonne und mit derselben Packung (Mellapak™ 500.Y, W-rilliert und perforiert) mit Hilfe eines Computertomographen der Universität Erlangen durchgeführt. Abbildung 5.8 zeigt die Kolonne mit den Messtellen, an denen der Tracer-Massenanteil ermittelt wurde. Die Kolonne hatte einen Innendurchmesser von 10 cm, eine Höhe von 1 m und wurde mit Wasser und Luft bei stagnierender Gasphase betrieben.

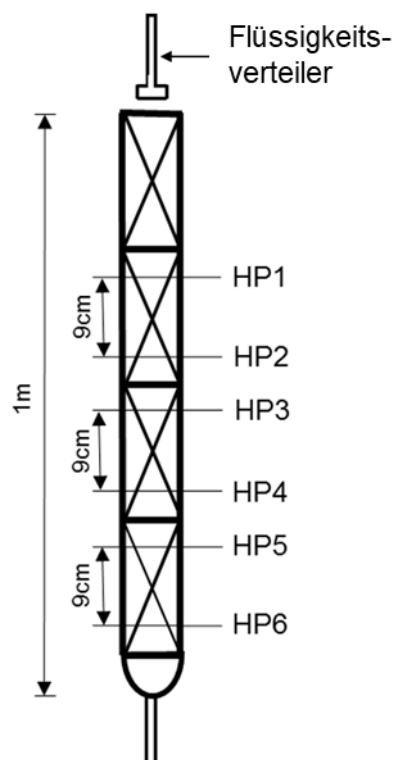


Abbildung 5.8: Experimenteller Aufbau für tomographische Messungen nach Kögl et al. (2023).

5.4.1 Fluidodynamik

Zunächst wurden drei verschiedene Simulationen durchgeführt, alle mit der Packung des Typs 500.Y, Wasser als Flüssigphase und einer Flüssigkeitsbelastung von $u_L = 28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. Die erste Simulation wurde mit einer nicht perforierten Packung und einem konstanten Kontaktwinkel von $\gamma = 70^\circ$ durchgeführt. Dies entspricht dem Kontaktwinkel von Wasser auf glatten Edelstahloberflächen. In der zweiten Simulation wurde der Kontaktwinkel $\gamma_{eff} = 8^\circ$ genutzt. Dieser effektive Kontaktwinkel wurde für Wasser auf einer W-rillierten Packungsoberfläche mit dem in Kapitel 4 beschriebenen Vorgehen bestimmt. Perforationen wurden bei dieser Simulation noch nicht berücksichtigt. In der dritten Simulation wurde ein Kontaktwinkelprofil mit $\gamma_{eff} = 8^\circ$ und $\gamma_{perf} = 100^\circ$ angewandt, um neben der Mikrostruktur auch Perforationen zu berücksichtigen. Der Wert für γ_{perf} wurde mit dem in Abschnitt 4.5 beschriebenen Verfahren ermittelt. Abbildung 5.9 zeigt die Strömungsmorphologien, die sich aus den drei Simulationen ergaben, die zugehörigen Werte für effektive Grenzfläche und Holdup sind in Tabelle 5.5 aufgelistet. Ein reduzierter Kontaktwinkel von 8° statt 70° beeinflusste die Strömung deutlich. In der unteren Hälfte der nicht perforierten Packung mit $\gamma = 70^\circ$ bildeten sich Flüssigkeitstropfen (vgl. Abbildung 5.9, links), während bei Verwendung von $\gamma_{eff} = 8^\circ$ die Rinnsale innerhalb der Packungskanäle stabil blieben und keine Tropfenbildung erfolgte (vgl. Abbildung 5.9, Mitte). Letztere Strömungsform wurde auch in der Arbeit von Olenberg (2021), in der nicht perforierte Packungen mittels CFD-Methoden untersucht wurden, gefunden. Mit $\gamma_{eff} = 8^\circ$ wurde im Vergleich zu den Ergebnissen mit $\gamma = 70^\circ$ sowohl ein erhöhter Holdup (24%) als auch eine Steigerung der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche (115%) ermittelt. Dies ist auf die oben beschriebenen Unterschiede der Strömungsmorphologien zurückzuführen.

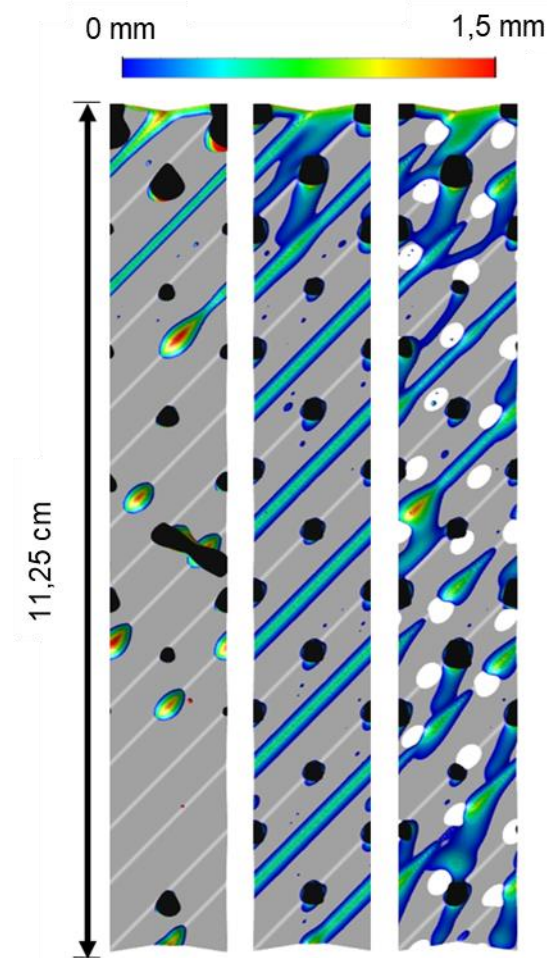


Abbildung 5.9: Strömungsmorphologie in der 500.Y-Packung. Nicht perforierte Packung mit $\gamma = 70^\circ$ (links), nicht perforierte Packung mit $\gamma_{eff} = 8^\circ$ (Mitte), perforierte Packung mit $\gamma_{eff} = 8^\circ$ und $\gamma_{perf} = 100^\circ$ (rechts). Die Farbskala zeigt die Filmdicke auf der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche, der Kern der Flüssigphase ist schwarz dargestellt.

Tabelle 5.5: Effektive Phasengrenzfläche und Holdup (500.Y-Packung mit Wasser).

Beschreibung	a_{GF}/a_P	h_L
nicht perforiert, $\gamma = 70^\circ$	0,122	0,042
nicht perforiert, $\gamma_{eff} = 8^\circ$	0,262	0,052
perforiert, $\gamma_{eff} = 8^\circ$, $\gamma_{perf} = 100^\circ$	0,419	0,073
perforiert, W-rilliert (Schug, 2018)	0,521	0,086

Durch die Wirkung der Perforationen erhöhten sich der Holdup und die Größe der Phasengrenzfläche erheblich. Wie in Abbildung 5.9 (rechts) zu sehen ist, lenkten die Perforationen die Rinnsale um und beeinflussten so den Strömungsweg signifikant. Dies führte zu einer verringerten mittleren Strömungsgeschwindigkeit und erhöhte den Holdup um 20%. Durch die Bildung zusätzlicher Rinnsale vergrößerte sich die Grenzfläche um 60% gegenüber der ungelochten Packung.

Tabelle 5.5 zeigt, dass alle CFD-Ergebnisse die benetzte Fläche und den Holdup im Vergleich zu den CT-Daten von Schug (2018) unterschätzten. Die beste Übereinstimmung zwischen CFD-Ergebnissen und CT-Daten ergab sich erwartungsgemäß bei Anwendung des effektiven Kontaktwinkels ($\gamma_{eff} = 8^\circ$) zusammen mit dem Kontaktwinkelprofil zur Berücksichtigung der Perforationen ($\gamma_{Perf} = 100^\circ$).

Aus den Ergebnissen lässt sich schließen, dass Perforationen im Modell berücksichtigt werden sollten, da sie die Strömungsmorphologie verändern und einen starken Einfluss auf die effektive Phasengrenzfläche und den Holdup haben. Andernfalls ist keine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten zu erwarten. Die präsentierten Ergebnisse bestätigen die Erkenntnisse von Singh et al. (2017) und Olenberg und Kenig (2020), dass die Wahl des effektiven Kontaktwinkels einen signifikanten Einfluss auf die Strömungsmorphologie, den Holdup und die Phasengrenzfläche hat.

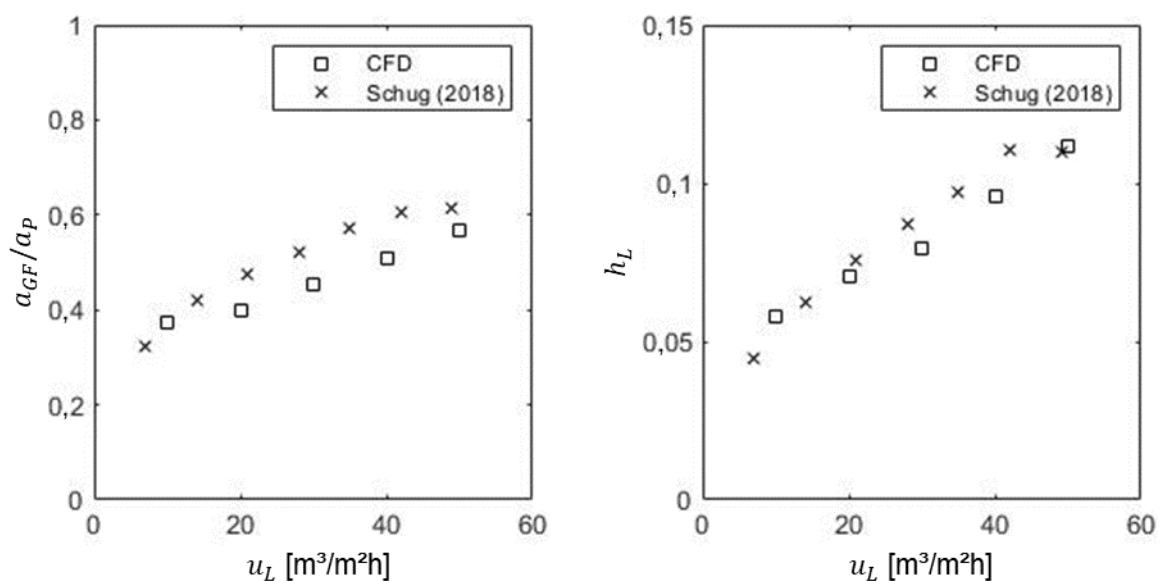


Abbildung 5.10: CFD-Ergebnisse dieser Arbeit und CT-Daten von Schug, 2018 für die 500.Y-Packung mit Wasser: Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche (links), Holdup (rechts).

