

## Kapitel 9

# Gleichmäßig begaste Blasensäule

In den letzten zwei Kapiteln wurde das Basismodell zur Simulation von lokal begasten Blasensäulen und Schlaufenreaktoren eingesetzt. Bei **lokal begasten Blasensäulen** handelte es sich um Zweiphasenströmungen mit einem niedrigen Gasgehalt (1-2%), wobei die Gasphase nur in einem relativ kleinen Bereich der Apparatur vorhanden war. Es konnte eine sehr gute *qualitative und quantitative* Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment erzielt werden.

Im Falle von **flachen Schlaufenreaktoren** wurden einige Testfälle mit einem ebenfalls moderaten Gasgehalt untersucht. Die Gasblasen verteilen sich diesmal allerdings über den gesamten Querschnitt des Risers und üben einen beträchtlichen Einfluß auf die Turbulenz in der flüssigen Phase aus. In diesem Fall konnte mit dem Basismodell zwar eine gute *qualitative* Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden, eine quantitative Anpassung der Simulationsergebnisse an die Meßdaten wurde jedoch erst nach einer Erweiterung des Basismodells durch zusätzliche Terme zur Beschreibung der blaseninduzierten Turbulenz (BIT) möglich. Es wurde allerdings festgestellt, daß die Simulationsergebnisse sehr empfindlich gegenüber einer Variation der in den zusätzlichen BIT-Termen enthaltenen Modellkonstanten reagieren, so daß ein Einsatz der BIT-Terme für eine *Apriori*-Berechnung von Zweiphasenströmungen mit großen Unsicherheiten verbunden ist.

Eine zutreffende Beschreibung der Blasenströmung in einer **gleichmäßig begasten Blasensäule** stellt die größte Herausforderung für ein Zweiphasenmodell dar. Auf der einen Seite liegt der lokale Gasgehalt in den praxisrelevanten Fällen meist wesentlich oberhalb der bisher untersuchten 2%-Grenze. Gleichzeitig sind die Gasblasen im Unterschied zu lokal begasten Blasensäulen und den Schlaufenreaktoren über die *gesamte Apparatur* verteilt.

Die Strömungsform in einer gleichmäßig begasten Blasensäule hängt in einem entscheidenden Maße vom eingesetzten Gasvolumenstrom ab. Bei geringen Gasbelastungen liegt der sog. *homogene Strömungszustand* vor. Dieser Betriebszustand ist durch eine einheitliche

Blasenaufstiegsgeschwindigkeit aufgrund der einheitlichen Blasengröße und der gleichmäßigen Blasenverteilung charakterisiert. Es wird keine großräumige Zirkulation beobachtet. Der homogene Strömungszustand stellt den Trivialfall einer Blasenströmung dar. Seine numerische Berechnung im Rahmen eines Two-Fluid-Modells bereitet keine Schwierigkeiten.

Bei höheren Gasleerrohrgeschwindigkeiten tritt ein *heterogener* Strömungszustand auf. Bei konstanter Blasengröße und einer begrenzten Blasenaufstiegsgeschwindigkeit gibt es einen maximal möglichen Gasdurchsatz (Flutpunkt), der unter diesen Bedingungen durch die Säule transportiert werden kann. Zur Illustration dieses Effektes stellen wir folgende Überlegungen an. Wir nehmen an, daß die Gasphase absolut gleichmäßig über die gesamte Blasensäule verteilt ist, und der Wert des lokalen Gasgehaltes einheitlich  $\varepsilon_g$  beträgt (zur Vereinfachung der Darstellung wird von der Inkompressibilität der Gasphase ausgegangen). Bei zunehmendem Gasgehalt nimmt die vertikale Komponente des Druckgradienten mit dem steigenden Gasgehalt ab, was in einer Abnahme der Relativgeschwindigkeit resultiert. Geht man einfachheitshalber von einer linearen Abhängigkeit zwischen dem lokalen Gasgehalt und dem Wert der vertikalen Schlupfgeschwindigkeit aus [44], so beträgt die Gasleerrohrgeschwindigkeit bei einer gleichmäßigen Begasung

$$\dot{V}_G = \varepsilon_g(1 - \varepsilon_g)u_{slip}^{EB} \quad (9.1)$$

Hier bezeichnet  $u_{slip}^{EB}$  die Einzelblasenaufstiegsgeschwindigkeit in unendlich ausgedehntem ruhendem Wasser. Die Größe  $\dot{V}_G$  erreicht ihr Maximum bei  $\varepsilon_g = 0.5$ . Bei  $u_{slip}^{EB} = 20\text{cm/s}$  entspricht das einer Gasleerrohrgeschwindigkeit von  $5\text{cm/s}$ .

Wird die Gasleerrohrgeschwindigkeit über den Flutpunkt erhöht, so weicht das System vom homogenen in den heterogenen Strömungszustand aus. Durch Zusammenballungen von Klein- zu Großblasen, die eine wesentlich höhere Blasenaufstiegsgeschwindigkeit haben, wird der hohe Gasdurchsatz bewältigt. Dieser Strömungszustand wird aufgrund der rotierenden größeren Blasen auch als „churn turbulent“ bezeichnet [19].

Die Größe der Gasleerrohrgeschwindigkeit, bei der die homogene Strömung heterogen wird, hängt von vielen äußeren Parametern wie Reaktorgeometrie, Begaserkonstruktion, Druck, Temperatur, Blasengrößenverteilung u. v. a. ab [35] und kann von dem oben abgeschätzten Wert von  $5\text{cm/s}$  stark abweichen. Diese Abweichung resultiert zum einen aus der stark vereinfachten Annahme der linearen Abhängigkeit der Schwarmgeschwindigkeit vom Gasgehalt. Zum anderen tritt die Blasenkoaleszenz bereits wesentlich früher auf als beim oben ermitteltem kritischen Wert von  $\varepsilon_g = 0.5$ . Diese beiden Korrekturen erklären zwar die Abweichung des Flutpunktes von dem ermittelten Wert von  $5\text{cm/s}$ , nicht jedoch seine Abhängigkeit von der Reaktorgeometrie.

Die dritte Voraussetzung des Ansatzes (9.1) war die Annahme, daß sich die Flüssigkeit

in einem globalen Ruhezustand befindet, und daher alle Gasblasen mit einer einheitlichen Geschwindigkeit aufsteigen. In der Realität gibt es jedoch eine Übergangsphase zwischen dem homogenen und heterogenen Strömungszustand, in der in der Flüssigphase bereits großräumige Zirkulationen entstehen, während die Blasengröße noch mehr oder weniger einheitlich bleibt. Verlagern sich die Blasen in die Bereiche mit schnell aufsteigender Flüssigkeit, so können auch wesentlich höhere Gasdurchsätze als im homogenen Strömungszustand bewältigt werden, ohne daß eine höhere Relativgeschwindigkeit zwischen Phasen und somit auch die Blasenkoaleszenz notwendig wäre. Da das dynamische Verhalten der Flüssigkeit jedoch stark von der Geometrie der Apparatur abhängt, hat die Geometrie einen entscheidenden Einfluß auf die kritische Gasleerrohrgeschwindigkeit, bei der sich der heterogene Strömungszustand einstellt.

Obwohl in vielen neueren Arbeiten versucht wird, die heterogene Strömungsform in einer gleichmäßig begasten Blasensäule mit lokalen Gasgehalten bis zu 30-40% einer Berechnung zugänglich zu machen, muß man sich im Klaren darüber sein, daß für eine zuverlässige Simulation des heterogenen Strömungszustandes der gegenwärtige Kenntnisstand noch nicht ausreicht. Das Widerstandsverhalten der Blasen bei hohem Gasgehalt, der Einfluß der Blasen auf die Turbulenz sowie ihr – bei hohen Gasvolumenanteilen nicht mehr zu vernachlässigendes – Koaleszenz- und Redispergierungsverhalten sind Phänomene, die bis jetzt nur wenig verstanden und somit nicht zuverlässig modelliert werden können.

Da im Rahmen des Basismodells von einer einheitlichen Blasenmasse ausgegangen wird, werden wir uns bei den Berechnungen der Strömung in einer gleichmäßig begasten Blasensäule auf Gasdurchsätze von 1 bis  $2\text{ cm/s}$  beschränken. Diese Gasdurchsätze entsprechen für die meisten Apparaturgeometrien dem oben angesprochenen Übergangsbereich zwischen der homogenen und heterogenen Strömungsform, während dessen die starke Blasenkoaleszenz noch nicht einsetzt, die Strömung jedoch bereits einen stark dynamischen Charakter hat, der zumindest qualitativ mit dem heterogenen Strömungszustand übereinstimmt. Bereits bei diesen moderaten Gasleerrohrgeschwindigkeiten beträgt der lokale Gasgehalt in größeren Teilen der Apparatur 5 bis 10%, so daß der Einfluß der Blasen auf die Turbulenz bedeutend ist. Da dieser jedoch gegenwärtig nicht zuverlässig modelliert werden kann, wird bei den numerischen Simulationen lediglich eine *qualitative* Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen angestrebt, auf die quantitativen Vergleiche mit den Meßdaten wird an dieser Stelle verzichtet.

