

Teil II

Modellbildung und Simulation von Blasenströmungen

Kapitel 6

Das mathematische Modell

6.1 Grundgleichungen des Two-Fluid Modells

Den Ausgangspunkt für die Herleitung der Gleichungen des Two-Fluid-Modells bilden die einphasigen Grundgleichungen der Strömungsmechanik: die Kontinuitätsgleichung und die Impulsgleichung. Diese Gleichungen gelten an jedem Ort im Reaktor, der entweder durch die Gas- oder durch die Flüssigphase ausgefüllt wird, da dort eine einphasige Strömung vorliegt. An der (beweglichen) Phasengrenzfläche werden die Innenrandbedingungen aufgestellt, die von der Gleichheit der Geschwindigkeiten beider Phasen in unmittelbarer Grenzflächennähe und vom Kräftegleichgewicht an der Phasengrenzfläche ausgehen [26, 50, 56].

Diese Gleichungen sind für die direkte numerische Simulation isothermer Zweiphasenströmungen prinzipiell ausreichend. Aufgrund ihrer Komplexität sind sie allerdings einer numerischen Lösung nur bedingt zugänglich. Der numerische Aufwand gestattet bisher nur die Simulation von wenigen aufsteigenden Blasen [79, 123, 125] und keinesfalls eines gesamten Reaktors. Erst durch geeignete Mittelung kann eine praktikable Form makroskopischer Gleichungen mit kollektiven Wechselwirkungstermen gewonnen werden.

Bei einer Mittelung wird das Verhalten der physikalischen Größen durch einen Mittelwert und eine die Fluktuationen beschreibende Größe ersetzt. In den gemittelten Gleichungen treten dann die Korrelationen der Fluktuationen von verschiedenen physikalischen Größen auf. Da der Wert der Fluktuationen nicht bekannt ist, muß der Einfluß dieser Korrelationen auf die makroskopischen Gleichungen abgeschätzt, und durch entsprechende Modellterme, die nur die statistischen Mittelwerte dieser Größen enthalten, approximiert werden.

Da allerdings nur sehr wenige experimentelle Informationen über das instationäre dreidimensionale Verhalten von Blasenströmungen vorliegen, ist die geeignete Beschreibung dieser Modellterme schwierig. Unterschiedliche Annahmen, die von verschiedenen Autoren

auf dem Wege zu den gemittelten Gleichungen getroffen werden, führen dazu, daß es in der Literatur eine Fülle von Varianten des Two-Fluid-Modells gibt, die sich im Komplexitätsgrad sowie in der Modellierung der einzelnen gemittelten Terme unterscheiden. Sie sind Gegenstand zahlreicher *theoretischer* Diskussionen [4, 26, 66, 88, 127, 134].

Werden diese Modelle für eine *numerische Berechnung* eingesetzt, so werden sie zunächst vereinfacht, so daß nur solche Terme in den Gleichungen erhalten bleiben, welchen eine konkrete physikalische Bedeutung zugemessen werden kann. Diese vereinfachten Modelle, die zur Simulation von Gas-Flüssigkeitsströmungen verwendet werden, weisen untereinander (im Unterschied zu den allgemeinen theoretischen Modellen) viel mehr Ähnlichkeit auf [33, 34, 97, 105, 112]. Die Unterschiede beziehen sich auf die Modellierung von einigen wenigen Termen. Solche praxisrelevante Modelle „mittlerer“ Komplexität bilden den Ausgangspunkt unserer Untersuchungen.

Im Rahmen des Two-Fluid Euler-Euler-Modells wird das hydrodynamische Verhalten einer Gas-Flüssigkeits-Blasenströmung durch folgende Größen beschrieben, die sich sowohl zeitlich, als auch örtlich ändern können:

- lokale Geschwindigkeit u_l der Flüssigphase;
- lokale Geschwindigkeit u_g der Gasphase;
- Gasgehalt ε_g , der den lokalen volumetrischen Anteil der Gasphase am Gesamtvolumen der Gas-Flüssigkeits-Mischung beschreibt;
- Flüssigkeitsgehalt ε_l , der den lokalen volumetrischen Anteil der flüssigen Phase am Gesamtvolumen beschreibt;
- Druck p , der für beide Phasen den gleichen lokalen Wert annimmt.

Als Parameter bzw. abhängige Variablen treten die Dichten der beiden Phasen auf:

- Dichte ρ_l der Flüssigphase, die meist als konstant angenommen wird;
- Dichte ρ_g der Gasphase, die entweder als konstant angenommen wird, oder vom lokalen Druck z. Bsp. gemäß der Zustandsgleichung für ideale Gase abhängt.

Es wird weiter angenommen, daß die Gasphase in Form von **einzelnen Gasblasen** vorliegt. Obwohl in einer realen Strömung Gasblasen unterschiedlicher Blasengröße und -masse auftreten, wird bei einem Two-Fluid-Modell meist nur von einer Blasenklasse ausgegangen. Alle Blasen einer Blasenklasse haben gleiche Blasenmasse. Das Volumen einer Blase kann sich allerdings mit dem lokalen Druck ändern.

Möchte man explizit zwischen verschiedenen Blasengrößen unterscheiden, müssen mehrere Blasenklassen betrachtet werden. Jede Blasenklasse wird dann durch ihre eigene Volumenkonzentration ε_g^i und ihre eigene Geschwindigkeit \mathbf{u}_g^i charakterisiert. Im folgenden wird von nur einer Blasenklasse ausgegangen. Es wird außerdem angenommen, daß die Strömung isotherm ist. Der Stoffaustausch zwischen beiden Phasen wird vernachlässigt.

Zur Bestimmung der neun unbekanntenen Größen (\mathbf{u}_l , \mathbf{u}_g - mit jeweils drei Komponenten, ε_g , ε_l und p) wird ein System von Differentialgleichungen aufgestellt, das aus den Kontinuitätsgleichungen und Impulsbilanzen für beide Phasen besteht. Da jede Impulsbilanz 3 skalare Gleichungen beinhaltet, liegen zur Bestimmung von 9 unbekanntenen Größen 8 Gleichungen vor. Das System wird durch eine algebraische Beziehung geschlossen, die besagt, daß die Summe von Volumenanteilen beider Phasen am Gesamtvolumen des Zweiphasengemisches gleich 1 sein muß:

$$\varepsilon_l + \varepsilon_g = 1. \quad (6.1)$$

Da zwischen beiden Phasen kein Massenaustausch angenommen wird, können die Kontinuitätsgleichungen für beide Phasen getrennt und ohne Austauschglieder formuliert werden

$$\frac{\partial(\varepsilon_l \rho_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \mathbf{u}_l) = 0 \quad (6.2)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g) = 0 \quad (6.3)$$

Beide Kontinuitätsgleichungen entsprechen den einphasigen Masseerhaltungsgleichungen, wobei alle Terme mit dem Volumenanteil der jeweiligen Phase multipliziert werden.

Die Impulsbilanzen für beide Phasen lauten [127]:

$$\frac{\partial(\varepsilon_l \rho_l \mathbf{u}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \mathbf{u}_l \mathbf{u}_l) = -\varepsilon_l \nabla p + \varepsilon_l \nabla \cdot \mathbf{T}_l + \varepsilon_l \rho_l \mathbf{g} + \nabla \cdot \mathbf{T}_l^{Re} + \mathbf{F}_W \quad (6.4)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = -\varepsilon_g \nabla p + \varepsilon_g \nabla \cdot \mathbf{T}_l + \varepsilon_g \rho_g \mathbf{g} - \mathbf{F}_W \quad (6.5)$$

Sie weisen ebenfalls viel Ähnlichkeit mit den einphasigen Impulsbilanzen auf, wobei die meisten Terme den Volumenanteil der jeweiligen Phase enthalten. Außerdem tritt in beiden Impulsbilanzen ein Term \mathbf{F}_W auf, der die Wechselwirkung zwischen den beiden Phasen beschreibt und daher in beiden Impulsbilanzen mit unterschiedlichem Vorzeichen auftritt. Dieser Wechselwirkungsterm wird in einem weiteren Abschnitt spezifiziert.

Der Term $\varepsilon_l \nabla \cdot \mathbf{T}_l$ berücksichtigt den molekularen Impulstransport in der Flüssigphase. Der

Schubspannungstensor \mathbf{T}_l wird standardmäßig wie folgt definiert:

$$(\mathbf{T}_l)_{ij} = \mu_l \left(\frac{\partial(\mathbf{u}_l)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(\mathbf{u}_l)_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial(\mathbf{u}_l)_n}{\partial x_n} \right). \quad (6.6)$$

Dabei bezeichnet μ_l die laminare Viskosität in der Flüssigphase. Ein ähnlicher Term, gewichtet mit ε_g , ist auch in der Gasimpulsbilanz (6.5) aufgeführt. Einige Autoren verwenden in der Gasimpulsbilanz anstelle von \mathbf{T}_l den Tensor \mathbf{T}_g , der analog zu (6.6) definiert wird. Andere Forscher vernachlässigen diesen Term dagegen vollständig. Für die praktische Anwendung des Modells haben diese Unterschiede nur wenig Bedeutung, da die Größe der Gasgeschwindigkeit überwiegend durch den Druckterm ($-\varepsilon_g \nabla p$) und den Wechselwirkungsterm \mathbf{F}_W bestimmt wird, so daß alle anderen Terme in der Gasimpulsbilanz nur eine untergeordnete Rolle spielen.

Der Term \mathbf{T}_l^{Re} entsteht bei der Herleitung der gemittelten Gleichungen dadurch, daß die momentanen Geschwindigkeitswerte von den gemittelten Geschwindigkeitswerten abweichen. Bezeichnet man diese Abweichungen mit \mathbf{u}'_l , so gilt [127]:

$$\mathbf{T}_l^{Re} := -\varepsilon_l \varrho_l \overline{\mathbf{u}'_l \mathbf{u}'_l}. \quad (6.7)$$

Die Abweichungen \mathbf{u}'_l resultieren aus den Geschwindigkeitsschwankungen, die sowohl durch die Turbulenz in der Flüssigphase als auch durch die Störungen infolge der Umströmung der einzelnen Blasen entstehen. In Analogie zu einphasigen turbulenten Strömungen werden wir den Term \mathbf{T}_l^{Re} als Tensor der Reynolds'schen Scheinspannungen bezeichnen. Da die lokalen Schwankungswerte durch das mathematische Modell nicht aufgelöst werden, muß dieser Term durch ein geeignetes Turbulenzmodell aus anderen makroskopischen Variablen approximiert werden. In Anlehnung an *Nigmatulin et al.* [88] wird ein ähnlicher Term in der Gasimpulsbilanz nicht berücksichtigt, da man davon ausgeht, daß zwischen den einzelnen Blasen keine direkte Wechselwirkung stattfindet, die einen turbulenten Impulstransport in der dispersen Phase verursachen könnte.

Sind die Terme \mathbf{T}_l^{Re} und \mathbf{F}_W spezifiziert, so bilden die Gleichungen (6.1–6.5) ein geschlossenes System, das numerisch gelöst werden kann. Bevor wir die Modellierung dieser Terme ausführlich besprechen, wollen wir das Gleichungssystem (6.1–6.5) etwas genauer untersuchen.

6.2 Kopplung zwischen den Phasen im Two-Fluid-Modell

Das Two-Fluid-Modell (6.1–6.5) enthält für jede Phase jeweils eine Massen- und eine Impulsbilanz. Diese Bilanzen sind jedoch nicht voneinander unabhängig, sondern stark ver-

koppelt.

Die Kopplung zwischen den Phasen wird in einem Zweiphasenmodell zum einen durch die Wechselwirkungsterme in den Impulsbilanzen, zum anderen durch den Volumenanteil der jeweiligen Phase am Gesamtvolumen berücksichtigt. In Abhängigkeit von der zu simulierenden Strömungsform können eine oder alle beide Kopplungskomponenten vernachlässigt werden. Schauen wir uns diese beiden Kopplungskomponenten für den Fall der Blasenströmung näher an.

Die Impulsbilanz für die Flüssigphase in einem Euler-Euler-Modell unterscheidet sich von der Impulsbilanz in einem Einphasensystem vor allem dadurch, daß auf der rechten Seite ein zusätzlicher Quellterm F_W auftritt, der die Wechselwirkungskraft zwischen den beiden Phasen beschreibt. Diese Wechselwirkungskraft beinhaltet die Summe aller Kräfte, die von der Gasphase auf die sich relativ zu ihr bewegende Flüssigphase ausgeübt werden. Da diese Kräfte auf die Gasphase in die gegengesetzte Richtung wirken, geht der Quellterm F_W in die Impulsbilanz für die Gasphase mit einem Minuszeichen ein.

Die relative Bewegung der Gasblasen erfolgt überwiegend in vertikaler Richtung, da die Blasen infolge der Archimedes-Kraft zur Flüssigkeitsoberfläche aufsteigen. Daß die Gasblasen dabei nicht unendlich beschleunigt werden, ist Folge einer *Widerstandskraft* der Flüssigphase. Diese Widerstandskraft stellt gleichzeitig den größten Anteil der Wechselwirkungskraft zwischen den Phasen dar. Werden die Blasen durch die Widerstandskraft abgebremst, so erfährt die Flüssigkeit einen vertikalen **Auftrieb**. Bei Gas-Liquid-Strömungen, die durch das Gas angetrieben werden, und nur solche werden im Rahmen dieser Arbeit untersucht, ist die Auftriebskraft allein dafür verantwortlich, daß die Flüssigphase in Bewegung kommt. Würde man den Auftriebseffekt vernachlässigen, so würden die aufsteigenden Blasen keinen Einfluß auf die Flüssigphase ausüben, und sie bliebe in Ruhe (wie das anschaulich von *Delnoij et al.* [20] gezeigt wurde). Deshalb kann die Kopplung der beiden Phasen durch die Wechselwirkungskraft bei *blaseninduzierten Strömungen* selbst bei einem sehr niedrigen Gasphasenanteil keinesfalls vernachlässigt werden.

Bei *mechanisch induzierten* Strömungen (in einem Rohr oder in einem gerührten Behälter) hat die Gasphase *bei einem niedrigen Gasanteil* dagegen keinen entscheidenden Einfluß auf die Strömung in der Flüssigphase. Man kann in diesem Fall den Auftriebseffekt vernachlässigen, indem die Impulsbilanz für die Flüssigphase durch eine einphasige Impulsbilanz ohne den Wechselwirkungsterm ersetzt wird. Die Wechselwirkungskraft beeinflusst dann nur die Bewegung der Gasphase, nicht aber die der Flüssigphase. Man spricht in diesem Zusammenhang oft von einer Einwegkopplung zwischen den Phasen („one-way coupling“), im Unterschied zu einer Zweiwegkopplung („two-way coupling“), bei welcher die Wechselwirkungskraft in beiden Impulsbilanzen berücksichtigt wird.

Der Auftriebseffekt ist allerdings nur *eine* Komponente der Kopplung zwischen den beiden Phasen. Die *zweite* Kopplungskomponente resultiert daraus, daß die Kontinuitätsgleichungen für die beiden Phasen (6.2, 6.3) durch die Schließbedingung (6.1) miteinander gekoppelt sind. Nimmt der Gasgehalt in einem Volumenelement zu, so wird der Wert von ε_g grösser und von ε_l entsprechend kleiner. Damit stellen wir fest, daß die Geschwindigkeit der Liquid-Phase in einem Volumenelement zum einen durch die Auftriebskraft, zum anderen durch diesen **Verdrängungseffekt** beeinflusst wird. Die beiden angesprochenen Kopplungseffekte bereiten allerdings Schwierigkeiten bei der numerischen Behandlung des Euler-Euler-Modells.

Die übliche Methode zur Lösung der Modellgleichungen besteht darin, die partiellen Differentialgleichungen (6.2–6.5) bzgl. der Ortkoordinaten zu diskretisieren und das resultierende System von gewöhnlichen Differentialgleichungen zusammen mit der algebraischen Schließbedingung (6.1) mit einem Zeitintegrator zu lösen (sog. „Method of Lines“). Die zeitliche Integration kann entweder mit einem gekoppelten oder mit einem entkoppelten Lösungsverfahren durchgeführt werden. Bei einem gekoppelten Lösungsverfahren wird das gesamte System von diskretisierten Modellgleichungen simultan gelöst. Mit zunehmender Stützstellenanzahl nimmt der Speicherplatzbedarf und die notwendige Rechenzeit drastisch zu. Deshalb ist die Verwendung eines gekoppelten Lösungsverfahrens bei einer feinen örtlichen Diskretisierung viel zu rechenintensiv.

Bei einem entkoppelten Lösungsverfahren werden die einzelnen Modellgleichungen nicht simultan, sondern nacheinander gelöst, und die Kopplung zwischen den einzelnen Variablen wird durch äußere Iterationen erreicht. Sind die Gleichungen stark miteinander gekoppelt, so ergeben sich bei einem entkoppelten Lösungsverfahren Konvergenzschwierigkeiten. So wird die Widerstandskraft, die den Hauptanteil der Wechselwirkungskraft F_W beinhaltet, maßgeblich von der Geschwindigkeitsdifferenz der beiden Phasen ($u_g - u_l$) mitbestimmt. Da die Wechselwirkungskraft in beiden Impulsbilanzen auftritt, folgt daraus, daß die Geschwindigkeit der Flüssigphase in der Impulsbilanz für die Gasphase enthalten ist und umgekehrt. Dadurch treten während der Iteration Schwingungen auf, die die Konvergenz verlangsamen [35].

Da auf die Kopplung durch den Wechselwirkungsterm zwischen den beiden Phasen nicht verzichtet werden kann, muß ein anderer Weg zur Konvergenzbeschleunigung eingeschlagen werden. Er besteht darin, die einzelnen Gleichungen nicht in der ursprünglichen Form zu lösen, sondern zunächst so umzuformen, daß die Kopplung zwischen den umgeformten Gleichungen schwächer ist, als zwischen den ursprünglichen Impulsbilanzen. Diese Umformung kann auf zwei Ebenen durchgeführt werden. Eine Möglichkeit besteht darin, daß man die Umformung der bereits *diskretisierten* Impulsbilanzen vornimmt. Dieser Weg wurde von *Spalding* [116] vorgeschlagen und ist unter der Bezeichnung PEA („Partial-

Elimination-Algorithm“) bekannt. Wie der Name schon sagt, wird durch das PEA-Verfahren die Kopplung zwischen zwei Impulsbilanzen nur teilweise beseitigt, wodurch die durch die Umformung erzielte Konvergenzbeschleunigung nicht sehr groß ausfällt.

Die zweite Möglichkeit besteht darin, daß man die nötige Umformung auf der Ebene der *Differentialgleichungen* vornimmt, d.h. **vor** der eigentlichen Ortsdiskretisierung. Man ersetzt dabei die Impulsbilanz der Flüssigphase durch die Summe der Impulsbilanzen für beide Phasen und erhält auf diese Weise die Impulsbilanz für die Gas-Flüssig-Mischung. Die resultierende Gleichung enthält keinen Wechselwirkungsterm mehr, da dieser durch Addition der beiden Impulsbilanzen eliminiert wird. Sie ist jedoch komplexer als die ursprüngliche Flüssigphasenimpulsbilanz, da sie Terme enthält, die die Trägheitskraft und den konvektiven Impulstransport für *beide Phasen* beschreiben. Wegen dem starken Dichteunterschied zwischen der Gas- und der Flüssigphase können jedoch die auf die Gasphase bezogenen Terme meist vernachlässigt werden, so daß die resultierende Gleichung analog zu der Flüssigphasenimpulsbilanz gelöst werden kann. Da der hohe Dichteunterschied zwischen der kontinuierlichen und der dispersen Phase eine wichtige Voraussetzung dieses Verfahrens ist, kann dieses Verfahren allerdings nicht auf andere disperse Zweiphasensysteme übertragen werden.

Auch die zweite Kopplungskomponente bereitet Schwierigkeiten bei der numerischen Behandlung der Modellgleichungen. Löst man beide Kontinuitätsgleichungen (bei gegebenen Geschwindigkeiten beider Phasen) nach dem Liquid-Gehalt ε_l und dem Gasgehalt ε_g auf, so erfüllen diese Größen in der Regel die Schließbedingung (6.1) nicht, so daß die Geschwindigkeiten beider Phasen oder vielmehr die Druckverteilung iterativ „korrigiert“ werden muß, was sich wiederum negativ auf das Konvergenzverhalten auswirkt. Im Gegensatz zum Auftriebseffekt kann der Verdrängungseffekt der Flüssigphase allerdings in vielen Fällen vernachlässigt werden, was zu einer *Entkopplung* der beiden Kontinuitätsgleichungen und damit zu einer drastischen Konvergenzbeschleunigung führt. Die Einzelheiten des Verfahrens sowie die Zulässigkeit der getroffenen Annahme werden im übernächsten Abschnitt ausführlich besprochen.

6.3 Das Drift-Flux-Modell

Im Abschnitt 6.1 wurden die Grundgleichungen des Two-Fluid Euler-Euler-Modells vorgestellt, wobei für jede Phase eine eigene Kontinuitätsgleichung und eine eigene Impulsbilanz aufgestellt wurde. Das Two-Fluid-Modell ist jedoch nicht die einzige Möglichkeit, die Anwesenheit von zwei Phasen bei der Beschreibung von Blasenströmungen zu berücksichtigen. Andere Modelle konzentrieren sich auf die Betrachtung des *Gemisches* der beiden

Phasen. Werden die Gemischdichte ϱ und die Gemischimpulsdichte $\varrho\mathbf{u}$ als effektive Dichte bzw. effektive Impulsdichte der Gas-Liquid-Dispersion definiert,

$$\varrho = \varepsilon_l \varrho_l + \varepsilon_g \varrho_g \quad (6.8)$$

$$\varrho\mathbf{u} = \varepsilon_l \varrho_l \mathbf{u}_l + \varepsilon_g \varrho_g \mathbf{u}_g \quad (6.9)$$

so kann man das Navier-Stokes-System für das Gemisch, bestehend aus der Kontinuitätsgleichung und der Impulsbilanz, aufstellen:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho\mathbf{u}) = 0 \quad (6.10)$$

$$\frac{\partial(\varrho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mathbf{T} + \mathbf{T}^{Re}) + \varrho\mathbf{g} \quad (6.11)$$

Der Spannungstensor \mathbf{T} wird analog zu (6.6) definiert:

$$(\mathbf{T})_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_n}{\partial x_n} \right). \quad (6.12)$$

Hier beschreibt die Größe μ die (laminare) Viskosität der Gas-Liquid-Dispersion. In [100] werden unterschiedliche Darstellungen für diesen Modellparameter angegeben. Dabei wird zur Berechnung der Viskosität der Gas-Liquid-Dispersion die laminare Viskosität der Liquid-Phase mit einem Faktor versehen, der vom Volumenanteil der dispersen Phase abhängt. Bei einem niedrigen Volumenanteil der dispersen Phase ist dieser Faktor für alle Darstellungen in etwa gleich 1, so daß in diesem Fall

$$\mu \approx \mu_l \quad (6.13)$$

gilt.

Für den Turbulenzterm \mathbf{T}^{Re} gilt in Analogie zu (6.7)

$$\mathbf{T}^{Re} := -\overline{\varrho \mathbf{u}' \mathbf{u}'}, \quad (6.14)$$

wobei \mathbf{u}' den turbulenten Schwankungen der Gemischgeschwindigkeit \mathbf{u} entspricht.

Die Definition der Gemischdichte (6.8) spielt im Rahmen des Drift-Flux-Modells die Rolle der „Zustandsgleichung“ für das Zweiphasengemisch. Der Gasgehalt ε_g kann aus der Kontinuitätsgleichung für die Gasphase (6.3) berechnet werden, wenn die Gasgeschwindigkeit \mathbf{u}_g bekannt ist.

Zur Bestimmung der Gasgeschwindigkeit gibt es zwei Möglichkeiten. Die einfachste Variante stellt das **homogene Modell** dar, das keine relative Bewegung zwischen den Phasen

zuläßt. In diesem Fall gilt $\mathbf{u}_g = \mathbf{u}_l = \mathbf{u}$. Für die Beschreibung der Strömung von Gas-Flüssigkeitsgemischen ist diese Annahme nur im Falle von sehr kleinen Gasblasen oder hohen Liquid-Zähigkeiten gerechtfertigt, so daß das homogene Modell zur Simulation von Wasser-Luft-Blasenströmungen mit Blasendurchmessern von 1 bis 10mm nicht eingesetzt werden kann.

Bei einem **Drift-Flux-Modell** wird im Gegensatz zum homogenen Modell die Relativbewegung zwischen den beiden Phasen zugelassen. Die Geschwindigkeit der Gasphase kann dann entweder aus der Gasimpulsbilanz (6.5) berechnet, oder als Summe der Liquid-Geschwindigkeit und Schlupfgeschwindigkeit dargestellt werden, wobei die letztere aus empirischen Korrelationen bestimmt wird.

Der Einsatz der Gasimpulsbilanz (6.5) setzt allerdings voraus, daß die Liquid-Geschwindigkeit \mathbf{u}_l bekannt ist, da die Wechselwirkungskraft von der Differenz der Geschwindigkeiten beider Phasen abhängt. Aus der Impulsbilanz (6.11) für das Zweiphasengemisch läßt sich allerdings nur die Geschwindigkeit \mathbf{u} des *Gemisches* bestimmen. Um das System zu schließen, muß man beide Impulsbilanzen zusammen mit der Gleichung (6.9) lösen, die die Geschwindigkeiten beider Phasen mit der Geschwindigkeit des Gemisches verknüpfen. Wegen der starken Kopplung dieser drei Gleichungen, und einer daraus folgenden komplexen numerischen Behandlung, verzichtet man normalerweise auf die Berechnung der Gasgeschwindigkeit aus der Gasimpulsbilanz, und bedient sich stattdessen einer empirischen Korrelation, die einen direkten Zusammenhang zwischen \mathbf{u} und \mathbf{u}_g beschreibt.

Im Gegensatz zum allgemeinen Fall einer dispersen Zweiphasenströmung, kann man im Falle einer Gas-Liquid-Blasenströmung allerdings davon ausgehen, daß die Geschwindigkeit der Liquid-Phase mit der Geschwindigkeit des Gemisches mit guter Genauigkeit übereinstimmt. Da die Dichte der Gasphase ρ_g (unter Normalbedingungen) um drei Größenordnungen kleiner als die Dichte der Flüssigphase ρ_l ist, und wir außerdem davon ausgehen wollen, daß der Gasphasenanteil ε_g die 5% Grenze nicht übersteigt (s. Einleitung) und damit bedeutend unterhalb des Liquid-Volumenanteils ε_l liegt, folgt wegen $\varepsilon_g \rho_g \ll \varepsilon_l \rho_l$ für die Dichte des Gemisches

$$\rho = \varepsilon_l \rho_l + \varepsilon_g \rho_g \approx \varepsilon_l \rho_l \quad (6.15)$$

und damit für die Gemischgeschwindigkeit

$$\rho \mathbf{u} = \varepsilon_l \rho_l \mathbf{u}_l + \varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g \approx \varepsilon_l \rho_l \mathbf{u}_l \approx \rho \mathbf{u}_l \quad (6.16)$$

bzw.

$$\mathbf{u} \approx \mathbf{u}_l. \quad (6.17)$$

Wird die Gemischgeschwindigkeit aus der Gemischimpulsbilanz (6.11) bestimmt, so kann man also im Falle von Blasenströmungen zur Berechnung der Gasgeschwindigkeit die Gasimpulsbilanz (6.5) bzw. eine Schlupfbeziehung verwenden, wobei anstatt der Liquid-Geschwindigkeit \mathbf{u}_l die ihr mit einer hohen Genauigkeit entsprechende Gemischgeschwindigkeit \mathbf{u} eingesetzt wird.