Unter Berücksichtigung der oben diskutierten Ergebnisse wurden alle weiteren Simulationen unter Verwendung von Kontaktwinkelprofilen mit den in Tabelle 5.4 angegebenen Werten für γ_{eff} und γ_{perf} durchgeführt. Wie in Abbildung 5.10 zu sehen ist, stimmten die CFD-Ergebnisse und die experimentellen Daten sowohl für die effektive Grenzfläche als auch für den Holdup bei Variation der Flüssigkeitsbelastung weiterhin gut überein. Die Tendenz, dass die CFD-Simulationen die benetzte Fläche in der Packung unterschätzten, blieb bestehen. Dies könnte ein Hinweis darauf sein, dass der angewandte effektive Kontaktwinkel etwas zu hoch war. Weitere Fehlerquellen sind die idealisierten Einlaufbedingungen (vgl. Abbildung 5.3) und die periodischen Randbedingungen an den Seiten des Rechengebiets, die eine unendliche Ausdehnung der Kolonne in x -Richtung implizieren (d.h. Wandeffekte wurden vernachlässigt). Darüber hinaus zeigten tomographische Messungen einen erhöhten Holdup an den Übergängen zwischen Packungssegmenten (z. B. Suess und Spiegel, 1992, Green et al., 2007, Basden et al., 2013). Da die Übergänge nicht Teil des Rechengebiets waren, konnte dieser Effekt durch die CFD-Simulationen nicht reproduziert werden.

5.4.2 Tracer-Transport

In den Experimenten von Kögl et al. (2023) wurde der Tracer oberhalb des Flüssigkeitsverteilers injiziert. Die Tracer-Injektion an dieser Stelle kann durch Gleichung (5.1) beschrieben werden. Jedoch wären CFD-Simulationen der Strömung vom Aufgabepunkt, durch den Flüssigkeitsverteiler, bis hin zur ersten Messstelle HP1 (vgl. Abbildung 5.8) nur unter enormem Aufwand durchführbar. Das benötigte Rechengebiet wäre sehr groß, es müsste mehrere Packungssegmente und den Flüssigkeitsverteiler umfassen. Stattdessen wurden die experimentell erfassten Profile der Messstellen HP1, HP3 und HP5 als zeitabhängige Tracer-Eintrittsbedingungen in drei Simulationen verwendet, die im Folgenden als CFD1 bis CFD3 bezeichnet werden. Das am Ort HP1 gemessene Profil wurde als Tracer-Eintrittsbedingung für CFD1, das Profil bei HP3 als Eintrittsbedingung für CFD2 und das Profil bei HP5 als Eintrittsbedingung für CFD3 verwendet. Der Abstand zwischen HP1 und HP2 entsprach auch dem Abstand zwischen Injektionspunkt und Messort des Tracer-Massenanteils in CFD1. Dies ermöglichte einen Eins-zu-eins-Vergleich der CFD-Ergebnisse mit den CT-Daten. Da die Messpunkte HP1 und HP2, HP3 und HP4 sowie HP5 und HP6 paarweise gleiche Abstände zueinander aufweisen, konnte das gleiche Verfahren für CFD2 (mit den gemessenen Profilen bei HP3 und HP4) und CFD3 (mit den gemessenen Profilen bei HP5 und HP6) angewendet werden.

Abbildung 5.11 zeigt die experimentellen und die simulierten Tracer-Profile. Experimentelle Kurven wurden hier analog zu den entsprechenden Messstellen HP1-HP6 benannt. Die Kurven ϕ_1 bis ϕ_3 sind die Massenanteile des passiven Skalars aus CFD1-CFD3 am Messort. Im Idealfall sollten die Kurven ϕ_1 und HP2, ϕ_2 und HP4 sowie ϕ_3 und HP6 deckungsgleich verlaufen. Da die Profile an den Positionen HP1, HP3 und HP5 als Randbedingungen für die CFD-Simulationen verwendet wurden, sind die zugehörigen Kurven für Experiment und Simulationen identisch.

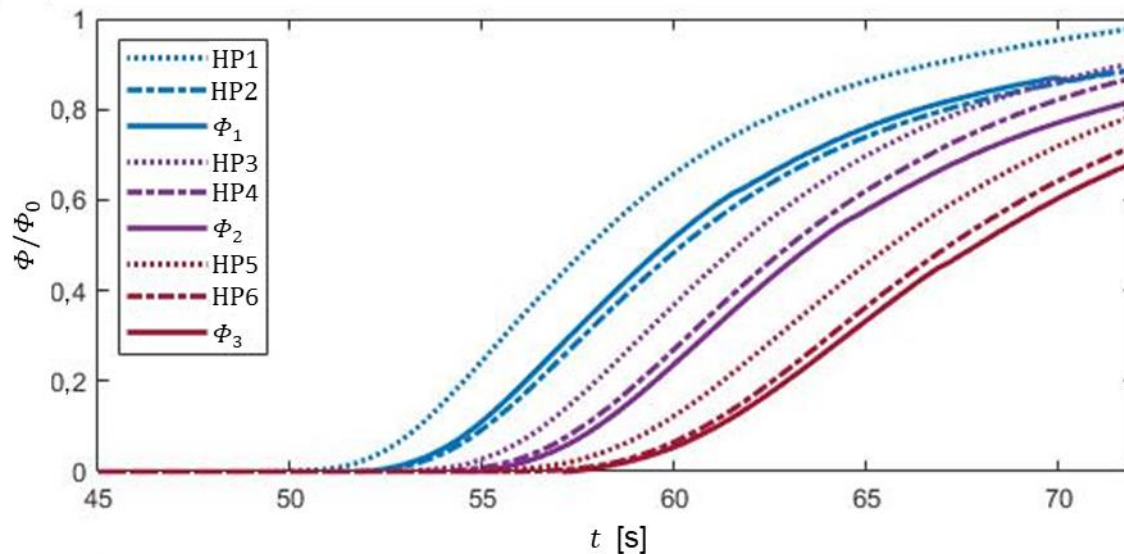


Abbildung 5.11: Tracer-Profil in der 500.Y-Packung. Tomographische Messungen von Kögl et al. (2023) sind entsprechend der in Abbildung 5.8 gezeigten Messtellen mit HP1 bis HP6 benannt. In den CFD-Simulationen wurden die experimentell ermittelten Profile an den Stellen HP1, HP3 und HP5 als Tracer-Einlassbedingung verwendet.

Das aus CFD1 erhaltene Tracer-Profil ist im Vergleich zum bei HP2 gemessenen Profil leicht nach links verschoben. Dies deutet darauf hin, dass die Abwärtsbewegung des Tracers entlang der Kolonnenachse in der Simulation schneller war als im Experiment. Die aus CFD2 und CFD3 gewonnenen Tracer-Profile zeigen im Vergleich mit HP4 und HP6 jedoch den gegenteiligen Trend.

Es ist wichtig zu betonen, dass die Strömungsbedingungen in den drei Simulationen identisch waren (der einzige Unterschied zwischen den Simulationen CFD1-CFD3 waren die Tracer-Einlassbedingungen, welche die Strömung nicht beeinflussen). Dass die CFD-Simulationen in einem Fall die Geschwindigkeit des Tracer-Transports überschätzen und in den beiden anderen Fällen unterschätzen, lässt sich daher nur durch leicht unterschiedliche Strömungsverhältnisse in den drei verschiedenen Packungsabschnitten erklären, die im Experiment untersucht wurden.

Es sollte auch berücksichtigt werden, dass der Kolonnendurchmesser im Experiment sehr klein war. Die Tracer-Verteilungen wurden daher wahrscheinlich durch Wandeffekte beeinflusst. Es ist zu erwarten, dass dieser Einfluss mit zunehmender Entfernung zum Flüssigkeitsverteiler zunimmt.

5.5 Untersuchungen der Fluidodynamik und des Verweilzeitverhaltens

5.5.1 Einflüsse von Packungsgeometrie und Flüssigkeitseigenschaften auf die Fluidodynamik

Abbildung 5.12 zeigt die relative Benetzung und den Holdup, welche aus den Simulationen mit Wasser ermittelt wurden. Die entsprechenden Ergebnisse für das Wasser-TEG-Gemisch sind in Abbildung 5.13 dargestellt.

Die 500.Y-Packung weist allgemein ein schlechteres Benetzungsverhalten auf als die 250.Y-Packung. Dies bedeutet, dass die Größe der spezifischen Phasengrenzfläche nicht direkt proportional zur Größe der spezifischen Packungsoberfläche wächst. Dieses Phänomen ist auch aus früheren Studien bekannt, z.B. Wehrli et al. (2018), Olujić et al. (2004) und Tsai et al. (2011). Der Holdup ist für die Packung des Typs 500.Y erheblich höher, was auch durch Korrelationen (z.B. Máckowiak, 2010) vorhergesagt wird.

Besonders bei der 500.Y-Packung führen die höhere Viskosität und geringere Oberflächenspannung des Wasser-TEG-Gemisches im Vergleich zu reinem Wasser zu einer Erhöhung der benetzten Fläche und einem größeren Holdup. Beide Effekte waren so zu erwarten: Die Oberflächenspannung wirkt als Widerstand gegen die Bildung einer größeren Phasengrenzfläche und daher fördert eine niedrigere Oberflächenspannung die Benetzung. Eine höhere Viskosität führt zu einer stärkeren Reibung in der Strömung, wodurch sich die mittlere Geschwindigkeit der Flüssigkeit verringert. In der Folge wächst die mittlere Filmdicke (vgl. Abbildung 5.14).