Die dynamische Strömungsform in einer flachen Apparatur unterscheidet sich wesentlich von der Strömung in einer zylindrischen Blasensäule. Wir werden deshalb die flachen und die zylindrischen Apparate in zwei separaten Abschnitten behandeln.

## 9.1 Flache Blasensäule

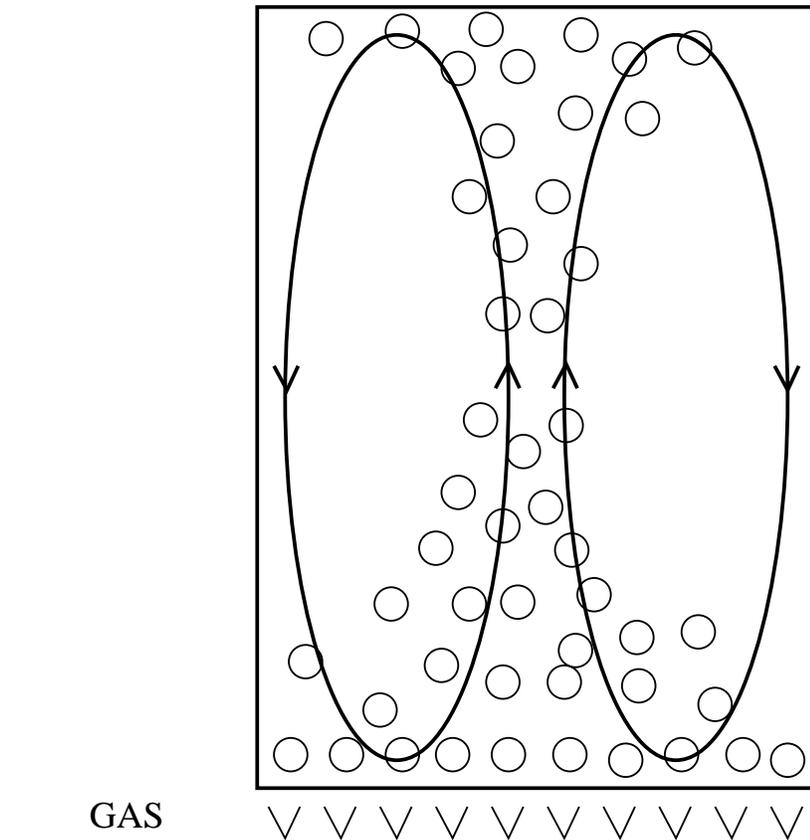
**Experimentelle Erkenntnisse.** Die dynamische Strömungsform in einer gleichmäßig begasten flachen Blasensäule wurde experimentell in mehreren Arbeiten untersucht. *Chen et al.* [15] untersuchten 2 flache Apparate mit den Abmessungen (Höhe/Breite/Tiefe)  $1500\text{mm} \times 760\text{mm} \times 50\text{mm}$  und  $1800\text{mm} \times 175\text{mm} \times 15\text{mm}$ , *Lin et al.* [79] haben die Blasenströmung in 3 Apparaten mit den Abmessungen  $1600\text{mm} \times 483\text{mm} \times 12.7\text{mm}$ ,  $2286\text{mm} \times 609.6\text{mm} \times 6.4\text{mm}$  und  $300\text{mm} \times 240\text{mm} \times 6.35\text{mm}$  beobachtet. Die Abmessungen der vom *Mudde et al.* [85] eingesetzten Apparatur stimmen fast genau mit dem ersten Apparat von *Lin et al.* überein.

In einigen Apparaten wurden zwei bewegliche Trennwände eingebaut, so daß nicht nur die Füllhöhe, sondern auch die effektive Breite der Apparatur variiert werden konnte. In allen drei Arbeiten wurde bei einem Höhe/Breite-Verhältnis oberhalb von 1 bei höheren Gasleerrohrgeschwindigkeiten eine dynamische Strömungsform festgestellt, die viel Ähnlichkeit mit der Strömung in den mittig begasten flachen Apparaten aufweist (s. Abschnitt 7.2).

Das Strömungsfeld besteht aus zwei versetzten Reihen von Zirkulationszellen, die sich von oben nach unten bewegen und sich gegenseitig periodisch ablösen. Die Breite der Zirkulationszellen nimmt mit der Gasleerrohrgeschwindigkeit zu und erreicht eine stabile Größe bei einem Gasdurchsatz von  $1\text{cm}/\text{s}$ . Diesem Gasdurchsatz entspricht auch der Übergang in den heterogenen Strömungszustand, bei dem die starke Koaleszenz ansetzt. Das Verhältnis zwischen der maximalen Breite der Zirkulationszellen und der Breite der Apparatur hängt von der letzteren ab und geht von 0.6 (bei der Apparaturbreite von  $10\text{cm}$ ) auf 0.3 (bei der Apparaturbreite von  $60\text{cm}$ ) herunter. Die Anzahl der Zirkulationszellen in der vertikalen Richtung nimmt mit dem Höhe/Breite-Verhältnis der Apparatur zu.

Eine *simultane* Geschwindigkeitsmessung in der gesamten Blasensäule wurde in keiner der zitierten Arbeiten durchgeführt. Werden die Geschwindigkeitsmessungen an verschiedenen Stellen im Reaktor *nacheinander* durchgeführt, und die gemessenen Geschwindigkeiten an jeder Meßstelle über einen längeren Zeitraum gemittelt, so liefern die *zeitgemittelten* Geschwindigkeitswerte ein Strömungsbild, bei dem die Flüssigphase in der Mitte der Blasensäule nach oben, und entlang der Reaktorwand nach unten fließt (s. Abbildung 9.1).

**Zweidimensionale Simulationen.** Im Jahre 1994 haben wir erste Simulationsergebnisse für die Blasenströmung in einer gleichmäßig begasten flachen Blasensäule veröffentlicht (*Sokolichin und Eigenberger* [110]). Wegen der Unsicherheiten, die mit dem Einsatz eines einphasigen Turbulenzmodells für Zweiphasenströmungen verbunden sind, wurden die Rechnungen mit einem laminaren Two-Fluid-Modell durchgeführt. Die verwendeten Modellvoraussetzungen stimmen ziemlich genau mit der laminaren Version des Basismodells (Abschn.