Das Two-Fluid-Modell und das Drift-Flux-Modell sind zunächst zwei verschiedene Ansätze zur Beschreibung einer Zweiphasenströmung. Während das Two-Fluid-Modell aus den genauen lokalen Einphasengleichungen durch ein Mittelungsprozess abgeleitet wird, wird bei einem Drift-Flux-Modell von der Annahme ausgegangen, daß sich das hydrodynamische Verhalten eines Zweiphasengemisches durch die einphasigen Kontinuitäts- und Navier-Stokes-Gleichungen beschreiben läßt. Das Navier-Stokes-System (6.10–6.11) wird somit nicht mathematisch hergeleitet, sondern postuliert. Im Fall von allgemeinen Zweiphasenströmungen hat das Two-Fluid-Modell einen detaillierteren Charakter als das Drift-Flux-Modell. Im Falle von Blasenströmung allerdings sind das Two-Fluid-Modell und das Drift-Flux-Modell weitgehend äquivalent. Das soll im folgenden gezeigt werden.

Die Kontinuitätsgleichung für das Gemisch (6.10) ergibt sich direkt aus der Summe der Kontinuitätsgleichungen der beiden Phasen (6.2) und (6.3), wenn man die Definitionen (6.8) und (6.9) einsetzt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\varepsilon_l \varrho_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_l \varrho_l \mathbf{u}_l) &= 0 \\ &+ \\ \frac{\partial(\varepsilon_g \varrho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \varrho_g \mathbf{u}_g) &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\varepsilon_l \varrho_l + \varepsilon_g \varrho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_l \varrho_l \mathbf{u}_l + \varepsilon_g \varrho_g \mathbf{u}_g) &= 0 \\ \iff \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{u}) &= 0 \end{aligned}$$

Addiert man beide Impulsbilanzen (6.4) und (6.5), so können die Trägheitsterme in (6.5) wegen $\varepsilon_g < \varepsilon_l$ und $\varrho_g \ll \varrho_l$ vernachlässigt werden:

$$\frac{\partial(\varepsilon_l \varrho_l \mathbf{u}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_l \varrho_l \mathbf{u}_l \mathbf{u}_l) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mathbf{T}_l + \mathbf{T}_l^{Re}) + \varrho \mathbf{g} \quad (6.18)$$

Aus (6.13, 6.15, 6.17) folgt außerdem:

$$\frac{\partial(\varepsilon_l \varrho_l \mathbf{u}_l)}{\partial t} \approx \frac{\partial(\varrho \mathbf{u})}{\partial t} \quad (6.19)$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \mathbf{u}_l \mathbf{u}_l) \approx \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) \quad (6.20)$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{T}_l)_{ij} &= \mu_l \left(\frac{\partial (\mathbf{u}_l)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial (\mathbf{u}_l)_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial (\mathbf{u}_l)_n}{\partial x_n} \right) \\ &\approx \mu \left(\frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \mathbf{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \mathbf{u}_n}{\partial x_n} \right) = (\mathbf{T})_{ij} \end{aligned} \quad (6.21)$$

$$\mathbf{T}_l^{Re} = -\varepsilon_l \rho_l \overline{\mathbf{u}'_l \mathbf{u}'_l} \approx -\overline{\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}'} = \mathbf{T}^{Re} \quad (6.22)$$

Setzt man nun (6.19 – 6.22) in (6.18) ein, so folgt die Impulsbilanz für das Gemisch (6.11).

Somit ist festzuhalten, daß für die numerische Berechnung einer Gas-Liquid-Blasenströmung sowohl das Drift-Flux-Modell als auch das Two-Fluid-Modell eingesetzt werden kann, wobei zu erwarten ist, daß die Ergebnisse beider Modelle weitgehend ähnlich ausfallen. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit werden wir uns deshalb auf die Weiterentwicklung des Drift-Flux-Modells beschränken.

6.4 Boussinesq-Approximation für Drift-Flux-Modell

Boussinesq-Approximation und deren Interpretation. Das Drift-Flux-Modell hat gegenüber dem Two-Fluid-Modell den Vorteil, daß zur Berechnung von Zweiphasenströmungen *Einphasensimulationsprogramme* und -algorithmen verwendet werden können, die nur unwesentlich modifiziert werden müssen. Die Gas-Flüssig-Strömung wird als quasi-einphasige Strömung mit variabler Dichte betrachtet. Die lokalen Dichteunterschiede sorgen dabei für die Auftriebseffekte, die Wechselwirkungskraft \mathbf{F}_W tritt dagegen in der Gemischimpulsbilanz nicht mehr auf.

Wird das betrachtete System im Batch-Mode betrieben, so daß keine äußeren Impulsströme zu- bzw. abgeführt werden, und wird dem System auch kein Impuls auf mechanischem Wege aufgeprägt (wie im Rührkesselreaktor durch den Rührer), so befindet sich die Flüssigphase im Ruhezustand, solange dem System kein Gas zugeführt wird. Erst nach dem Einschalten des Begasers entsteht die großräumige Zirkulationsbewegung in der Flüssigphase, die aus den horizontalen Dichtegradienten des Zweiphasengemisches resultiert.

Ähnliche Vorgänge in einphasigen Strömungen, bei denen sich Zirkulationsbewegungen im Fluid als Folge der lokalen Dichteunterschiede aus den Temperaturgradienten ergeben, nennt man freie Konvektion. Bei der mathematischen Modellierung der freien Konvektion wird üblicherweise die Abhängigkeit der Dichte von der Temperatur nur im Schwerkraftterm der Impulsgleichung berücksichtigt. Diese Vorgehensweise geht auf die Arbeit von *Boussinesq* [14] zurück und wird daher als Boussinesq-Approximation bezeichnet. Sie kann

auch bei der Modellierung der gasangetriebenen Strömungen angewandt werden, wenn der Wert des lokalen Gasgehalts wesentlich kleiner als Eins ist. In diesem Fall kann man die Abhängigkeit der Gemischdichte vom Gasgehalt (bis auf den Schwerkraftterm $\varrho \mathbf{g}$) vernachlässigen und das Navier-Stokes-System (6.10, 6.11) nimmt wegen

$$\varrho \approx \varepsilon_l \varrho_l \approx \varrho_l \quad (\text{vgl. mit (6.15)})$$

$$\mathbf{u} \approx \mathbf{u}_l \quad (\text{vgl. mit (6.17)})$$

$$\varrho \mathbf{g} \approx \varepsilon_l \varrho_l \mathbf{g} = (1 - \varepsilon_g) \varrho_l \mathbf{g}$$

folgende Form an:

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_l = 0 \quad (6.23)$$

$$\frac{\partial(\varrho_l \mathbf{u}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_l \mathbf{u}_l \mathbf{u}_l) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mathbf{T}_l + \mathbf{T}_l^{Re}) + \varrho_l \mathbf{g} - \varepsilon_g \varrho_l \mathbf{g} \quad (6.24)$$

Bis auf den Term $-\varepsilon_g \varrho_l \mathbf{g}$ in der zweiten Gleichung ist das System (6.23, 6.24) mit dem Navier-Stokes-System für eine *einphasige inkompressible* Strömung identisch. Man sieht, daß sich unter den getroffenen Annahmen eine Gas-Flüssigkeit-Strömung wie eine reine Flüssigkeitsströmung verhält, mit der Ausnahme, daß an jenen Stellen im Reaktor, wo die Gasphase präsent und somit der Gasgehalt ε_g ungleich Null ist, ein zusätzlicher Quellterm in der Impulsbilanz auftritt. Überall dort wo Gasphase präsent ist, erfährt die Flüssigkeit einen Auftrieb, der proportional zum lokalen Gasgehalt ist. Somit wird auch im Rahmen des Drift-Flux-Modells der Auftriebseffekt berücksichtigt, jedoch nicht über den Wechselwirkungsterm sondern direkt über den Auftriebsterm $-\varepsilon_g \varrho_l \mathbf{g}$. Eine Rückkopplung erfolgt dadurch, daß die Bewegung in der Flüssigphase die Gasgeschwindigkeit und somit die Gasverteilung im Reaktor beeinflußt. Der Verdrängungseffekt, den die Gasphase in der ursprünglichen Kontinuitätsgleichung (6.2) auf die Flüssigphase ausübt, wird allerdings vernachlässigt.

Würde auch der Einfluß des Auftriebstermes in der Impulsbilanz (6.24) vernachlässigt, so würde nur die Bewegung der Flüssigphase durch das geschlossene System (6.23, 6.24) beschrieben. Die Gasphase könnte damit keinen Einfluß auf die Strömung der flüssigen Phase ausüben. Der Einfluß der Flüssigphase auf die Gasverteilung im Reaktor bliebe allerdings erhalten (Impulsbilanz der Gasphase). Diese Situation entspräche genau dem Fall einer Einwegkopplung zwischen den Phasen, die bereits im Abschnitt 6.2 angesprochen wurde.

Es ist somit festzuhalten, daß im Rahmen der Boussinesq-Approximation nur der Auftriebseffekt, jedoch nicht der Verdrängungseffekt durch das Drift-Flux-Modell berücksichtigt wird. Somit wird z.B. nicht berücksichtigt, daß sich die Höhe des Gas-Flüssigkeitsspiegels in einem Behälter verschiebt, wenn der mittlere Gasgehalt durch Änderung der Gaszufuhr zu- oder abnimmt. Allerdings ist bei vielen technischen Fragestellungen die Höhe

des Flüssigkeitsspiegels weniger entscheidend als die lokale Gasgehaltsverteilung und die durch sie induzierte Strömungsstruktur. Das gilt insbesondere für die hier betrachteten Fälle mit niedrigem Gasgehalt. Gasgehaltsverteilung und Strömungsstruktur werden aber auch mit Berücksichtigung der Boussinesq-Approximation korrekt wiedergegeben.

Demgegenüber würde die genaue Simulation von Lage und Form der Gas-Flüssigkeitsoberfläche die Berücksichtigung einer freien Oberfläche in den Randbedingungen erforderlich machen, was den Modellierungs- und den Rechenaufwand erheblich erhöht.

Herleitung der Druckgleichung. Ein weiterer Vorteil der Boussinesq-Approximation ist die Vereinfachung bei der Berechnung der Druckverteilung im Reaktor. Die Gleichungen (6.23, 6.24) liefern keine *explizite* Bedingung zur Berechnung des Druckes. Löst man die Navier-Stokes-Gleichungen (6.24) bei einem gegebenen Druckfeld nach den Geschwindigkeitskomponenten auf, so werden im allgemeinen die resultierenden Geschwindigkeitskomponenten der Kontinuitätsgleichung (6.23) **nicht** genügen. Um dieses Problem zu lösen, werden die diskretisierten Navier-Stokes-Gleichungen vereinfacht, und in die Kontinuitätsgleichung eingesetzt. So entsteht eine Druckgleichung, die zur Bestimmung des Druckfeldes benutzt wird. Da die Gleichungen (6.23, 6.24) weitgehend mit dem Navier-Stokes-System für eine inkompressible einphasige Strömung übereinstimmen, kann die Druckgleichung genau wie bei *Patankar* [93] hergeleitet werden.

Wird anstatt der Einphasenkontinuitätsgleichung (6.23) die Kontinuitätsgleichung für Gemisch (6.10) ohne Boussinesq-Approximation berücksichtigt, so läßt sich auch für diesen Fall eine Gleichung zur Bestimmung des Druckfeldes herleiten [117]. Die resultierende Druckgleichung ist allerdings nicht mehr linear wie bei einer Einphasenströmung, sondern quadratisch. Sie verliert ihre Übersichtlichkeit und ihre Lösung erfordert zusätzliche äußere Iterationen, was die notwendige Rechenzeit erheblich verlängert.

Zulässigkeit der Boussinesq-Approximation. Bei der Simulation der Naturkonvektion in Flüssigkeiten ist der mit der Annahme konstanter Fluidichte verbundener Fehler sehr klein, da die Dichteunterschiede infolge der Temperaturgradienten nur Bruchteile von einem Prozent betragen. Im Falle eines Gas-Liquid-Gemisches bedeutet der Einsatz von ρ_l statt $\varepsilon_l \rho_l$ in die Impulsbilanz einen um etwa ε_g erhöhten Betrag der Trägheitskraft. Bei kleinen Werten von ε_g , und nur solche werden im Rahmen dieser Arbeit betrachtet, hat das keinen qualitativen und kaum einen quantitativen Einfluß auf die Lösung. Beträgt der Wert des lokalen Gasgehalts in einem größeren Bereich des Berechnungsgebietes mehr als 5%, so werden quantitative Unterschiede bemerkbar. In diesem Fall sollte die tatsächliche Gemischdichte $\varepsilon_l \rho_l$ in die Impulsbilanz (6.24) eingesetzt werden:

$$\frac{\partial(\varepsilon_l \rho_l \mathbf{u}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \mathbf{u}_l \mathbf{u}_l) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mathbf{T}_l + \mathbf{T}_l^{Re}) + \rho_l \mathbf{g} - \varepsilon_g \rho_l \mathbf{g} \quad (6.25)$$

Auf das numerische Verfahren hat dies aber keinen wesentlichen Einfluß.

Von entscheidender Bedeutung für die Effektivität des numerischen Verfahrens ist allerdings der Einsatz der Einphasenkontinuitätsgleichung (6.23) anstelle von (6.10), da genau diese Vereinfachung sowohl eine effektive Modellierung der freien Oberfläche als auch die Herleitung einer einfachen Druckgleichung ermöglicht.

Um zu prüfen, ob man diese Gleichung auch bei höheren Gasgehalten einsetzen kann, seien die Kontinuitätsgleichungen der beiden Phasen noch einmal aufgeführt:

$$\begin{aligned}\frac{\partial(\varepsilon_l \varrho_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_l \varrho_l \mathbf{u}_l) &= 0 \\ \frac{\partial(\varepsilon_g \varrho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \varrho_g \mathbf{u}_g) &= 0\end{aligned}$$

Werden beide Phasen als inkompressibel betrachtet, so kann man beide Gleichungen durch die jeweils konstante Dichte teilen und addieren mit dem Ergebnis

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overbrace{(\varepsilon_l + \varepsilon_g)}^{\equiv 1}}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_l \mathbf{u}_l + \varepsilon_g \mathbf{u}_g) &= 0 \\ \iff \nabla \cdot (\varepsilon_l \mathbf{u}_l + \varepsilon_g \mathbf{u}_g) &= 0 \\ \iff \nabla \cdot \mathbf{u}_l + \nabla \cdot (\varepsilon_g (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_l)) &= 0\end{aligned}\tag{6.26}$$

Wie im Abschnitt 6.6.5 gezeigt wird ist in der Schlupfgeschwindigkeit $\mathbf{u}_{slip} = (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_l)$ die vertikale x -Komponente dominant und annähernd konstant, so daß der letzte Term auf der linken Seite von (6.26) durch

$$\nabla \cdot (\varepsilon_g (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_l)) \approx u_{slip}^x \frac{\partial \varepsilon_g}{\partial x}$$

abgeschätzt werden kann. Selbst bei hohen Gasgehaltswerten ist dieser Term relativ klein, wenn sich der Gasgehalt in der vertikalen Richtung nicht sehr stark ändert.

Diese Forderung ist offensichtlich verletzt, wenn in einem Behälter der Gaseintrag verändert wird. Wird z.Bsp. in einem nur mit Flüssigkeit gefüllten Behälter ein Bodenbegaser eingeschaltet, so wandert in den ersten Sekunden eine scharf abgegrenzte Gasfront nach oben. In der Zeit bis die Gasfront die Oberfläche erreicht hat, steigen der integrale Gasgehalt, das Gesamtvolumen des Gemisches und entsprechend die freie Oberfläche kontinuierlich an. Nach einer gewissen Zeit stellt sich ein Zustand ein, bei dem sich der integrale Gasgehalt nicht mehr stark ändert, und Gleichung (6.26) durch die Einphasenkontinuitätsgleichung (6.23) gut approximiert wird. Wird die Einphasenkontinuitätsgleichung (6.23) vom

Anfang der Berechnung an eingesetzt, so wird in der Simulation das Ansteigen der freien Oberfläche vernachlässigt. Ist der integrale Gasgehalt so hoch, daß diese Ausdehnung nicht vernachlässigt werden darf, so kann man ihren Einfluß näherungsweise berücksichtigen, indem man die Simulation mit der um den integralen Gasgehalt vergrößerten Höhe des Berechnungsgebietes neu startet.

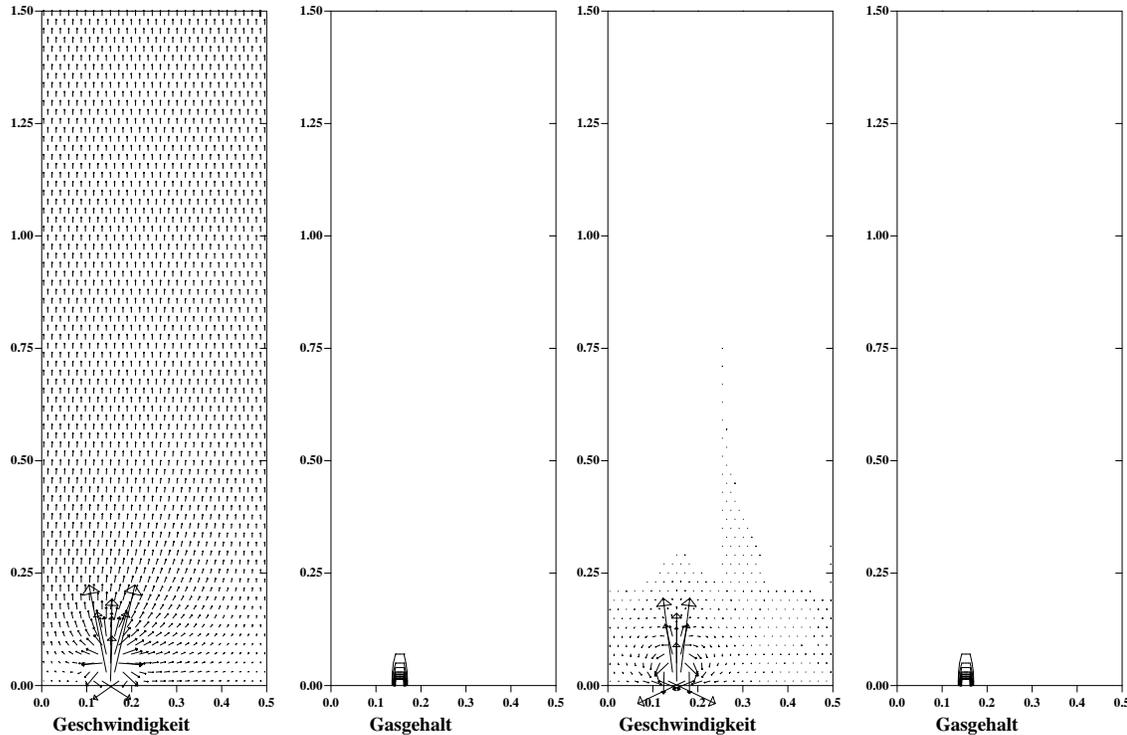


Abbildung 6.1: Anfahren einer lokal begasten Blasensäule. Simulationszeit 0.1 s. Momentaufnahme der Liquid-Geschwindigkeit und der Gasverteilung, links berechnet ohne und rechts mit Boussinesq-Approximation.

Zwei illustrative Beispiele. Der Einfluß der Boussinesq-Approximation auf die Lösung der Modellgleichungen soll nun an zwei Beispielen demonstriert werden. Im ersten Beispiel wird das Anfahrverhalten einer lokal begasten flachen Blasensäule mit dem Drift-Flux-Modell ohne und mit Boussinesq-Approximation zweidimensional simuliert. Abb.6.1 zeigt eine Momentaufnahme der Liquid-Geschwindigkeit und der Gasverteilung 0.1 s nach dem Einschalten der Begasung. Bei den Simulationsergebnissen ohne Boussinesq-Approximation (Abb.6.1, links) zeigt die Flüssigkeitgeschwindigkeit fast im gesamten Reaktor nach oben, weil die Flüssigkeit durch den Verdrängungseffekt aus dem Reaktor herausgeschoben wird. Außerdem sieht man einen deutlichen Anstieg der Geschwindigkeit in der Nähe des Begasers infolge des Auftriebseffektes.

Im Falle der Verwendung der Boussinesq-Approximation (Abb.6.1, rechts) wird der Verdrängungseffekt vernachlässigt und die Flüssigphase gerät nur in der unmittelbaren Nähe

des Begasers in Bewegung. In Abb. 6.1 werden die beiden Geschwindigkeitsfelder stark vergrößert dargestellt, da die tatsächlichen Unterschiede der mit den beiden Modellen berechneten Geschwindigkeiten im Bereich von mm/s liegen. Auf die Gasgehaltsverteilung haben diese Unterschiede somit keinen erkennbaren Einfluß.

Spätestens wenn die Gasphase den oberen Teil des Reaktors erreicht hat und sich der integrale Gasgehalt in der Blasensäule nur noch sehr wenig ändert, kann man die Strömungsbilder, die mit beiden Methoden berechnet wurden, nicht mehr voneinander unterscheiden (Abb. 6.2).

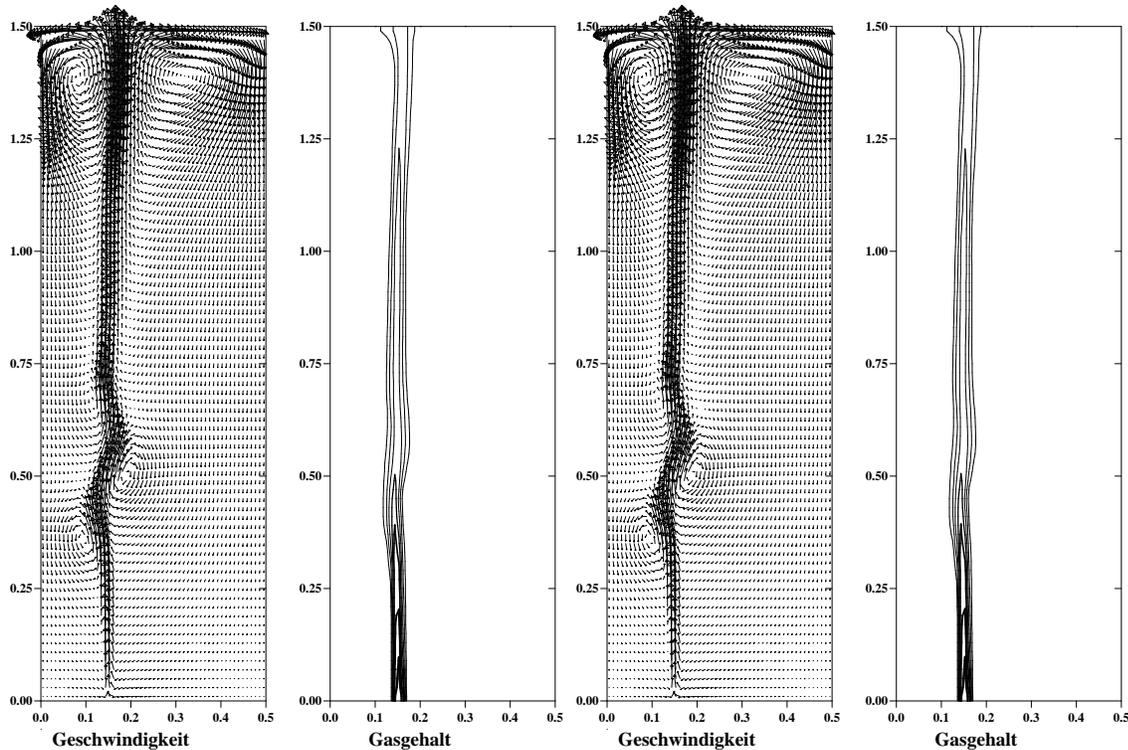


Abbildung 6.2: Wie Abb. 6.1, jedoch zum Simulationszeitpunkt von $10.0s$ (links ohne, rechts mit Boussinesq-Approximation).

Wir haben somit gesehen, daß sich der Einsatz der Boussinesq-Approximation im Drift-Flux-Modell kaum auf die Genauigkeit der Lösung auswirkt. Gleichzeitig konnte die Rechenzeit infolge der getroffenen Vereinfachungen um den Faktor 7 reduziert werden. Man beachte jedoch, daß das Drift-Flux-Modell bereits eine Vereinfachung gegenüber dem Two-Fluid-Modell darstellt.

Im zweiten Beispiel wird daher das Ergebnis einer Berechnung mit dem Drift-Flux-Modell inklusive Boussinesq-Approximation dem Ergebnis einer Simulation mit dem Two-Fluid-Modell gegenübergestellt. Es handelt sich dabei um die 3-dimensionale Berechnung eines flachen Schlaufenreaktors auf einem Gitter mit 140000 Stützstellen. Die Berechnung

mit dem Two-Fluid-Modell wurde mit dem kommerziellen Software-Paket CFX 4.2 von *D.Pfleger* (BASF) durchgeführt, die Lösung des Drift-Flux-Modells mit dem eigenen Programm.

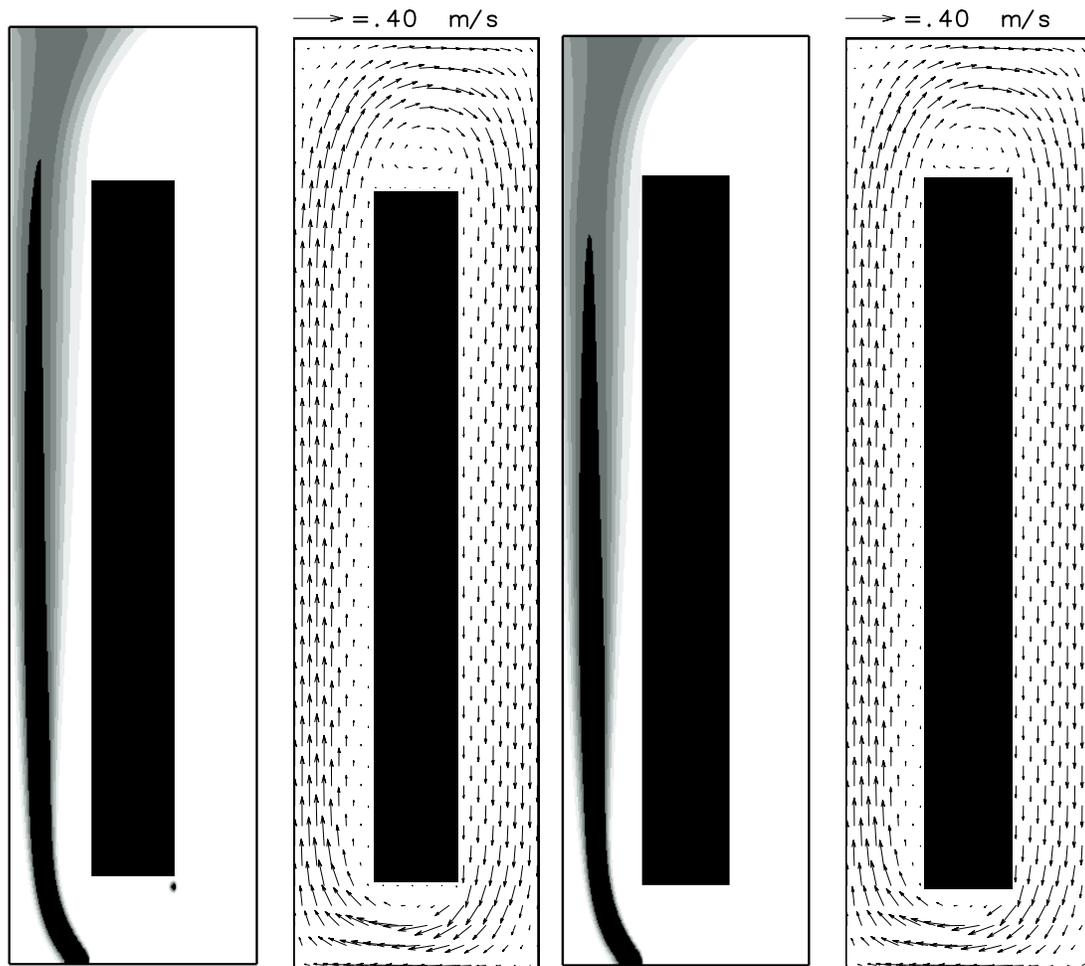


Abbildung 6.3: Tiefengemittelte Gasverteilung und Liquid-Geschwindigkeit, berechnet auf einem Gitter $140 \times 100 \times 10$, links mit CFX 4.2 und vollständigem Two-Fluid-Modell, rechts mit Drift-Flux-Modell und Boussinesq-Approximation.