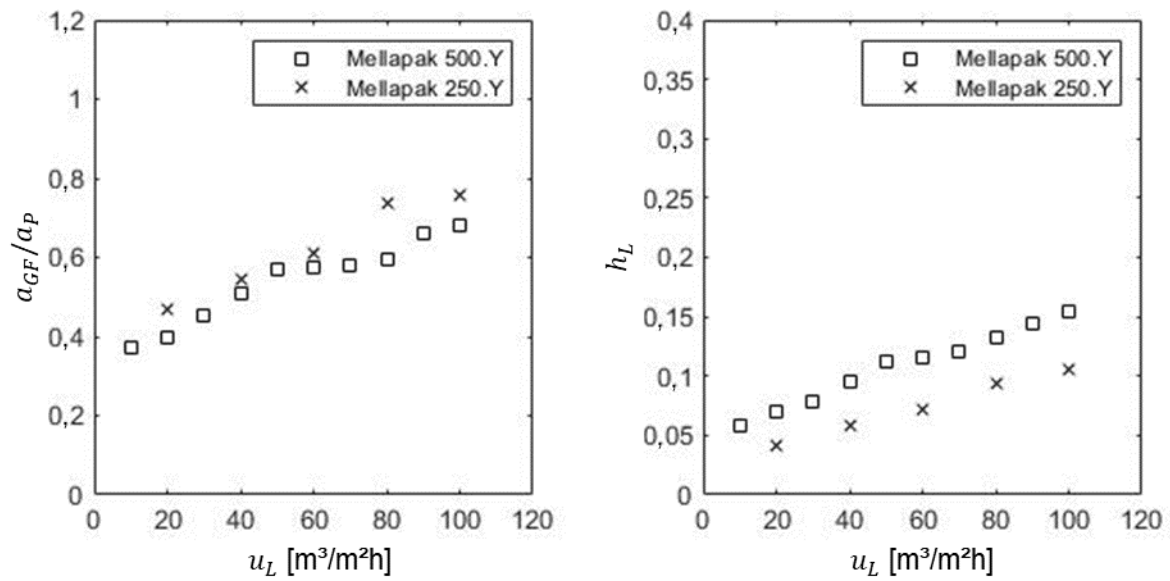


Abbildung 5.12: Ergebnisse der CFD-Simulationen mit Wasser. Effektive Phasengrenzfläche (links), Holdup (rechts).

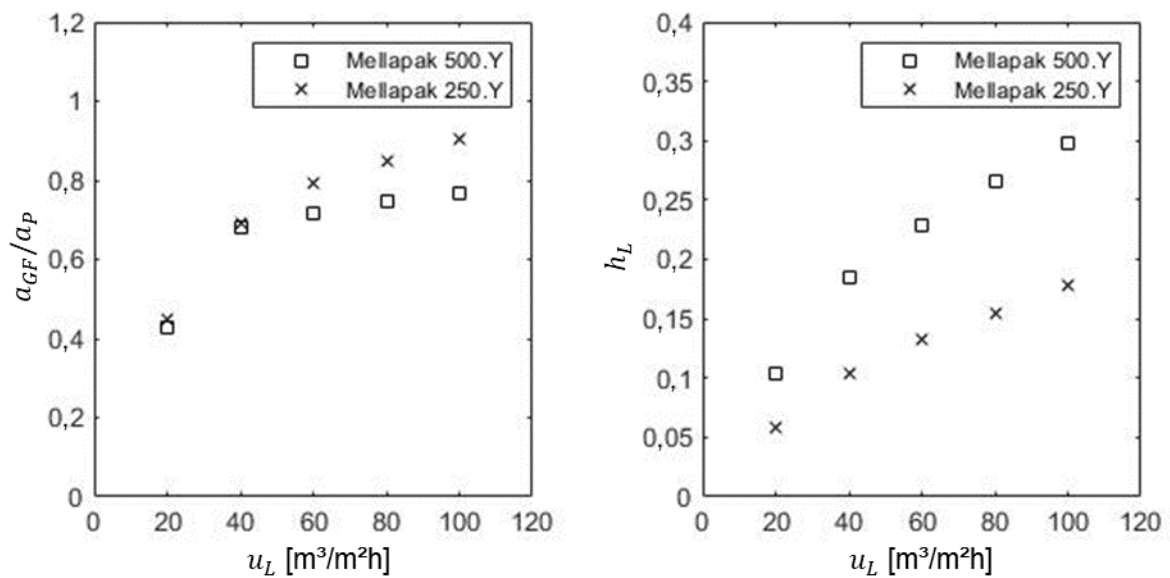


Abbildung 5.13: Ergebnisse der CFD-Simulationen mit Wasser-TEG-Gemisch. Effektive Phasengrenzfläche (links), Holdup (rechts).

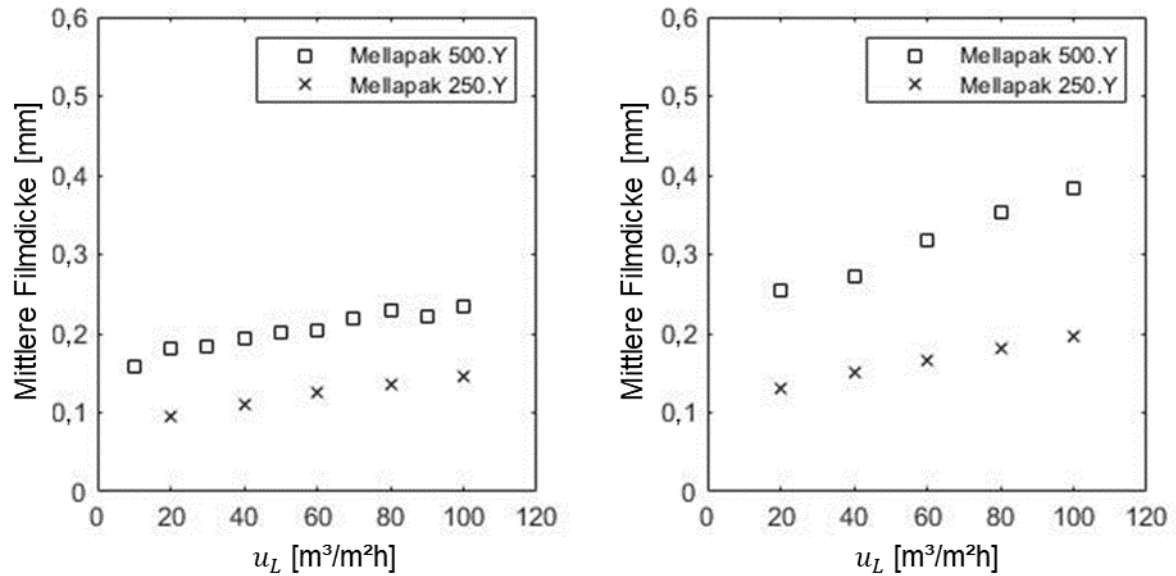


Abbildung 5.14: Durch CFD-Simulationen bestimmte mittlere Filmdicke. Wasser (links), Wasser-TEG-Gemisch (rechts).

Die Abbildungen 5.15 und 5.16 zeigen die in den Packungen vorliegenden Strömungsmorphologien. In beiden Geometrien entwickelte sich die vorherrschende Strömungsform von kleinen Rinnsalen bei geringen Flüssigkeitsbelastungen zu größeren Rinnsalen und Filmströmungen bei hohen Flüssigkeitsbelastungen. In allen Simulationen bildeten sich Flüssigkeitsbrücken an den Kontaktpunkten zwischen den Blechen. Aufgrund des periodischen Aufbaus der Packung hatten die Kontaktpunkte mit den Flüssigkeitsbrücken gleichmäßige Abstände zueinander. Die Brücken bildeten sich kurz nach der Initialisierung, bei der die Packung vollständig geflutet war. Der größte Teil der Flüssigkeit verließ dann infolge der Gravitation in kurzer Zeit das Rechengebiet. Durch Kapillarkräfte blieb die Flüssigkeit an den Kontaktstellen zurück und bildete dort die Flüssigkeitsbrücken. Die Abbildungen 5.15 und 5.16 zeigen auch, dass die Perforationen und die Kontaktpunkte der Packungsbleche den Flüssigkeitsstrom umleiten. Dies gilt für beide Packungen und beide Flüssigkeiten.

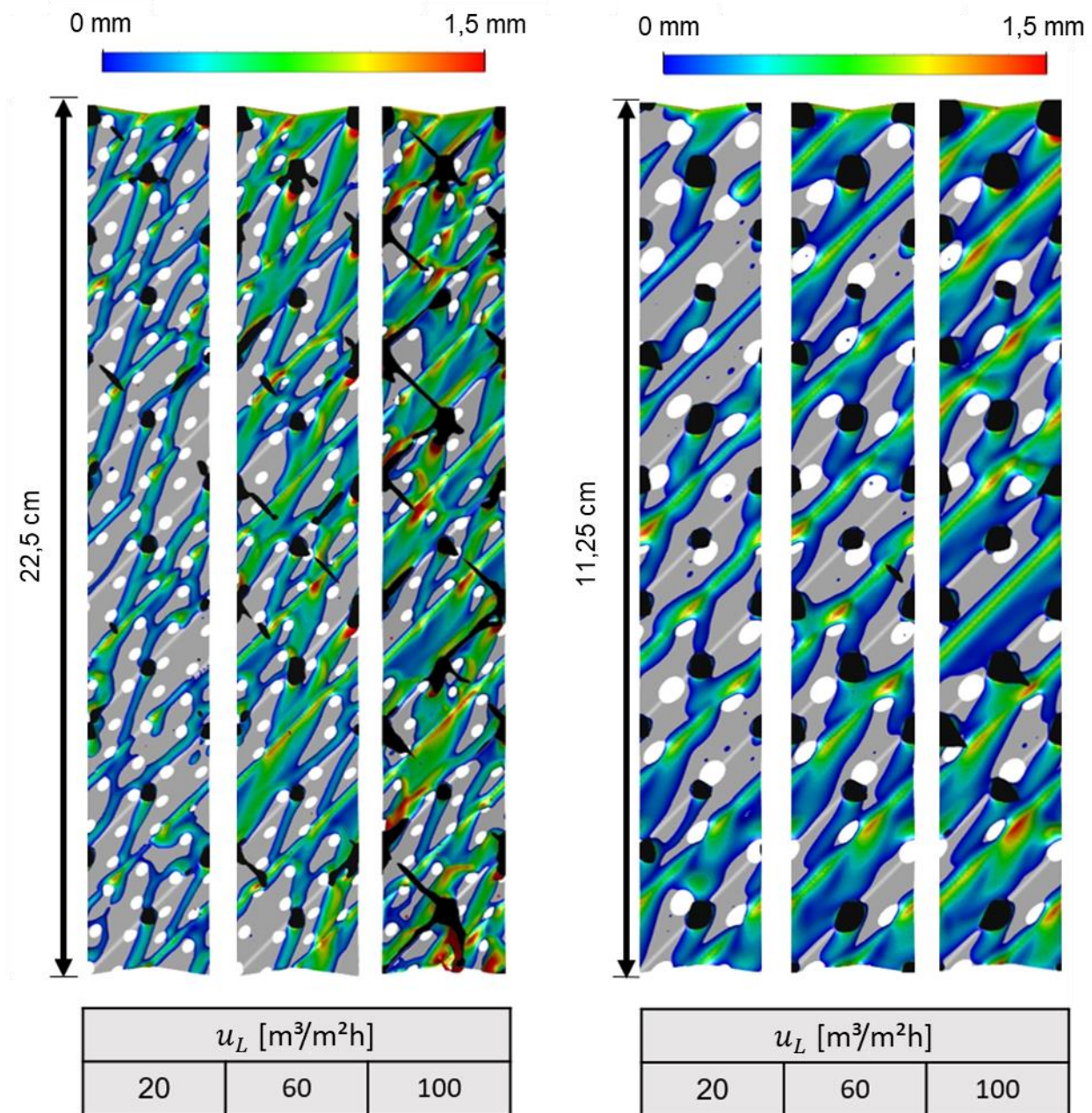


Abbildung 5.15: Wasserströmung in strukturierten Packungen. 250.Y-Packung (links), 500.Y-Packung (rechts). Die Farbskala zeigt die Filmdicke an der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche, die Packung ist in grau und der Kern der Flüssigphase in schwarz dargestellt.