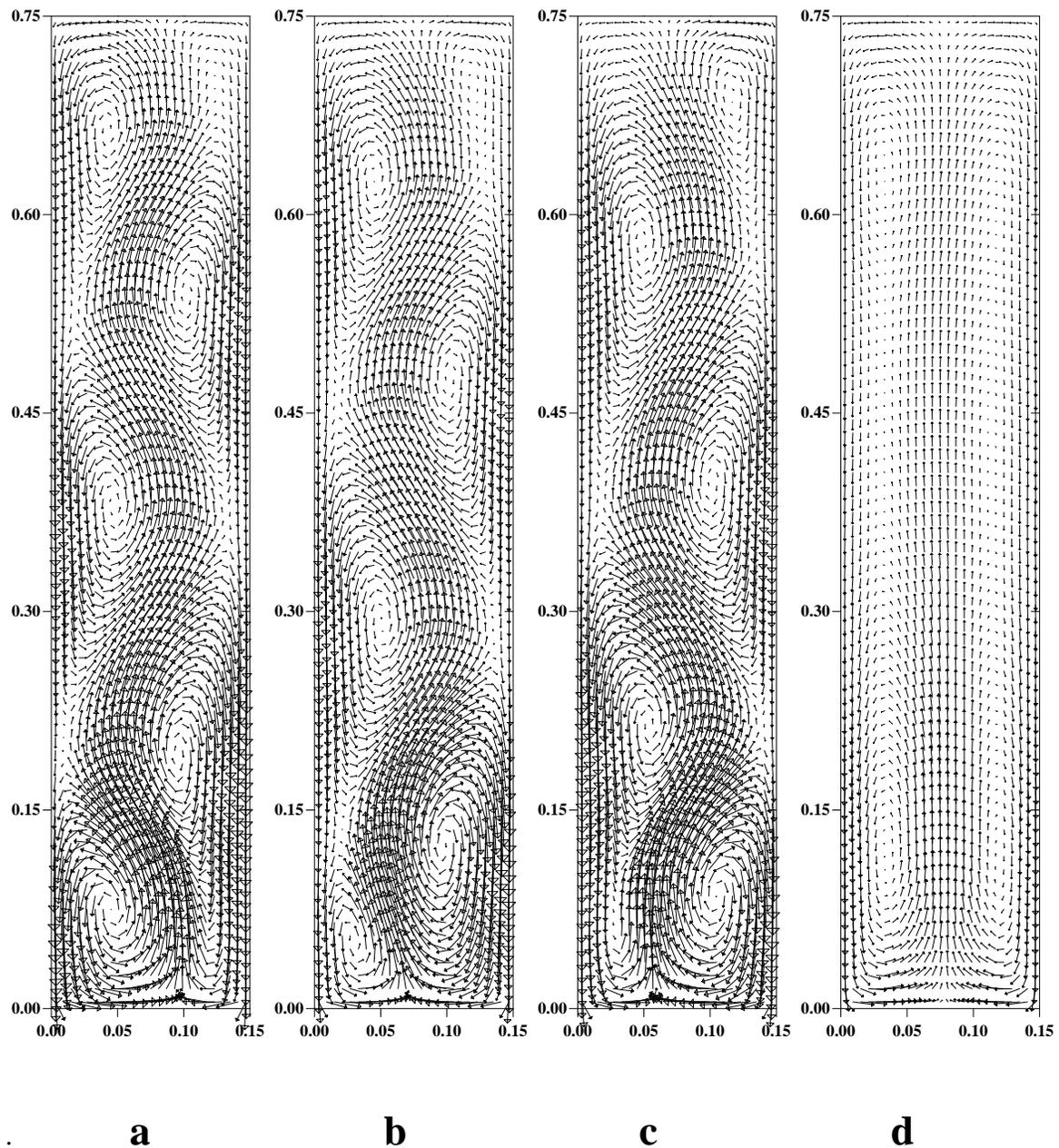


**Abbildung 9.1:** Zeitlich gemitteltetes Strömungsbild in einer gleichmäßig begasteten flachen Blasen säule

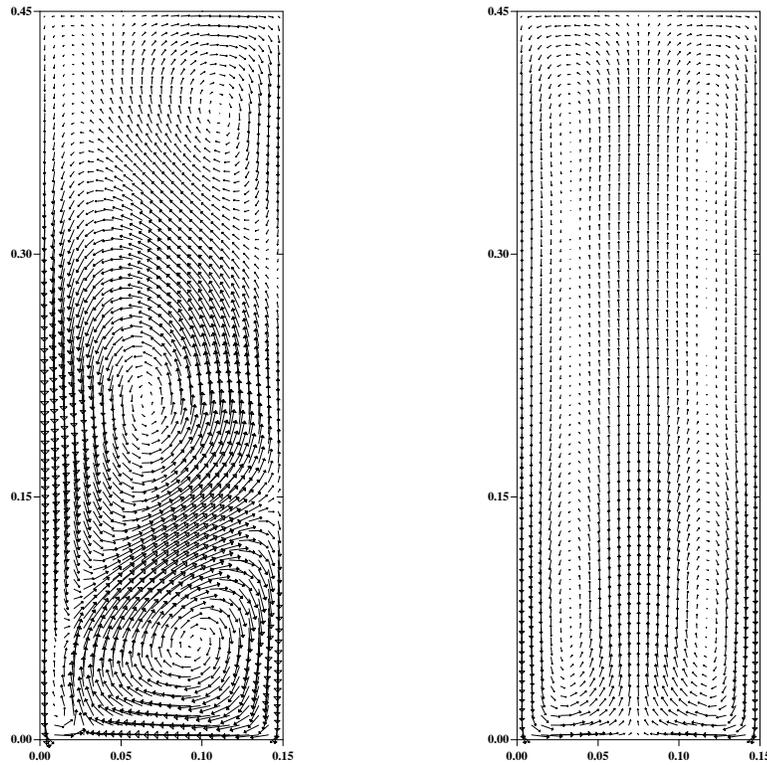
6.9) überein. Für die Schlupfgeschwindigkeit wurde ein konstanter Wert von  $20\text{cm/s}$  angenommen.

Wegen der im Vergleich zu anderen Abmessungen relativ geringen Tiefe der Apparatur, wurde von einer Zweidimensionalität der Strömung ausgegangen, und auf die Berücksichtigung der dritten Dimension bei der Simulation verzichtet. Die Konvektionsterme in allen Gleichungen wurden mit Upwind-Verfahren erster Ordnung diskretisiert.

Simulationen wurden für zwei unterschiedliche Apparaturabmessungen durchgeführt:  $750\text{mm} \times 150\text{mm}$  und  $450\text{mm} \times 150\text{mm}$ . Die eingesetzten numerischen Gitter bestanden entsprechend aus  $75 \times 25$  und  $45 \times 25$  Kontrollvolumina. Wurde in den Simulationen jede Bodenzelle mit gleicher Intensität begast, so ergab sich unabhängig von der Gasleerrohrgeschwindigkeit immer der homogene Strömungszustand. Der Begaser wurde deshalb so modelliert, daß ein Gasmassenstrom mit der gleichen Intensität nicht durch jede, sondern durch jede *zweite* Zelle am unteren Teil des Berechnungsgebietes einfließt. In diesem Fall bleiben die wandnächsten Kontrollvolumina unbegast. Trotzdem wurde bei niedrigen Werten der Gasleerrohrgeschwindigkeit ein homogener Strömungszustand berechnet. Bei Gasdurchsätzen oberhalb von etwa  $2\text{cm/s}$  ergab sich dagegen ein dynamisches Strömungsfeld.



**Abbildung 9.2:** Laminare 2D-Simulation einer gleichmässig begasten flachen Blasensäule mit einem Höhe/Breite-Verhältnis von 5: momentane (a,b,c) und langzeitgemittelte (d) Simulationsergebnisse für Liquid-Geschwindigkeitsfeld.

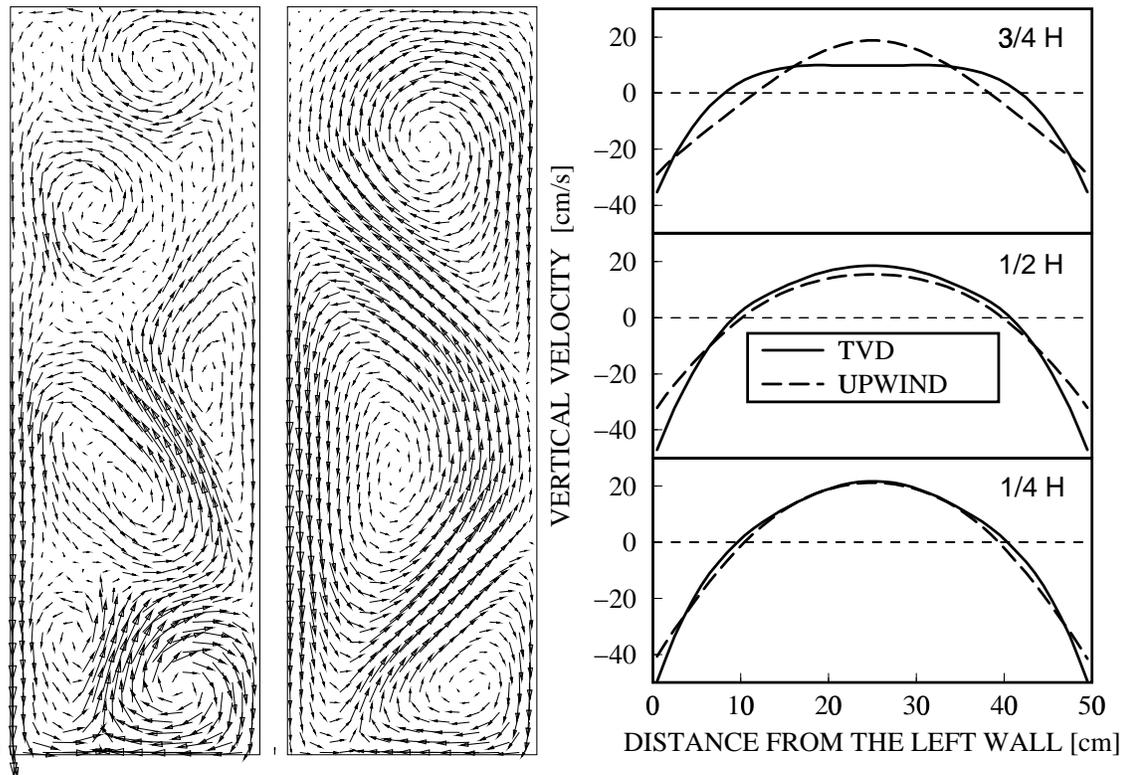


**Abbildung 9.3:** Laminare 2D-Simulation einer gleichmäßig begasten flachen Blasensäule mit einem Höhe/Breite-Verhältnis von 3: momentanes (links) und langzeitgemittelttes Liquid-Geschwindigkeitsfeld (rechts).

Die Strömung hat einen periodischen Charakter. Die momentanen Geschwindigkeitsfelder zu drei verschiedenen Zeitpunkten sowie die langzeitgemittelten Ergebnisse sind in der Abb. 9.2 für das Höhe/Breite-Verhältnis von 5 dargestellt. Beide stimmen mit den entsprechenden experimentellen Ergebnissen qualitativ gut überein. Bei einem Höhe/Breite-Verhältnis von 3 (Abb. 9.3) ergab sich ein ähnliches Strömungsbild, wobei die Anzahl der Zirkulationszellen gegenüber dem ersten Fall kleiner ist. Das entspricht ebenfalls den experimentellen Beobachtungen.