In Abb. 6.3 ist die Gasverteilung sowie das Geschwindigkeitsfeld der Flüssigphase dargestellt, berechnet mit beiden Modellvarianten. Man sieht, daß die Ergebnisse sehr ähnlich sind. Um einen besseren Vergleich zu ermöglichen, sind in Abb. 6.4 die mit beiden Programmen berechneten Profile des Gasgehalts und der vertikalen Liquid-Geschwindigkeit auf unterschiedlichen Höhen gegenübergestellt. Unterschiede zwischen beiden Lösungen sind kaum zu erkennen. Die erforderlichen Rechenzeiten differieren allerdings um einen Faktor ≈ 48 (1 Stunde gegenüber etwa 2 Tagen auf einer UltraSPARC-60 Workstation). Man kann somit festhalten, daß das Drift-Flux-Modell mit Boussinesq-Approximation bei niedrigen Gasgehalten eine sehr gute Näherung des vollständigen Two-Fluid-Modells dar-

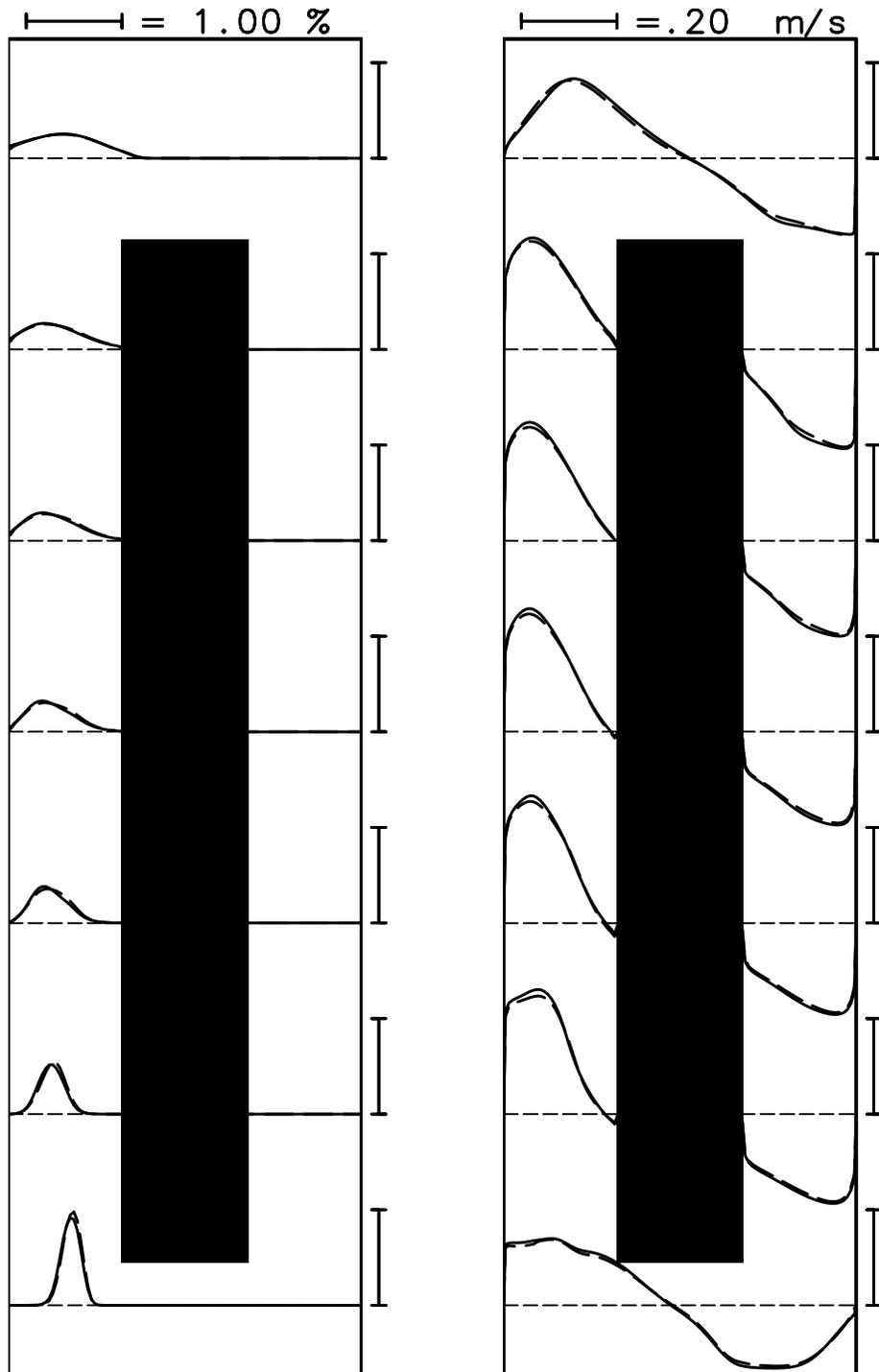


Abbildung 6.4: Profile des Gasgehalts (links) und der Liquid-Geschwindigkeit (rechts) auf unterschiedlichen Höhen, berechnet mit Two-Fluid-Modell (—) und mit dem Drift-Flux-Modell inkl. Boussinesq-Approximation (---).

stellt und numerisch wesentlich effektiver gelöst werden kann.

6.5 Erste Zwischenbilanz

Bevor wir mit der Modellbeschreibung fortfahren, soll der bisherige Stand kurz zusammengefaßt werden.

Der Ausgangspunkt für die Beschreibung einer Gas-Liquid-Blasenströmung war das Euler-Euler Two-Fluid-Modell (6.1–6.5), das aus einer Kontinuitätsgleichung und einer Impulsbilanz für jede der beiden Phasen sowie einer zusätzlichen Schließbedingung bestand. Das Modell wurde allgemein konzipiert. Einige Terme, die den Einfluß der Turbulenz auf die Strömung und die Wechselwirkungskraft zwischen den beiden Phasen beschreiben, wurden zwar eingeführt, aber noch nicht spezifiziert.

Danach wurde gezeigt, daß im Falle von Gas-Liquid-Strömung das Two-Fluid-Modell dem Drift-Flux-Modell infolge der großen Dichterunterschiede zwischen den beiden Phasen weitgehend äquivalent ist. Bei einem Drift-Flux-Modell werden die Kontinuitätsgleichung und die Impulsbilanz für die Flüssigphase durch die entsprechenden Gleichungen für das Gas-Flüssig-Gemisch ersetzt. Die beiden Bilanzgleichungen für die Gasphase bleiben unverändert.

In einem weiteren Schritt wurde die Boussinesq-Approximation eingeführt, die die Abhängigkeit der Gemischdichte vom lokalen Gasgehalt nur im Schwerkraftterm der Gemischimpulsbilanz berücksichtigt. Dadurch wurde das Navier-Stokes-System für das Gemisch auf eine Form gebracht, die sich von der Impuls- und Massebilanz für inkompressible Einphasenströmung nur durch einen zusätzlichen Auftriebsterm in der vertikalen Impulsbilanz unterscheidet. Diese Vereinfachung ermöglicht eine anschauliche Interpretation der Modellgleichungen und den Einsatz von numerischen Algorithmen für Einphasenströmungen, die nur unwesentlich modifiziert werden müssen. Es wurden die Grenzen der Anwendbarkeit der Boussinesq-Approximation diskutiert. Für Berechnung von Gas-Flüssig-Strömungen mit niedrigem Gasvolumenanteil, und nur solche werden im Rahmen dieser Arbeit untersucht, kann das vereinfachte Modell uneingeschränkt eingesetzt werden. Bei Gasvolumenanteilen von mehr als 5% sollte die Gemischimpulsbilanz (Glg. (6.25) anstelle von Glg. (6.24)) verwendet werden. Bei der Lösung der für die numerische Effizienz entscheidenden Gemischkontinuitätsgleichung kann die Boussinesq-Approximation eingesetzt werden, wenn die Verteilung des Gasgehalts keine starken Gradienten in der vertikalen Richtung aufweist. Bis auf Fälle, in denen sich die Begasung zeitlich stark ändert, ist diese Voraussetzung in der Regel erfüllt. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit gehen wir daher davon aus, daß der Einsatz der Boussinesq-Approximation zulässig ist.

Wir fassen die Modellgleichungen noch einmal zusammen. Das Drift-Flux-Modell mit Boussinesq-Approximation und (noch nicht genauer definiertem) Turbulenz-Term \mathbf{T}_l^{Re} besteht aus folgenden Gleichungen:

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_l = 0 \quad (6.27)$$

$$\frac{\partial(\varrho_l \mathbf{u}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_l \mathbf{u}_l \mathbf{u}_l) = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{T}_l + \nabla \cdot \mathbf{T}_l^{Re} + \varrho_l \mathbf{g} - \varepsilon_g \varrho_l \mathbf{g} \quad (6.28)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \varrho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \varrho_g \mathbf{u}_g) = 0 \quad (6.29)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \varrho_g \mathbf{u}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \varrho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = -\varepsilon_g \nabla p + \varepsilon_g \nabla \cdot \mathbf{T}_l + \varepsilon_g \varrho_g \mathbf{g} - \mathbf{F}_W \quad (6.30)$$

In den folgenden Abschnitten werden die Terme diskutiert, die bis jetzt noch nicht spezifiziert wurden.

6.6 Die Impulsbilanz für die Gasphase

6.6.1 Impulsbilanz für die Einzelblase

Die Impulsbilanz für die Gasphase

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \varrho_g \mathbf{u}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \varrho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = -\varepsilon_g \nabla p + \varepsilon_g \nabla \cdot \mathbf{T}_l + \varepsilon_g \varrho_g \mathbf{g} - \mathbf{F}_W \quad (6.31)$$

wird zur Berechnung der Gasgeschwindigkeit eingesetzt. Diese Gleichung wurde bis auf den Term \mathbf{F}_W definiert, der die Wechselwirkungskraft zwischen den Gasblasen und der sie umströmenden Flüssigkeit beschreibt. Dieser Term wird in der Regel aus der Impulsbilanz für die Einzelblase durch einen Mittelungsprozess abgeleitet.

Im *Two-Fluid-Modell*, welches den Ausgangspunkt für die Beschreibung der Gas-Liquid-Blasenströmung bildete, trat der Term \mathbf{F}_W sowohl in der Impulsbilanz für die Flüssigphase als auch in der Impulsbilanz für die Gasphase (mit anderem Vorzeichen) auf. In einem *Drift-Flux-Modell* tritt dieser Term nur noch in der Gasimpulsbilanz auf. In der Gemischimpulsbilanz, die aus der Summe der beiden Einzelphasenbilanzen hergeleitet werden kann, ist er eliminiert. Da wir nicht an dem Term \mathbf{F}_W selbst, sondern nur an der Gasgeschwindigkeit interessiert sind, können wir in einem ersten Schritt auch die Impulsbilanz für die *Einzelblase* zur Bestimmung der Gasgeschwindigkeit heranziehen.

Die Gleichung, welche im Lagrangeschen Bezugssystem die Bilanz der auf die Gasblase

wirkenden Kräfte beschreibt, kann folgendermaßen formuliert werden:

$$\frac{d(m_b \mathbf{u}_b)}{dt} = \mathbf{F}_{total} \quad (6.32)$$

Dabei ist m_b die Blasenmasse, \mathbf{u}_b - die Geschwindigkeit der Blase zum Zeitpunkt t , und \mathbf{F}_{total} - die Summe aller Kräfte, die auf die Blase wirken. Es werden dabei die in den folgenden Abschnitten diskutierten Summanden berücksichtigt.

6.6.2 Druckkraft

Aus einem globalen Druckgradienten resultiert die Druckkraft, die durch den folgenden Ausdruck wiedergegeben werden kann:

$$\mathbf{F}_p = -V_b \cdot \nabla p \quad (6.33)$$

V_b ist dabei das Volumen der Gasblase. Weicht der Druckgradient nur unwesentlich vom hydrostatischen Druckgradienten ab ($\nabla p \approx \rho_l \mathbf{g}$), so entspricht die Druckkraft (6.33) der nach *Archimedes* (220 v.Chr.) berechneten Auftriebskraft, die betragsmäßig gleich der Gewichtskraft der von der Gasblase verdrängten Flüssigkeit ist:

$$\mathbf{F}_p \approx -V_b \rho_l \mathbf{g}. \quad (6.34)$$

6.6.3 Schwerkraft

Der Einfluß der Schwerkraft wird durch den Ausdruck

$$\mathbf{F}_g = m_b \cdot \mathbf{g} \quad (6.35)$$

beschrieben.

6.6.4 Weitere Kräfte: Vorbemerkungen

Befindet sich eine ruhende Gasblase in einer ruhenden Flüssigkeit, so wirken keine weiteren Kräfte auf die Gasblase. Da sich aber die Gasblase relativ zu der Flüssigphase bewegt, bilden sich in der unmittelbaren Nähe der Gasblase lokale Druckstörungen und Schubspannungen aus. Im Rahmen unseres über Volumenelemente mit mehreren Gasblasen mittelnden

Modells werden diese Schwankungen jedoch nicht aufgelöst. Ihr Einfluß auf die Blasenbewegung muß deshalb aus experimentell basierten halb-empirischen Korrelationen abgeleitet werden. Da die Wechselwirkungen zwischen der Gasblase und der sie umströmenden Flüssigkeit von ziemlich komplexer Natur sind und noch nicht vollständig verstanden werden, gibt es viele unterschiedliche Ansichten darüber, wie man diese Einflüsse am besten beschreiben kann.

Auf der einen Seite stehen Arbeiten, in denen nur die Widerstandskraft berücksichtigt wird, bzw. direkt die Annahme einer konstanten Schlupfgeschwindigkeit zwischen beiden Phasen getroffen wird. Andere Veröffentlichungen berücksichtigen dagegen eine Fülle von weiteren „relevanten“ Kräften – wie z.B. die „added mass force“, die „Basset-force“ und die „lift force“ (bzw. die Magnuskraft als Spezialfall), um einige davon zu nennen. Modelle, die mehrere Kräfte berücksichtigen, werden in der Regel als „genauer“ und „vollständiger“ bewertet, als Modelle, die nur von einer einfachen Schlupfbeziehung Gebrauch machen.

Diese Beurteilung wäre allerdings nur dann gerechtfertigt, wenn die Existenz der oben genannten Kräfte, sowie die Richtigkeit von konkreten Formeln zu ihrer Berechnung nachgewiesen wäre. Herrscht dagegen über die Existenz einzelner Kräfte bzw. deren Darstellung eine große Unsicherheit, so kann es sinnvoller sein, auf ihre Berücksichtigung zu verzichten. Unter diesem Aspekt haben algebraische Schlupfmodelle durchaus ihre Rechtfertigung, zumal bei diesen Modellen in der Regel eine Schlupfgeschwindigkeit berechnet wird, die den Experimentaldaten weitgehend entspricht, was beim Einsatz von umfangreicheren Modellen nicht immer gewährleistet ist.

Die oben angesprochene Unsicherheit bezüglich der Existenz und Modellierung der einzelnen Kräfte resultiert daraus, daß die experimentelle Erfassung der auf eine Einzelblase wirkenden Kräfte (wenn überhaupt) nur unter einer Reihe von stark vereinfachenden Annahmen möglich ist, die in praxisrelevanten Fällen fast immer verletzt sind. Darauf wird in den folgenden Abschnitten näher eingegangen.

6.6.5 Widerstandskraft

Bewegt sich eine Blase in einer Flüssigkeit, so erfährt sie eine Kraft, die ihrer Bewegung entgegen wirkt, falls die Geschwindigkeit der umgebenden Flüssigkeit kleiner als die Geschwindigkeit der Blase ist. Während die Bewegung der Blase gebremst wird, erfährt die Flüssigkeit eine Beschleunigung in Richtung der Blasenbewegung. Diese Widerstandskraft F_d läßt sich in allgemeiner Form wie folgt darstellen (Index „d“ steht für den englischen

Ausdruck „drag force“):

$$\mathbf{F}_d = -\frac{1}{2}C_d \varrho_l \pi \frac{d_b^2}{4} |\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_l| (\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_l) \quad (6.36)$$

Hier wurde mit d_b der (äquivalente) Blasendurchmesser bezeichnet. C_d steht für einen dimensionslosen Ausdruck, der in der Literatur als *Widerstandsbeiwert* bezeichnet wird (englisch: „drag coefficient“). Bei kleinen Blasen-Reynoldszahlen

$$Re := \frac{\varrho_l d_b |\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_l|}{\mu_l} < 0.1 \quad (6.37)$$

kann die Widerstandskraft und somit der Widerstandsbeiwert unter der Annahme schleicher Strömung analytisch berechnet werden:

$$C_d = \frac{24}{Re} \quad (6.38)$$

Diese Formel setzt voraus, daß es sich um ein kugelförmiges Teilchen mit einer starren Oberfläche handelt. Da bereits geringe Verunreinigungen die Beweglichkeit der Phasengrenzfläche und die interne Zirkulation unterbinden, kann die Gleichung (6.38) auch für sehr kleine Blasen verwendet werden.

Für die Einzelblase, die mit konstanter Geschwindigkeit in der ruhenden Flüssigkeit aufsteigt, lässt sich die Blasenaufstiegsgeschwindigkeit aus dem Kräftegleichgewicht zwischen Druckkraft, Schwerkraft und Widerstandskraft berechnen. Vernachlässigt man die Schwerkraft gegenüber der Druckkraft, so ergibt sich folgender Ausdruck für die Aufstiegsgeschwindigkeit:

$$u_{rise} = \sqrt{\frac{4}{3} \cdot \frac{d_b g}{C_d}} \quad (6.39)$$

Wird der Widerstandsbeiwert C_d nach (6.38) berechnet, so ergibt sich aus (6.39) für eine Gasblase mit einem Durchmesser von 5mm in einem Luft/Wasser-System eine Blasenaufstiegsgeschwindigkeit von 13.65m/s , was um einen Faktor von etwa 60(!) die experimentell ermittelten Werte von $20 - 25\text{cm/s}$ übersteigt.

Da Gleichung (6.38) bei höheren Reynoldszahlen nicht benutzt werden darf, muß die Widerstandskraft in solchen Fällen experimentell ermittelt werden. Dimensionsanalytische Überlegungen führen zu dem Ergebnis, daß im Falle einer *starrten kugelförmigen Partikel* der Widerstandsbeiwert eine Funktion der Partikel-Reynoldszahl allein sein muß. Um die Abhängigkeit des C_d -Wertes von Reynoldszahl Re zu bestimmen, reicht es aus, bei einem beliebig gewählten Partikeldurchmesser und für eine beliebig gewählte newtonsche Flüssigkeit die Widerstandskraft bei unterschiedlich hohen Relativgeschwindigkeiten zu messen.

Die entsprechenden Experimente lassen sich relativ einfach durchführen, indem man die Partikel mit einer (beliebigen) konstanten Geschwindigkeit durch eine sich im Ruhezustand befindliche Flüssigkeit zieht, und die dafür notwendige Zugkraft direkt mißt. Aus der so ermittelten Widerstandskraft läßt sich dann der Widerstandsbeiwert berechnen. Die resultierende Abhängigkeit des Widerstandsbeiwertes von der Reynoldszahl kann analytisch folgendermaßen approximiert werden [16]:

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re}(1 + 0.15Re^{0.687}), & \text{wenn } Re < 1000 \\ 0.44, & \text{wenn } Re \geq 1000 \end{cases} \quad (6.40)$$

Für die Gasblasen gilt diese Beziehung nur, wenn sie nicht deformiert sind und eine starre Oberfläche vorliegt, was nur bei sehr kleinen Gasblasen angenommen werden kann. Wird der Widerstandsbeiwert C_d nach (6.40) berechnet, so ergibt sich aus (6.39) für einen Blasendurchmesser von 5mm eine Blasenauftiegs geschwindigkeit von 38.6cm/s , was zwar wesentlich genauer ist als Glg. (6.38), aber immerhin noch eine etwa 70%-ige Überschätzung gegenüber den experimentell ermittelten Werten bedeutet.

Wie wir gesehen haben, beeinflußt die Größe des Widerstandsbeiwerts unmittelbar die Blasenauftiegs geschwindigkeit bzw. die Schlupfgeschwindigkeit zwischen beiden Phasen. Wird die Blasengeschwindigkeit falsch berechnet, so führt dies zu einer inkorrekt berechneten Verteilung der Gasphase im Reaktor. Da in einem durch das Gas angetriebenen System die Strömungsform sehr stark von der Gasgehaltsverteilung abhängt, ist eine ausreichend genaue Berechnung des Widerstandsbeiwerts mitentscheidend für die Qualität der numerischen Simulation.

Eine genaue Bestimmung des Widerstandsbeiwerts für Gasblasen erweist sich allerdings als eine äußerst schwierige Aufgabe. Die Gasblase ist weder rund noch starr. Die Korrelationen für den Widerstandsbeiwert sollten die Deformation der Gasblase sowie die Zirkulation des Gases im Blaseninneren berücksichtigen. Diese Korrelationen müssten daher außer der Blasen-Reynoldszahl die Abhängigkeit von anderen dimensionslosen Kennzahlen enthalten, die für die Blasendeformation von Bedeutung sind, wie z.B. Eötvöszahl ($E\ddot{o}$) und Mortonzahl (Mo) oder Weberzahl (We), die folgendermaßen definiert sind (wir nehmen an, daß $\varrho_g \ll \varrho_l$ gilt, und verwenden deshalb einfachheitshalber ϱ_l anstelle von $(\varrho_l - \varrho_g)$):

$$E\ddot{o} = \frac{g\varrho_l d_b^2}{\sigma}$$

$$Mo = \frac{g\mu_l^4}{\varrho_l \sigma^3}$$

$$We = \frac{\varrho_l |\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_l|^2 d_b}{\sigma}$$

Hier bezeichnet σ die Oberflächenspannung (für das Wasser gilt $\sigma \approx 0.07 \text{ kg/s}^2$). Da die meisten Simulationen für das Wasser/Luft-System durchgeführt wurden, beschränken wir uns im weiteren Verlauf bei der Beurteilung von verschiedenen Ansätzen ausschließlich auf dieses Stoffsystem.

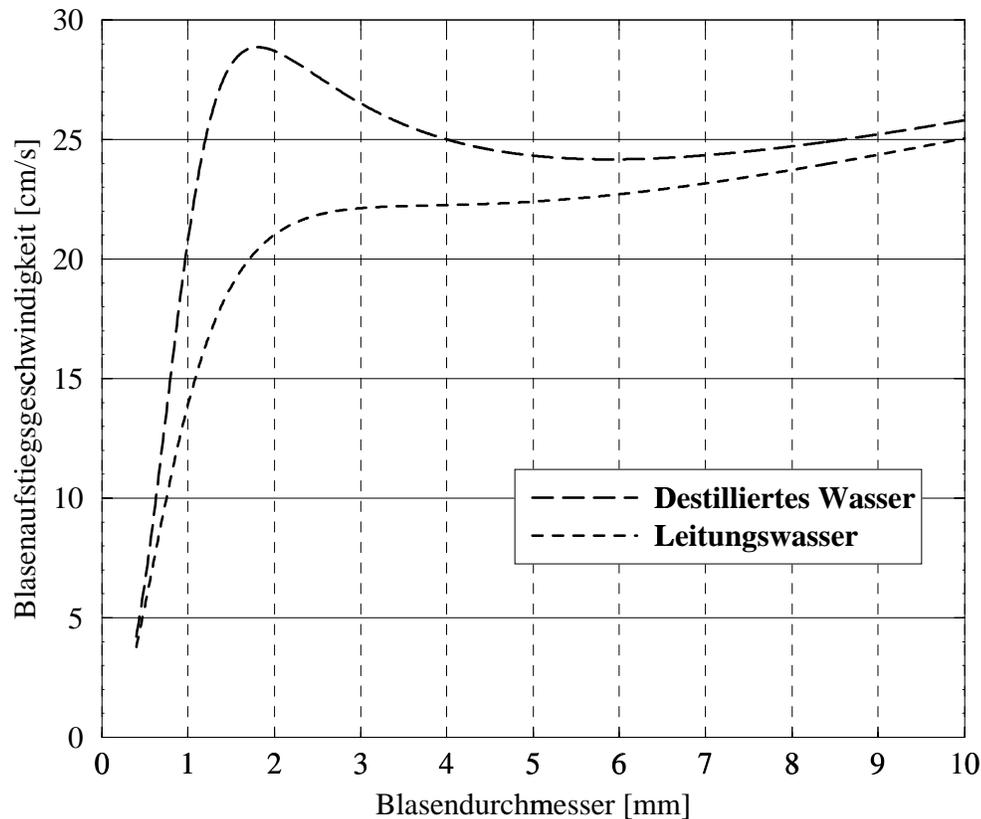


Abbildung 6.5: Aufstiegsgeschwindigkeit u_{rise} von Einzelblasen in Wasser in Abhängigkeit vom äquivalenten Blasendurchmesser d_b . An Meßergebnisse von *Haberman und Morton* [37] angepaßte Kurven nach [29].

Eine zuverlässige Bestimmung empirischer Korrelationen wird dadurch erschwert, daß eine direkte Messung der Widerstandskraft von Gasblasen in Abhängigkeit der Relativgeschwindigkeit unmöglich ist. Im Gegensatz zu einer starren Kugel läßt sich eine Gasblase nicht mit einer konstanten Geschwindigkeit durch eine ruhende Flüssigkeit ziehen. Der Widerstandsbeiwert kann deshalb bei einem vorgegebenen Blasendurchmesser nur für **den** Wert der Relativgeschwindigkeit berechnet werden, der gleich der Blasenaufstiegsgeschwindigkeit ist. Wird dabei der Blasendurchmesser variiert, so liegt als Meßergebnis ein Diagramm vor, das die Abhängigkeit der Blasenaufstiegsgeschwindigkeit vom Blasendurchmesser beschreibt. Dabei unterliegen die Meßergebnisse großen Schwankungen, da die Blasenaufstiegsgeschwindigkeit stark von der Reinheit des Wassers abhängt. In Abbildung 6.5 sind

analytisch berechnete Kurven dargestellt, die nach Glng. (2.11) aus [29] an die Meßergebnisse von *Haberman und Morton* [37] für destilliertes Wasser und für Leitungswasser angepaßt wurden. Man sieht, daß insbesondere im Bereich $1\text{mm} < d_b < 2\text{mm}$ große Unterschiede in der Aufstiegsgeschwindigkeit von Einzelblasen beobachtet wurden. Diese Unterschiede sind darauf zurückzuführen, daß infolge von oberflächenaktiven Verunreinigungen im Leitungswasser die Grenzfläche immobilisiert wird, was die Herabsetzung der Aufstiegsgeschwindigkeit verursacht [132].