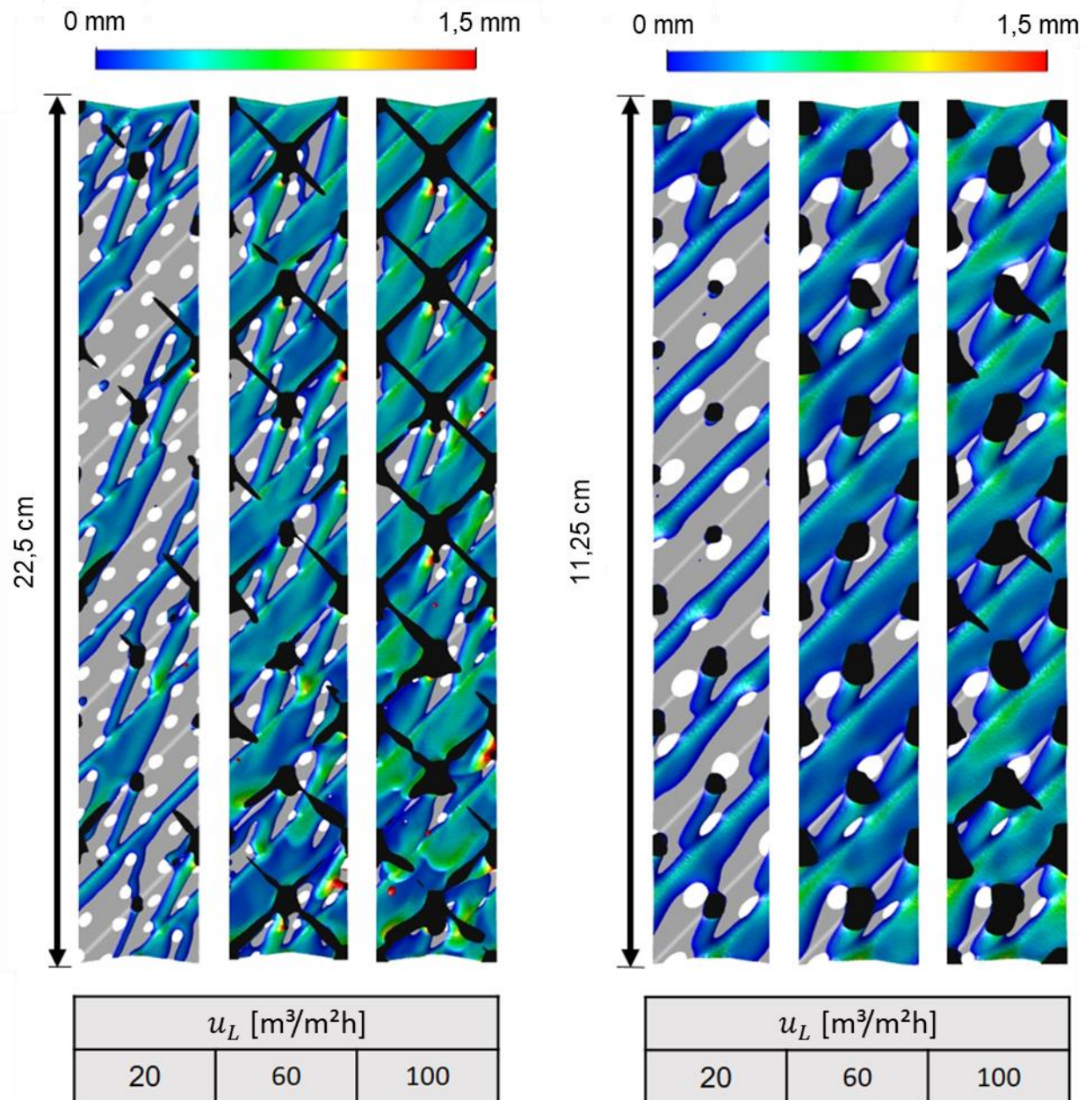


Abbildung 5.16: Strömung der Wasser-TEG-Mischung in strukturierten Packungen. 250.Y-Packung (links), 500.Y-Packung (rechts). Die Farbskala zeigt die Filmdicke an der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche, die Packung ist in grau und der Kern der Flüssigphase in schwarz dargestellt.

Beim Vergleich der mittleren Filmdicken der Wasser- und der Wasser-TEG-Strömungen wird deutlich, dass die Filme und Rinnsale für das letztgenannte System viel dicker sind (für die Ergebnisse mit Wasser siehe Abbildung 5.14 (links) und Abbildung 5.15, für die Ergebnisse mit dem Wasser-TEG-Gemisch siehe Abbildung 5.14 (rechts) und Abbildung 5.16). Beim Vergleich der Abbildungen 5.15 und 5.16 ist auch die erhöhte Benetzung im Falle des Wasser-TEG-Gemisches deutlich erkennbar. Wie oben erläutert, stehen beide Phänomene in direktem Zusammenhang mit der höheren Viskosität und der geringeren Oberflächenspannung des Wasser-TEG-Gemisches. Es ist weiterhin ersichtlich, dass die Flüssigkeitsbrücken in den Simulationen mit dem Wasser-TEG-Gemisch einen höheren Durchmesser haben, was den Holdup zusätzlich erhöht.

Die Gegenüberstellung der Flüssigkeitsverteilungen in den Packungen der Typen 250.Y und 500.Y macht einen signifikanten Unterschied deutlich: Bei der 500.Y-Packung liegen die Regionen mit hohen Filmdicken meist nahe an den Faltungskanten der Packungsbleche und die Strömung folgt hauptsächlich dem Verlauf der Kanäle. In der 250.Y-Packung ist dies nicht der Fall. Die Ansammlung der flüssigen Phase in den Faltungskanten der 500.Y-Packung wird wahrscheinlich durch Kapillarkräfte verursacht, die in der 500.Y-Packung im Vergleich zur 250.Y-Packung dominanter sind.

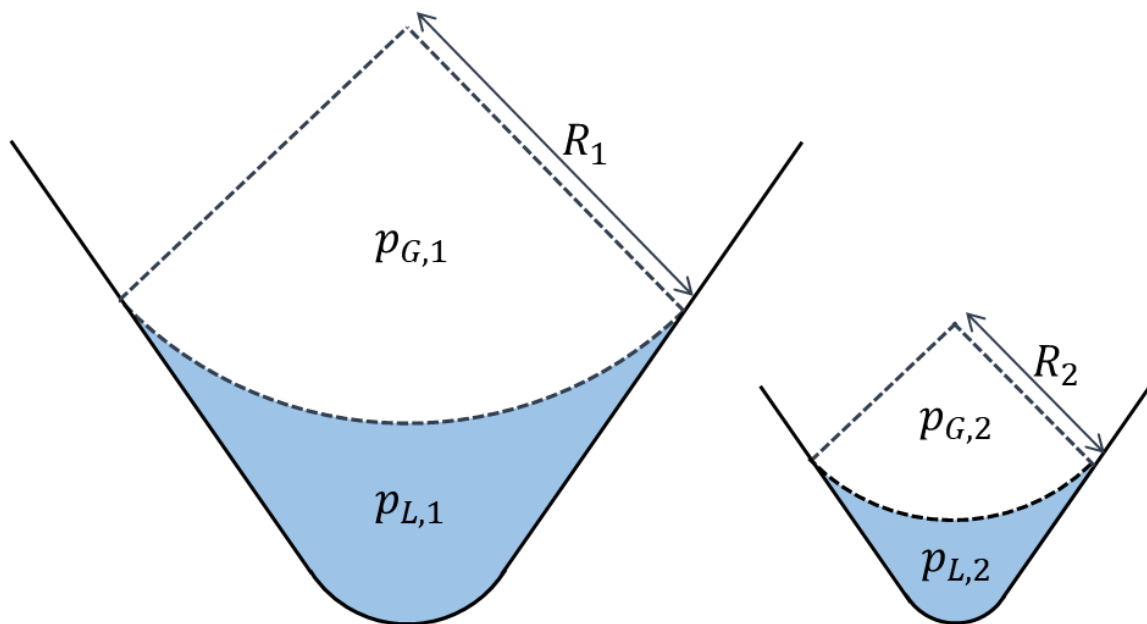


Abbildung 5.17: Schematische Darstellung der Kanalquerschnitte der 250.Y-Packung (links) und der 500.Y-Packung (rechts). Die Packungsbleche sind als schwarze Linien illustriert, die Flüssigphase ist in blau und die Gasphase in weiß dargestellt. Die Topologien der Gas-Flüssigkeits-Grenzflächen sind zu Kreissegmenten vereinfacht.