Im weiteren Verlauf der numerischen Untersuchungen wurde festgestellt, daß ein dynamischer Strömungszustand auch dann berechnet werden kann, wenn man in der Simulation den gesamten Boden tatsächlich absolut gleichmäßig begast. In diesem Fall darf man allerdings nicht mehr von einer konstanten Schlupfgeschwindigkeit ausgehen, sondern muß eine Abhängigkeit der Schlupfgeschwindigkeit vom lokalen Druckgradienten berücksichtigen. Dieser Effekt läßt sich folgendermaßen erklären.

Bei einer absolut gleichmäßigen Begasung kann eine Bewegung in der flüssigen Phase nur dann entstehen, wenn diese Gleichmäßigkeit durch die radiale Umverteilung der Gasphase gestört wird. Dies geschieht in der Regel während der Simulation des Anfahrverhaltens einer gleichmäßig begasten flachen Blasensäule infolge der kleinen numerischen Fehler selbst bei



**Abbildung 9.4:** Laminare 2D-Simulation einer gleichmäßig begasten flachen Bläsensäule mit einem Höhe/Breite-Verhältnis von 3: momentane Liquid-Geschwindigkeitsfelder, berechnet mit folgenden Diskretisierungsverfahren für die Konvektionsterme in der Gaskontinuitätsgleichung: TVD (links) und UPWIND (mitte). Rechts: Vergleich der mit beiden Verfahren berechneten langzeitgemittelten Geschwindigkeitsprofile auf 3 unterschiedlichen Höhen [111].

Annahme einer konstanten Schlupfgeschwindigkeit. Im weiteren Simulationsverlauf wird diese Ungleichmäßigkeit jedoch wieder eliminiert und die Strömung kommt zum Erliegen. Wird dagegen im Modell die Abhängigkeit der Schlupfgeschwindigkeit vom lokalen Druckgradienten berücksichtigt, so sorgt der durch die Flüssigkeitswirbel verursachte horizontale Druckunterschied für eine ständige radiale Umverteilung der Gasphase. Die Gasblasen werden zur Mitte der Wirbel getrieben, wodurch dort ein zusätzlicher Auftrieb entsteht, der die Struktur der Wirbel verändert. Dadurch wird eine neue radiale Umverteilung der Gasphase angeregt, u. s. w., so daß dieser dynamische Strömungszustand als selbsterhaltend bezeichnet werden kann. Allerdings muß die Gasbelastung entsprechend hoch sein, damit die Unterschiede im horizontalen Verlauf des Gasgehalts ausreichen, um die Wirbel auf Dauer aufrechtzuerhalten. Daher wird der dynamische Strömungszustand nicht bei jeder, sondern nur bei einer genügend hohen Gasbelastung simuliert.

Ergebnisse einer laminaren 2-D Simulation für den Fall einer absolut gleichmäßigen Begasung wurden in *Sokolichin et al.* [111] für eine Flachapparatur mit einem Höhe/Breite-

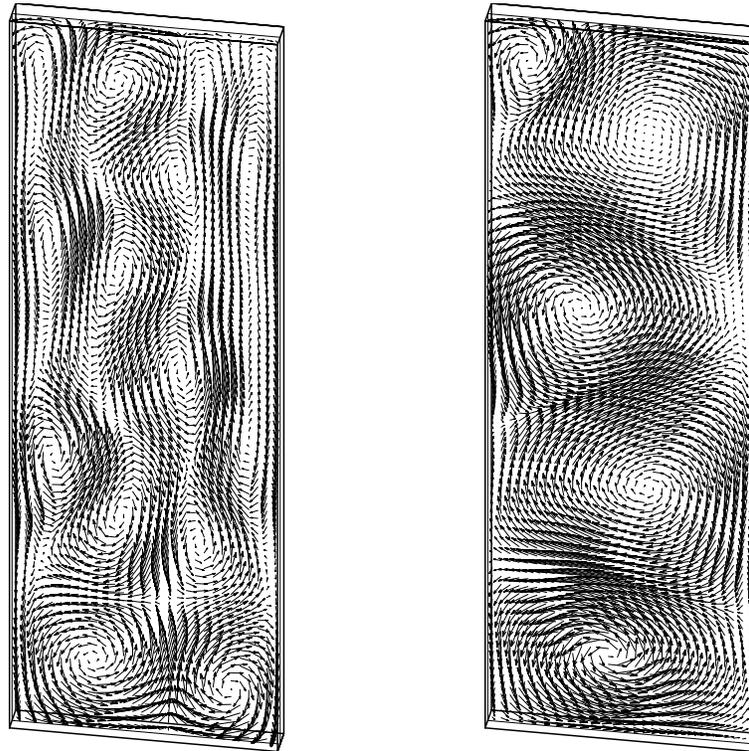
Verhältnis von 3 ( $1500\text{mm} \times 500\text{mm}$ ) auf einem Gitter mit  $150 \times 50$  Kontrollvolumina für die Gasleerrohrgeschwindigkeit von  $2\text{cm/s}$  präsentiert. Die Konvektionsterme in den Navier-Stokes-Gleichungen wurden mit Upwind-Verfahren erster Ordnung diskretisiert, während bei der Berechnung der Gasverteilung sowohl das Upwind-Verfahren erster Ordnung als auch ein TVD-Verfahren eingesetzt wurde. Die momentanen Geschwindigkeitsfelder, berechnet mit beiden Verfahren sind in der Abb. 9.4 dargestellt.

Die mit dem UPWIND-Verfahren berechnete Lösung stimmt mit den früheren Ergebnissen (Abb. 9.3) und mit den experimentellen Beobachtungen qualitativ recht gut überein. Das mit dem (genaueren) TVD-Verfahren berechnetes Strömungsfeld enthält dagegen wesentlich mehr Wirbel. Ihre Anzahl steigt immer weiter, wenn man die Gitterauflösung verfeinert und TVD-Verfahren auch für Konvektionsterme in den Navier-Stokes-Gleichungen einsetzt. Die berechnete Strömungsform weicht dann immer mehr von der experimentell ermittelten ab. Dieser Effekt war bereits bei der laminaren Berechnung einer lokal begasten Blasensäule aufgetreten (Abb. 7.7). Er ist auf die Turbulenz der Strömung zurückzuführen, die in einem laminaren Modell vernachlässigt wird.

Im rechten Teil der Abb. 9.4 sind die langzeitgemittelten Geschwindigkeitsprofile, berechnet mit beiden Diskretisierungsverfahren für die Konvektionsterme in der Gaskontinuitätsgleichung, gegenübergestellt. Man sieht, daß die langzeitgemittelten Profile ziemlich gut übereinstimmen, obwohl die momentanen Strömungsfelder wesentliche qualitative Unterschiede aufweisen. Dieses Beispiel zeigt, wie gefährlich es ist, die Validierung eines Modells nur anhand von langzeitgemittelten Daten durchzuführen.

*Pan et al.* [90, 91] setzen ein *turbulentes* zweidimensionales Two-Fluid-Modell zur Simulation einer gleichmäßig begasten flachen Blasensäule ein. Sie gehen davon aus, daß der Einfluß der scherinduzierten Turbulenz im Vergleich zur blaseninduzierten Turbulenz vernachlässigt werden kann. Daher wird nur die letztere modelliert. *Pan et al.* verwenden das Modell von *Sato und Sekoguchi* [102] (s. Glg. (6.90)) und erzielen dabei Strömungsfelder, die denen aus den Abbildungen 9.3 und 9.4 sehr ähnlich sind. Sie untersuchten auch den Einfluß der added mass force und der Schlupfgeschwindigkeit auf die Simulationsergebnisse und haben festgestellt, daß dieser Einfluß sehr gering ist. Zur Berechnung des Widerstandsbeiwertes wurde die Korrelation B (6.41) eingesetzt, wobei für Blasendurchmesser  $d_b$  drei Werte  $2.5\text{mm}$ ,  $5\text{mm}$  und  $8\text{mm}$  eingesetzt wurden. Die Schlupfgeschwindigkeit beträgt für diese Blasengrößen  $25.17\text{cm/s}$ ,  $22.92\text{cm/s}$  und  $23.83\text{cm/s}$  entsprechend.

**Dreidimensionale Simulationen.** Bei der Simulation der außermittig begasten flachen Blasensäule (Abschnitt 7.1) wurde festgestellt, daß wegen der geringen Tiefe der Apparatur ( $8\text{cm}$ ) die Vorder- und die Hinterwand einen bedeutenden Einfluß auf die Simulationsergebnisse ausüben. Das gilt um so mehr für die gleichmäßig begasten Apparate, da hier die



**Abbildung 9.5:** Turbulente 3D-Simulation einer gleichmässig begasten flachen Blasensäule mit einem Höhe/Breite-Verhältnis von 3 ( $450\text{mm} \times 150\text{mm} \times 20\text{mm}$ ). Momentane Simulationsergebnisse für Liquid-Geschwindigkeitsfeld in der mittleren Tiefenebene. Links: ohne blaseninduzierte Turbulenz, rechts - mit BIT nach (6.90).