Da die vorliegende experimentelle Information nicht ausreicht, um den Widerstandsbeiwert C_d als eine Funktion von drei dimensionslosen Kennzahlen eindeutig zu bestimmen, ist die Anzahl unterschiedlicher Korrelationen hoch. Wir wollen einige davon etwas genauer untersuchen. Dabei erwarten wir von einer empirischen Korrelation für den Widerstandsbeiwert C_d , daß ihr Einsatz in die Gleichung (6.39) Blasenauftiegseschwindigkeiten u_{rise} liefert, die zwischen den beiden in Abb.6.5 dargestellten Meßkurven liegen. Wir beschränken uns dabei auf die Blasendurchmesser von 2mm bis 6mm , da in den meisten zur Validierung von Zweiphasenmodellen verwendeten Testfällen die experimentell ermittelte Blasengröße innerhalb dieser Grenzen liegt (s. z.B. [9]).

Wir beginnen mit der „Feststoff-Formel“ (6.40), die wir als „**Korrelation A**“ bezeichnen werden. Obwohl der Einsatz dieser Formel in die Beziehung (6.39) für Blasendurchmesser oberhalb von 3mm deutlich überhöhte Blasenauftiegseschwindigkeiten liefert (vgl. Abb. 6.6, oben links), wird sie von vielen Autoren bei der Simulation von Blasenströmungen eingesetzt (*Delnoij et al.* [20, 21], *Djebbar et al.* [25], *Kuwagi und Ozoe* [63], *Mudde und Simonin* [86], *Sommerfeld et al.* [115]). Nicht in allen Arbeiten werden die dabei eingesetzten Blasendurchmesser angegeben, so daß nicht immer festgestellt werden kann, ob die aus der „Feststoff-Formel“ resultierende Relativgeschwindigkeit zwischen beiden Phasen in dem mit den Meßdaten übereinstimmenden Bereich ($2\text{mm} < d_b < 2.7\text{mm}$) liegt oder nicht. *Sommerfeld et al.* [115] sowie *Mudde und Simonin* [86] gehen bei der Simulation einer lokal begasten Blasensäule aus [8] von einem Blasendurchmesser von $d_b = 3\text{mm}$ aus, was zwar mit dem im zugrundeliegenden Experiment ermittelten mittleren Blasendurchmesser übereinstimmt, bei der Verwendung der Korrelation A jedoch in einer überhöhten Blasenauftiegseschwindigkeit von etwa 29cm/s resultiert. *Delnoij et al.* verwenden für denselben Testfall einen fiktiven Blasendurchmesser von 2mm . Das entspricht zwar nicht dem experimentell ermittelten Wert, dafür wird in diesem Fall eine realistischere Blasenauftiegseschwindigkeit von 20.8cm/s berechnet.

Als nächstes untersuchen wir eine Korrelation, die von *Tomiyama et al.* [121] 1995 vorgeschlagen (s. auch [126]) und von *Pan et al.* [90, 91] sowie *Tomiyama* [123] zur Simulation

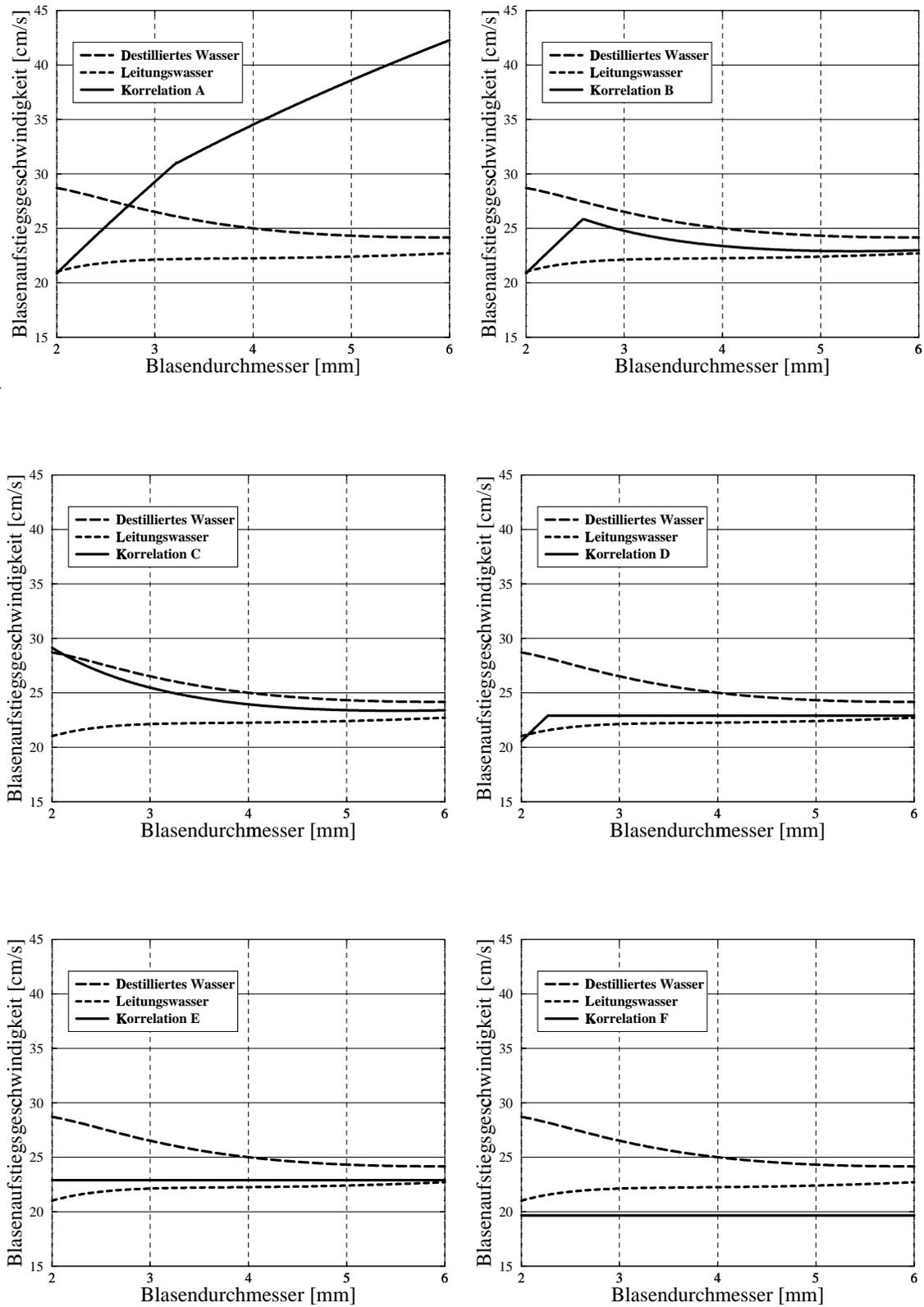


Abbildung 6.6: Einzelblasenaufstiegsgeschwindigkeit u_{rise} in Wasser in Abhängigkeit vom äquivalenten Blasendurchmesser d_b , berechnet nach (6.39) für 6 unterschiedliche empirische Korrelationen für C_d .

von gleichmäßig und lokal begasten Blasensäulen eingesetzt wurde:

$$C_d = \max \left[\frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}), \frac{8}{3} \cdot \frac{E\ddot{o}}{E\ddot{o} + 4} \right] \quad (6.41)$$

Diese Formel, die wir als „**Korrelation B**“ bezeichnen werden, stimmt für kleine Reynoldszahlen mit der Feststoff-Formel (6.40) überein. Ab einer Blasengröße von etwa $d_b = 2.6\text{mm}$ wird der Widerstandsbeiwert durch den zweiten Ausdruck in (6.41) bestimmt. Dieser sorgt dafür, daß die Korrelation B auch für größere Blasen zur Aufstiegsgeschwindigkeiten führt, die innerhalb des Meßbereichs liegen (vgl. Abb. 6.6, oben rechts).

Bhanu und Mazumdar [10], *Jakobsen et al.* [53], *Johansen und Boysan* [55], *Ranade und van den Akker* [97] verwenden folgende „**Korrelation C**“, die nur von der Eötvöszahl abhängt:

$$C_d = \frac{0.622}{\frac{1.0}{E\ddot{o}} + 0.235} \quad (6.42)$$

Sie darf jedoch nur für Blasen ab 2mm Durchmesser eingesetzt werden, da mit abnehmendem Blasendurchmesser der nach (6.42) berechnete Widerstandsbeiwert gegen Null geht, weshalb für kleinere Blasen eine stark überhöhte Aufstiegsgeschwindigkeiten berechnet wird. Für Blasendurchmesser oberhalb von $d_b = 2.6\text{mm}$ stimmen die mit Korrelationen B und C berechneten Aufstiegsgeschwindigkeiten ziemlich genau überein (vgl. Abb. 6.6, mitte links). Schreibt man die Korrelation C folgendermaßen um:

$$C_d = \frac{7.464}{3} \cdot \frac{E\ddot{o}}{0.94E\ddot{o} + 4}, \quad (6.43)$$

so wird die Ähnlichkeit mit dem 2. Teil des Ausdruckes (6.41) offensichtlich.

Die von *Kuo und Wallis* [61] für das Stoffsystem Leitungswasser/Luft ermittelte Formel, die wir als „**Korrelation D**“ bezeichnen werden, wirkt recht komplex:

$$C_d = \begin{cases} 24/Re, & \text{wenn } Re < 0.49 \\ 20.68/Re^{0.643}, & \text{wenn } 0.49 < Re < 100 \\ 6.3/Re^{0.385}, & \text{wenn } Re > 100, We \leq 8, Re \leq 2065.1/We^{2.6} \\ We/3, & \text{wenn } Re > 100, We \leq 8, Re > 2065.1/We^{2.6} \\ 8/3, & \text{wenn } Re > 100, We > 8 \end{cases} \quad (6.44)$$

Sie wurde von *Boisson und Malin* [11], *Ilegbusi et al.* [48], *Jenne* [54] zur numerischen Simulation von Blasenströmungen eingesetzt. Der Einsatz dieser Formel für Luftblasen im Wasser resultiert in einer Blasenauftstiegsgeschwindigkeit, die für Blasendurchmesser oberhalb von $d_b = 2.27\text{mm}$ nicht mehr von der Blasengröße abhängt, solange für die Weberzahl

$We \leq 8$ gilt (vgl. Abb. 6.6, mitte rechts). Einsatz von $C_d = We/3$ in (6.39) führt dabei zu folgendem Ausdruck

$$u_{rise} = \sqrt[4]{\frac{4\sigma g}{\rho_l}} \approx 22.9 \frac{cm}{s}. \quad (6.45)$$

Das in der letzten Zeit häufig eingesetzte Softwarepaket CFX 4.2 verwendet folgende Formel („**Korrelation E**“) zur Berechnung des Widerstandsbeiwertes

$$C_d = \frac{2}{3} E \ddot{o}^{\frac{1}{2}} \quad (6.46)$$

Setzt man die Definition der Eötvöszahl in diese Formel ein, so kann man die Korrelation E auch folgendermaßen darstellen:

$$C_d = \frac{2}{3} d_b \sqrt{\frac{g \rho_l}{\sigma}} \quad (6.47)$$

In dieser Form wird Korrelation E von *Morud* [83] sowie *Morud und Hjertager* [84] für die Simulation von gleichmäßig begasten Blasensäulen und begasten Rührkesseln eingesetzt und stimmt mit der von *Ishii und Zuber* in [51] vorgeschlagenen Korrelation überein. Setzt man diese Formel in die Beziehung (6.39) ein, so stellt man überraschenderweise fest, daß hinter der Korrelation E ebenfalls die Annahme einer *blasengrößenunabhängigen* Aufstiegs geschwindigkeit steckt (vgl. Abb. 6.6, unten links). Diese kann nach der Formel (6.45) berechnet werden und beträgt somit ebenfalls $\approx 22.9 cm/s$, und zwar nicht nur für Blasendurchmesser oberhalb von $d_b = 2.27 mm$, sondern für alle Blasengrößen.

Korrelationen D und E sind nicht die einzigen Ansätze, die zu einer (zumindest in einem großen d_b -Bereich) blasengrößenunabhängigen Aufstiegs geschwindigkeit führen. Eine sehr einfache Beziehung stammt von *Schwarz und Turner* [105]. Sie fassen das Produkt $\frac{1}{2} C_d \rho_l \pi \frac{d_b^2}{4} |\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_l|$ zu $C_w V_b$ zusammen, so daß der Ausdruck (6.36) für die Widerstandskraft zu

$$\mathbf{F}_d = -C_w V_b (\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_l) \quad (6.48)$$

vereinfacht wird und geben für C_w folgenden konstanten Wert an („**Korrelation F**“):

$$C_w = 5 \cdot 10^4 \frac{kg}{m^3 s} \quad (6.49)$$

Die Aufstiegs geschwindigkeit ergibt sich mit dieser Gleichung zu ungefähr $20 cm/s$, was ebenfalls mit den experimentell gefundenen Werten mit brauchbarer Genauigkeit übereinstimmt (vgl. Abb. 6.6, unten rechts). Der Einsatz von einem etwas kleineren Wert („**Korrelation \bar{F}** “)

$$\bar{C}_w = 4.29 \cdot 10^4 \frac{kg}{m^3 s} \quad (6.50)$$

würde sogar zu einem Ergebnis führen, das mit der aus den Korrelationen D und E berechneten Blasenauftiegs geschwindigkeit von $\approx 22.9 \text{ cm/s}$ übereinstimmt. Wir werden den Wert (6.50) später für einen detaillierteren Vergleich zwischen Korrelationen D, E und \bar{F} verwenden. Wegen ihrer Einfachheit wird die Korrelation F von vielen Autoren eingesetzt (*Becker et al.* [8], *Deng et al.* [23], *Grienberger und Hofmann* [34], *Hillmer et al.* [43], *Kuzmin* [64], *Lapin et al.* [71], *Sokolichin und Eigenberger* [110], *Svendsen et al.* [119], *Torvik und Svendsen* [124]).

Zusammenfassend können wir feststellen, daß bis auf die Feststoff-Formel (6.40) alle untersuchten Korrelationen sinnvolle Ergebnisse für die Blasenauftiegs geschwindigkeit liefern. Die resultierenden Kurven unterscheiden sich nur unwesentlich voneinander, nehmen für Luftblasen im Wasser Werte im Bereich zwischen 20 cm/s und 30 cm/s an, und zeigen (wie die Meßdaten auch) nur wenig Abhängigkeit vom eingesetzten Blasendurchmesser.

Der durchgeführte Vergleich bezog sich allerdings auf einen speziellen Fall: wir untersuchten die Aufstiegs geschwindigkeit einer Einzelblase in einer ruhenden Flüssigkeit. Nun nehmen wir an, daß die Flüssigkeit geschwindigkeit von Null verschieden ist. Beschränkt man sich bei der Betrachtung der Wechselwirkungskräfte ausschließlich auf die Widerstandskraft, so lautet die Impulsbilanz für die Einzelblase im Lagrangeschen Bezugssystem

$$\begin{aligned} \frac{d(m_b \mathbf{u}_b)}{dt} &= \mathbf{F}_p + \mathbf{F}_g + \mathbf{F}_d \\ &= -V_b \cdot \nabla p + m_b \cdot \mathbf{g} - \frac{1}{2} C_d \varrho_l \pi \frac{d_b^2}{4} |\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_l| (\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_l). \end{aligned} \quad (6.51)$$

Für mäßige Gasdichten kann der Einfluß der Schwerkraft in dieser Gleichung vernachlässigt werden. Wegen der niedrigen Dichte der Gasphase wird der Gleichgewichtszustand zwischen der Druck- und der Widerstandskraft innerhalb von einigen Millisekunden erreicht, so daß der Einfluß des Trägheitstermes ebenfalls keine Rolle spielt. Definiert man die Schlupfgeschwindigkeit zwischen beiden Phasen als

$$\mathbf{u}_{slip} = \mathbf{u}_b - \mathbf{u}_l, \quad (6.52)$$

so erhält man aus $0 = \mathbf{F}_p + \mathbf{F}_d$ unter Einsatz von $V_b = \pi d_b^3/6$ folgende Gleichung zu Berechnung von \mathbf{u}_{slip} :

$$\frac{3}{4} \frac{C_d}{d_b} \varrho_l |\mathbf{u}_{slip}| \mathbf{u}_{slip} = -\nabla p. \quad (6.53)$$

Nimmt man weiterhin an, daß der Druckgradient sich nur wenig vom hydrostatischen Druckgradienten unterscheidet (was bei blaseninduzierten Strömungen mit niedrigen

Gasgehalten immer der Fall ist), so gilt wegen $\frac{\partial p}{\partial x} \approx -\rho_l g$, $\frac{\partial p}{\partial y} \approx 0$, $\frac{\partial p}{\partial z} \approx 0$:

$$u_{slip}^x \approx \sqrt{\frac{4}{3} \cdot \frac{d_b g}{C_d}} \quad (6.54)$$

$$u_{slip}^y \approx 0, \quad u_{slip}^z \approx 0 \quad (6.55)$$

Das bedeutet, daß unter den gemachten Voraussetzungen die Relativgeschwindigkeit zwischen beiden Phasen gleich der Aufstiegsgeschwindigkeit einer Einzelblase in ruhender Flüssigkeit ist (vgl. (6.39)). Damit liefern die Korrelationen B – F nicht nur für die Blasenanstiegsgeschwindigkeiten, sondern auch für Schlupfgeschwindigkeit zwischen beiden Phasen in einem dynamischen Strömungsfeld weitgehend ähnliche Ergebnisse. Wie die Blasenanstiegsgeschwindigkeit, hängt auch die Schlupfgeschwindigkeit bei einem konstanten Druckgradienten allein vom Blasendurchmesser ab. Wird in einem Zweiphasenmodell die Abhängigkeit des Blasendurchmessers von Druck vernachlässigt, so braucht die Schlupfgeschwindigkeit nach (6.54, 6.55) nur einmal berechnet zu werden. Diese Überlegungen zeigen, daß der Einsatz von algebraischen Schlupfmodellen, in denen die Gasgeschwindigkeit als Summe von Liquidgeschwindigkeit und einem konstanten Schlupf berechnet wird, durchaus seine Rechtfertigung besitzt.

Auch wenn sich der dynamische Druckgradient bei niedrigen Gasgehalten nur unwesentlich vom statischen Druckgradienten unterscheidet, gibt es dennoch Fälle, in welchen diese Unterschiede eine wichtige Rolle spielen. Dazu gehört insbesondere die Simulation einer gleichmäßig begasten Blasensäule. Wir werden die Simulation einer Blasenströmung in einer gleichmäßig begasten Blasensäule in einem weiteren Kapitel noch ausführlich besprechen. An dieser Stelle sei nur vermerkt, daß ein (experimentell nachgewiesener) dynamischer Strömungszustand in einer gleichmäßig begasten Blasensäule nur dann durch die Simulation wiedergegeben werden kann, wenn das mathematische Modell eine horizontale, von Null verschiedene Relativgeschwindigkeit zwischen beiden Phasen zuläßt. Geht man allerdings davon aus, daß sich der dynamische Druckgradient vom hydrostatischen Druckgradienten nicht unterscheidet, so sind die Horizontalkomponenten u_{slip}^y, u_{slip}^z gleich Null (s. (6.55)). Im Falle einer gleichmäßig begasten Blasensäule darf diese Vereinfachung somit nicht getroffen werden, und die Schlupfgeschwindigkeit sollte stattdessen aus der allgemeineren Beziehung (6.53) berechnet werden. Diese Prozedur ist jedoch viel rechenaufwendiger, da der Widerstandsbeiwert in den meisten Korrelationen eine nichtlineare Funktion von Schlupfgeschwindigkeit ist. Die Auflösung von Gleichung (6.53) nach Komponenten der Schlupfgeschwindigkeit kann damit nur auf einem iterativen Wege erfolgen, und zwar in jedem einzelnen Kontrollvolumen, deren Anzahl bei 3-D Simulationen oft die Einhunderttausendgrenze übersteigt. Die Korrelation F liefert hier eine rechenzeitsparende Alternative. Da der hier eingesetzte C_w -Wert keine Abhängigkeit von der Schlupfgeschwindigkeit auf-

weist, kann diese explizit aus der Relation

$$\mathbf{u}_{slip} = -\frac{\nabla p}{C_w} \quad (6.56)$$

berechnet werden.

Nichtgleichgewichtszustände. Alle bisher diskutierten Korrelationen für den Widerstandsbeiwert wurden für den Fall eines hydrostatischen Druckgradienten bzw. für den Fall einer diesem Gradienten entsprechenden Blasenauftiegs geschwindigkeit getestet. Oft werden diese Korrelationen allerdings in Situationen eingesetzt, in denen sich die Blasen geschwindigkeiten von den bis jetzt diskutierten Bedingungen unterscheiden. Die damit verbundenen Unsicherheiten sollen an einem Beispiel illustriert werden.

Wir betrachten dazu eine Gasblase mit einem Durchmesser von 5mm . Steigt diese Blase in einem ruhendem Wasser auf, so erfährt sie eine Druckkraft, deren Betrag sich durch

$$|\mathbf{F}_p| = -V_b \cdot \frac{\partial p}{\partial x} = \pi d_b^3/6 \cdot \rho_l g = 6.43 \cdot 10^{-4} \text{N} \quad (6.57)$$

berechnen läßt. Gleichzeitig erfährt sie seitens der Flüssigphase die Widerstandskraft, deren Betrag sich aus der Beziehung (6.36) folgendermaßen darstellen läßt:

$$|\mathbf{F}_d| = \frac{1}{2} C_d \rho_l \pi \frac{d_b^2}{4} |\mathbf{u}_b|^2 = 0.0098 [\text{kg}/\text{m}] \cdot C_d \cdot |\mathbf{u}_b|^2. \quad (6.58)$$

Wird das Produkt $\frac{1}{2} C_d \rho_l \pi \frac{d_b^2}{4} |\mathbf{u}_b|^2$ zu $\overline{C}_w V_b$ zusammengefaßt, so kann man auch folgende Beziehung verwenden:

$$|\mathbf{F}_d| = \overline{C}_w V_b |\mathbf{u}_b| = 65.45 \cdot 10^{-9} [\text{m}^3] \cdot \overline{C}_w \cdot |\mathbf{u}_b| \quad (6.59)$$

Wir setzen nun Korrelationen D und E zur Berechnung des Widerstandsbeiwertes C_d in die Formel (6.58), sowie Korrelation \overline{F} für die Größe \overline{C}_w in die Darstellung (6.59) ein, und berechnen die daraus resultierenden Beträge der Widerstandskraft in Abhängigkeit von der Blasen geschwindigkeit $|\mathbf{u}_b|$. Ergebnisse dieser Berechnungen sind in der Abb. 6.7 graphisch dargestellt. Man sieht, daß bei einer Blasen geschwindigkeit von $|\mathbf{u}_b| = 22.9\text{cm}/\text{s}$ der Betrag der Widerstandskraft in allen drei Fällen gleich groß ist. Er stimmt mit dem in (6.57) berechneten Betrag der Druckkraft überein. Das bedeutet, daß beim Einsatz von allen drei Korrelationen der Wert $|\mathbf{u}_b| = 22.9\text{cm}/\text{s}$ der Blasen endgeschwindigkeit entspricht, da in diesem Fall ein Gleichgewicht zwischen Druck- und Widerstandskraft erreicht wird. Für alle anderen Werte der Blasen geschwindigkeit weichen die mit den drei Korrelationen berechneten Beträge der Widerstandskraft jedoch stark voneinander ab. Diese Schlußfolgerung betrifft allgemein die Bestimmung der Widerstandskraft bei Werten der Schlupfgeschwindigkeit, die sich von der Endgeschwindigkeit wesentlich unterscheiden. Da eine

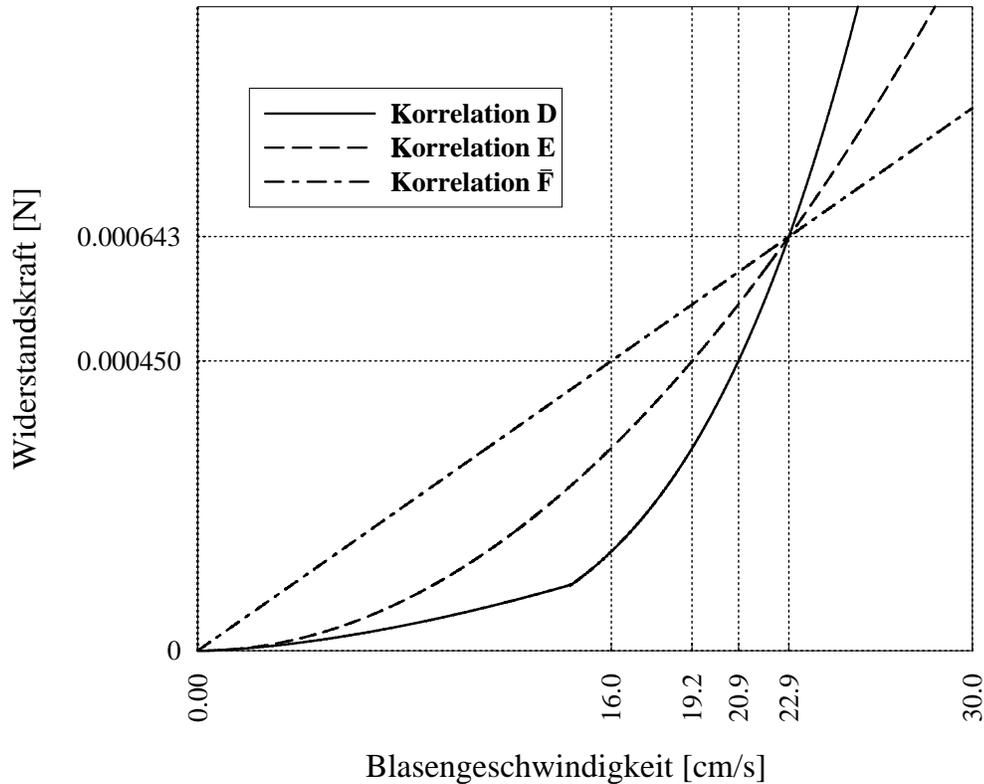


Abbildung 6.7: Betrag der Widerstandskraft $|\mathbf{F}_d|$ in Abhängigkeit von Blasengeschwindigkeit für eine Blase mit 5 mm Durchmesser, berechnet nach Korrelationen D, E, und \bar{F} .

direkte Messung der Widerstandskraft in diesem Fall jedoch nicht möglich ist, ist der Einsatz von unterschiedlichen empirischen Korrelationen, die für den Gleichgewichtszustand angepaßt wurden, in einem Nichtgleichgewichtszustand problematisch.