Abbildung 5.17 veranschaulicht die Wirkung einer geometrischen Verkleinerung der Packungsgeometrie auf die Kapillarkräfte anhand eines idealisierten Beispiels. Dabei werden nur die Einflüsse der Oberflächenspannung und des Drucks betrachtet, während andere Einflüsse (Trägheitskräfte, Schwerkraft und Reibung) vernachlässigt werden. In diesem Fall wird die Oberflächenenergie minimiert, daher nehmen die Gas-Flüssigkeits-Grenzflächen die Form von Kreissegmenten an. Dabei muss Gleichung (3.7) erfüllt sein, sodass sich an der Triplelinie der Kontaktwinkel einstellt. Die Oberflächenkrümmungen können mit $\kappa_i = 1/R_i$ und den entsprechenden Radien R_1 und R_2 berechnet werden. Aufgrund der Skalierung der gesamten Geometrie um den Faktor zwei gilt: $R_1 = 2 R_2$. Mit Hilfe der *Young-Laplace Gleichung* kann die Druckdifferenz zwischen Gas- und Flüssigphase für diesen Fall bestimmt werden (Butt et al., 2003):

$$p_{G,i} - p_{L,i} = \sigma \kappa_i \quad (5.6)$$

Da die Oberflächenkrümmung für die 500.Y-Packung im Vergleich zur 250.Y-Packung um den Faktor zwei erhöht ist, ist auch die Druckdifferenz zwischen Gas und Flüssigkeit im Falle der 500.Y-Packung doppelt so hoch, wie für die 250.Y Packung. Die Flüssigkeit wird entsprechend stärker in der Faltung gebunden. In realen Anwendungen (und auch in den hier diskutierten CFD-Simulationen) hat die Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche eine komplexere Form, aber das Prinzip bleibt erhalten.

Die im Vergleich zur 250.Y-Packung geringere Benetzbarkeit der 500.Y-Packung kann durch diesen Effekt erklärt werden, da die in den Faltungen fließenden Rinnsale eine geringere spezifische Phasengrenzfläche aufweisen als Flüssigkeitsfilme und Rinnsale auf den ebenen Teilflächen der Packung. Ein weiterer Effekt des Scale-downs der Packungsgeometrie ist, dass die Anzahl der Kontaktpunkte pro Packungsvolumen in der 500.Y-Packung um den Faktor acht erhöht ist, da die Abstände zwischen benachbarten Kontaktpunkten in jeder Koordinatenrichtung um die Hälfte reduziert sind. Dementsprechend erhöht sich auch die Anzahl der Flüssigkeitsbrücken zwischen den Blechen. Dies ist ein Grund für den höheren Holdup der 500.Y-Packung.

5.5.2 Tracer-Transport in der 500.Y-Packung

Für einen anderen Zweck als die Modellvalidierung sind die in Abschnitt 5.4.2 diskutierten Ergebnisse aufgrund der dort verwendeten ungewöhnlichen Tracer-Eintrittsbedingungen nur schwer zu interpretieren. In diesem Abschnitt werden daher Tracer-Profile diskutiert, die mit einer Sprungbedingung am Einlass bestimmt wurden. Abbildung 5.18 zeigt die Tracer-Verteilung in der 500.Y-Packung für verschiedene Zeitpunkte nach der ersten Injektion des Tracers zum Zeitpunkt $t_0 = 7,5$ s. Zum Zeitpunkt t_0 befand sich die Strömung in einen stationären Zustand mit nur geringen zeitlichen Abweichungen (*pseudo-stationärer Zustand*). Die Flüssigkeitsbelastung betrug $u_L = 14 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ und die Injektion des passiven Skalars erfolgte gemäß:

$$\Phi_{in} = \begin{cases} 0 & \text{für } t < t_0 \\ 1 & \text{für } t \geq t_0 \end{cases} \quad (5.7)$$

Entsprechend kann im weiteren Verlauf die Normierung der ermittelten Massenanteile auf die Eintrittskonzentration entfallen (Normierung mit dem Wert 1 hat keinen Effekt). Bei $t - t_0 = 2,5$ s näherte sich der Massenanteil des Tracers in den meisten Teilen der Packung bereits einem Wert von eins an. In einigen Regionen lag Φ jedoch immer noch nahe Null, was bedeutet, dass dieser Teil des Holdups nicht erneuert wurde. Dieser Anteil wird daher als passiver Holdup betrachtet.

Vergleicht man beide Hälften der Packung zum Zeitpunkt 2,5 s nach der erstmaligen Injektion, so befindet sich auf dem Packungsblech hinter der Schnittebene viel mehr passiver Holdup (blauer Teil der Flüssigphase bei $t - t_0 = 2,5$ s in Abbildung 5.18, links) als auf dem Blech vor der Schnittebene (Abbildung 5.18, rechts bei $t - t_0 = 2,5$ s). Auf den ersten Blick ist dies unerwartet, da die Strömungsbedingungen auf beiden Blechen sehr ähnlich sind. Der einzige Unterschied liegt in den Positionen der Lochungen. Die Diskrepanz im Strömungsverhalten lässt sich wie folgt erklären: In Abbildung 5.18 markieren die magentafarbenen Rechtecke eine Flüssigkeitsbrücke, die die Packungsbleche verbindet. Jedes der Rechtecke markiert eine Hälfte der Flüssigkeitsbrücke auf dem entsprechenden Packungsblech. Um die Strömung sichtbar zu machen, musste das Blech vor der Schnittebene (vgl. Abbildung 5.7) um 180° um die z-Achse gedreht werden (das Achsensystem ist in Abbildung 5.1 gezeigt). Auf dem Blech hinter der Schnittebene (Abbildung 5.18, links) wird der Flüssigkeitsweg durch eine Perforation direkt unterhalb der Kontaktstelle blockiert. Dadurch wird die flüssige Phase auf das andere Blech (Abbildung 5.18, rechts) geleitet, wo sich in der

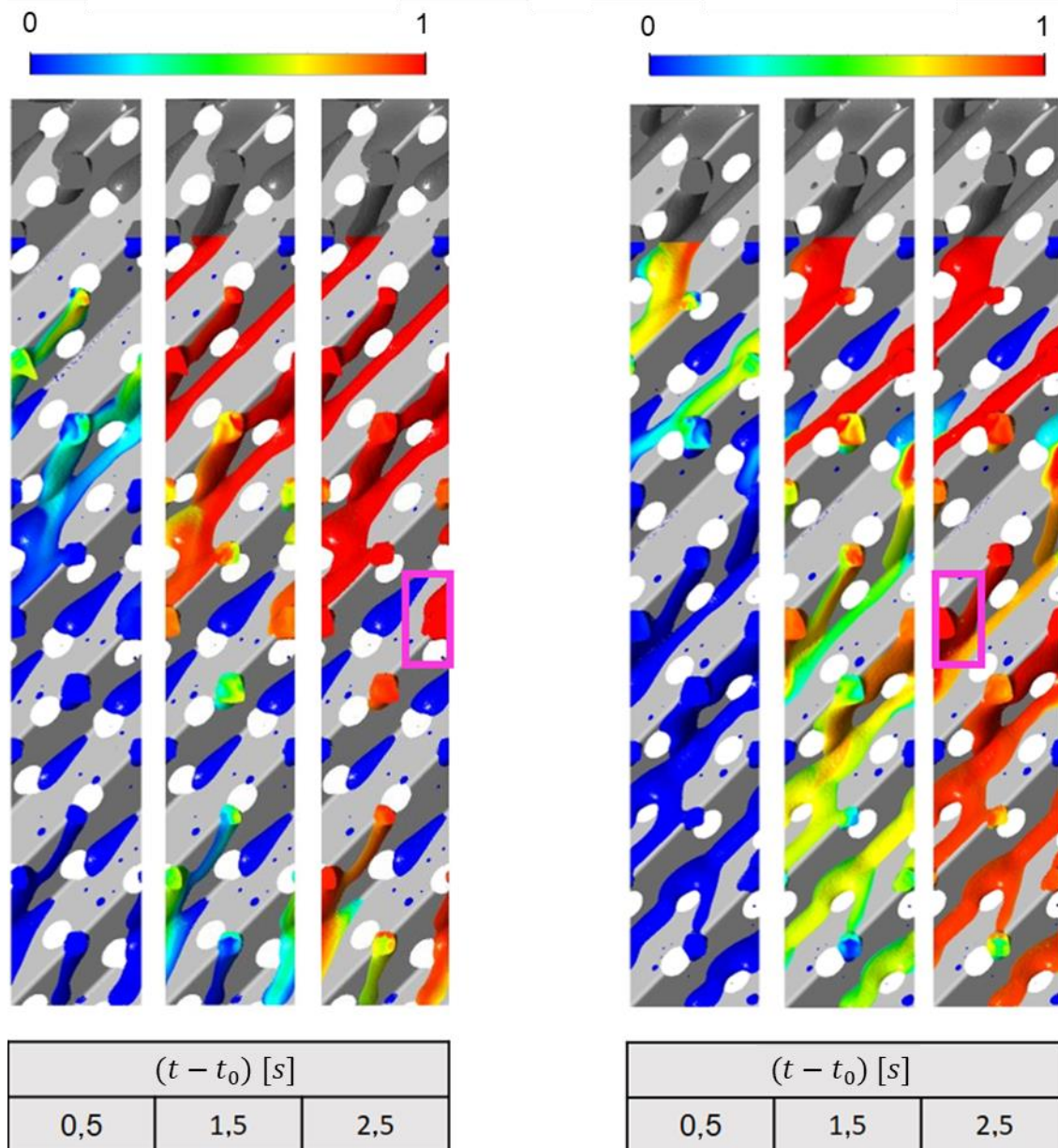


Abbildung 5.18: Tracer-Verteilungen in der 500.Y-Packung. Packungsblech hinter der Schnittebene bei $y = 0$ (links), Packungsblech vor der Schnittebene bei $y = 0$ (rechts). Die magentafarbenen Rechtecke zeigen einen Punkt, an dem die Flüssigkeit von einem Blech zum anderen wechselt. Die Farbskala zeigt den Massenanteil des Tracers an der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche. Oberhalb des Tracer-Aufgabepunktes (vgl. Abbildung 5.4) ist die Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche in dunkelgrau dargestellt. Die Packung ist in hellgrau visualisiert.

Nähe des Kontaktpunktes keine Perforation befindet. Folglich wird der Holdup auf dem Blech in Abbildung 5.18 (links) unterhalb der markierten Flüssigkeitsbrücke nicht erneuert (d.h. das Blech ist in Teilen von der Strömung abgeschnitten). Es scheint, dass die Position der Perforationen relativ zu den Flüssigkeitsbrücken eine wichtige Rolle bei der Flüssigkeitsverteilung spielt. Dies ist ein möglicher Grund, warum einige der Flüssigkeitsbrücken von der Strömung abgeschnitten sind (d.h. sie tragen zum

passiven Holdup bei), während die Flüssigkeit in anderen Flüssigkeitsbrücken ständig erneuert wird (lokale Werte von ϕ nähern sich im Laufe der Zeit dem Wert von eins). In Abbildung 5.19 sind die Tracer-Profile für verschiedene virtuelle Messstellen im Rechengebiet dargestellt. Der Abstand zwischen Tracer-Einlass ($z = -16,1$ mm) und virtuellem Messort ($z = z_M$) ist mit Δz bezeichnet. Es werden massenstromgemittelte Werte in der Ebene des Messorts dargestellt.