Experimente in Apparaturen mit noch kleineren Tiefen durchgeführt wurden (in der Regel weniger als  $2\text{cm}$ ).

Um den Einfluß der Apparattiefe zu untersuchen, wurde eine 3-dimensionale Simulation eines gleichmäßig begasten flachen Apparates mit den Abmessungen  $450\text{mm} \times 150\text{mm} \times 20\text{mm}$  mit dem turbulenten Basismodell durchgeführt. Die Auflösung betrug  $90 \times 30 \times 6$  Stützstellen, für die Gasleerrohrgeschwindigkeit wurde ein Wert von  $1\text{cm/s}$  eingesetzt. Im linken Teil der Abb. 9.5 ist das momentane Liquid-Geschwindigkeitsfeld in der mittleren Tiefenebene dargestellt. Dieses zeigt ein recht chaotisches Strömungsbild, die aus Experimenten bekannte geordnete Wirbelstruktur ist hier nicht zu Erkennen. Dieses Strömungsbild ist auf die niedrige effektive Viskosität zurückzuführen. Obwohl zu ihrer Berechnung das  $k$ - $\epsilon$ -Modell eingesetzt wurde, liegen die Werte für die turbulente Wirbelviskosität im zentralen Bereich bei etwa

$$\mu_l^t = 0.01 \left[ \frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}} \right].$$

Das entspricht lediglich einer Verzehnfachung gegenüber der laminaren Viskosität des Wassers, und ist um fast zwei Größenordnungen niedriger, als die turbulente Wirbelviskosität,

die in der außermittig begasten flachen Blasensäule und in den flachen Schlaufenapparaten berechnet wurde. Dies bestätigt die Annahme von *Pan et al.*, daß in einer flachen Apparatur mit einer sehr geringen Tiefe der Einfluß der scherinduzierten Turbulenz im Vergleich zur blaseninduzierten Turbulenz vernachlässigt werden darf.

Zur Berücksichtigung der blaseninduzierten Turbulenz wurden zwei Modelle getestet. Das Einschalten des BIT-Modells von *Kataoka und Serizawa* [58] (6.95, 6.96) mit den Werten  $C_k = 1$ ,  $C_\epsilon = 1.2$ , die sich bei der Simulation von flachen Schlaufenapparaten bei höheren Gasdurchsätzen bewährt haben, führte zunächst zu einem drastischen Anstieg der turbulenten Wirbelviskosität auf Werte um

$$\mu_l^t = 0.25 \left[ \frac{kg}{m \cdot s} \right],$$

was zu einer starken Dämpfung der dynamischen Wirbel führte und die Strömung in der Flüssigphase binnen weniger Sekunden zurück in den Ruhezustand versetzte. Der Einsatz des Sato-Modells nach (6.90) führte dagegen zu einem weniger starken Anstieg der effektiven Viskosität – auf Werte im Bereich von

$$\mu_l^t = 0.07 \left[ \frac{kg}{m \cdot s} \right].$$

In diesem Fall wurde die dynamische Strömungsstruktur beibehalten, gleichzeitig brachte der Anstieg der turbulenten Wirbelviskosität etwas Ordnung in die vorher chaotische Wirbelstruktur (s. Abb. 9.5, rechts), so daß nun eine qualitative Übereinstimmung mit Experimenten wieder vorhanden war. Die langzeitgemittelten Geschwindigkeitsprofile entsprechen ebenfalls dem in der Abb. 9.1 dargestellten Muster und werden hier nicht angegeben.

Obwohl in diesem speziellen Fall das Sato-Modell zur einer Verbesserung der Simulationsergebnisse geführt hat, darf man seine Bedeutung nicht überschätzen. Der Einfluß des Sato-Modells ist ausschließlich auf die (auf die geringe Tiefe der Apparatur bemessene) niedrige Reynoldszahl der Flüssigströmung und die damit verbundene niedrige scherinduzierte Turbulenz zurückzuführen. Wie wir später sehen werden, ist bei runden Blasensäulen bereits bei einem Durchmesser von  $15\text{cm}$  die scherinduzierte effektive Wirbelviskosität um mehrere Größenordnungen höher und der Beitrag des Sato-Modells ist daher verschwindend gering.

## 9.2 Zylindrische Blasensäule

Die dynamische Strömungsform in einer zylindrischen Blasensäule unterscheidet sich von der Strömung in einer flachen Apparatur vor allem dadurch, daß die Zirkulation in der

flüssigen Phase in Form von dreidimensionalen thorusförmigen Wirbeln vorliegt. Diese sind völlig regellos angeordnet, so daß in diesem Fall von einer absolut chaotischen Strömung gesprochen werden kann. Über die instationäre Wirbelstruktur liegen bisher kaum detaillierte Informationen vor. Ein momentanes Strömungsbild kann nicht gemessen werden, weil dazu eine *simultane* Geschwindigkeitsmessung in der gesamten Blasensäule notwendig wäre, was mit keiner der bekannten Meßmethoden möglich ist. Werden jedoch die Geschwindigkeitsmessungen an verschiedenen Stellen im Reaktor nacheinander durchgeführt, so liefern die *zeitgemittelten* Geschwindigkeitswerte ein ähnliches Strömungsbild wie in einer Flachapparatur, bei dem die Flüssigphase in der Mitte der Blasensäule nach oben, und entlang der Reaktorwand nach unten fließt (s. Abbildung 9.1). Im mittleren Teil der Apparatur nimmt die langzeitgemittelte axiale Komponente der Liquid-Geschwindigkeit den Wert vom  $0\text{ m/s}$  bei einem Abstand von  $0.7R$  von der Symmetrieachse an, wobei  $R$  den Radius des runden Querschnittes der Blasensäule bezeichnet [35, 44].

Man beachte jedoch, daß dieses zeitgemittelte Strömungsbild nichts über die momentanen stark instationären Geschwindigkeitsfelder aussagt, da die Schwankungsbreite der momentanen Geschwindigkeitswerte an einzelnen Meßstellen ein mehrfaches der zeitlich gemittelten Werten beträgt.

In den letzten Jahren wird verstärkt versucht, die mehrdimensionale Zirkulationsströmung in einer zylindrischen Blasensäule einer Berechnung zugänglich zu machen. Es werden dabei überwiegend 2-dimensionale axialsymmetrische Modelle verwendet (*Boisson und Malin* [11], *Grienberger und Hofmann* [34], *Jakobsen et al.* [52], *Krishna et al.* [60], *Ranade* [98], *Solbakken und Hiertager* [113], *Svendsen et al.* [119], *Torvik und Svendsen* [124]), wobei in allen zitierten Arbeiten die stationäre Lösung berechnet wird. Da man mit einem stationären Modell die transienten Strömungsstrukturen offensichtlich nicht berechnen kann, wird versucht, es zur Berechnung der zeitlich gemittelten Strömungsstruktur zu verwenden.

Dabei wird folgendes übersehen: liegt in einem Reaktor eine instationäre Strömungsform vor, die durch dynamische Gleichungen beschrieben wird, so werden die gemittelten Geschwindigkeitswerte im allgemeinen **nicht** den stationären Gleichungen genügen, die aus den dynamischen Modellgleichungen resultieren, wenn man den zeitabhängigen Term wegläßt. Das stationäre Modell darf man nur zur Berechnung von *stationären* Strömungen verwenden. Die *zeitgemittelte* Strömung wird dagegen nicht durch die stationären, sondern durch die zeitgemittelten Gleichungen beschrieben. Diese zeitgemittelten Gleichungen enthalten zwar ebenfalls keinen zeitabhängigen Term, sie unterscheiden sich allerdings wesentlich von den stationären Modellgleichungen.

Versucht man trotzdem, die zeitgemittelte Strömungsform in einer gleichmäßig begasten Blasensäule mit Hilfe des stationären Modells zu berechnen, so erhält man ohne Einsatz der

radialen Kräfte (s. Abschnitt 6.6.7) unabhängig von der Gasleerrohrgeschwindigkeit immer den *homogenen* Strömungszustand. Das liegt daran, daß eine Umverteilung des am Begaser noch gleichmäßigen Gasgehaltprofils zur Mitte der Säule nur durch eine von Null verschiedene radiale Schlupfgeschwindigkeit resultieren kann. Diese ist bei dynamischen Simulationen eine Folge der ungleichmäßigen Druckverteilung, die sich aus den dynamischen Wirbeln ergibt. Da diese jedoch im Rahmen eines stationären Modells nicht berechnet werden können, wird das stationäre Modell in den oben zitierten Arbeiten dahingehend modifiziert, daß die Umverteilung der Gasphase zur Reaktormitte auf andere Weise gewährleistet wird.