Zum Glück sind die Nichtgleichgewichtszustände beim Blasenauftstieg in der Regel nur von äußerst kurzer Dauer. Wegen der niedrigen Dichte der Gasphase wird bei einer Störung das Kräftegleichgewicht zwischen Druckkraft und Widerstandskraft so schnell wiederhergestellt, daß die Unterschiede in der Darstellung der Widerstandskraft während der Übergangsphase kaum einen Einfluß auf die Berechnung der Blasentrajektorie haben. Es gibt jedoch einen Sonderfall, bei welchem die Unterschiede in den Verläufen von drei Kurven aus Abb. 6.7 sehr wohl einen bedeutenden Einfluß auf die Simulationsergebnisse haben können. In unseren bisherigen Überlegungen gingen wir davon aus, daß sich der an der Blase anliegende Druckgradient nicht deutlich vom hydrostatischen unterscheidet. Bei blaseninduzierten Strömungen mit niedrigen lokalen Gasgehalten ist diese Annahme durchaus gerechtfertigt. Oft werden die oben angegebenen Korrelationen allerdings auch für den Fall einer gleichmäßig begasten Blasensäule in einem heterogenen Strömungszustand eingesetzt, wobei die integralen Gasgehalten nicht selten im Bereich von 30% und mehr liegen. In die-

sem Fall ist der an der Blase anliegende Druckgradient ebenfalls um etwa 30% kleiner, als der hydrostatische, da die Gemischdichte proportional mit dem Liquid-Gehalt abnimmt. Für eine Blase mit einem Durchmesser von 5mm würde das z.B. bedeuten, daß die auf sie wirkende Druckkraft nicht mehr $6.43 \cdot 10^{-4}\text{N}$ (wie in (6.57) berechnet), sondern lediglich $4.50 \cdot 10^{-4}\text{N}$ beträgt. In diesem Fall wird das Gleichgewicht zwischen Druckkraft und Widerstandskraft beim Einsatz von Korrelationen D, E und \bar{F} nicht mehr bei einer und derselben Blasengeschwindigkeit erreicht, sondern es ergeben sich 3 unterschiedliche Werte: 20.9cm/s , 19.2cm/s und 16.0cm/s (s. Abb. 6.7). Dieser Unterschiede sollte man sich beim Einsatz von Blasenauftiegskorrelationen für Fälle mit nicht hydrostatischer Druckverteilung immer bewußt sein.

Widerstandsbeiwerte im Blasenschwarm. Alle bisher besprochenen Korrelationen für den Widerstandsbeiwert bezogen sich auf die einzelne aufsteigende Gasblase. Befindet sich die Gasblase jedoch in einem Blasenschwarm, so senken die Nachbarblasen zum einen (wie oben diskutiert) den hydrostatischen Druckgradienten. Zum anderen haben sie aber auch einen Einfluß auf die Blasen-Umströmung, was zu einer Änderung des Widerstandverhaltens der Flüssigkeit führen kann. Modellmäßig wird dieser Einfluß dadurch berücksichtigt, daß die Korrelationen für den Widerstandsbeiwert, die für eine Einzelblase berechnet wurden, mit einem Korrekturfaktor f versehen werden, der vom lokalen Gasgehalt abhängt. Folgende Darstellung des Korrekturfaktors f stammt von *Ishii und Zuber* [51] und wurde von *Pan et al.* [90, 91], *Morud* [83] sowie *Morud und Hjertager* [84] eingesetzt:

$$f = \left(\frac{1 + 17.67\varepsilon_l^{9/7}}{18.67\varepsilon_l^{3/2}} \right)^2. \quad (6.60)$$

Mudde und Simonin [86] verwenden den Korrekturfaktor $f = \varepsilon_l^{-1.7}$, während *Tomiyama* [123] die Beziehung $f = \varepsilon_l^{-0.5}$ einsetzt. Der nach diesen Formeln berechnete Korrekturfaktor ist in allen drei Fällen größer als 1, so daß der daraus resultierende Widerstandsbeiwert für eine Gasblase im Blasenschwarm größer ist als der Widerstandsbeiwert für eine einzelne isolierte Gasblase. Das führt dazu, daß die daraus resultierende Aufstiegs geschwindigkeit im Blasenschwarm mit steigendem Gasgehalt kontinuierlich abnimmt.

Eine Reihe von neueren experimentellen Ergebnissen zeigt jedoch, daß die Abnahme der Schwarmgeschwindigkeit mit zunehmendem Gasgehalt erst ab einem Gasgehalt von etwa 4 bis 5 % erfolgt. Bei kleineren Gasgehalten dagegen kann die Schlupfgeschwindigkeit in einem Blasenschwarm um bis zu 40% **höher** als die einer isoliert aufsteigenden Gasblase sein [36, 104]. In der Abbildung 6.8 ist der an die Meßdaten von *Schlüter und Räßiger* [104] angepaßte Verlauf der Aufstiegs geschwindigkeit eines Blasenschwarms in Abhängigkeit vom lokalen Gasgehalt für Gasblasen von 4mm Durchmesser dargestellt. Da diese Korrelation zu Vergleichszwecken auch in unserem Programm einsetzt wurde (s. Ergebnisse im Kapitel

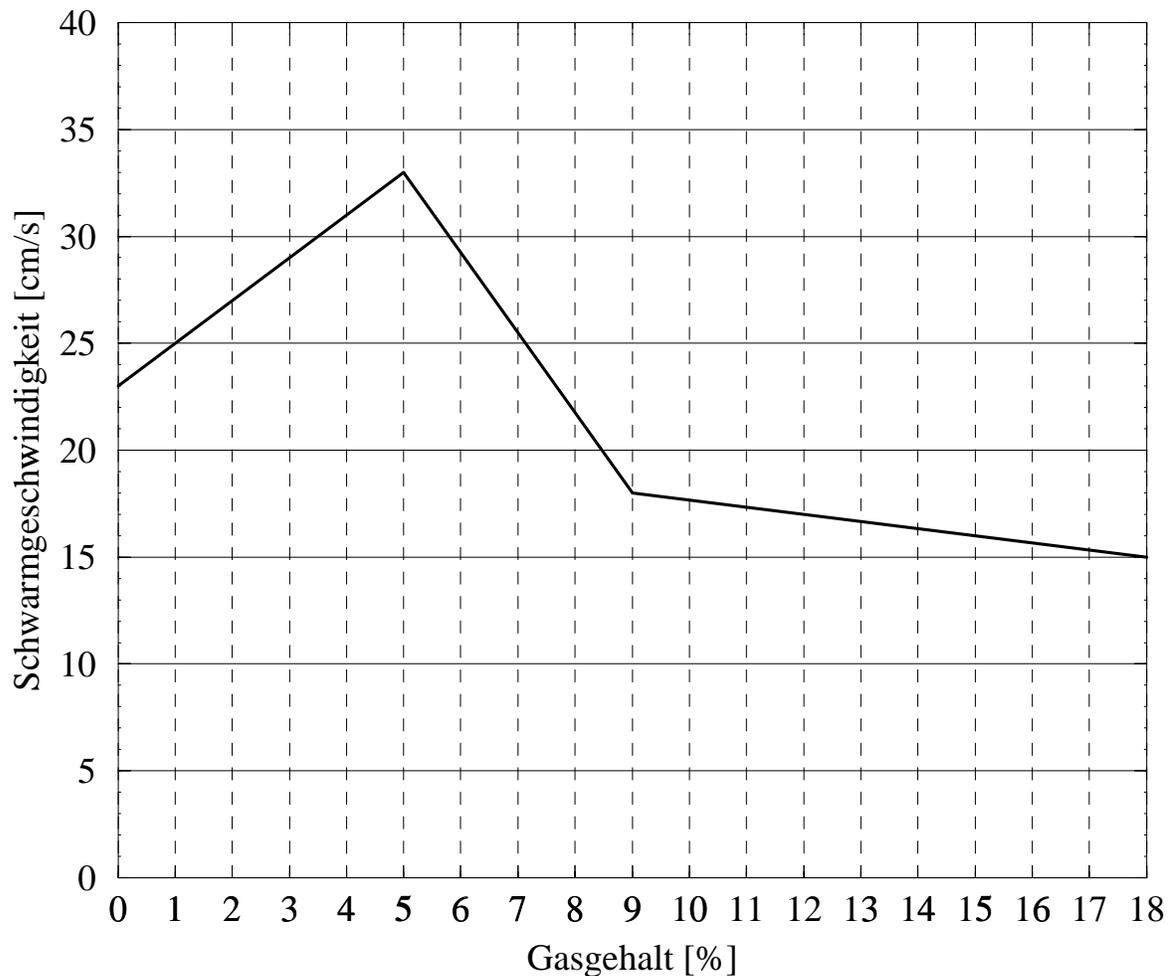


Abbildung 6.8: Aufstiegsgeschwindigkeit eines Blasenschwarms in Abhängigkeit vom lokalen Gasgehalt. An Meßergebnisse von *Schlüter und Rübiger* [104] angepaßter Verlauf nach (6.61).

8), wird hier die dafür verwendete Berechnungsformel angegeben:

$$u_{slip}^x = |\mathbf{u}_{slip}| = \begin{cases} (23 + 200\varepsilon_g)[cm/s], & \text{wenn } 0 \leq \varepsilon_g < 0.05 \\ (51.75 - 375\varepsilon_g)[cm/s], & \text{wenn } 0.05 \leq \varepsilon_g < 0.09 \\ (21 - 100\varepsilon_g/3)[cm/s], & \text{wenn } 0.09 \leq \varepsilon_g \leq 0.18 \end{cases} \quad (6.61)$$

6.6.6 Die virtuelle Masse („added mass force“)

Die vorstehend diskutierten unterschiedlichen Ausdrücke für den Widerstandsbeiwert wurden empirisch für den Fall einer konstanten Schlupfgeschwindigkeit zwischen beiden Phasen bestimmt. Falls sich die Gasblase aber relativ zu der L-Phase **beschleunigt**, so wird

ein Teil der Flüssigkeit (die Blasenschlepe oder der „wake“) mitbeschleunigt, und diese zusätzliche Trägheitskraft der Flüssigkeit bremst die Gasblase entsprechend ab. Dieser Einfluß wird durch die sogenannte „*virtual mass force*“, manchmal auch „*added mass force*“ genannt, beschrieben:

$$\mathbf{F}_{am} = -C_{am} V_b \rho_l \frac{D\mathbf{u}_{slip}}{Dt} = -C_{am} V_b \rho_l \left(\frac{d\mathbf{u}_b}{dt} - \frac{D\mathbf{u}_l}{Dt} \right) \quad (6.62)$$

Der Koeffizient C_{am} beschreibt den Volumenanteil der mitgenommenen Flüssigkeit relativ zu dem Blasenvolumen. Dann stellt der Ausdruck für \mathbf{F}_{am} nichts anderes dar, als die Masse der mitgenommenen Flüssigkeit multipliziert mit der relativen Beschleunigung zwischen den beiden Phasen. Wie die Kräftebilanz (6.51) deutlich macht, würde eine unter dem Einfluß des archimedischen Auftriebes losgelassene Blase ohne die Wirkung der virtuellen Masse eine sehr hohe Beschleunigung erfahren. Die virtuelle Masse erhöht dagegen die Trägheit der Gasblase beträchtlich, und verzögert die Einstellung ihrer Endgeschwindigkeit.

Obwohl der Einfluß der virtuellen Masse wegen der Plausibilität ihrer physikalischen Begründung allgemein anerkannt ist, ist es schwierig, den Wert des Parameters C_{am} korrekt abzuschätzen. Während man sich bei den theoretischen Untersuchungen bisher nur auf sehr vereinfachte Modelle beschränkt hat, wird die experimentelle Bestimmung dieses Koeffizienten dadurch erschwert, daß in den bis jetzt durchgeführten Experimenten der Einfluß der virtuellen Masse auf die Meßergebnisse als äußerst gering bezeichnet werden muß [47]. Die grundsätzliche Schwierigkeit der experimentellen Ermittlung liegt darin, daß der Effekt der *added mass force* nur bei schnellen Änderungen der Schlupfgeschwindigkeiten auftritt [26], diese lassen sich jedoch experimentell nicht zuverlässig genug einstellen und auswerten. Diese Unsicherheiten bei der Bestimmung des C_{am} -Koeffizienten erklären, warum in der Literatur für diesen Wert viele verschiedene Korrelationen angegeben werden (s. z.B. [100]).

Unter idealisierten Bedingungen (kleine starre kugelförmige Partikel) ergibt sich für den Koeffizienten der virtuellen Masse:

$$C_{am} = 0.5. \quad (6.63)$$

Bei Gasblasen in der Flüssigkeit schlagen *Cook und Harlow* [17] den Wert

$$C_{am} = 0.25 \quad (6.64)$$

vor und begründen das damit, daß im Falle einer Gasblase die Masse der mitgenommenen Flüssigkeit halb so groß ist, wie im Falle einer starren Partikel.

Auf der anderen Seite behaupten viele Autoren, daß die mit wachsender Größe immer forminstabiler werdenden Blasen im Verhältnis zu ihrem eigenen Blasenvolumen immer mehr Flüssigphase mit sich schleppen. So verwenden *Lopez de Bertodano et al.* [81, 82] in Anlehnung an *Lance und Bataille* [68] für Gasblasen mit einem Durchmesser von 5mm Werte im Bereich

$$1.2 < C_{am} < 3.4. \quad (6.65)$$

Wie bei der Berechnung des Widerstandsbeiwertes verwenden einige Autoren auch für Berechnung des C_{am} -Koeffizienten Korrelationen, die einen vom lokalen Gasgehalt abhängigen Faktor enthalten. Auch diese Abhängigkeiten sind sehr widersprüchlich. Während *Boisson und Malin* [11], z.B., eine Korrelation einsetzen, die von der Abnahme des C_{am} -Wertes mit zunehmendem lokalen Gasgehalt ausgeht:

$$C_{am} = 0.5 \cdot (1.0 - 2.78 \min(0.2, \varepsilon_g)), \quad (6.66)$$

setzt die von *Pan et al.* [90, 91] verwendete Beziehung

$$C_{am} = 1 + 3.32\varepsilon_g \quad (6.67)$$

eine genau gegengerichtete Abhängigkeit voraus. Von der überwiegenden Mehrheit der Autoren, die die added mass force bei der Simulation von Blasenströmungen berücksichtigen, wird für C_{am} allerdings der zu Anfang vorgestellte Wert von 0.5 eingesetzt (s. z.B. [10, 54, 63, 67, 86, 89, 92, 109]).

Abgesehen davon, daß eine Fülle von unterschiedlichen Darstellungen für den Added-Mass-Koeffizienten vorliegt, ist auch die Frage umstritten, ob die Berücksichtigung dieser Kraft einen wesentlichen Einfluß auf die Simulationsergebnisse haben kann. In jedem Fall würde sie aber den Lösungsaufwand drastisch erhöhen. Wird nämlich im mathematischen Modell neben der Widerstandskraft auch die Kraft der virtuellen Masse explizit berücksichtigt, so geht der algebraischer Charakter der Impulsgleichung für die Gasphase verloren, was einen nicht unwesentlichen zusätzlichen Speicher- und Rechenzeitbedarf für die Simulation bedeutet.

Die Vermutung, man könnte die added mass force in der Gasimpulsbilanz vernachlässigen, basiert auf der Annahme, daß die Gasblase – trotz der Präsenz der virtuellen Trägheitskraft – den Gleichgewichtszustand wesentlich schneller erreicht, als sich die für den Gleichgewichtszustand entscheidenden äußeren Einflüsse ändern. Um diese Annahme zu überprüfen, berechnen wir den Aufstieg einer Gasblase ausgehend vom Ruhezustand im unendlich ausgedehnten ruhenden Wasser. Einfachheitshalber gehen wir von der Korrelation F (6.48, 6.49)

für den Widerstandsbeiwert aus. Wegen $u_l = 0$ und $\frac{\partial p}{\partial x} = -\varrho_l g$ lautet die (eindimensionale) Bewegungsgleichung für die Gasblase in diesem Fall:

$$\frac{d(m_b u_b)}{dt} = V_b \varrho_l g - m_b g - C_w V_b u_b - C_{am} V_b \varrho_l \frac{du_b}{dt} \quad (6.68)$$

Wir teilen alle Terme dieser Gleichung durch die konstante Blasenmasse $m_b = \varrho_g V_b$ und erhalten:

$$\frac{du_b}{dt} = \frac{\varrho_l}{\varrho_g} g - g - \frac{C_w}{\varrho_g} u_b - \frac{\varrho_l}{\varrho_g} C_{am} \cdot \frac{du_b}{dt} \quad (6.69)$$

bzw.

$$\left(1 + \frac{\varrho_l}{\varrho_g} C_{am}\right) \frac{du_b}{dt} = -\frac{C_w}{\varrho_g} u_b + \left(\frac{\varrho_l}{\varrho_g} - 1\right) g \quad (6.70)$$

Wegen $\frac{\varrho_l}{\varrho_g} \gg 1$ sieht man sofort, daß die Trägheitskraft gegenüber der virtuellen Masse und die Schwerkraft gegenüber der Druckkraft vernachlässigt werden kann:

$$C_{am} \varrho_l \frac{du_b}{dt} = -C_w u_b + \varrho_l g \quad (6.71)$$

In dieser Differentialgleichung werden nur noch die Druckkraft, die Widerstandskraft und die virtuelle Trägheitskraft berücksichtigt. Die analytische Lösung mit den Anfangsbedingungen $u_b(0) = 0$ lautet

$$u_b(t) = \frac{\varrho_l g}{C_w} \left(1 - e^{-\frac{C_w}{C_{am} \varrho_l} t}\right) \quad (6.72)$$

bzw. für $\varrho_l = 1000 \frac{kg}{m^3}$, $g \approx 10 \frac{m}{s^2}$, $C_w = 5 \cdot 10^4 \frac{kg}{m^3 s}$ und $C_{am} = 0.5$:

$$u_b(t) = 0.2 \frac{m}{s} \left(1 - e^{-100t}\right) \quad (6.73)$$

Dieser Verlauf der Blasenauftiegschwindigkeit in Abhängigkeit der Zeit ist in Abbildung 6.9 dargestellt. Er zeigt, daß die Endgeschwindigkeit, die aus dem Kräftegleichgewicht zwischen Druck- und Widerstandskraft resultiert, bereits nach weniger als einer Zehntel Sekunde erreicht wird. Nach nur $0.022s$ liegt der Unterschied zwischen der Blasen- geschwindigkeit und der Terminalgeschwindigkeit innerhalb des 10%-Bereichs. Dabei stellt das hier besprochene Testbeispiel einen Extremfall dar, denn es entspricht der Annahme, daß die Relativgeschwindigkeit nach Störung des Gleichgewichtszustandes nur $0cm/s$ beträgt. Da man jedoch davon ausgehen kann, daß die Relativgeschwindigkeit *vor* der Störung *gleich* der Terminalgeschwindigkeit gewesen ist, so wird sie auch *nach* der Störung nicht wesentlich davon abweichen. Außerdem führt die hier eingesetzte Korrelation F für den Widerstandsbeiwert zu einer deutlichen Überschätzung der Widerstandskraft bei niedrigen Blasengeschwindigkeiten (s. Abb. 6.7). Beim Einsatz von anderen Korrelationen würde sich deshalb das Gleichgewichtszustand noch schneller einstellen.

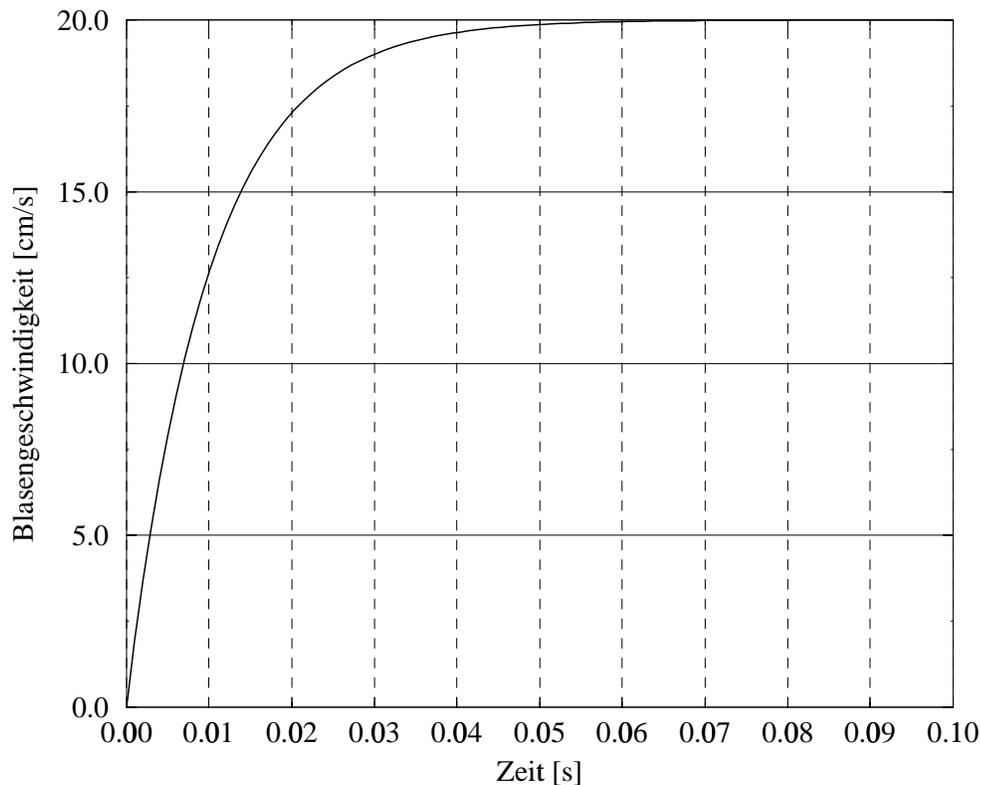


Abbildung 6.9: Zeitlicher Verlauf der Blasenauftiegs geschwindigkeit ausgehend vom Ruhezustand, berechnet nach (6.73).

Die virtuelle Trägheitskraft kann also nur dann einen Einfluß auf die Bewegung der Gasblase ausüben, wenn sich die Geschwindigkeit der Flüssigphase entlang der Blasentrajektorie schneller und stärker verändert, als sich die Relativgeschwindigkeit zwischen beiden Phasen diesen Veränderungen anpassen kann. Da die Relaxationszeit der Gasblase bei einer Störung des Gleichgewichts lediglich 0.01 s beträgt, muß es sich hierbei um hochfrequente Oszillationen im Geschwindigkeitsverlauf der Flüssigphase (entlang der Blasentrajektorie) handeln. Diese Schlußfolgerung stimmt mit der von *Drew* [26] überein, daß der Effekt der added mass force nur bei relativ hohen Frequenzen auftreten kann. Hier könnte man an den Einfluß von turbulenten Schwankungen, insbesondere im Blasenschwarm denken. Dieser Einfluß wird aber mit dem vorliegenden Modell nicht aufgelöst, sondern ist bereits in den experimentell-empirischen Korrelationen für die Schwarmgeschwindigkeit berücksichtigt.

Den Einfluß von großräumigen Wirbeln auf die Blasentrajektorie hat *Lapin* [72] für ein für gleichmäßig begaste Blasensäulen typisches dynamisches 3-dimensionales Strömungsfeld untersucht, und festgestellt, daß dabei der Beitrag der added mass force verschwindend gering ist.

In die gleiche Richtung deuten die Ergebnisse von *Jenne* [54], der den Einfluß der added mass force auf die Verteilung der Gasphase in einem Rührkessel untersuchte. Obwohl in einem Rührkessel bei einer hohen Rührerdrehzahl das Geschwindigkeitsfeld wesentlich höheren Schwankungen unterliegt, als im Falle von blaseninduzierten Strömungen, wurden in dieser Arbeit keine qualitativen und kaum quantitative Unterschiede zwischen einer Simulation ohne und mit der Berücksichtigung der virtuellen Trägheitskraft festgestellt (s. Abb. 60 in [54]).

Vollständigkeitshalber seien hier jedoch zwei Arbeiten erwähnt, in denen von einem entscheidenden Einfluß der added mass force berichtet wurde. *Delnoij et al.* [20] behaupten, daß der Einfluß der virtuellen Masse unter keinen Umständen außer Acht gelassen werden darf, da sonst Stabilitätsprobleme bei der Berechnung der Blasengeschwindigkeit in der Nähe des Begasers entstehen. Abgesehen davon, daß die Schwierigkeiten bei der numerischen Realisierung kaum als Argument gegen ein konkretes Modell angesehen werden dürfen, liegen die von *Delnoij et al.* berichteten Stabilitätsprobleme offensichtlich in der ungünstigen Wahl des numerischen Verfahrens und nicht, wie die Autoren behaupten, im Modell selbst. In der Arbeit von *Sommerfeld et al.* [115] werden ähnliche Simulationen wie in [20] durchgeführt. Die Autoren berichten von keinen Stabilitätsproblemen, obwohl sie den Einfluß der virtuellen Masse in ihrem Modell *nicht* berücksichtigen.

Mudde und Simonin [86] berichten, daß bei der Simulation einer lokal begasten Blasensäule aus [8] bei der Berücksichtigung der added mass force ein mit dem Experiment übereinstimmender instationärer Strömungszustand simuliert werden konnte, während ohne die virtuelle Trägheitskraft eine lediglich quasistationäre Lösung erzielt wurde. Wir gehen auf dieses Phänomen im nächsten Kapitel näher ein. Hier sei nur angemerkt, daß in der Arbeit von *Sokolichin und Eigenberger* [112] für denselben Testfall eine sehr gute Übereinstimmung mit den Meßdaten auch ohne Berücksichtigung der virtuellen Masse erzielt werden konnte, so daß die Ursache für die Diskrepanzen nicht allein an der Vernachlässigung der added mass force liegen kann.

6.6.7 Radiale Kräfte („lift forces“)

Wird eine *starre kugelförmige Partikel* örtlich ungleichmäßig angeströmt, so wirken auf diese Partikel zusätzliche Kräfte in der quer zu der Hauptströmung liegenden Richtung, die zum einen aus der Partikelrotation (*Saffman-Kraft*) und zum anderen aus der unterschiedlichen Druckverteilung um die rotierende Partikel (*Magnus-Kraft*) resultieren.

Es gibt viele unterschiedliche Darstellungen für die Summe dieser Kräfte, die in der englischsprachigen Literatur mit „*transversal lift force*“ bezeichnet wird. Da diese Kraft über-

wiegend zur Beschreibung der radialen Umverteilung der Gasblasen in einem vertikal ausgerichteten Strömungsfeld verwendet wird, ist auch die Bezeichnung „radiale Kraft“ bzw. „lateral force“ üblich. Wie die Widerstandskraft läßt sich die lift force nur in den einfachsten Fällen theoretisch berechnen. Zur Bestimmung der Saffman-Kraft nimmt man starre kugelförmige Partikel bei niedrigen Reynoldszahlen an, die Magnus-Kraft wird unter Annahme einer idealen reibungsfreien Strömung berechnet. In *Blasenströmungen* ist das Phänomen allerdings sehr komplex (Ausbildung einer asymmetrischen Nachlaufströmung, Blasenverformung, Zirkulation im Blaseninneren) und entzieht sich einer exakten theoretischen Beschreibung. Eine simple Übernahme der unter idealisierten Annahmen hergeleiteten Ausdrücke ist für Simulation von realen Blasenströmungen nicht gerechtfertigt. Auf der einen Seite gibt es bisher für den in realen Blasenströmungen relevanten Bereich von Eötvös-, Morton- und Reynoldszahlen keinen eindeutigen experimentellen bzw. numerischen Nachweis über die Existenz, die Richtung und den Betrag der radialen Kraft. Auf der anderen Seite haben die für die Darstellung der radialen Kraft eingesetzten Ausdrücke einen *sehr großen* Einfluß auf die Simulationsergebnisse. Sie können somit zu einer reinen Anpassung an die experimentellen Ergebnisse mißbraucht werden.