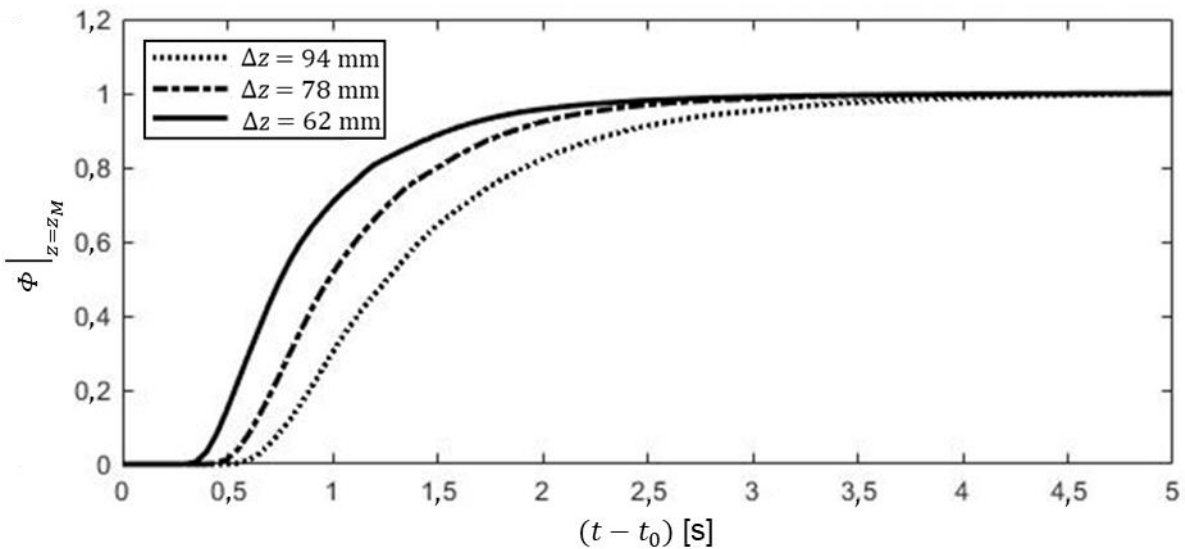


Abbildung 5.19: Tracer-Verteilungen in der 500.Y-Packung für unterschiedliche Abstände zum Tracer-Einlass mit $u_L = 14 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$.

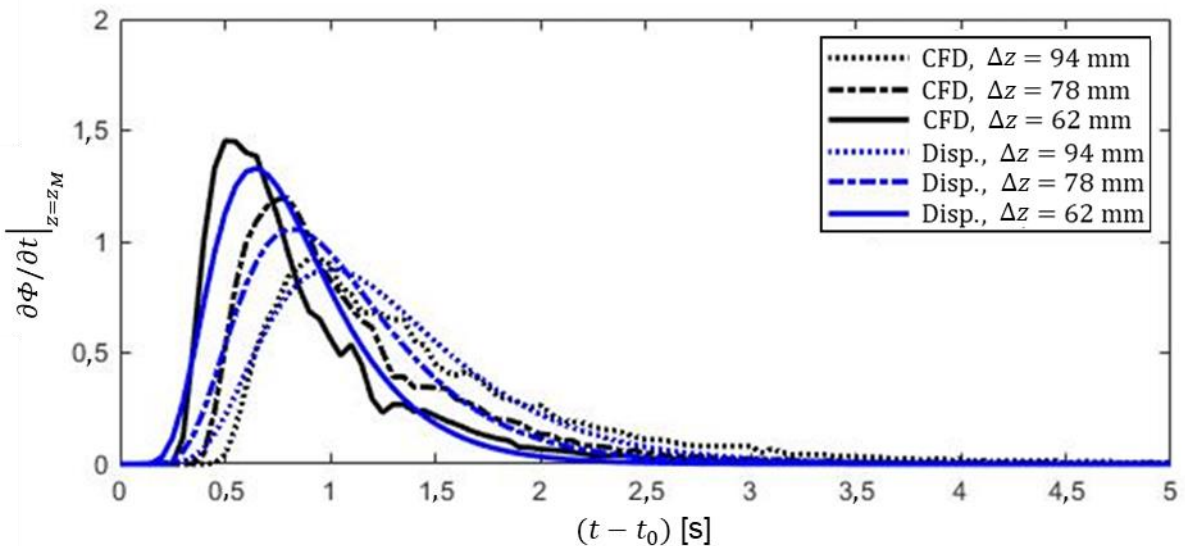


Abbildung 5.20: Verweilzeitverteilungen in der 500.Y-Packung für unterschiedliche Abstände zum Tracer-Eintritt mit $u_L = 14 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. Die schwarzen Kurven zeigen die zeitlichen Ableitungen der CFD-Ergebnisse in Abbildung 5.19, die blauen Kurven wurden mit dem Dispersionsmodell (Levenspiel, 1998) bestimmt.

Abbildung 5.20 zeigt die Verweilzeitverteilungen $E(t)$. Wie erwartet, werden die Kurven mit zunehmenden Werten von Δz breiter. Dies ist auf die zunehmende Durchmischung in der flüssigen Phase zurückzuführen. Die mittlere Verweilzeit τ , die die Flüssigkeitselemente innerhalb des Packungsabschnitts zwischen dem Tracer-Einlass bei $z = -16,1$ mm und dem virtuellen Messort bei z_M verbringen, kann durch Einsetzen von Gleichung (5.3) (mit $\Phi_o = 1$) in Gleichung (5.4) bestimmt werden:

$$\tau = \int_{t_0}^{t=\infty} \frac{\partial \Phi}{\partial t} \Big|_{z=z_M} t dt \quad (5.8)$$

Tabelle 5.6 gibt einen Überblick über die Parameter, die die Verteilungen charakterisieren. Mit größeren Werten von Δz nimmt τ zu, da Δz der Strecke entspricht, die der Tracer zurücklegt. Die mittlere Geschwindigkeit der Flüssigphase in Richtung der Kolonnennachse ist definiert durch $\bar{w} = \Delta z / \tau$. In einer ausgebildeten Strömung sollte \bar{w} unabhängig vom Messort sein. Wie in Abbildung 5.18 zu sehen ist, sind die Strömungsverhältnisse jedoch nicht völlig konstant, da sich Form und Weg der Rinnsale ständig ändern. Dies erklärt, warum je nach virtuellem Messort leicht unterschiedliche Werte für \bar{w} erhalten werden.

Tabelle 5.6 Parameter zur Charakterisierung der Verweilzeitverteilungen an verschiedenen virtuellen Messorten

Δz [mm]	τ [s]	\bar{w} [mm/s]
-94	1,45	65
-78	1,11	70
-62	0,86	72

Die blauen Kurven in Abbildung 5.20 sind die Verweilzeitverteilungen, die mit dem in Levenspiel (1998) beschriebenen Dispersionsmodell bestimmt wurden. Dieses Modell stellt eine analytische Lösung für den idealisierten 1D-Tracer-Transport dar. In diesem Modell wird die Verweilzeitverteilung bestimmt durch:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} \Big|_{z=z_M} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{Bo}{\pi \theta}} \exp \left[-\frac{(1-\theta)^2 Bo}{4\theta} \right] \quad (5.9)$$

mit

$$Bo = \frac{\bar{w} \Delta z_i}{D_{eff}} \quad (5.10)$$

und

$$\theta = \frac{t}{\tau} \quad (5.11)$$

wobei D_{eff} ein Modellparameter, der sog. effektive Dispersionskoeffizient ist.

Die mittlere Verweilzeit kann nach Gleichung (5.8) aus den Simulationsergebnissen abgeleitet werden, sodass die Bo -Zahl der einzige fehlende Parameter in Gleichung (5.9) ist. Die Bo -Zahl wurde verwendet, um die mittels Dispersionsmodell bestimmten Kurven an die aus den Simulationen abgeleiteten Verweilzeitverteilungen anzupassen. Die beste Übereinstimmung für alle drei Kurven wurde für eine Bo -Zahl mit dem Wert 12 gefunden. Die Unterschiede zwischen den Formen der numerisch ermittelten Verweilzeitverteilungen und den mit Hilfe des Dispersionsmodell bestimmten Kurven können auf die zugrunde liegenden Annahmen des Dispersionsmodells zurückgeführt werden. Dazu gehören die Annahmen eines 1D-Transports (isotropes Mischverhalten) und einer vollständig stationären Strömung. Die Strömung in den CFD-Simulationen ist jedoch dreidimensional und nur pseudo-stationär. Trotz der starken Vereinfachungen liefert das Dispersionsmodell eine recht gute Annäherung an das beobachtete Verweilzeitverhalten. Die Methode ermöglicht es, unter Verwendung von Gleichung (5.9) die Verweilzeitverteilung in Packungsabschnitten mit größeren Abmessungen oder in ganzen Kolonnen abzuschätzen, was allein mit der vorgestellten CFD-Methode nicht möglich wäre.

5.6 Zusammenfassung

Es wurden für zwei verschiedene Packungen (Mellapak™ 250.Y und 500.Y) CFD-Ergebnisse der gravitationsgetriebenen Strömung zweier Flüssigkeiten (Wasser und Wasser/TEG-Gemisch) vorgestellt. Die Einflüsse der Mikrostruktur und der Perforationen auf die Strömung wurden in den Simulationen mithilfe der in Kapitel 4 erarbeiteten Modellierungsansätze berücksichtigt. Darüber hinaus wurde das Verweilzeitverhalten der 500.Y-Packung mittels eines numerischen Tracers charakterisiert.

Die Validierung erfolgte anhand von CT-Daten zur Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche und des Holdups (Schug, 2018), sowie des Tracer-Transports (Kögl et al., 2023). Bezüglich des Holdups und des Tracer-Transports zeigten die CFD-Simulationen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

Der Einfluss des Kontaktwinkels auf die Strömung wurde am Beispiel einer nicht perforierten 500.Y-Packung diskutiert. Es wurden Ergebnisse unter Verwendung von zwei verschiedenen Kontaktwinkeln (8° und 70°) verglichen. Der Vergleich zeigte, dass der Kontaktwinkelwert einen starken Einfluss auf die Strömungsmorphologie hat. Mit dem höheren Kontaktwinkel wurde eine Tropfenströmung vorgefunden, der geringere Kontaktwinkel führte stattdessen zu durchgehenden Rinnsalen entlang der Faltungen der Packung. Die Verwendung des niedrigeren Kontaktwinkels führte zu einer Erhöhung der Phasengrenzfläche um 115% und zu einem um 24% erhöhten Holdup. Als nächstes wurde der Einfluss von Perforationen auf die Strömung diskutiert. Zur Berücksichtigung der Perforationen wurde der Kontaktwinkelwert lokal angepasst. Die Flüssigkeitsströmung wurde durch die Perforationen umgeleitet. Dies führte dazu, dass die Flüssigphase vermehrt außerhalb der Faltungen strömte und sich zusätzliche kleinere Rinnsale bildeten. Hierdurch vergrößerten sich die benetzte Fläche um 60% und der Holdup um 20% im Vergleich zur nicht perforierten Packung.