In den meisten Arbeiten wird die radiale Magnuskraft mit einem negativen Lift-Koeffizienten verwendet [11, 34, 52, 113, 119, 124]. Die „falsche“ Magnuskraft hat zur Folge, daß bei einem Strömungsbild, wie auf der Abbildung 9.1 skizziert, die Gasblasen zur Mitte des Reaktors transportiert werden. Ein ähnlicher Effekt wird durch den Einsatz der „Wand-Abstoß-Kraft“ [98] erzielt. Die Stärke der radialen Kraft wird so angepaßt, daß eine gute Übereinstimmung mit den Meßdaten erzielt wird.

In einigen Arbeiten wird zusätzlich eine Abhängigkeit des Widerstandsbeiwertes von der Entfernung von der Symmetrieachse eingeführt. Ist der Widerstandsbeiwert in der Säulenmitte größer als in der Nähe der Reaktorwand, so resultiert das in einer Schlupfgeschwindigkeit zwischen den beiden Phasen, die in der Säulenmitte kleiner ist, als in der Wandnähe. Da die Blasensäule über den gesamten Querschnitt gleichmäßig begast wird, führt das dazu, daß bei gleicher Gaszufuhr in der Säulenmitte weniger Gas wegtransportiert wird, als in der Wandnähe, und der Gasgehalt in der Reaktormitte entsprechend ansteigt.

Obwohl das stationäre Modell, nach diesen Modifikationen, Strömungsbilder liefert, die mit Abb. 9.1 übereinstimmen, kann diese Vorgehensweise nicht zufriedenstellen. Zum einen sind die eingesetzten Anpassungskoeffizienten nicht auf andere Apparaturabmessungen übertragbar und variieren von Fall zu Fall beträchtlich. Zum anderen, haben die Werte der langzeitgemittelten Geschwindigkeiten für die Auslegung von Blasensäulenreaktoren nur wenig Relevanz, da für die Vermischungsvorgänge in den beiden Phasen die instationären Geschwindigkeitsfelder ausschlaggebend sind, und diese werden mit einem stationären Modell gerade nicht aufgelöst.

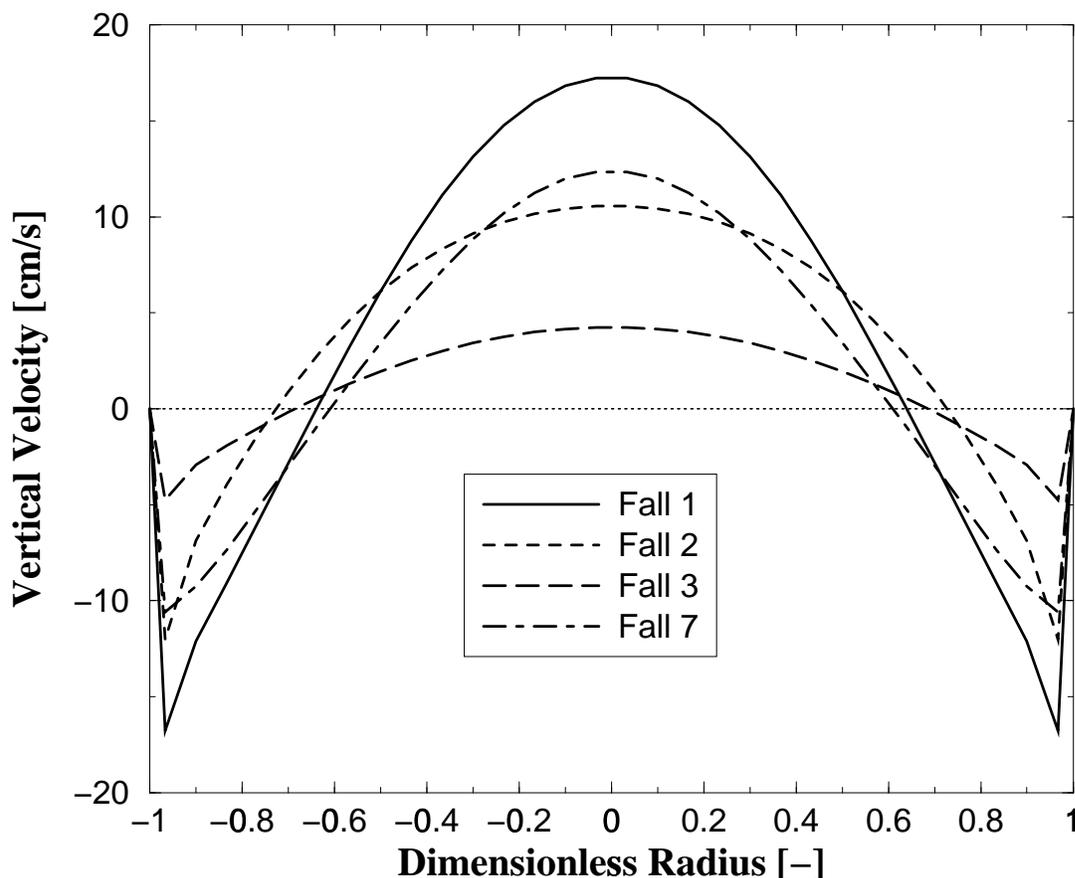
Da man mit einem stationären Modell die dynamischen Strömungsstrukturen offensichtlich nicht berechnen kann, wurde von der Arbeitsgruppe Lübbert/Lapin [24, 70, 71] ein *dynamisches* Modell zur dreidimensionalen Berechnung der Hydrodynamik und Vermischung in Blasensäulen verwendet. Die Turbulenz in der Flüssigphase wird durch eine über die gesamte Blasensäule konstante effektive Viskosität berücksichtigt. Wie in diesen Arbeiten gezeigt wird, kann bei einer hohen räumlichen Auflösung des Berechnungsgebietes das instationäre Strömungsverhalten in einer Blasensäule qualitativ gut wiedergegeben werden. Die berech-

neten instationären Geschwindigkeitsfelder können dann zur Berechnung der konvektiven Rückvermischung in den beiden Phasen eingesetzt werden.

| Modell  | Begasung 80%  | Begasung 100%                                      |
|---|---|--|
| ohne turbulente Dispersion  | <b>Fall 1</b><br>dynamisch<br>$U_{max} = 17.2cm/s$      | <b>Fall 2</b><br>dynamisch<br>$U_{max} = 10.5cm/s$ |
| mit turbulenter Dispersion  | <b>Fall 3</b><br>quasi-stationär<br>$U_{max} = 4.2cm/s$ | <b>Fall 4</b><br>stationär<br>$U_{max} = 0.0cm/s$  |
| mit turbulenter Dispersion<br>und BIT nach (6.95, 6.96) mit<br>$C_k = 1, C_\epsilon = 1.2$  | <b>Fall 5</b><br>stationär<br>$U_{max} = 0.002cm/s$     | <b>Fall 6</b><br>stationär<br>$U_{max} = 0.0cm/s$  |
| mit turbulenter Dispersion<br>und BIT nach (6.95, 6.96) mit<br>$C_k = 1, C_\epsilon = 1.92$ | <b>Fall 7</b><br>dynamisch<br>$U_{max} = 12.3cm/s$      | <b>Fall 8</b><br>stationär<br>$U_{max} = 0.0cm/s$  |

**Tabelle 9.1:** 3D-Simulation einer gleichmässig begasten zylindrischen Blasensäule mit einem Höhe/Breite-Verhältnis von 6: Definition der 8 Testfälle und Zusammenfassung der Simulationsergebnisse (dynamisch oder stationär, Maximalwert des langzeitgemittelten Geschwindigkeitsprofils auf der Höhe  $H/2$ ).