Wir wollen das Gesagte an einigen Beispielen verdeutlichen. Dabei gehen wir von der folgenden Darstellung der lift force aus, die von *Auton* [5, 6] sowie *Thomas et al.* [120] für den Fall einer Potentialumströmung von Blasen hergeleitet und in den meisten Arbeiten zur Simulation von Blasenströmungen, die diese Kraft berücksichtigen, eingesetzt wurde:

$$\mathbf{F}_l = -C_l V_b \rho_l (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_l) \times (\nabla \times \mathbf{u}_l) \quad (6.74)$$

Obwohl in [5, 6, 120] für den C_l -Koeffizienten ein Wert von 0.5 berechnet wurde, werden bei den numerischen Berechnungen sowohl positive Werte zwischen 0.01 [65] und 0.5 [20, 21, 22, 63, 87, 109] als auch negative(!) Werte zwischen -0.5 [11, 34, 124] und -3.0 [119] eingesetzt.

Der Effekt der lift force auf die Blasenbewegung läßt sich am einfachsten veranschaulichen, wenn man von einer axialsymmetrischen ausgebildeten Aufwärtsströmung in der Mitte eines Zylinders bzw. langen Rohres ausgeht. Unter den gemachten Voraussetzungen ist nur die axiale Komponente der Flüssigkeitgeschwindigkeit (u_l^x) von Null verschieden und sie kann sich nur in der radialen Richtung ändern. Daher gilt für die radiale Komponente der lift force:

$$F_l^r = -C_l V_b \rho_l (u_g^x - u_l^x) \frac{\partial u_l^x}{\partial r}. \quad (6.75)$$

Hier bezeichnen u_g^x und u_l^x die axialen Komponenten der Gas- und Liquid-Geschwindigkeit. Nimmt nun die axiale Geschwindigkeit der Flüssigkeit zur Wand ab, so gilt

$$\frac{\partial u_l^x}{\partial r} < 0, \quad (6.76)$$

so daß wegen

$$u_g^x - u_l^x = u_{slip}^x > 0 \quad (6.77)$$

die Richtung der radialen Kraft mit dem Vorzeichen von C_l übereinstimmt: für $C_l > 0$ wirkt sie in die Richtung Wand, während sie beim Einsatz von $C_l < 0$ die Blasen zur Reaktormitte treibt. Dementsprechend wird auch bei numerischen Berechnungen der Lift-Koeffizient entweder positiv oder negativ angesetzt, je nach dem, ob für eine bessere Übereinstimmung mit den Meßdaten eine Umverteilung des radialen Gasgehaltsprofils in die Richtung Wand oder zur Reaktormitte erforderlich ist.

Im Falle eines vertikal ausgerichteten von unten nach oben **zwangsdurchströmten Rohres** zeigen Experimentaldaten, daß die Gasgehaltsprofile ein ausgeprägtes Maximum in der Wandnähe aufweisen [80, 107, 131]. Wird das Gas dem Rohr gleichmäßig über den gesamten Querschnitt zugeführt, so ist eine Umverteilung des flachen Gasgehaltsprofils erwünscht, bei der die Gasblasen zur Wand hin verschoben werden. Entsprechend wird ein **positiver** Lift-Koeffizient angesetzt. Die Versuche werden in der Regel in langen Röhren mit einem Durchmesser von nur wenigen Zentimetern durchgeführt, die Liquidgeschwindigkeit beträgt in der Rohrmitte oft mehr als $1m/s$. In diesem Fall würde der Einsatz vom theoretischen Lift-Koeffizienten von $C_l = 0.5$ zu einer radialen Kraft führen, die in derselben Größenordnung liegt wie die vertikale Druckkraft, was einer horizontalen Schlupfgeschwindigkeitskomponente von bis zu $20cm/s$ entspricht. Deshalb wird bei der Simulation der Rohrströmung ein wesentlich niedrigerer C_l -Wert eingesetzt. *Lopez de Bertodano et al.* [82] schlagen z.B. Werte zwischen 0.02 und 0.1 vor.

Der Einsatz der radialen Migrationskraft in einer Rohrströmung führt allerdings dazu, daß das Gasgehaltsprofil den Maximalwert direkt an der Wand, und nicht – wie experimentell beobachtet – in der *Wandnähe* erreicht. Um auch diesen Effekt durch die Simulation wiederzugeben, wird eine weitere Kraft eingeführt. Mit der Begründung, die Blasen können nicht durch die Wand gehen, wird die von *Antal et al.* [2] vorgeschlagene „Wand-Abstoß-Kraft“ („wall-force“, „lubrication-like lift force“) in das Modell aufgenommen, wodurch eine noch bessere Übereinstimmung mit gemessenen Gasgehaltsprofilen erzielt werden konnte [62, 82].

Im Unterschied zu einer vertikalen Rohrströmung, liegen im Falle einer **gleichmäßig** über den gesamten Querschnitt **begasten Blasensäule** Gasgehaltsprofile vor, die ein Maximum nicht in der Wandnähe, sondern in der Mitte des Reaktors aufweisen [35, 44]. Es findet somit eine Umverteilung des unmittelbar am Begaser noch flachen Gasgehaltsprofils zur Symmetrieachse der Apparatur statt. Da jedoch ein positiver Lift-Koeffizient die genau entgegengerichtete Migration der Gasblasen zu Folge haben würde, wird das **Vorzeichen** des Koeffizienten willkürlich **geändert**, mit der Begründung, dadurch ließen sich die gemessene

nen Profile besser wiedergeben. Da die radiale Änderung der Axialgeschwindigkeit in einer Blasensäule in der Regel um eine Größenordnung niedriger ist als in einer vertikalen Rohrströmung, wird diesmal ein vom Betrag her wesentlich höherer Lift-Koeffizient eingesetzt: -0.5 in [11, 34, 124], -1.5 und -2.0 in [52] sowie -3.0 in [119], was einer zur Mitte gerichteten Schlupfgeschwindigkeit von etwa 2 bis 6 cm/s entspricht. Der große Einfluß des dabei eingesetzten Wertes auf die Simulationsergebnisse wird aus der Abb. 5.8 aus [35] ersichtlich: wird bei einem Wert von $C_l = -0.1$ eine Liquid-Geschwindigkeit in der Mitte der Säule von lediglich 16 cm/s berechnet, führt der Lift-Koeffizient von $C_l = -0.7$ zu einer fast vierfach so hohen Geschwindigkeit von 60 cm/s . Dabei ist zu berücksichtigen, daß die obigen Zwangsmaßnahmen nur erforderlich sind, wenn man versucht, das durch schnell fluktuierende großräumige Wirbel gekennzeichnete Strömungsverhalten in gleichmäßig begasten Blasensäulen durch ein *stationäres* Modell zu beschreiben. Darauf wird am Ende dieses Abschnitts eingegangen.

Im Zusammenhang mit der Diskussion über das Vorzeichen des Lift-Koeffizienten sollten an dieser Stelle Ergebnisse einiger experimentellen Untersuchungen sowie Ergebnisse der Direkten Numerischen Simulation von einer in einer Scherströmung aufsteigenden Einzelblase erwähnt werden, die belegen, daß dabei tatsächlich eine auf die Blase wirkende Querkraft entstehen kann, wobei die Richtung dieser Kraft von der *Größe* der Gasblase abhängt [28, 122]. *Tomiyama et al.* [122] schlagen deshalb folgenden, von dem Blasendurchmesser abhängigen, Lift-Koeffizienten vor:

$$C_l = -0.04E\ddot{o} + 0.48. \quad (6.78)$$

Das entspricht einem negativen Vorzeichen bei Blasen ab einem Durchmesser von 9 mm , der Wert $C_l = -0.5$ wird dabei bei einem Durchmesser von etwa 13 mm erreicht. Abgesehen davon, daß in den meisten Simulationen die Blasen diese Größe nicht erreichen, muß man genau darauf achten, unter welchen Voraussetzungen die Korrelation (6.78) hergeleitet wurde. Sowohl die numerischen Simulationen als auch die Experimente wurden für die Mortonzahlen im Bereich von $-5 < \log(Mo) < -3$ durchgeführt. Es handelt sich dabei also um Fluide, die im Vergleich zu Wasser eine wesentlich höhere Viskosität aufweisen (für Wasser gilt $Mo = 2.37 \cdot 10^{-11}$). Das Vorzeichenwechsel des Lift-Koeffizienten wird damit begründet, daß sich bei größeren Blasen infolge deren Deformation der Blasennachlauf asymmetrisch anordnet, so daß aus der Wechselwirkung zwischen dem zur Wand versetzten Nachlauf und der Scherströmung eine zusätzliche Querkraft resultiert, die der „klassischen“ lift force entgegen wirkt. Es muß allerdings sehr bezweifelt werden, daß diese Argumentation auch für große Luftblasen im Wasser ihre Gültigkeit behält, da bei einem Blasendurchmesser von 9 mm nicht mehr von einem stabilen, seitlich versetzten Blasennachlauf ausgegangen werden kann. Die zahlreichen Meßergebnisse belegen (s. z.B. [9, 29]), daß bereits bei wesentlich kleineren Gasblasen ein dynamischer, sich periodisch ablösender Nachlauf

beobachtet wird. Er sorgt unter anderem dafür, daß selbst in ruhendem Wasser die Blase entlang einer *spiralförmigen* Trajektorie aufsteigt, so daß auch in diesem Fall von einer „Querkräft“ — allerdings mit einer ständig wechselnder Richtung — gesprochen werden kann, obwohl gar keine Scherströmung vorliegt. Aufgrund ihrer Formänderung „segelt“ die Gasblase in unterschiedliche Richtungen.

Außer bei Rohrströmungen und gleichmäßig begasten Blasensäulen wurde die radiale Kraft auch bei einigen Simulationen einer **lokal begasten Blasensäule** eingesetzt [20, 21, 22, 63, 87, 109]. Dabei wird eine (zylindrische bzw. flache) Apparatur durch eine einzige am Boden angebrachte Fritte entweder mittig oder etwas seitlich versetzt begast. Der Blasen-schwarm steigt auf und verursacht eine großräumige Zirkulation in der Flüssigphase mit einem Geschwindigkeitsmaximum in der Mitte der Apparatur. Dabei läßt sich beobachten, daß die Breite des Blasenschwarmes mit der Höhe zunimmt. Dieser Effekt läßt sich wiederum durch die Berücksichtigung der Lift-Kraft beschreiben. Diesmal muß diese Kraft jedoch bewirken, daß sich die Blasen vom Blasenschwarminnen nach außen (zur Wand) bewegen, dafür ist — wie das auch bei der vertikalen Rohrströmung der Fall war — wiederum ein **positiver** Lift-Koeffizient erforderlich. Daher wird in allen oben zitierten Arbeiten der Wert von $C_l = 0.5$ eingesetzt. Werden bei niedrigen Füllhöhen der untersuchten Apparatur (20 bis 40 cm in [63, 87, 109]) durch den Einsatz der radialen Kraft noch durchaus sinnvolle Ergebnisse erzielt, so führt diese Kraft bei Simulation von schlanken langen Apparaten (17.5×199.5 cm in [21]) zu einer immer größeren Ausweitung des Blasenschwarms über die gesamte Breite der Apparatur, wodurch die Strömung im oberen Teil der Blasensäule fast vollständig zum Erliegen kommt (Fig. 7 in [21]). Das entspricht jedoch ganz und gar nicht den dieser Simulation zugrundeliegenden experimentellen Beobachtungen [15].

Die oben angegebenen Beispiele zeigen eine große Willkür beim Einsatz der radialen Kraft zur Simulation von Blasenströmungen. Gegen ihre Berücksichtigung spricht insbesondere die Tatsache, daß diese Kraft **nur** dann verwendet wird, wenn sie im konkreten Fall eine bessere Anpassung an die Meßdaten erlaubt. (So wird z.B. bei der Berechnung von begasten Rührkesseln die lift force niemals eingesetzt [25, 42, 49, 54, 83, 84, 97], weil sich dadurch keine Verbesserung der Ergebnisse erzielen läßt.) Die durch die Anpassung an einen Spezialfall bestimmten „optimalen“ Werte lassen sich nicht auf andere Testfälle übertragen, selbst wenn es sich um die gleiche Apparatur (unter veränderten Betriebsbedingungen) handelt. Die Verwendung der Lift-Kraft erhöht also beim derzeitigen Stand der Erkenntnisse nicht die Vorhersagekraft der Modelle. Sie wird deshalb im folgenden nicht berücksichtigt.

Das stärkste Argument für ihre Nichtberücksichtigung ergibt sich allerdings aus der Tatsache, daß alle oben genannten Effekte, die bisher mit der Wirkung einer radialen Kraft erklärt wurden, auch ohne deren Berücksichtigung zutreffend simuliert werden können, wenn man die Wirkung der dabei auftretenden stark instationären Wirbel angemessen berücksichtigt.

So haben *Pokharna et al.* [95] gezeigt, daß sich ein den Meßdaten entsprechendes Profil des Gasgehalts in einem vertikalen Rohr dadurch berechnen läßt, daß man die Wechselwirkung zwischen Gasblasen und turbulenten Wirbeln in das Modell aufnimmt. *Wachi und Yates* [130] äußerten die Vermutung, daß das Ansteigen des Gasgehaltes in der Mitte einer gleichmäßig begasten Blasensäule ein Ergebnis des zur Mitte gerichteten Druckgradienten ist, der infolge der instationären Wirbeln in der Blasensäule entsteht. Die instationären Simulationsergebnisse von *Devanathan et al.* [24] sowie von *Sokolichin et al.* [111] bestätigen diese Vermutung (s. auch Kapitel 9). Auch die Ausbreitung des aufsteigenden Blasenschwarmes in einer lokal begasten Blasensäule läßt sich ohne den Einsatz der radialen Kraft erklären, wenn man den Einfluß der Turbulenz auf die Gasgehaltsverteilung im Modell berücksichtigt [12, 86, 109, 111, 112, 115] (s. auch Abschnitt 6.8.3).

6.6.8 Zur Relevanz der einzelnen Kräfte

Nachdem wir die einzelnen Kräfte, die die Bewegung einer Gasblase beeinflussen können, detailliert untersucht haben, wollen wir die Frage nach der Relevanz dieser Kräfte zusammenfassend beantworten. Modellmäßig berücksichtigt werden sollten nur solche Kräfte,

- deren Existenz experimentell nachgewiesen ist und
- deren Berücksichtigung bei der numerischen Simulation einen bedeutenden Einfluß auf die Ergebnisse hat.

Wenn eine Kraft beide Bedingungen erfüllt, muß die Frage untersucht werden, ob für ihre numerische Berechnung ein zuverlässiges Modell vorhanden ist.

Unter den Kräften, deren Existenz unumstritten ist, gibt es solche, die kaum einen Einfluß auf die Simulationsergebnisse ausüben. Dazu gehören die Trägheitskraft $\frac{d(m_b \mathbf{u}_b)}{dt}$, die Schwerkraft \mathbf{F}_g und die added mass force \mathbf{F}_{am} . Die Aufnahme dieser Kräfte in das mathematische Modell verbessert zwar nicht die Simulationsergebnisse, verlangsamt aber bedeutend die Rechenprozedur, was die Effektivität des Simulationsprogramms stark herabsetzt.

Die lift force \mathbf{F}_l gehört zu den nichtrelevanten Kräften „zweiter Art“: ihre Aufnahme in das mathematische Modell hat zwar einen bedeutenden Einfluß auf die Simulationsergebnisse, ihre Existenz und Wirkungsrichtung ist für praxisrelevante Blasengrößen jedoch nicht nachgewiesen. Dasselbe gilt auch für die im vorigen Abschnitt erwähnte „wall force“.

Zu den einzigen relevanten Kräften im Sinne der o.g. Definition gehören somit nur zwei Kräfte: die Druckkraft und die Widerstandskraft. Ohne die Präsenz der Druckkraft würde

eine Blase in ruhendem Wasser nicht aufsteigen, während sie sich ohne die Wirkung der Widerstandskraft unendlich beschleunigen würde.

Zusammenfassend können wir festhalten, daß mathematische Modelle, die sich auf die Berücksichtigung der Druckkraft und der Widerstandskraft beschränken, die als wesentlich erkannten Kräfte berücksichtigen. Ihre Aussagen müssen zunächst als vertrauenswürdiger angesehen werden als die mit einem Modell berechneten Resultate, das „all relevant forces“ [20] einsetzt, insbesondere dann, wenn dabei auch solche Kräfte wie lift force und wall force verwendet werden.

6.6.9 Die Impulsbilanz für die Gasphase: Zusammenfassung

Der Ausgangspunkt unserer Überlegungen war die Impulsbilanz für die Gasphase (6.31), die aus dem Two-Fluid-Modell übernommen und im Eulerschen Bezugssystem formuliert wurde. Diese Gleichung war bis auf den Term \mathbf{F}_W definiert, der die Wechselwirkungskraft zwischen den Gasblasen und der sie umströmenden Flüssigkeit beschreibt.

Ein Ansatz für \mathbf{F}_W wurde aus der Impulsbilanz (6.32) für die *Einzelblase* abgeleitet. Dazu müsste diese Gleichung in das Eulersche Bezugssystem transformiert werden [53]. Werden jedoch in der Blasenimpulsbilanz ausschließlich die Druckkraft und die Widerstandskraft berücksichtigt, so läßt sich die Schlupfgeschwindigkeit \mathbf{u}_{slip} zwischen beiden Phasen unmittelbar aus der Beziehung $0 = \mathbf{F}_p + \mathbf{F}_d$ ableiten (s. (6.53)), woraus sich die Blasen­geschwindigkeit \mathbf{u}_b als

$$\mathbf{u}_b = \mathbf{u}_l + \mathbf{u}_{slip} \quad (6.79)$$

bestimmen läßt. Die so berechnete **Blasen**geschwindigkeit unterscheidet sich jedoch von der Geschwindigkeit der **Gas**phase, die in die Gleichung (6.29) zur Berechnung des Gas­gehalts eingesetzt wird. Die Differenz zwischen beiden Geschwindigkeiten —

$$\mathbf{u}_{drift} = \mathbf{u}_g - \mathbf{u}_b \quad (6.80)$$

— wird in der Literatur oft als „drifting velocity“ bezeichnet [86, 108] und resultiert aus der Wechselwirkung zwischen den einzelnen Gasblasen und den turbulenten Schwankungen in der Flüssigphase. Ihre Berücksichtigung im Modell ist deswegen so wichtig, weil die Kontinuitätsgleichung für die Gasphase (6.29) keinen diffusiven Term enthält, der die turbulente Dispersion der Gasphase berücksichtigt. Herkunft und Berechnung der „drifting velocity“ werden im Abschnitt 6.8.3 ausführlich besprochen.

6.7 Das Euler-Lagrange Modell

Eine Inspektion des Drift-Flux-Modells (6.27–6.30) zeigt, daß die beiden letzten Gleichungen nur dazu benötigt werden, um den Gasgehalt ε_g zu bestimmen. Wäre die Verteilung der Gasphase im Reaktor bekannt, so könnte man sich auf die Lösung der ersten beiden Gleichungen beschränken.

Die bisher diskutierte Eulersche Betrachtungsweise stellt jedoch nicht die einzige Möglichkeit dar, die Gasgehaltsverteilung zu berechnen. Eine Alternative besteht darin, daß man die Trajektorie jeder einzelnen Blase direkt bestimmt. Da in diesem Fall die Positionen der einzelnen Gasblasen zu jedem Zeitpunkt bekannt sind, läßt sich daraus der Gasgehalt in jedem vorgegeben Volumen ΔV berechnen, indem man die Volumina von allen Blasen aufsummiert, die sich im Volumenelement ΔV befinden, und anschließend durch ΔV teilt.

Zur Berechnung der Trajektorie einer Blase wird eine Bewegungsgleichung aufgestellt:

$$\frac{d\mathbf{x}_b}{dt} = \mathbf{u}_b, \quad (6.81)$$

die Blasengeschwindigkeit wird direkt aus der Gleichung (6.32) berechnet. Da diese Gleichungen in einem Lagrangeschen Bezugssystem formuliert sind, spricht man in diesem Fall von einem Lagrange-Modell für die Gasphase, bzw. von einem Euler-Lagrange-Modell für die Zweiphasenströmung.

In der hier diskutierten Variante beschreiben die Eulerschen Gleichungen das Gemisch der beiden Phasen (6.27, 6.28). Eine andere Möglichkeit besteht darin, daß man nicht das Zweiphasengemisch, sondern nur die Liquid-Phase durch die Eulerschen Gleichungen beschreibt (s. (6.2, 6.4)). In diesem Fall ist ein weiterer Rechenschritt erforderlich, der zur Berechnung des Beitrages der Wechselwirkungskraft \mathbf{F}_W in der Impulsbilanz für die Flüssigphase führt. Im Rahmen des Euler-Lagrange-Modells wird diese Größe mit Hilfe der PSIC-Methode (Particle-Source-in-Cell) nach *Crowe et al.* [18] berechnet. Die überwiegende Mehrheit der Veröffentlichungen verwendet diese Variante des Euler-Lagrange-Modells, obwohl die erste Vorgehensweise wesentlich effektiver ist [69].

An dieser Stelle sollen kurz die Vor- und Nachteile des Euler-Lagrange-Verfahrens im Vergleich zum Euler-Euler-Verfahren besprochen werden. Der wichtigste Vorteil des Euler-Lagrange-Modells besteht darin, daß jede Gasblase einzeln modelliert wird. Dadurch können beliebige Blasengrößenverteilungen sowie zusätzliche Effekte, die die Wechselwirkungen zwischen Blasen untereinander wie auch zwischen beiden Phasen betreffen, direkt modelliert werden. Stoffübergang mit und ohne Reaktion, Blasenzerfall und -koaleszenz können — im Prinzip — direkt in das hydrodynamische Modell aufgenommen werden. Der andere große Vorteil dieses Modells besteht darin, daß bei einer Lagrange'schen Modellierung

der dispersen Phase keine numerische Diffusion auftritt, die die Gasgehaltsverteilung im Reaktor stark beeinflussen kann [111].

Diesen wichtigen Vorteilen steht jedoch eine Reihe von Nachteilen gegenüber. Das größte Problem beim Einsatz der Euler-Lagrange-Verfahrens — und das betrifft speziell die Blasenströmungen — resultiert aus der Tatsache, daß die einzelnen Gasblasen ein beträchtliches Volumen einnehmen und daher nicht als punktförmige Partikel angesehen werden können. Befindet sich lediglich das *Zentrum* und nicht die gesamte Gasblase innerhalb eines Volumenelementes ΔV , so darf demnach nicht *das gesamte Volumen dieser Gasblase* dem Volumenelement ΔV zugerechnet werden. Da eine genaue Umrechnung des Blasenvolumens auf die Nachbarelemente einer rechenaufwendigen Prozedur bedarf, wird der Beitrag jeder Gasblase zu dem Gasgehalt in den Nachbarvolumina durch eine spezielle Gewichtungsfunktion berücksichtigt [20, 69].

Selbst in diesem Fall kann bei einer niedrigen durchschnittlichen Anzahl der Gasblasen pro Kontrollvolumen eine stark fluktuierende Gasgehaltsverteilung resultieren, was zum einen der Definition des Gasgehaltes widerspricht, und zum anderen zu numerischen Instabilitäten führen kann. Bei der Definition der gemittelten Größen — und der Gasgehalt gehört dazu — nimmt man an, daß das Mittelungsvolumen genügend groß sei, um die starken lokalen Schwankungen zu eliminieren. Die oben angesprochenen Fluktuationen der Gasgehaltsverteilung sind somit die Folge eines zu klein gewählten Mittelungsvolumens. Das zur Berechnung des lokalen Gasgehaltes eingesetzte Mittelungsvolumen stimmt in der Regel mit dem Kontrollvolumen ΔV überein und wird durch die numerische Auflösung des Berechnungsgebiets eindeutig festgelegt. Da jedoch eine Vergrößerung dieses Kontrollvolumens gleichzeitig eine gröbere Auflösung bedeuten würde, werden die Schwankungen in der Gasgehaltsverteilung dadurch eliminiert, daß bei niedriger Blasenanzahl pro Kontrollzelle jede physikalische Blase durch mehrere numerischen Blasen modelliert wird, wobei mit jeder numerischen Blase nur ein Teil des Volumens der physikalischen Blase assoziiert wird [111]. Diese Vorgehensweise ist insbesondere dann erforderlich, wenn neben dem konvektiven Transport auch die turbulenten Schwankungen der Blasenpositionen im Modell berücksichtigt werden sollen. Dazu wird für jede Gasblase entweder die Blasen Geschwindigkeit oder direkt die Blasenposition einer zufälligen Störung unterworfen, deren Intensität vom Turbulenzgrad in der Flüssigphase abhängt (s. z.B. [69, 111, 114]). Während im Rahmen des Euler-Modells der Einfluß der turbulenten Schwankungen durch einen diffusiven Term beschrieben wird (s. Abschn. 6.8.3), was immer zu einem Gastransport aus dem Bereich mit einer höheren in den Bereich mit einer niedrigeren Gaskonzentration führt, kann im Rahmen des Lagrange-Modells bei niedriger Blasenanzahl auch ein Gastransport in die entgegengesetzte Richtung simuliert werden.

Ein entscheidender Nachteil des Euler-Lagrange-Verfahrens besteht darin, daß mit steigen-

der Blasenanzahl im Reaktor der Rechenaufwand und der Speicherplatzbedarf ständig zunehmen, was dem Einsatz dieses Verfahrens physikalische Grenzen setzt. Bei einer gleichmäßig begasten Blasensäule im Industriemaßstab kann die Blasenanzahl mehrere Millionen betragen. Ist die Anzahl der Einzelblasen pro Kontrollvolumen ziemlich hoch, so wird oft angenommen, daß jede berechnete Trajektorie nicht einer Einzelblase, sondern einem ganzen Blasencluster entspricht. Der Blasencluster wird so modelliert, daß man eine räumliche Verteilung der einzelnen Gasblasen um den zentralen Clusterpunkt postuliert, und nur dessen Trajektorie berechnet. Eine solche Clusterbildung ist allerdings nur bis zu einer gewissen Clustergröße möglich, da bei einer zu niedrigen Clusteranzahl pro Kontrollvolumen wiederum starke Fluktuationen in der resultierenden Gasgehaltsverteilung sowie Probleme bei der Berechnung des turbulenten Gastransports entstehen.

Bei der Benutzung des Euler-Euler-Modells treten die o.g. Schwierigkeiten nicht auf. Speicherbedarf und der Rechenaufwand hängen nur von der Anzahl der Kontrollvolumina und nicht von der Gasblasenanzahl ab. Die hohe numerische Diffusion bei der Berechnung der Gasgehaltsverteilung muß allerdings durch den Einsatz von Diskretisierungsverfahren höherer Ordnung bekämpft werden. Berücksichtigung von mehreren Blasengrößen ist im Rahmen des Euler-Euler-Modells nur mit zunehmendem Rechenaufwand möglich, stellt aber numerisch gesehen keine grundsätzliche Schwierigkeit dar.

Zusammenfassend kann man sagen, daß das Euler-Euler-Modell numerisch leichter behandelt werden kann, während das Euler-Lagrange-Modell einen höheren numerischen Aufwand erfordert, dafür aber detailliertere Informationen über das Verhalten der dispersen Phase liefert. Werden in beiden Modellen jedoch gleiche Annahmen über die zugrundeliegenden physikalischen Prozesse getroffen, so liefern beide Modelle bei einer hinreichend feinen Diskretisierung grundsätzlich dieselben Ergebnisse (*Sokolichin et al.* [111]).