Im weiteren Verlauf des Kapitels wurden ausschließlich Ergebnisse mit perforierten und mikrostrukturierten Packungen betrachtet. Es wurden die Einflüsse von Flüssigkeitseigenschaften und spezifischer geometrischer Packungsoberfläche auf die Strömung diskutiert. Für die 500.Y-Packung wurden im Vergleich zur 250.Y-Packung ein erhöhter Holdup und eine größere spezifische Phasengrenzfläche festgestellt. Die relative Benetzung der Packungsoberfläche war jedoch für die 500.Y-Packung geringer, d.h. die vergrößerte volumenspezifische Packungsoberfläche führte nicht zu

einer um den gleichen Faktor größeren benetzten Fläche. Die höhere Viskosität und geringere Oberflächenspannung des Wasser/TEG-Gemisches im Vergleich zu reinem Wasser führten zu einem drastisch erhöhten Holdup und einer etwas höheren Benetzung.

Das Verweilzeitverhalten der 500.Y-Packung wurde in einer Analyse der zeitlichen Entwicklung von Tracerverteilungen bewertet. Für diese Studie wurde eine Flüssigkeitsbelastung von $u_L = 14 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ (Wasser) verwendet. Durch die Auswertung der Tracer-Verteilungen konnte ermittelt werden, wie schnell sich der Flüssigkeitsinhalt in verschiedenen Packungsregionen erneuert. Die örtliche Anordnung der Perforationen hatte in diesem Zusammenhang einen starken Einfluss. Zudem wurde ein uneinheitliches Verhalten der Flüssigkeitsbrücken an den Kontaktstellen der Packungsbleche festgestellt. An einigen Kontaktstellen wurde der Holdup ständig erneuert, während andere vollständig von der Strömung abgeschnitten waren.

Es wurde weiterhin gezeigt, dass die Verweilzeitverteilung durch das Dispersionsmodell (Levenspiel, 1998) in guter Näherung beschrieben werden kann. Somit können auch die Verweilzeitverteilungen in größeren Packungsabschnitten abgeschätzt werden.

6 Fazit

Bei der Simulation von Gas-Flüssigkeitsströmungen in Faltblechpackungen werden häufig effektive Kontaktwinkel genutzt und es wurde bereits mehrfach gezeigt, dass die Wahl des Kontaktwinkels erheblichen Einfluss auf die Größe der ausgebildeten Phasengrenzfläche hat. Eine zuverlässige Methode zur Bestimmung dieser Kontaktwinkel wurde vor dieser Arbeit und den dazugehörigen Veröffentlichungen jedoch noch nicht publiziert. In dieser Dissertation wurde eine Methode zur Ermittlung effektiver Kontaktwinkel gezeigt. Die Methode basiert auf der experimentellen und numerischen Untersuchung von Rinnsalen und Filmen auf geneigten, ungefalteten Packungsblechen. Bei der Auswertung der Experimente wurden mit einem eigens entwickelten Verfahren aus Fotografien Filmdickenprofile und die Benetzung der Bleche ermittelt. Somit wurde ein direkter Vergleich zwischen experimentellen und numerischen Ergebnissen ermöglicht. Die Übereinstimmung zwischen der einerseits durch die Simulationen und andererseits durch die Experimente bestimmten Rinnsalbreite wurde als Kriterium für die Wahl des effektiven Kontaktwinkels genutzt. Zur Ermittlung des Kontaktwinkelwerts wurde ein Algorithmus implementiert, in dem durch eine iterative Anpassung des Kontaktwinkels die Differenz zwischen der Rinnsalbreite aus Simulation und Experiment minimiert wurde. Der anschließende Vergleich der experimentellen und numerischen Ergebnisse bestätigte, dass das Konzept der effektiven Kontaktwinkel in der Lage ist, die experimentell beobachteten Strömungsmorphologien recht gut zu reproduzieren. Dies gilt besonders hinsichtlich des Benetzungsverhaltes. Der Einfluss der Mikrostruktur auf die Filmdicke konnte durch effektive Kontaktwinkel nur bedingt erfasst werden, da der Kontaktwinkel nur im Bereich der Triplelinie einen direkten Einfluss auf die Strömung ausübt. Im Zuge der Untersuchungen an geneigten Packungsblechen konnte auch die Strömung auf einem perforierten Blech erfolgreich durch ein CFD-Modell reproduziert werden. Dies erfolgte mittels einer Anpassung des Kontaktwinkels am Ort der Perforationen.

Im nächsten Schritt wurde auf Untersuchungen der Mellapak™ 250.Y und 500.Y Packungen eingegangen. Mit Hilfe eines numerischen Tracers wurde dabei auch das

Verweilzeitverhalten der Flüssigphase analysiert. Zunächst wurde die Validierung des Modells thematisiert. Der erste Teil der Validierung erfolgte anhand von experimentellen CT-Daten (Schug, 2018) zu Holdup und effektiver Phasengrenzfläche einer perforierten 500.Y-Packung mit W-Rillierung. Unter Verwendung des auf dem geneigten Packungsblech ermittelten effektiven Kontaktwinkels und unter Berücksichtigung von Perforationen stimmten die CFD-Ergebnisse gut mit den experimentellen Daten überein.

Die Validierung des Verweilzeitmodells erfolgte im zweiten Schritt anhand von CT-Daten aus Kögl et. al (2023). Hierzu wurden die publizierten experimentellen Profile des Tracer-Massenanteils über der Zeit in analoger Weise durch CFD-Simulationen bestimmt und direkt verglichen. Die Simulationen konnten die experimentellen Daten gut reproduzieren.

Nach der Validierung des Modells wurde der Einfluss von Flüssigkeitseigenschaften und Packungstyp auf die Strömung analysiert. Die größere spezifische Oberfläche der 500.Y-Packung im Vergleich zur 250.Y-Packung führte zu einem höheren Holdup und einer größeren spezifischen Phasengrenzfläche. Die relative Benetzung der Packungsoberfläche war jedoch für die 500.Y-Packung geringer. Letzteres konnte darauf zurückgeführt werden, dass die Flüssigkeit in der 500.Y-Packung stärker in den Faltungen der Packungskanäle verblieb, als dies bei der 250.Y Packung der Fall war. Die höhere Viskosität des Wasser/TEG-Gemisches im Vergleich zu reinem Wasser zeigte sich vor allem in deutlich dickeren Filmen und größeren Flüssigkeitsansammlungen an den Kontaktpunkten der Packungsbleche. Es wurde entsprechend ein drastisch erhöhter Holdup ermittelt. Die effektive Phasengrenzfläche war mit dem Wasser/TEG-Gemisch leicht erhöht, was auf die im Vergleich zu reinem Wasser geringere Oberflächenspannung zurückgeführt wurde.

Anhand der zeitlichen Entwicklung von Tracer-Verteilungen wurde das Verweilzeitverhalten der 500.Y-Packung analysiert. Dabei konnte gezeigt werden, dass an einigen Kontaktstellen der Packungslagen der Holdup der Flüssigkeitsbrücken kontinuierlich erneuert wurde. Andere waren dagegen vollständig von der Strömung abgeschnitten, sodass kein Austausch der Flüssigkeit erfolgte.

Die mittels CFD-Simulationen ermittelte Verweilzeitverteilung konnte, bei entsprechender Anpassung der Bodensteinzahl, in guter Näherung durch das Dispersionsmodell (Levenspiel, 1998) beschrieben werden. Dies kann genutzt

werden, um auch die Verweilzeitverteilungen in größeren Packungsabschnitten zu approximieren.

Mit dem vorgeschlagenen Modellierungsansatz kann der Einfluss von Packungsgeometrie, Flüssigkeitsbelastung und Flüssigkeitseigenschaften auf die Strömungsdynamik und den Tracer-Transport bewertet werden.

Weitere Arbeiten sind erforderlich, um die Anwendung der entwickelten Ansätze für verschiedene Flüssigkeitssysteme zu testen. In Zukunft könnte das Rechengebiet erweitert werden, um auch Wandeffekte und Übergänge zwischen Packungselementen zu berücksichtigen. Darüber hinaus könnte in zukünftigen Arbeiten ein Gegenstrom von Gas und Flüssigkeit betrachtet werden, um die Bedingungen in realen Trennprozessen besser widerzuspiegeln.

Literaturverzeichnis

Aferka, S., Viva, A., Brunazzi, E., Marchot, P., Crine, M., Toye, D., 2011. Tomographic measurement of liquid hold up and effective interfacial area distributions in a column packed with high performance structured packings. *Chem. Eng. Sci.* 66, 3413–3422.

Amini, Y., Esfahany, M.N., 2018. CFD simulation of the structured packings: a review. *Sep. Sci. Technol.* 54, 2536–2554.

Ausner, I., 2006. *Experimentelle Untersuchungen mehrphasiger Filmströmungen*. Dissertation, TU Berlin.

Basden, M.A., Eldridge, R.B., Farone, J., Feng, E., Hussey, D.S., Jacobson, D.L., 2013. Liquid holdup profiles in structured packing determined via neutron radiography. *Ind. Eng. Chem. Res.* 52, 17263.

Basden, M. A., 2014. *Characterization of Structured Packing via Computational Fluid Dynamics*. Dissertation, University of Texas.

Bernemann, S., 2020. *Erstellung eines CFD-Modells für die Entwicklung eines innovativen Trennapparates zur Stickstoffrückgewinnung aus landwirtschaftlichen Abfällen*. Unveröffentlichte Masterarbeit, Universität Paderborn, Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik, Betreuer: Bertling, R.

Bertling, R., Hack, M., Ausner, I., Horschitz, B., Bernemann, S., Kenig, E.Y., 2022. Modelling film and rivulet flows on microstructured surfaces using CFD methods. *Chem. Eng. Sci.* 251, 117414.

Bertling, R., Hack, M., Ausner, I., Horschitz, B., Wehrli, M., Kenig, E.Y., 2023. Simulation of liquid flow in structured packings using CFD-methods. *Chem. Eng. Sci.* 269, 118405.