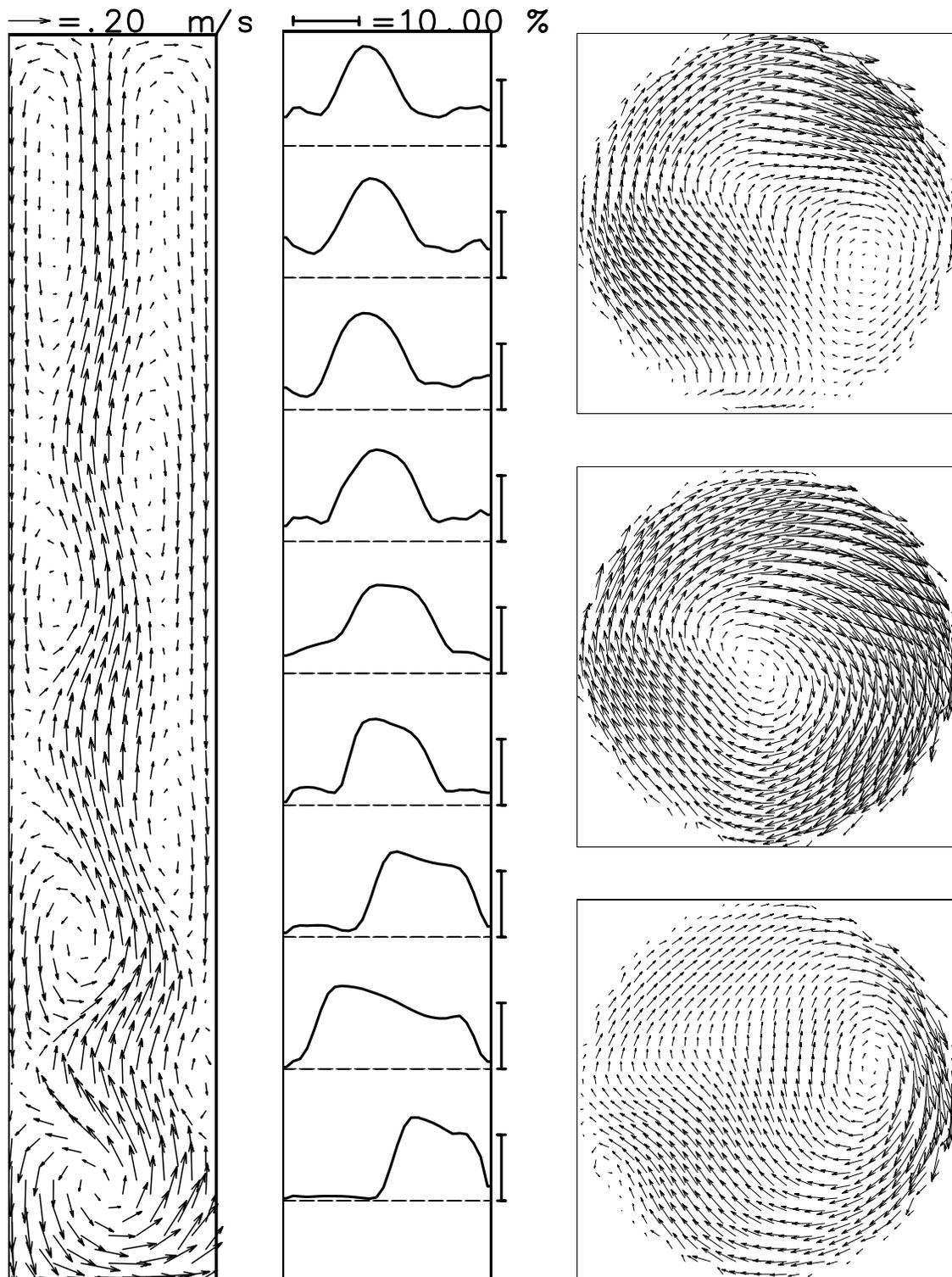
Bisher gibt es nur eine Veröffentlichung, in der das dreidimensionale dynamische Two-Fluid Modell in Verbindung mit einem  $k$ - $\epsilon$ -Modell zur Berechnung einer zylindrischen Blasensäule eingesetzt wird (Pfleger und Becker [94]). Es wird eine zylindrische Blasensäule mit einer Höhe von  $2.6m$  und einem Durchmesser von  $0.288m$  untersucht, wobei sowohl ein Ringbegaser als auch ein Plattenbegaser simuliert wird. Beim Plattenbegaser wird allerdings in der Simulation nicht der gesamte Boden begast, da in diesem Fall keine Zirkulation in der flüssigen Phase simuliert werden konnte. Stattdessen wird über die an die Wand grenzenden Kontrollvolumina kein Gas zugefügt. Daß bei einer völlig gleichmäßigen Begasung kein dynamischer Strömungszustand berechnet werden konnte, kann allerdings an einer mangelhaften Gitterauflösung liegen (12300 Zellen entsprechen einem mittleren Zellenvolumen von etwa  $17.5cm^3$ ). Da eine Simulation mit einer feineren Auflösung (62400 Zellen) mehr als 12 Tage Rechenzeit in Anspruch genommen hatte, waren solche feinen Gitter nicht zur Variation der Modellparameter geeignet.



**Abbildung 9.6:** 3D-Simulation einer gleichmäßig begasten zylindrischen Blasensäule mit einem Höhe/Breite-Verhältnis von 6: Vergleich der langzeitgemittelten Geschwindigkeitsprofile auf der Höhe  $H/2$  für Fälle 1,2,3 und 7.

Bei beiden Begaserkonfigurationen wurde das instationäre Strömungsverhalten der Blasensäule qualitativ gut wiedergegeben und es konnte sogar eine recht brauchbare Übereinstimmung mit den (langzeitgemittelten) Meßdaten für Geschwindigkeitsprofile erzielt werden. Es sollte allerdings darauf hingewiesen werden, daß in dem von *Pfleger und Becker* verwendeten Modell die turbulente Dispersion in der Gasphase völlig vernachlässigt wird, was bei in der Arbeit eingesetzten Gasgehalten von bis zu 10% kaum zulässig ist.

Um den Einfluss der Begasung, der Turbulenzmodelle sowie der turbulenten Dispersion auf die Simulationen zu untersuchen, haben wir eine Reihe von Vergleichsrechnungen durchgeführt. Die genaue Spezifikation der untersuchten Modelle ist der Tabelle 9.1 zu entnehmen. Die Gasleerrohrgeschwindigkeit betrug in allen Fällen  $2\text{ cm/s}$ . Da uns vor allem qualitative Unterschiede interessierten, wurde eine kleinere Blasensäule mit einer Höhe von  $90\text{ cm}$  und einem Durchmesser von  $15\text{ cm}$  untersucht. Die Gitterauflösung betrug  $180 \times 30 \times 30$  Kontrollvolumina, was einem Zellenvolumen von  $0.125\text{ cm}^3$  entspricht.



**Abbildung 9.7:** Fall 1: Momentanes Liquid-Geschwindigkeitsfeld (links) und Gasgehaltsprofile (mitte) auf unterschiedlichen Höhen in der mittleren Tiefenebene. Rechts - momentanes Liquid-Geschwindigkeitsfeld in 3 unterschiedlichen horizontalen Querschnittsebenen.