6.8 Modellierung der Turbulenz in einer Blasenströmung

6.8.1 Einleitende Bemerkungen

Bei der Modellierung der Hydrodynamik in einem Zweiphasensystem stellt die Modellierung der Turbulenz eindeutig das komplexeste Problem dar. Wird der Einfluß des turbulenten Terms $\nabla \cdot \mathbf{T}_t^{Re}$ in der Gemischimpulsbilanz (6.28) vernachlässigt, so führt das dazu, daß bei hohen Reynoldszahlen mit zunehmender Gitterfeinheit immer mehr Wirbel aufgelöst werden und keine Gitterkonvergenz der numerischen Lösung erzielt werden kann (s. dazu Abb.7.7 im nächsten Kapitel).

Im Falle von einphasigen Strömungen wäre eigentlich kein Turbulenzmodell erforderlich, wenn die Rechnerkapazitäten ausreichen würden, um die Navier-Stokes-Gleichungen zeitabhängig und dreidimensional mit ausreichend feinen Gittern und ausreichend kleinen Zeitschritten zu lösen. Das Navier-Stokes-System für Einphasenströmungen enthält eine *genaue* Beschreibung des Fluidverhaltens bis auf den Mikromaßstab. Kann die Strömung bis hin zu sehr kleinen Wirbeln aufgelöst werden, so spricht man von einer Direkten Numerischen Simulation (DNS) der Turbulenz.

Im Falle von zweiphasigen Strömungen müßte man entsprechend *die lokalen einphasigen Gleichungen* auf einem genügend feinen Raster lösen, die Phasengrenzfläche verfolgen, sowie die Strömung im Blaseninneren und um jede der beweglichen Blasen auflösen, um zu einer Direkten Numerischen Simulation zu gelangen.

Im Rahmen von statistischen Zweiphasenmodellen wie dem Two-Fluid- oder dem Drift-Flux-Modell, die durch eine geeignete Mittelung der einphasigen Gleichungen hergeleitet werden, haben dagegen Begriffe wie Phasengrenzfläche oder Blaseninneres keinen Sinn. Da zu jedem Zeitpunkt an jedem Ort im Reaktor nur eine der beiden Phasen vorhanden sein kann, ist der Volumenanteil der jeweiligen Phase *nur als Mittelwert* der Phasenindikatorfunktion definiert. Die Geschwindigkeiten der beiden Phasen, die in statistischen Modellen auftreten, sind ebenfalls **phasengemittelte** Geschwindigkeiten. So wie die Diskontinuitäten der Phasenindikatorfunktion an der Phasengrenzfläche durch den Mittelungsprozeß geglättet werden, so dürfen auch bei den phasengemittelten Geschwindigkeiten keine Schwankungen mehr auftreten, die auf dem Scale der Einzelblasen liegen. Diese Schwankungen werden (soweit vorhanden) durch den Mittelungsprozeß eliminiert. Ihr Einfluß auf die phasengemittelten Geschwindigkeiten muß daher durch den Zusatzterm $\nabla \cdot \mathbf{T}_l^{Re}$ berücksichtigt werden.

Wird bei einem laminaren Modell dieser Term vernachlässigt, so nimmt man an, daß in der Strömung keine Wirbel vorliegen, die in der Größenordnung von Einzelblasen sind. Der Einfluß von geringen Geschwindigkeitsschwankungen, die durch die Umströmung von einzelnen dispersen Partikeln (Blasen) entstehen, wird also entweder vernachlässigt, oder durch eine Korrektur in der laminaren Viskosität der Flüssiphase berücksichtigt. Werden bei numerischen Simulationen mit einem solchen laminaren Modell Wirbel aufgelöst, die in der Größenordnung der einzelnen Gasblasen liegen, so ist das ein Anzeichen dafür, daß der Turbulenz-Term $\nabla \cdot \mathbf{T}_l^{Re}$ nicht mehr vernachlässigt werden kann.

Bereits bei einphasiger Strömung stellt die Erfassung der turbulenzbedingten Schwankungswerte ein anspruchsvolles Unterfangen dar. In zweiphasigen Strömungen kommen die Auswirkungen der Blasenumströmung auf Produktion, Transport und Dissipation der turbulenten kinetischen Energie hinzu. Außerdem gewinnen bei Gas-Flüssigkeitsgemischen die Wechselwirkungen der turbulenten Strukturen mit der Phasengrenzfläche und die daraus

resultierenden Wellen an der Blasenoberfläche entscheidende Bedeutung. Die für die zutreffende Modellierung dieser Effekte notwendige Information, die nur aus detaillierten Experimenten oder aus der Direkten Numerischen Simulation von Zweiphasenströmungen gewonnen werden kann, liegt allerdings noch nicht in ausreichendem Umfang vor. Deshalb werden zur Beschreibung der Turbulenz in Zweiphasensystemen von vielen Autoren die einphasigen Turbulenzmodelle eingesetzt. Dabei wird meistens das sogenannte Standard- k - ϵ -Modell verwendet, das ursprünglich für stationäre einphasige Strömungen in einfachen Geometrien von *Harlow und Nakayama* [39] sowie *Launder und Spalding* [73] entwickelt wurde. Bei der Berechnung des turbulenten Spannungstensors wird Gebrauch von der *Boussinesq*-Hypothese [13] gemacht, wonach in Analogie zu (6.6) folgende Darstellung verwendet wird:

$$(\mathbf{T}_l^{Re})_{ij} = \mu_l^t \left(\frac{\partial(\mathbf{u}_l)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(\mathbf{u}_l)_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \varrho_l \delta_{ij} k. \quad (6.82)$$

Dabei stellt k die turbulente kinetische Energie

$$k := \frac{1}{2} \overline{(\mathbf{u}_l'')_i (\mathbf{u}_l'')_i} \quad (6.83)$$

und μ_l^t die turbulente bzw. effektive Wirbelviskosität dar. Diese berechnet sich aus

$$\mu_l^t = C_\mu \cdot \varrho_l \frac{k^2}{\epsilon}. \quad (6.84)$$

Für die örtliche und zeitliche Veränderung der turbulenten kinetischen Energie k und deren Dissipationsrate ϵ werden zwei zusätzliche Bilanzgleichungen benötigt (s. z.B. [30]):

$$\frac{\partial(\varrho_l k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_l \mathbf{u}_l k) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_l^t}{\sigma_k} \nabla k \right) + P_k - \varrho_l \epsilon, \quad (6.85)$$

$$\frac{\partial(\varrho_l \epsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_l \mathbf{u}_l \epsilon) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_l^t}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon \right) + C_{\epsilon 1} P_k \frac{\epsilon}{k} - C_{\epsilon 2} \varrho_l \frac{\epsilon^2}{k}. \quad (6.86)$$

Der Term P_k beschreibt dabei die Produktionsrate der turbulenten kinetischen Energie, die folgendermaßen modelliert wird:

$$P_k = \mu_l^t \left(\frac{\partial(\mathbf{u}_l)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(\mathbf{u}_l)_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial(\mathbf{u}_l)_i}{\partial x_j}. \quad (6.87)$$

Dieses Modell enthält fünf Parameter, für die meistens folgende Werte eingesetzt werden:

$$C_\mu = 0.09; \quad C_{\epsilon 1} = 1.44; \quad C_{\epsilon 2} = 1.92; \quad \sigma_k = 1.0; \quad \sigma_\epsilon = 1.3. \quad (6.88)$$

Wird das einphasige k - ϵ -Modell zur Berechnung der Liquid-Turbulenz in Blasenströmungen eingesetzt, so werden die Bilanzgleichungen für k und ϵ dahingehend modifiziert, daß die

einzelnen Terme dieser Gleichungen mit dem Volumenanteil der Flüssigphase analog zu (6.2, 6.4) gewichtet werden [35]. Bei niedrigem Gasgehalt kann diese Korrektur jedoch vernachlässigt werden. Der Einfluß der Wirbelbewegungen um Blasen und Blasencluster auf die Hauptströmung (man spricht von „blaseninduzierter Turbulenz“) wird entweder vernachlässigt, durch zusätzliche Quellterme in den k - und ϵ -Gleichungen oder durch andere Modifikationen berücksichtigt. Eine Reihe von Ansätzen zur Beschreibung der blaseninduzierten Turbulenz wird im nächsten Abschnitt diskutiert.

Üben die relativ zu Flüssigphase aufsteigenden Gasblasen einen Einfluß auf die Turbulenzparameter aus, so haben auf der anderen Seite die turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen in der Flüssigkeit eine starke Wirkung auf die Vermischung in der Gasphase. Wie man diese turbulenten Dispersionseffekte durch ein mathematisches Modell beschreiben kann, ist das Thema des Abschnittes 6.8.3.

6.8.2 Modellierung der blaseninduzierten Turbulenz

Wie in den folgenden Kapiteln gezeigt, wird in den Simulationsergebnissen bereits bei moderaten Gasgehalten die Turbulenzintensität in der flüssigen Phase wesentlich unterschätzt, wenn das verwendete Turbulenzmodell keine Terme zur Beschreibung der blaseninduzierten Turbulenz enthält. Die Entwicklung von mathematischen Modellen für die blaseninduzierte Turbulenz befindet sich allerdings noch in einem Anfangsstadium. Im Prinzip können die Erhaltungsgleichungen für die turbulente kinetische Energie und deren Dissipationsrate in einer Zweiphasenströmung analog zu den einphasigen Gleichungen hergeleitet werden (*Elghobashi und Abou-Arab* [27], *Kataoka und Serizawa* [58]). Der Mangel an ausreichender Kenntnis über die physikalischen Abläufe erschwert jedoch die Erstellung stichhaltiger Schließungsgesetze. Wie die Untersuchungen partikelbeladener Strömungen gezeigt haben, kann es, je nach den konkreten Bedingungen, zu einer Reduzierung oder Anhebung der turbulenten kinetischen Energie in der kontinuierlichen Phase kommen. Bei blasenbeladener Strömung tritt zusätzlich eine Wechselwirkung der Wirbel mit der beweglichen Grenzfläche auf, deren experimentelle Untersuchung erst in Ansätzen vorgenommen wurde [7]. Die großen Blasen erreichen die Abmessung der energietragenden Wirbel; ihr dispersives Verhalten ist noch nicht hinreichend untersucht worden. Die in der Literatur vorhandenen Modelle sind deshalb zum Teil widersprüchlich und die Darstellung einzelner Terme meistens nur an das jeweilige Problem angepaßt.

Eine kritische Auseinandersetzung mit den theoretischen Aspekten der in der Literatur diskutierten Modelle zur blaseninduzierten Turbulenz liegt außerhalb des Rahmens dieser Arbeit. In diesem Abschnitt sollen lediglich die drei gängigsten Modellvarianten vorgestellt und die Grenzen ihrer Anwendung besprochen werden. Der Einfluß dieser Modelle auf die

Simulationsergebnisse wird in folgenden Kapiteln an konkreten Testfällen veranschaulicht.

Der einfachste Ansatz zur Berücksichtigung des Blaseneinflusses auf die Liquid-Turbulenz geht zurück auf *Sato und Sekoguchi* [102] sowie *Sato et al.* [103]. Der Spannungstensor \mathbf{T}_l^{Re} wird analog zu (6.82) modelliert, wobei für die effektive Viskosität folgende Formel eingesetzt wird:

$$\mu_l^t = \mu_{l,SI}^t + \mu_{l,BI}^t. \quad (6.89)$$

Hier entspricht $\mu_{l,SI}^t$ dem scherinduzierten Anteil der turbulenten Wirbelviskosität. Er wird analog zu (6.84) aus den Größen k und ϵ berechnet. Der zweite Summand, $\mu_{l,BI}^t$, resultiert dagegen aus der blaseninduzierten Turbulenz. Er wird proportional zum Gasgehalt angesetzt:

$$\mu_{l,BI}^t = 1.2 \frac{d_b}{2} \varepsilon_g \varrho_l |\mathbf{u}_{slip}|. \quad (6.90)$$

Um ein Gefühl über die Höhe der so definierten blaseninduzierten Viskosität zu erhalten, setzen wir in diesen Ausdruck für den Blasendurchmesser d_b , die Liquid-Dichte ϱ_l und die Schlupfgeschwindigkeit $|\mathbf{u}_{slip}|$ exemplarisch Werte von 5mm , $1000\text{kg}/\text{m}^3$ und $20\text{cm}/\text{s}$ ein. Die blaseninduzierte effektive Viskosität berechnet sich dann zu

$$\mu_{l,BI}^t = 0.6 \cdot \varepsilon_g \left[\frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}} \right].$$

Das entspricht bei einem lokalen Gasgehalt von 5% einem Wert

$$\mu_{l,BI}^t = 0.03 \left[\frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}} \right].$$

Dieser Wert ist im Fall einer typischen blaseninduzierten Strömung um 1 bis 2 Größenordnungen kleiner als derjenige Turbulenzanteil, der in der Flüssigphase erzeugt wird. Er übt somit kaum einen Einfluß auf die Simulationsergebnisse aus. *Jenne* [54] untersuchte den Einfluß des Sato-Modells auf die Simulation eines begasten Rührkessels und stellte fest, daß der Einfluß der blaseninduzierten Turbulenz nach dem Sato-Modell um bis zu drei Größenordnungen kleiner als der der scherinduzierten Turbulenz war, obwohl der Gasgehalt in seinen Untersuchungen in einigen Teilen der Apparatur oberhalb der 10%-Grenze lag.

Die zweite Modellvariante stammt von *Arnold et al.* [3]. Dieser Ansatz geht von der Annahme aus, daß der Einfluß der Gasblasen auf die Flüssigkeitsturbulenz überwiegend aus den Geschwindigkeitsfluktuationen resultiert, die als Folge der Umströmung der aufsteigenden Blasen durch die Flüssigkeit entstehen. Da aus Kontinuitätsgründen eine solche Reaktion im umgebenden Fluid selbst dann vorhanden ist, wenn sich die Blasen durch ein ruhendes

Medium bewegen, lassen sich diese Schwankungen nicht als Turbulenz im herkömmlichen Sinne interpretieren. Man verwendet deshalb dafür den Begriff „Pseudoturbulenz“. Unter Annahme einer Potentialumströmung von unverformten sphärischen Blasen läßt sich eine theoretische Abschätzung für den Einfluß dieser Schwankungen ableiten. Geht man von einer linearen Überlagerung der einphasigen und der Pseudoturbulenz aus, so läßt sich der Spannungstensor \mathbf{T}_l^{Re} als Summe

$$\mathbf{T}_l^{Re} = \mathbf{T}_{l,SI}^{Re} + \mathbf{T}_{l,BI}^{Re} \quad (6.91)$$

darstellen, wobei der scherinduzierte Anteil analog zu (6.82) modelliert und für den blaseninduzierten Anteil folgender Ausdruck eingesetzt wird:

$$\mathbf{T}_{l,BI}^{Re} = -\varepsilon_g \rho_l \left[\frac{1}{20} \mathbf{u}_{slip} \mathbf{u}_{slip} + \frac{3}{20} |\mathbf{u}_{slip}|^2 \mathbf{I} \right]. \quad (6.92)$$

Mit \mathbf{I} wird hier der Einheitstensor bezeichnet. *Lopez de Bertodano et al.* [81] verwenden dieses Modell in Kombination mit dem Sato-Ansatz zur Simulation einer vertikalen Blasenströmung in einem Rohr, und konnten damit eine deutliche Verbesserung gegenüber dem einphasigen Turbulenzmodell erzielen. Im übernächsten Kapitel wird jedoch am Beispiel eines Schlaufenreaktors gezeigt, daß die mit diesem Modell berechnete blaseninduzierte Turbulenz deutlich unterschätzt wird. Aus (6.92) läßt sich die blaseninduzierte turbulente kinetische Energie bestimmen [81] :

$$k_{BI} = \frac{1}{4} \varepsilon_g |\mathbf{u}_{slip}|^2, \quad (6.93)$$

was bei einem Schlupf von etwa 20cm/s

$$k_{BI} = 0.01 \varepsilon_g \left[\frac{m^2}{s^2} \right] \quad (6.94)$$

entspricht. Während für den oben angesprochenen Testfall ein Vergleich zwischen Meßdaten und Simulation mit einem einphasigen Turbulenzmodell auf einen Anteil der blaseninduzierten turbulenten kinetischen Energie von $0.01\text{m}^2/\text{s}^2$ schließen läßt, wird aus (6.94) selbst bei 10% Gasgehalt ein um den Faktor 10 kleinerer Betrag berechnet.

Wir haben gesehen, daß sowohl das Sato-Modell, als auch das Arnold-Modell in einer Reihe von Testfällen den Einfluß der blaseninduzierten Turbulenz stark unterschätzen. Ein weiterer Nachteil dieser Ansätze besteht in ihrer lokalen Wirkung, da sie die Anhebung der Turbulenzintensität nur dort berücksichtigen, wo die Gasphase auch tatsächlich präsent ist, während in der Realität eine durch die Blasen induzierte Turbulenz wegen dem konvektiven Transport der turbulenten Energie auch an den von der Turbulenzquelle weiter entfernten Stellen ihre Wirkung zeigen kann.

Der letzte Modellansatz, den wir besprechen wollen, berücksichtigt daher auch den konvektiven Transport der Blasenturbulenz, indem der Einfluß der Gasblasen direkt durch die Aufnahme von zusätzlichen Quelltermen in die Bilanzgleichungen für k und ϵ berücksichtigt wird. Der zusätzliche Quellterm in der k -Gleichung wird nach dem von *Kataoka und Serizawa* [58] vorgeschlagenen Ansatz proportional zum Produkt der Widerstandskraft und der Schlupfgeschwindigkeit zwischen beiden Phasen eingesetzt. Geht man von einem Gleichgewicht zwischen Druck- und Widerstandskraft aus, so läßt sich dieser Term folgendermaßen darstellen:

$$S_k = -C_k \varepsilon_g \nabla p \cdot \mathbf{u}_{slip}. \quad (6.95)$$

Da die Schlupfgeschwindigkeit und der Druckgradient entgegengerichtet sind, ist dieser Term bei Wahl einer positiven Konstante C_k stets größer als Null. Ein entsprechender Quellterm in der ϵ -Gleichung wird standardmäßig folgendermaßen modelliert

$$S_\epsilon = C_\epsilon \cdot \frac{\epsilon}{k} S_k \quad (6.96)$$

und ist ebenfalls positiv. Das bedeutet, daß der Beitrag der Blasen sowohl zur Produktion als auch zur Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie positiv ist, woraus sowohl ein Anstieg als auch eine Verminderung der Turbulenzintensität im Vergleich zu einphasigen Turbulenzmodellen resultieren kann. In vielen Fällen gelingt es, durch eine passende Wahl der Modellkonstanten C_k und C_ϵ eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Meßdaten und Simulationsergebnissen zu erzielen, wobei eine bessere Vorhersage der gemessenen Turbulenzintensität in der Regel auch zu einer besseren Übereinstimmung zwischen den gemessenen und berechneten Geschwindigkeiten führt. Darauf wird in Kapiteln 8 und 9 näher eingegangen. Das zeigt, wie wichtig eine genaue Vorhersage der blaseninduzierten Turbulenz für die Qualität der Simulationsergebnisse ist. Die Beispiele aus Kapiteln 8 und 9 zeigen aber auch, daß sich die durch Anpassung ermittelten „optimalen“ Werte der Modellparameter von Fall zu Fall unterscheiden können. In der Literatur werden für Modellkonstanten Werte zwischen 0.01 und 1 für C_k [11, 62] sowie zwischen 1 und 1.92 für C_ϵ [10, 62] eingesetzt. So stellten *Bhanu und Mazumdar* [10] bei der Simulation einer lokal begasten Blasensäule fest, daß ein Anstieg des C_k -Wertes von 0 auf 0.9 zu einer fast 50%igen Verminderung der Liquidgeschwindigkeit in der Säulenmitte führt. Eine starke Empfindlichkeit der Simulationsergebnisse gegenüber den Modellparametern schränkt den Einsatz dieses Modells für eine a priori-Berechnung der Zweiphasenhydrodynamik daher gegenwärtig noch ein.

6.8.3 Modellierung der turbulenten Dispersion in der Gasphase

Wenn man Fotoaufnahmen der Strömung in einer lokal begasten Blasensäule betrachtet (z.B. Abb.7.1), so stellt man fest, daß die Breite des aufsteigenden Blasenschwarms mit der Höhe der Säule zunimmt. Es findet also eine radiale Vermischung in der Gasphase statt. Eine gleichzeitige axiale Vermischung tritt ebenfalls auf. Ihre Wirkung kann auf den Bildern allerdings nicht erkannt werden, weil in der vertikalen Richtung der konvektive Transport dominiert.

Welche Ursachen hat die Vermischung in der Gasphase? Zum einen ergibt sie sich aus den Wechselwirkungen zwischen den Blasen, zum anderen durch den Einfluß der Turbulenz in der Flüssigphase. Relative Bewegung zwischen der Flüssigkeit und der Gasphase führt dazu, daß in der unmittelbaren Umgebung einzelner Gasblasen die Flüssigkeitgeschwindigkeit starken Fluktuationen ausgesetzt ist. Das gilt besonders im Blasenachlauf. Diese Fluktuationen treten selbst dann auf, wenn die auf die Apparategröße bezogene Reynoldszahl relativ klein ist, die Strömung also im globalen Sinne als laminar bezeichnet werden kann (z.B. kleine Luftblasen in Glyzerin in einer Apparatur im Labormaßstab). Diese Fluktuationen beeinflussen das Verhalten der benachbarten Blasen. Kleinere Blasen können im Nachlauf der großen Blasen beschleunigt werden, andere werden zur Seite geschoben. Hat die Strömung einen globalen turbulenten Charakter, so werden die dispersiven Effekte, die sich aus der Blasenwechselwirkung ergeben, *zusätzlich* durch die turbulenten Wirbel in der Flüssigphase verstärkt. Bei relativ niedrigem Gasblasenanteil und kleiner Blasengröße spielt dieser turbulente Anteil die dominierende Rolle bei der lokalen Vermischung.

Während die großräumige Zirkulationsbewegung in der Flüssigphase durch das Modell zutreffend wiedergegeben wird, können die lokalen Geschwindigkeitsschwankungen auf dem Maßstab der Einzelblasen im Rahmen des bisher betrachteten statistischen Modells nicht aufgelöst werden (s. Abschnitt 6.8.1). Der Einfluß dieser Geschwindigkeitsfluktuationen auf die lokale Vermischung in der Gasphase muß deshalb zusätzlich modelliert werden. Ein üblicher Weg besteht darin, die Kontinuitätsgleichung für die Gasphase um einen zusätzlichen Diffusionsterm

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varrho_g D_{lg}^t \frac{\partial \varepsilon_g}{\partial x_i} \right)$$

zu erweitern und den turbulenten Diffusionskoeffizienten D_{lg}^t proportional zur turbulenten Wirbelviskosität in der Flüssigphase zu setzen (s. z.B. *Grienberger und Hofmann* [34], *Torvik und Svendsen* [124]).

Um die Bedeutung des Diffusionsterms zu verstehen, muß man sich Klarheit über seine Herkunft sowohl im physikalischen wie im mathematischen Sinne verschaffen. Um die folgen-

den Ausführungen möglichst transparent zu gestalten, wird angenommen, daß die disperse Phase inkompressibel und die Strömung im statistischen Sinne stationär ist. Als Beispiel einer im statistischen Sinne stationären Strömung kann man sich die turbulente Strömung im Inneren eines langen Rohres vorstellen. Die momentanen Geschwindigkeitswerte unterliegen zwar turbulenten Schwankungen, die um die turbulenten Schwankungen bereinigten Geschwindigkeitsprofile ändern sich allerdings nicht mit der Zeit.

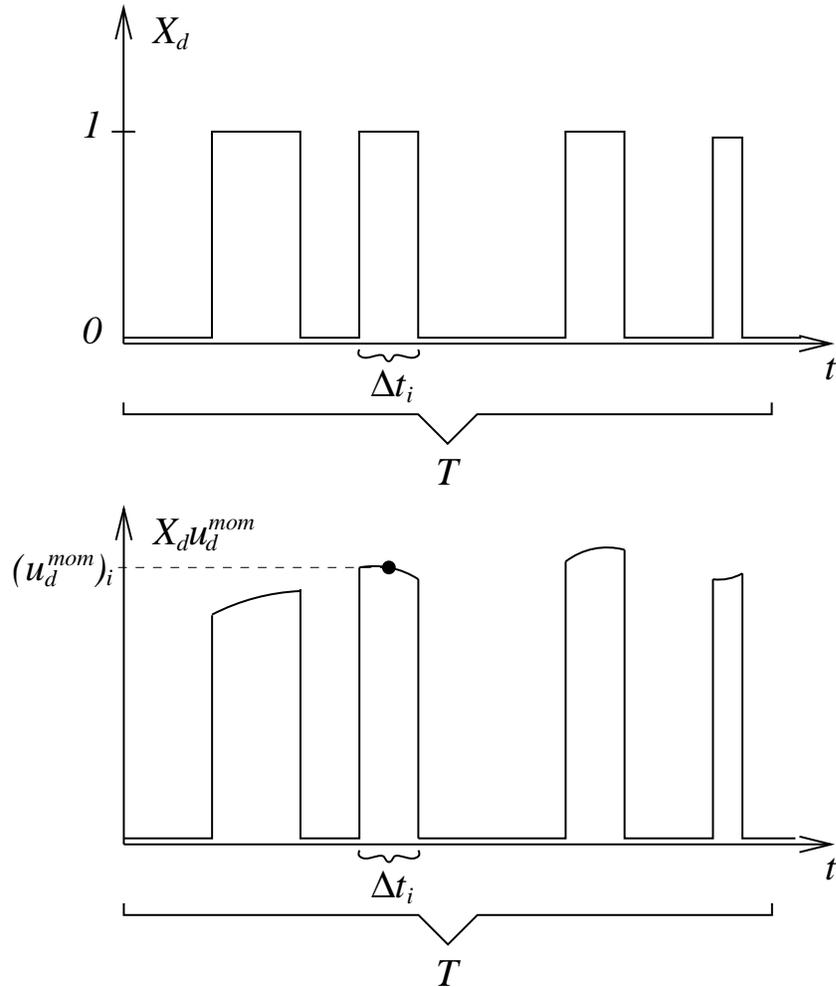


Abbildung 6.10: Phasenindikatorfunktion X_d der dispersen Phase (oben) und Produkt $X_d \mathbf{u}_d^{mom}$ (unten) als Funktionen der Zeit.

Wir wollen nun den Weg zur Herleitung der Kontinuitätsgleichung für die disperse Phase im Rahmen eines statistischen Modells skizzieren. Zu jedem Zeitpunkt und an jedem Ort im Reaktor kann nur eine der beiden Phasen vorhanden sein. Für Orte im **Inneren der dispersen Phase** gilt die *momentane* einphasige Kontinuitätsgleichung:

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_d^{mom}(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (6.97)$$

Hier bezeichnet \mathbf{u}_d^{mom} die momentane Geschwindigkeit der dispersen Phase.

Im Rahmen eines *statistischen Modells* wird die Kontinuitätsgleichung (6.97) einer Mittelungsprozedur unterworfen. In der Literatur werden dafür unterschiedliche Mittelungsverfahren verwendet [50]. Für statistisch stationäre Strömungen eignet sich insbesondere die Zeitmittelung sehr gut. Der zeitliche Mittelwert $\bar{f}(\mathbf{x})$ einer Größe $f(\mathbf{x}, t)$ wird durch

$$\bar{f}(\mathbf{x}) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(\mathbf{x}, t) dt \quad (6.98)$$

definiert.