Billet, R., Schultes, M., 1999. Prediction of mass transfer columns with dumped and arranged packings: updated summary of the calculation method of Billet and Schultes. *Chem. Eng. Res. Des.* 77, 498-504.

Bolenz, L. Fischer, F., Toye, D., Kenig, E.Y., 2021. Determination of local fluid dynamic parameters in structured packings through X-ray tomography: overcoming image resolution restrictions. *Chem. Eng. Sci.* 229, 115997.

Brackbill, J.U., Kothe, D.B., Zemach, C., 1992. A continuum method for modelling surface tension. *J. Comput. Phys.* 100, 335–354.

- Bragg, L.B., 1957. Goodloe column packing- a new knit packing material for vapor-liquid operations. *Ind. Eng. Chem.* 49, 1062–1066.
- Butt, H.J., Graf, K., Kappl, M., 2003. *Physics and Chemistry of Interfaces*. Wiley-VCH, Weinheim.
- Conesa, J. A., 2020. *Chemical Reactor Design - Mathematical Modeling and Applications*. Wiley-VCH, Weinheim.
- Düssel, R., Stichlmair, J. 2006. Rektifikation. In Goedecke, R. (Hrsg.), *Fluidverfahrenstechnik - Grundlagen, Methodik, Technik, Praxis*, 689-798. Wiley-VCH, Weinheim.
- Ferziger, H., Perić M., R.L., Street. 2020. *Numerische Strömungsmechanik*. Springer Verlag, Berlin Heidelberg.
- Green, C.W., Farone, J., Briley, J.K., Eldridge, R.B., Ketcham, R.A., Nightingale, B., 2007. Novel application of X-ray computed tomography: determination of gas/liquid contact area and liquid hold-up in structured packing. *Ind. Eng. Chem. Res.* 46, 5734–5753.
- Haroun, Y., Raynal, L., Alix, P., 2014. Prediction of effective area and liquid hold-up in structured packings by CFD. *Chem. Eng. Res. Des.* 92, 2247-2254.
- Hertwig, K., Martens, L., Hamel, C., 2018. *Chemische Verfahrenstechnik- Berechnung, Auslegung und Betrieb chemischer Reaktoren*. De Gruyter, Berlin.
- Hirt, C.W., Nichols, B.D., 1981. Volume of fluid method for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.* 39, 201–225.
- Ho, F.C.K., Hummel, R.L., 1970. Average velocity distributions within falling liquid films. *Chem. Eng. Sci.* 25, 1225–1237.
- Inguva, V., Schulz, A., Kenig, E.Y., 2020. On methods to reduce spurious currents within VOF solver frameworks. A review of the static bubble/droplet. *Chem. Prod. Process. Model.* 17, 121-135.
- Janzen, A., Steube, J., Aferka, S., Kenig, E.Y., Crine, M., Marchot, P., Toye D., 2013. Investigation of liquid flow morphology inside a structured packing using X-ray tomography. *Chem. Eng. Sci.* 102, 451–460.
- Kenig, E. Y., Dubjella, P., Hugen, T., Rietfort T., Hüser, N., 2014. Experimentelle Untersuchung und Bewertung einer strukturierten Packung mit 75° Neigungswinkel für die CO₂-Abscheidung. *Chem. Ing. Tech.* 86, 1451–1466.
- Kister, H. Z., 1992. *Distillation Design*. McGraw-Hill, New York.
- Kögl, T., Linder, T., Arlt, W., 2023. Spatially resolved tomographic assessment of axial mixing in modern structured and random packings. *Chem. Eng. Technol.* 46, 940-947.

- Lan, H., Wegener, J.L., Armaly, B.F., Drallmeier, J.A., 2010. Developing laminar gravity driven thin liquid film flow down an inclined plane. *J. Fluids Eng.* 132, 081301–081311.
- Levenspiel, O., 1998. *Chemical Reaction Engineering*, 3rd edition. Wiley, New York.
- Macfarlan, L., Phan, M.T., Eldridge, R.B., 2022. Methodologies for predicting the mass transfer performance of structured packing with computational fluid dynamics: a review. *Chem. Eng. Process.* 172, 108798.
- Maćkowiak, J., 2010. *Fluid Dynamics of Packed Columns*. Springer Verlag, Berlin Heidelberg.
- Mersmann, A., Deixler, A., 1986. Packungskolonnen. *Chem. Ing. Tech.* 58, 19-31.
- Mersmann, A., Kind, M., Stichlmair, J., 2005. *Thermische Verfahrenstechnik: Grundlagen und Methoden*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg
- Moser, F., Kessler, A., 2000. Mellapak Plus - eine neue Generation strukturierter Packungen. *ViP* 2, 122-124.
- Muzaferija, S., Perić, M., 1999. Computation of free surface flows using interface-tracking and interface-capturing methods. In Mahrenholtz O., Markiewicz, M. (Hrsg.), *Nonlinear Water Wave Interaction*, 59-100. WIT Press, Southampton.
- Olenberg, A., Kenig, E.Y., 2020. Numerical investigation of liquid flow morphology in structured packings. *Chem. Eng. Sci.* 219, 115559.
- Olenberg, A. 2021. *Untersuchung und Optimierung von strukturierten Packungen mittels CFD-Simulationen*. Dissertation, Universität Paderborn.
- Olujć, Ž., Seibert, A.F. Fair, J.R., 2000. Influence of corrugation geometry on the performance of structured packings: an experimental study. *Chem. Eng. Process.* 39, 335–342.
- Olujć, Ž., Jansen, H., Kaibel, B., Rietfort, T., Zich, E., 2001. Stretching the capacity of structured packings. *Ind. Eng. Chem. Res.* 40, 6172-6180.
- Olujć, Ž., Behrens, M., Colli, L., Paglianti, A., 2004. Predicting the efficiency of corrugated sheet structured packings with large specific surface area. *Chem. Biochem. Eng. Q.* 18, 89–96.
- Olujć, Ž., Jansen, H., 2015. Large-diameter experimental evidence on liquid (mal)distribution properties of structured packings. *Chem. Eng. Res. Des.* 99, 2-13.
- Paschke, S., 2011. *Experimentelle Analyse ein- und zweiphasiger Filmströmungen auf glatten und strukturierten Oberflächen*. Dissertation, TU Berlin.
- Petre, C.F., Larachi, F., Iliuta, I., Grandjean, B.P.A., 2003. Pressure drop through structured packings: Breakdown into the contributing mechanisms by CFD modeling. *Chem. Eng. Sci.* 58, 163-177.

- Rhie, C. M., Chow, W. L., 1983. Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. *AIAA Journal* 21, 1525–1532.
- Rider, W.J., Kothe, D.B., 1998. Reconstructing volume tracking. *J. Comput. Phys.* 141, 112–152.
- Sattler, K., 2001. *Thermische Trennverfahren: Grundlagen, Auslegung, Apparate*. Wiley-VCH, Weinheim.
- Schug, S., Arlt, W., 2016. Imaging of fluid dynamics in a structured packing using X-ray computed tomography. *Chem. Eng. Technol.* 39, 1561-1569.
- Schug, S., 2018. *Untersuchung der Fluidodynamik in Packungskolonnen mittels Computertomographie*. Dissertation, Universität Erlangen-Nürnberg.
- Schwarze, R., 2013. *CFD-Modellierung - Grundlagen und Anwendungen bei Strömungsprozessen*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- Sebastia-Saez, D., Gu, S., Ranganathan, P., Papadikis, K., 2015. Meso-scale CFD study of the pressure drop, liquid hold-up, interfacial area and mass transfer in structured packing materials. *Int. J. Greenh. Gas Control* 42, 388–399.
- Singh, R.K., Galvin, J.E., Sun, X., 2017. Hydrodynamics of the rivulet flow over corrugated sheet used in structured packings. *Int. J. Greenh. Gas Control* 64, 87–98.
- Singh, R.K., Bao, J., Wang, C., Fu, Y., Xu, Z., 2020. Hydrodynamics of countercurrent flows in a structured packed column: effects of initial wetting and dynamic contact angle. *Chem. Eng. J.* 398, 125548.
- Stichlmair, J., Klein, H., Rehfeldt, S., 2021. *Distillation: Principles and Practices, Second Edition*. Wiley, New York.
- Subramanian, K., Wozny, G., 2012. Analysis of hydrodynamics of fluid flow on corrugated sheets of packing. *Int. J. Chem. Eng.* 2012, 1–13.
- Suess, P., Spiegel, L., 1992. Hold-up of Mellapak structured packings. *Chem. Eng. Process.* 31, 119-124.
- Takamasa, T., Hazuku, T., 2000. Measuring interfacial waves on film flowing down a vertical plate wall in the entry region using laser focus displacement meters. *Int. J. Heat Mass Transfer* 43, 2807–2819.
- Tsai, R.E., Seibert, A.F., Eldridge, R.B., Rochelle, G.T., 2011. A dimensionless model for predicting the mass-transfer area of structured packing. *AIChE J.* 57, 1173-1184.
- Ubbink, O., 1997. *Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces*. Dissertation Imperial College of Science, Technology & Medicine, London.
- Ubbink, O., Issa, R.I. 1999. A method for capturing sharp fluid interfaces on arbitrary meshes. *J. Comput. Phys.* 153, 26-50.

Veerapaneni, S., Wan, J. Tokunaga, T.K., 2000. Motion of particles in film flow. *Environ. Sci. Technol.* 34, 2465–2471.

Wehrli, M., Kögl, T., Linder, T., Arlt, W., 2018. An unobstructed view of liquid flow in structured packing. *Chem. Eng. Trans.* 69, 775-780.

Youngs, D. L., 1982. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. In Morton, K.W., Baines, M. J. (Hrsg.), *Numerical methods for fluid dynamics*, 273-285. Academic Press, New York.

Erklärung zur Zitation von Inhalten aus studentischen Arbeiten

In Ergänzung zu meinem Antrag auf Zulassung zur Promotion in der Fakultät für Maschinenbau der Universität Paderborn erkläre ich gemäß §11 der Promotionsordnung und unter Beachtung der Regelung zur Zitation studentischer Arbeiten:

Die von mir vorgelegte Dissertation habe ich selbstständig verfasst, **und ich habe keine anderen** als die dort angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt. Es sind **Inhalte** studentischen Ursprungs (studentische Arbeiten) in dieser Dissertation enthalten.

Ich habe die verwendeten Arbeiten entsprechend der Regelung „Zitation aus studentischen Arbeiten in Dissertationen“ zitiert.