In der hier vorliegenden Form kann die Gleichung (6.97) jedoch noch nicht zeitlich gemittelt werden, da sie nur zu den Zeitpunkten definiert ist, an welchen der Mittelungsort \mathbf{x} im Inneren der dispersen Phase liegt. Um diese Schwierigkeit zu überwinden, führt man eine *Phasenindikatorfunktion* X_d ein. Diese nimmt zu jedem Zeitpunkt t an jedem Ort \mathbf{x} , der durch die disperse Phase „besetzt“ ist, den Wert 1 an, ansonsten 0 (s. Abb.6.10). Entsprechend ist das Produkt $X_d \mathbf{u}_d^{mom}$ aus der Phasenindikatorfunktion der dispersen Phase X_d und der momentanen Geschwindigkeit \mathbf{u}_d^{mom} definiert (s. Abb.6.10).

Multipliziert man nun die Gleichung (6.97) mit der Phasenindikatorfunktion X_d , so führt die Anwendung der Kettenregel zu einer Form der Kontinuitätsgleichung für die disperse Phase, die nun *zu jedem Zeitpunkt* t gilt:

$$\nabla \cdot (X_d(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}_d^{mom}(\mathbf{x}, t)) = 0. \quad (6.99)$$

(Streng genommen ist diese Gleichung an der Phasengrenzfläche nur im Sinne der verallgemeinerten Funktionen definiert. Auf eine genaue Betrachtung der damit verbundenen Besonderheiten wird im Rahmen dieser Ausführung jedoch verzichtet.)

Die zeitliche Mittelung der Glg. (6.99) führt zu

$$\overline{\nabla \cdot (X_d(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}_d^{mom}(\mathbf{x}, t))} = 0. \quad (6.100)$$

Wie in [57] gezeigt, lassen sich unter den gegebenen Voraussetzungen die Reihenfolge von Mittelwertbildung und Differentiation vertauschen, womit für die gemittelte Kontinuitätsgleichung

$$\nabla \cdot \overline{(X_d(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}_d^{mom}(\mathbf{x}, t))} = 0 \quad (6.101)$$

folgt. Definiert man den Volumenanteil $\varepsilon_d(\mathbf{x})$ der dispersen Phase am Ort \mathbf{x} als zeitlichen Mittelwert der Phasenindikatorfunktion X_d

$$\varepsilon_d(\mathbf{x}) := \overline{X_d(\mathbf{x}, t)} \quad (6.102)$$

und die *phasengemittelte Geschwindigkeit* $\mathbf{u}_d(\mathbf{x})$ der dispersen Phase am Ort \mathbf{x} als

$$\mathbf{u}_d(\mathbf{x}) := \frac{\overline{X_d(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}_d^{mom}(\mathbf{x}, t)}}{\varepsilon_d(\mathbf{x})}, \quad (6.103)$$

so läßt sich die gemittelte Kontinuitätsgleichung für die disperse Phase (6.101) folgendermaßen darstellen

$$\nabla \cdot (\varepsilon_d \mathbf{u}_d) = 0. \quad (6.104)$$

Die Bedeutung der neu eingeführten Größen ε_d und \mathbf{u}_d kann man sich am besten so klar machen. Man plaziert am Punkt \mathbf{x} einen fiktiven Beobachter und läßt ihn die Strömung an diesem Punkt über ein längeres Zeitintervall verfolgen. Die Größe $\varepsilon_d(\mathbf{x})$ ist dann die Gesamtverweilzeit der dispersen Phase am Ort \mathbf{x} , dividiert durch die Gesamtlänge des Beobachtungszeitintervalls, oder, in Bezeichnungen der Abb.6.10,

$$\varepsilon_d = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T X_d dt \approx \frac{1}{T} \sum_i \Delta t_i \quad (6.105)$$

Zur Berechnung der phasengemittelten Geschwindigkeit wird folgendermaßen vorgegangen. Jedes mal, wenn die disperse Phase am Ort \mathbf{x} vorhanden ist, wird die Länge der Verweilzeit mit der Geschwindigkeit der dispersen Phase mutipliziert. Diese Werte werden über die gesamte Beobachtungszeit aufaddiert und durch die Gesamtverweilzeit der dispersen Phase am Ort \mathbf{x} dividiert:

$$\mathbf{u}_d = \frac{1}{\varepsilon_d} \cdot \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T X_d \mathbf{u}_d^{mom} dt \approx \frac{\sum_i (\mathbf{u}_d^{mom})_i \cdot \Delta t_i}{\sum_i \Delta t_i} \quad (6.106)$$

Mit einer auf diese Weise definierten phasengemittelten Geschwindigkeit der dispersen Phase beschreibt Gleichung (6.104) die Transportvorgänge genau, also auch die lokalen Vermischungsvorgänge. Deshalb sind keine diffusionartigen Zusatzterme in dieser Gleichung vorhanden und nötig.

In Wirklichkeit ist es aber so, daß die Geschwindigkeit der dispersen Phase, die aus der Impulsbilanz berechnet wird, **nicht** mit der Größe identisch ist, die oben als phasengemittelte Geschwindigkeit definiert wurde. Diesen auf den ersten Blick paradoxen Sachverhalt wollen wir jetzt an einem einfachen Beispiel erklären.

Wir stellen uns zunächst eine stationäre, zweidimensionale *einphasige* turbulente Strömung einer Flüssigkeit zwischen zwei parallelen horizontalen Platten vor (Abb. 6.11). Es bezeichne Ox - die horizontale (axiale) Koordinatenachse und Oy - die vertikale (radiale)

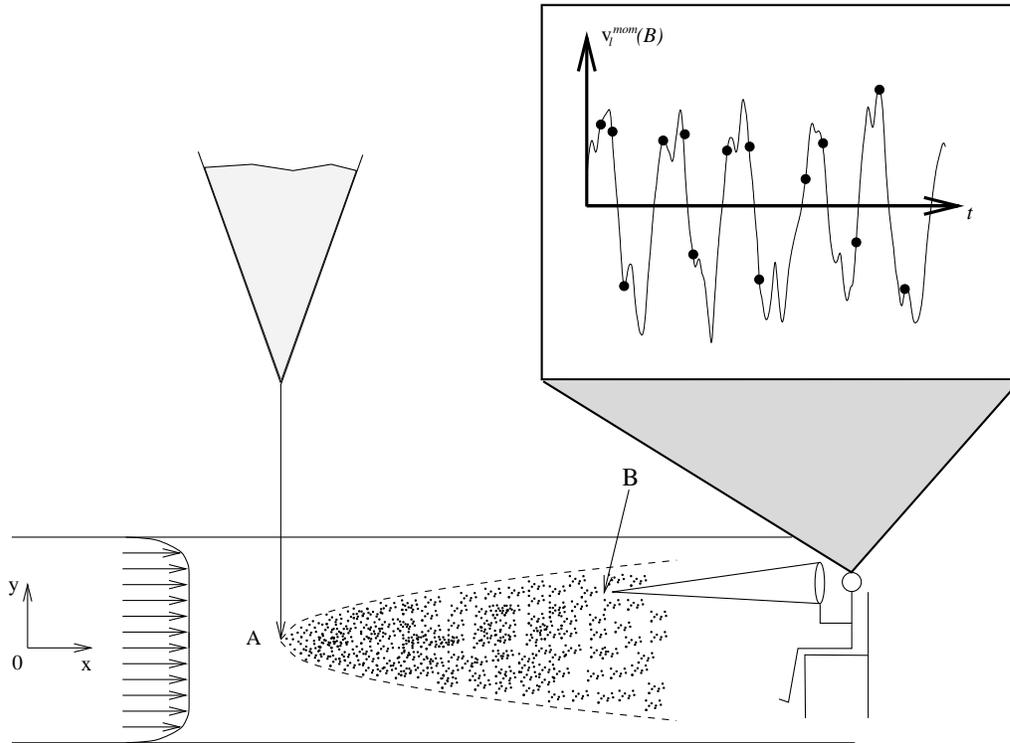


Abbildung 6.11: Turbulente Strömung einer Flüssigkeit zwischen zwei unendlich langen parallelen horizontalen Platten. Am Punkt A wird Tracer zugeführt, der sich radial vermischt. Am Ort B sitzt der Beobachter.

Koordinatenachse. Die Größen $u_i^{mom}(x, y, t)$ und $v_i^{mom}(x, y, t)$ seien die momentanen Werte der axialen und der radialen Geschwindigkeit am Ort (x, y) zum Zeitpunkt t . Es gilt dann:

$$u_i^{mom}(x, y, t) = \bar{u}_i(x, y) + u_i'(x, y, t) \quad (6.107)$$

$$v_i^{mom}(x, y, t) = \bar{v}_i(x, y) + v_i'(x, y, t) \quad (6.108)$$

\bar{u}_i und \bar{v}_i sind somit die statistischen (zeitlichen) Mittelwerte der beiden Geschwindigkeitskomponenten und u_i' und v_i' deren turbulente Schwankungen. Es gilt definitionsgemäß $\overline{u_i'} = 0$ und $\overline{v_i'} = 0$. Wenn man voraussetzt, daß die Strömung ausgebildet ist, ist die gemittelte Radialgeschwindigkeit \bar{v}_i ebenfalls gleich Null. Es gilt also $v_i^{mom} = v_i'$.

Man stelle sich nun vor, daß am Ort A der Strömung über eine Sonde Tracerpartikel zugeführt werden. Die Tracerpartikel haben die Dichte der Flüssigkeit und haben eine sehr kleine Konzentration und einen kleinen Durchmesser, so daß sie kaum einen Einfluß auf die Strömung der flüssigen Phase ausüben. Unter diesen Annahmen stimmt die phasengemittelte Geschwindigkeit der Flüssigphase mit ihrem zeitlichen Mittelwert überein. Insbesondere gilt für die radiale Komponente der phasengemittelten Geschwindigkeit

$$v_i = \bar{v}_i = 0 \quad (6.109)$$

Es ist klar, daß infolge der turbulenten Schwankungen eine radiale Vermischung der Tracerpartikel stromabwärts von Punkt A stattfinden wird. Wir wollen die örtliche Konzentrationsveränderung des Tracers stromabwärts mathematisch beschreiben.

Nach Gleichung (6.104) wird die örtliche Konzentrationsverteilung durch

$$\frac{\partial(\varepsilon_p u_p)}{\partial x} + \frac{\partial(\varepsilon_p v_p)}{\partial y} = 0 \quad (6.110)$$

beschrieben, wobei u_p und v_p die axiale und radiale Komponenten der phasengemittelten Geschwindigkeiten der Tracerpartikel sind. Die Gleichung (6.110) kann nur dann eine radiale Vermischung der Tracerpartikel beschreiben, wenn die radiale Komponente der phasengemittelten Partikelgeschwindigkeit v_p *nicht gleich Null* ist. Wir nehmen an, daß infolge der sehr kleinen Partikelgröße die Geschwindigkeit jeder einzelnen Partikel mit der Geschwindigkeit der Flüssigkeit in ihrer unmittelbaren Umgebung übereinstimmt.

Um die radiale Komponente v_p der phasengemittelten Geschwindigkeit der Tracerpartikel zu bestimmen, setzen wir einen fiktiven Beobachter an einen Punkt B , stromabwärts von A und etwas in der vertikalen Richtung nach oben versetzt, und lassen ihn die radiale Geschwindigkeit am Punkt B über längere Zeit beobachten. In der Abb.6.11 sei der zeitliche Verlauf der radialen Geschwindigkeit der flüssigen Phase am Punkt B dargestellt. Mit dicken schwarzen Punkten seien in der Abb.6.11 die Geschwindigkeiten der Tracerpartikel markiert, die am Ort B beobachtet wurden. Da sich die Tracerpartikel mit der Geschwindigkeit der flüssigen Phase bewegen, liegen diese Punkte direkt auf der Kurve $v_i^{mom}(B, t)$. Die Konzentration der Tracerpartikel nimmt von der Symmetrieachse zur Wand ab. Das bedeutet, daß oberhalb des Punktes B weniger Tracerpartikel pro Volumeneinheit vorhanden sind, als unterhalb vom Punkt B . Deshalb werden am Punkt B mehr solche Partikel registriert, die von unten kommen, als solche, die von oben kommen. Diese Partikel haben eine positive vertikale Geschwindigkeit, deshalb sehen wir in der Abb.6.11 mehr dicke schwarze Punkte oberhalb der t -Achse, als unterhalb. Bei jeder registrierten Partikel geht das Produkt aus Geschwindigkeit und Verweilzeit am Ort B in die Formel (6.106) ein. Nehmen wir zur Vereinfachung an, daß die Partikel rund sind und den Punkt B mit ihrem Massenschwerpunkt durchqueren. Dann ist die Verweilzeit umgekehrt proportional zur Partikelgeschwindigkeit und das Produkt aus diesen beiden Werten ist bei allen Partikeln bis auf das Vorzeichen gleich. Eine von unten kommende Partikel leistet einen positiven Beitrag zu (6.106), der genauso groß ist, wie der negative Beitrag einer von oben kommenden Partikel. Da von unten mehr Partikel den Punkt B durchqueren, ist die *phasengemittelte* radiale Geschwindigkeit der *dispersen Phase* positiv und somit ungleich der *phasengemittelten* Geschwindigkeit der *flüssigen Phase* v_i , die gleich Null ist (s. (6.109)).

Das bedeutet, obwohl für jede einzelne Partikel ihre Geschwindigkeit mit der Geschwin-

digkeit der Flüssigkeit in ihrer unmittelbaren Umgebung übereinstimmt, sind die phasengemittelten Geschwindigkeiten beider Phasen nicht gleich. Während die gemittelte radiale Liquid-Geschwindigkeit gleich Null ist, hat die phasengemittelte Geschwindigkeit der dispersen Phase einen Anteil, der vom Ortsgradienten der Volumenkonzentration der dispersen Phase abhängt. Wäre die phasengemittelte Geschwindigkeit der dispersen Phase ebenfalls Null, dann könnte durch Gleichung (6.110) eine radiale Vermischung der Partikel gar nicht beschrieben werden.

Analog zu diesem Beispiel gilt auch für Blasenströmungen: obwohl sich die Geschwindigkeit jeder einzelnen Gasblase von der Geschwindigkeit der sie umgebenden Flüssigkeit um eine mehr oder weniger konstante Schlupfgeschwindigkeit unterscheidet, ist die Differenz zwischen *phasengemittelten* Geschwindigkeiten beider Phasen nicht gleich der Schlupfgeschwindigkeit, die aus dem Kräftegleichgewicht zwischen Druck- und Widerstandskraft berechnet wird. Die phasengemittelte Gasgeschwindigkeit enthält vielmehr eine zusätzliche, vom Ortsgradienten der Volumenkonzentration der Gasphase abhängige Komponente \mathbf{u}_{drift} , die von *Simonin und Violet* [108] als „drifting velocity“ bezeichnet wurde. Es gilt somit

$$\mathbf{u}_g = \mathbf{u}_l + \mathbf{u}_{slip} + \mathbf{u}_{drift}, \quad (6.111)$$

bzw.

$$\mathbf{u}_g = \mathbf{u}_b + \mathbf{u}_{drift}, \quad (6.112)$$

wenn wir für die Summe aus der gemittelten Liquid-Geschwindigkeit \mathbf{u}_l und der Schlupfgeschwindigkeit \mathbf{u}_{slip} die Bezeichnung \mathbf{u}_b verwenden.

Zur Berechnung der „drifting velocity“ wird von *Simonin und Violet* [108] folgende Beziehung eingesetzt

$$\mathbf{u}_{drift} = -\mathbf{D}_{gl}^t \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon_g} \nabla \varepsilon_g - \frac{1}{\varepsilon_l} \nabla \varepsilon_l \right) \approx -\mathbf{D}_{gl}^t \cdot \frac{1}{\varepsilon_g} \nabla \varepsilon_g. \quad (6.113)$$

Da die beiden Gradienten $-\nabla \varepsilon_g$ und $\nabla \varepsilon_l$ bis auf das Vorzeichen übereinstimmen, und der Gasgehalt in der Regel um eine Größenordnung kleiner als der Liquid-Gehalt ist, kann der zweite Term in den runden Klammern vernachlässigt werden. Mit \mathbf{D}_{gl}^t wird der turbulente Dispersionstensor bezeichnet. In der Regel wird davon ausgegangen, daß dieser Tensor eine Diagonalform hat, wobei alle Diagonalelemente gleich sind und sich wie folgt berechnen lassen

$$(\mathbf{D}_{gl}^t)_{ii} = \frac{1}{Sc} \cdot \frac{\mu_l^t}{\rho_l}. \quad (6.114)$$

Sc ist die Schmidtzahl für den turbulenten Transport. Sie entspricht dem Verhältnis der Geschwindigkeitsfluktuationen der beiden Phasen. Es ist experimentell belegt, daß im Falle von Gas-Flüssig-Strömungen infolge eines deutlichen Dichteunterschieds die Geschwindigkeitsfluktuationen beider Phasen vergleichbare Größe aufweisen [106]. Es wird deshalb für den Faktor Sc in der Regel der Wert $Sc = 1$ angenommen [54, 124].

Faßt man alle diese Gleichungen zusammen, so ergibt sich für die Gasgeschwindigkeit

$$\mathbf{u}_g = \mathbf{u}_b - \frac{\mu_l^t}{\rho_l} \frac{1}{\varepsilon_g} \nabla \varepsilon_g. \quad (6.115)$$

Setzt man diese Darstellung für die phasengemittelte Gasgeschwindigkeit in die Kontinuitätsgleichung für die Gasphase (6.29) ein, so erhält man folgende Konvektions-Diffusions-Gleichung, die sowohl den konvektiven Transport als auch die turbulente Vermischung in der Gasphase beschreibt:

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_b) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\rho_g}{\rho_l} \cdot \mu_l^t \cdot \frac{\partial \varepsilon_g}{\partial x_i} \right). \quad (6.116)$$

6.9 Das mathematische Modell: Zusammenfassung und numerische Aspekte

In den letzten Abschnitten wurden unterschiedliche Möglichkeiten zur Modellierung der Wechselwirkungskraft und der Zweiphasenturbulenz vorgestellt. Legt man sich auf eine konkrete Modellvariante fest, so wird dadurch das turbulente Drift-Flux-Modell mit Boussinesq-Approximation (6.27–6.30) vollständig definiert. Wir wollen nun alle Modellgleichungen in einer zusammenfassenden Form darstellen, wobei wir die einfachste Variante der Modellierung der Wechselwirkungskraft und der Turbulenz zugrundelegen. Wir bezeichnen dieses Modell als „Basismodell“. Dieses Basismodell wird den Ausgangspunkt für numerische Simulationen bilden, die in den nächsten Kapiteln beschrieben werden.

Wir fassen zunächst die wichtigsten Annahmen des Basismodells zusammen:

- Die Gasphase liegt in Form von dispersen Gasblasen vor (Grundvoraussetzung des Euler-Euler-Modells).
- Alle Blasen haben die gleiche Blasenmasse (sonst müsste man mehrere Blasenklassen einführen).

- Blasenredispergierung und -koaleszenz werden vernachlässigt (sonst müsste man mehrere Blasengrößenklassen betrachten mit **zusätzlichen** Austauschtermen zwischen den einzelnen Klassen).
- Die Dichte der dispersen Phase (Gas) ist viel kleiner als die Dichte der kontinuierlichen Phase (Flüssigkeit). Unter dieser Voraussetzung kann das Two-Fluid-Modell durch das Drift-Flux-Modell ersetzt werden.
- Der Gasgehalt ist niedrig und weist keine starken vertikalen Gradienten auf (Grundvoraussetzungen für Boussinesq-Approximation).
- Die Trägheitskraft, Schwerkraft, lift force und virtuelle Masse werden in der Gasimpulsbilanz vernachlässigt, so daß die Schlupfgeschwindigkeit aus dem Gleichgewicht zwischen Druckkraft und Widerstandskraft berechnet wird.
- Bei Simulationen von *gleichmäßig* begasten Blasensäulen wird der Widerstandsbeiwert nach Korellation F berechnet, wobei ein konstanter C_w -Wert nach *Schwarz und Turner* [105] eingesetzt wird. Bei Simulationen von *lokal* begasten Blasensäulen und Schlaufenreaktoren wird eine konstante Schlupfgeschwindigkeit von 20cm/s angenommen.
- Die Turbulenz in der Flüssigphase wird durch das Standard- k - ϵ -Modell beschrieben. Der Einfluß der dispersen Phase auf die Turbulenz wird vernachlässigt.
- Die turbulente Durchmischung in der Gasphase wird durch einen Diffusionsterm in der Gaskontinuitätsgleichung modelliert. Der turbulente Diffusionskoeffizient wird proportional der turbulenten Wirbelviskosität in der Flüssigphase gesetzt.
- Für die turbulente Schmidtzahl wird der Wert $Sc = 1$ angenommen.

Das resultierende System besteht aus Gleichungen, die das Verhalten des Gas-Flüssig-Gemisches beschreiben, und Gleichungen, die zur Berechnung des lokalen Gasgehalts eingesetzt werden.

Das Navier-Stokes-System für das Gemisch besteht aus der Kontinuitätsgleichung

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_l = 0 \quad (6.117)$$

und der Impulsbilanz

$$\frac{\partial(\varrho_l \mathbf{u}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_l \mathbf{u}_l \mathbf{u}_l) = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{T}_l + \nabla \cdot \mathbf{T}_l^{Re} + \varrho_l \mathbf{g} - \varepsilon_g \varrho_l \mathbf{g} \quad (6.118)$$

Die Terme \mathbf{T}_l bzw. \mathbf{T}_l^{Re} entsprechen dem molekularen bzw. turbulenten Spannungstensor in der Flüssigphase. Es gilt

$$(\mathbf{T}_l)_{ij} = \mu_l \left(\frac{\partial(\mathbf{u}_l)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(\mathbf{u}_l)_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial(\mathbf{u}_l)_n}{\partial x_n} \right), \quad (6.119)$$

$$(\mathbf{T}_l^{Re})_{ij} = \mu_l^t \left(\frac{\partial(\mathbf{u}_l)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(\mathbf{u}_l)_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \varrho_l \delta_{ij} k, \quad (6.120)$$

wobei die turbulente Wirbelviskosität μ_l^t der Flüssigphase nach dem Standard- k - ϵ -Modell (6.85, 6.86) aus k und ϵ berechnet wird:

$$\mu_l^t = C_\mu \varrho_l \frac{k^2}{\epsilon}, \quad C_\mu = 0.09. \quad (6.121)$$

Die Dichte ϱ_l und die dynamische Viskosität der Flüssigphase nehmen folgende konstante Werte an:

$$\mu_l = 0.001 \left[\frac{kg \cdot m}{s} \right] \quad (6.122)$$

$$\varrho_l = 1000 \left[\frac{kg}{m^3} \right] \quad (6.123)$$

Die Gleichungen (6.117–6.123) stimmen mit dem hydrodynamischen Modell für einphasige inkompressible turbulente Strömungen bis auf den Term $-\varepsilon_g \varrho_l \mathbf{g}$ überein. Zur numerischen Lösung dieses Systems können daher alle für die einphasigen Strömungen entwickelten Verfahren eingesetzt werden. Für die Simulationen, die in folgenden Kapiteln präsentiert werden, wird das von Patankar [93] entwickelte SIMPLER-Verfahren eingesetzt. Die Diskretisierung der Modellgleichungen erfolgt nach der Finite-Volumen-Methode. Zur Diskretisierung der Konvektionsterme wird das TVD(SL)-Verfahren (2.39) für die linearen Gleichungen und das QTVD-Verfahren (3.54) für die Gleichungen zur Bestimmung der Geschwindigkeitskomponenten eingesetzt, soweit nicht ausdrücklich etwas anderes erwähnt wird. Als Limiter-Funktion wird in allen Gleichungen der Monotonized-Centered-Limiter (1.180) verwendet.

Zur Berechnung des Termes $-\varepsilon_g \varrho_l \mathbf{g}$ in Glg.(6.118) muß die lokale Gasgehaltsverteilung bekannt sein. Am Anfang der ersten Iteration wird der Wert des Gasgehaltes aus der alten Zeitebene übernommen. Zu Anfang aller folgenden Iteration wird die Gasverteilung neu berechnet. Diese Berechnung erfolgt in vier Schritten.

Zunächst wird die Schlupfgeschwindigkeit \mathbf{u}_{slip} bestimmt, wobei man entweder die Beziehung

$$\mathbf{u}_{slip} = -\frac{\nabla p}{C_w} \quad (6.124)$$

mit

$$C_w = 5 \cdot 10^4 \left[\frac{kg}{m^3 s} \right] \quad (6.125)$$

verwendet oder einfach

$$\mathbf{u}_{slip} = 20 \left[\frac{cm}{s} \right] \cdot \mathbf{e}_x \quad (6.126)$$

setzt. Im zweiten Schritt wird die „Blasengeschwindigkeit“ \mathbf{u}_b aus der folgenden Schlupf-
beziehung berechnet:

$$\mathbf{u}_b = \mathbf{u}_l + \mathbf{u}_{slip}. \quad (6.127)$$

Sie wird in die Kontinuitätsgleichung für die Gasphase eingesetzt, die in folgender Form
modelliert wird:

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \varrho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \varrho_g \mathbf{u}_b) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_l^t}{\varrho_l} \cdot \frac{\partial(\varepsilon_g \varrho_g)}{\partial x_i} \right). \quad (6.128)$$

Die Darstellung des diffusiven Termes unterscheidet sich hier von der Gleichung (6.116),
falls die Gasphase kompressibel modelliert wird, da wir es für sinnvoll halten, anzunehmen,
daß in diesem Fall der diffusive Strom zwischen zwei Nachbarzellen proportional zu der
Blasenanzahldifferenz in diesen Zellen und nicht zu der Gasgehaltsdifferenz ist.

Bei der numerischen Behandlung der Gleichung (6.128) wird das Produkt $\varepsilon_g \varrho_g$ zu einer
einzigen unbekanntem Variable zusammengefaßt. Im dritten Schritt wird die Verteilung die-
ser Variable aus der Gleichung (6.128) berechnet. Um daraus den Gasgehalt zu bestimmen,
wird der Wert dieser Variable im vierten Schritt durch die Gasdichte ϱ_g dividiert. Falls die
Gasphase kompressibel modelliert wird, wird ϱ_g aus der Zustandsgleichung für das ideale
Gas berechnet, mit dem aus der Navier-Stokes-Gleichung berechneten Druck.

In dieser Form wird das Basismodell in den nächsten Kapiteln zur Berechnung von lokal
und gleichmäßig begasten Blasensäulen sowie von Schlaufenreaktoren eingesetzt. Zu Ver-
gleichszwecken werden auch Rechnungen mit einer Schlupfgeschwindigkeit von $25 cm/s$
und mit einem laminaren Modell durchgeführt. Bei einem laminaren Modell wird die ef-
fektive Wirbelviskosität gleich Null gesetzt. Dadurch verschwindet sowohl der „turbulente“
Term in der Gemischimpulsbilanz (6.118), als auch der diffusive Term in der Kontinuitäts-
gleichung für die Gasphase (6.128).

Es wird sich zeigen, daß mit diesem Basismodell in mehreren komplexen Testfällen eine
sehr gute Übereinstimmung mit Meßdaten erzielt wird, ohne daß eine Anpassung des Mo-
dells notwendig wäre. Es handelt sich dabei in der Regel um Fälle mit einem niedrigen

lokalen Gasgehalt von 1 bis 2%. Nimmt der Gasgehalt in großen Bereichen des Reaktors höhere Werte an, so macht sich der Einfluß der blaseninduzierten Turbulenz bemerkbar. Um auch solche Fälle berechnen zu können, wird das Basismodell um die Quellterme (6.95, 6.96) in den k - und ϵ -Gleichungen erweitert. Dabei wird besonderer Wert darauf gelegt, daß die Modellgleichungen nicht an einem speziellen Fall, sondern an einer Reihe von unterschiedlichen Experimenten getestet werden.