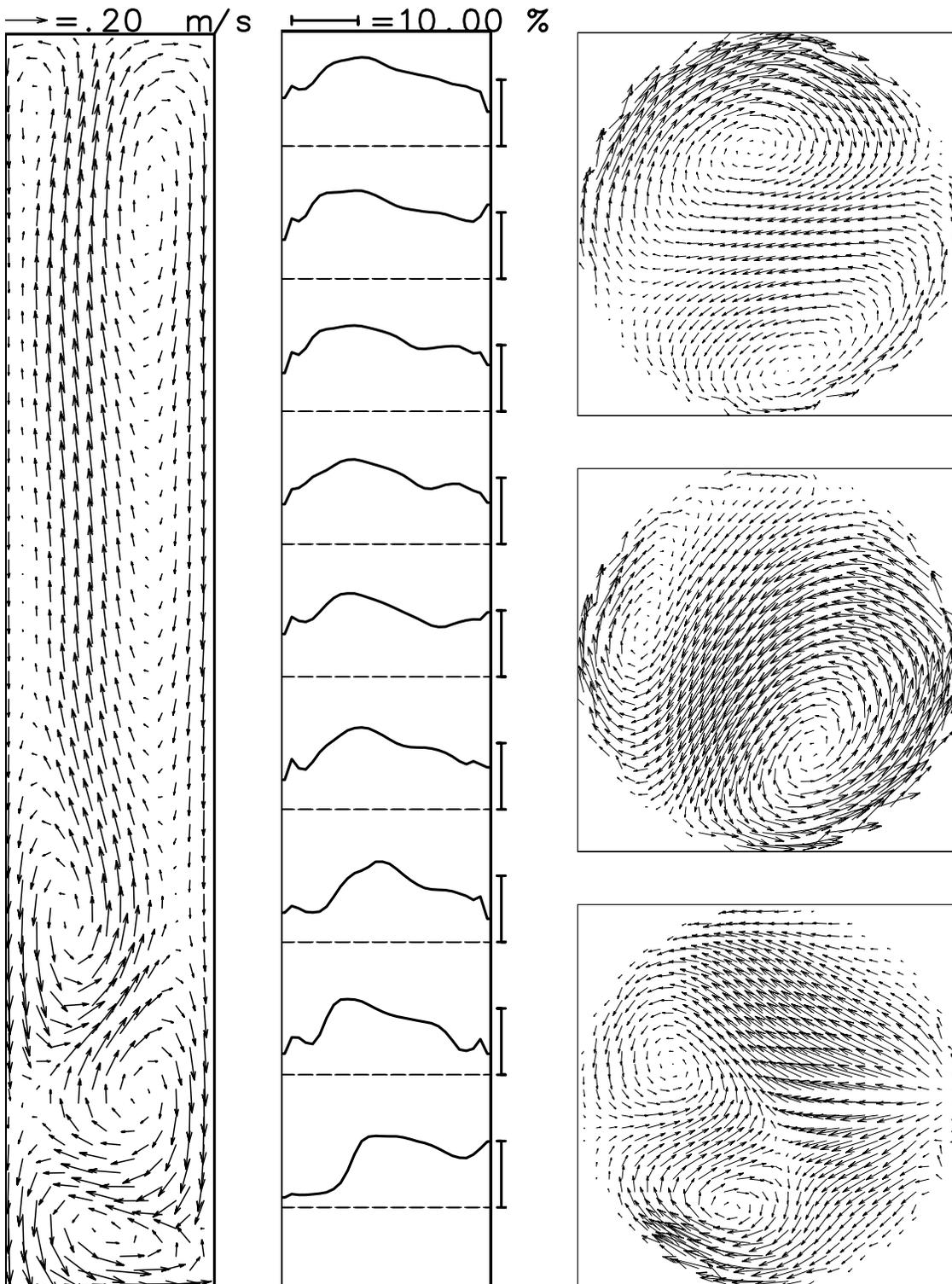


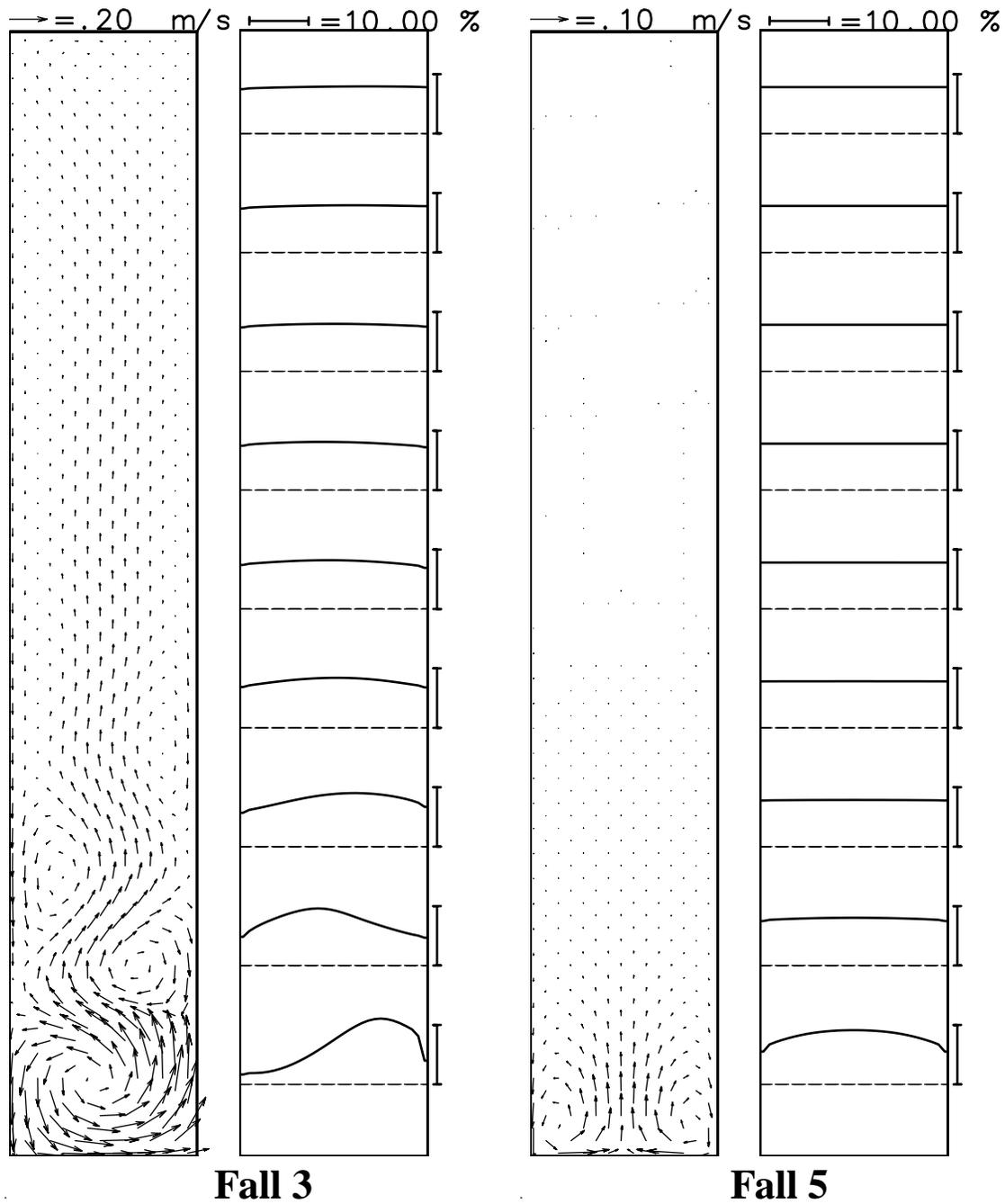
Abbildung 9.8: Wie Abb. 9.7, jedoch für den Fall 2.

Die ersten zwei Fälle entsprechen Simulationen mit dem turbulenten Basismodell, wobei wie in *Pfleger und Becker* [94] die turbulente Dispersion in der Gasphase zunächst nicht berücksichtigt wurde. Es wurde sowohl eine zentrale Begasung über 80% der Bodenfläche (Fall 1), als auch eine komplett gleichmäßige Begasung (Fall 2) simuliert. In beiden Fällen konnte eine stark instationäre Strömung berechnet werden (Abb. 9.7, 9.8), wobei die instationären Geschwindigkeitsfelder untereinander viel Ähnlichkeit aufweisen, und eine ausgeprägte Aufwärtströmung in der Säulenmitte auftrat. Sie resultiert daraus, daß der Gasgehalt in der Säulenmitte höher als in der Nähe der Reaktorwand ist. Im Fall 1 ist das eine Folge der zentralen Begasung. Im Fall 2 erfolgt die Umverteilung des ursprünglich gleichmäßigen Gasgehaltsprofils durch den Einfluß des horizontalen Druckgradienten auf die horizontale Komponente der Schlupfgeschwindigkeit. Hier ist das Maximum der Gasgehaltsprofile in der Säulenmitte jedoch nicht so stark ausgeprägt wie im Falle einer zentralen Begasung, was in einer niedrigeren vertikalen Geschwindigkeit im Vergleich zum Fall 1 resultiert (Abb. 9.6). Die Geschwindigkeitsfelder in mehreren horizontalen Querschnittsebenen zeigen, daß die Strömung einen ausgeprägten dreidimensionalen Charakter hat. Es ist offensichtlich, daß eine solche Strömungsform im Rahmen eines axialsymmetrischen Modells nicht simuliert werden kann.

Man sieht, daß die dynamische Strömung in einer zylindrischen Blasensäule im Rahmen eines turbulenten Modells qualitativ richtig wiedergegeben werden kann. Gleichzeitig zeigen die langzeitgemittelten Geschwindigkeitsprofile starke Abhängigkeit von der Simulation des Begasers. Nicht weniger bedeutend ist der Einfluß von anderen Modellparametern.

Wird der Einfluß der Turbulenz nicht nur auf die effektive Viskosität in der flüssigen Phase, sondern auch auf die Dispersion in der Gasphase berücksichtigt, so geht der dynamische Charakter der Strömung weitgehend verloren. In einer völlig gleichmäßig begasten Kolonne (Fall 4) kommt die Strömung vollständig zum Erliegen, während bei einer zentralen Begasung die Geschwindigkeitsschwankungen nur im unteren Teil der Säule beobachtet werden (Fall 3, Abb. 9.9, links). Dabei sieht man deutlich, daß infolge der turbulenten Dispersion die Gasgehaltsprofile mit der Höhe immer flacher werden, so daß das Geschwindigkeitsmaximum in der Säulenmitte im Falle einer zentralen Begasung von  $17.2\text{cm/s}$  auf nur  $4.2\text{cm/s}$  zurückgeht (Abb. 9.6).

Eine mögliche Ursache für den zu starken Einfluß der turbulenten Dispersion könnte die zu hoch berechnete turbulente Wirbelviskosität sein. Diese beträgt in der Säulenmitte durchschnittlich  $\mu_l^t = 1.5 \left[ \frac{\text{kg}}{\text{m}\cdot\text{s}} \right]$  im Fall 1 bzw.  $\mu_l^t = 1.0 \left[ \frac{\text{kg}}{\text{m}\cdot\text{s}} \right]$  im Fall 2. Für dieses Argument spricht auch eine ziemlich gleichmäßige Strömungsform im oberen Teil der Kolonne (Abb. 9.7 und 9.8, jeweils links), während im Experiment in der Regel eine chaotische Strömung entlang der gesamten Säule beobachtet wird.



**Abbildung 9.9:** Momentanes Liquid-Geschwindigkeitsfeld und Gasgehaltsprofile auf unterschiedlichen Höhen in der mittleren Tiefenebene für Fälle 3 und 5.

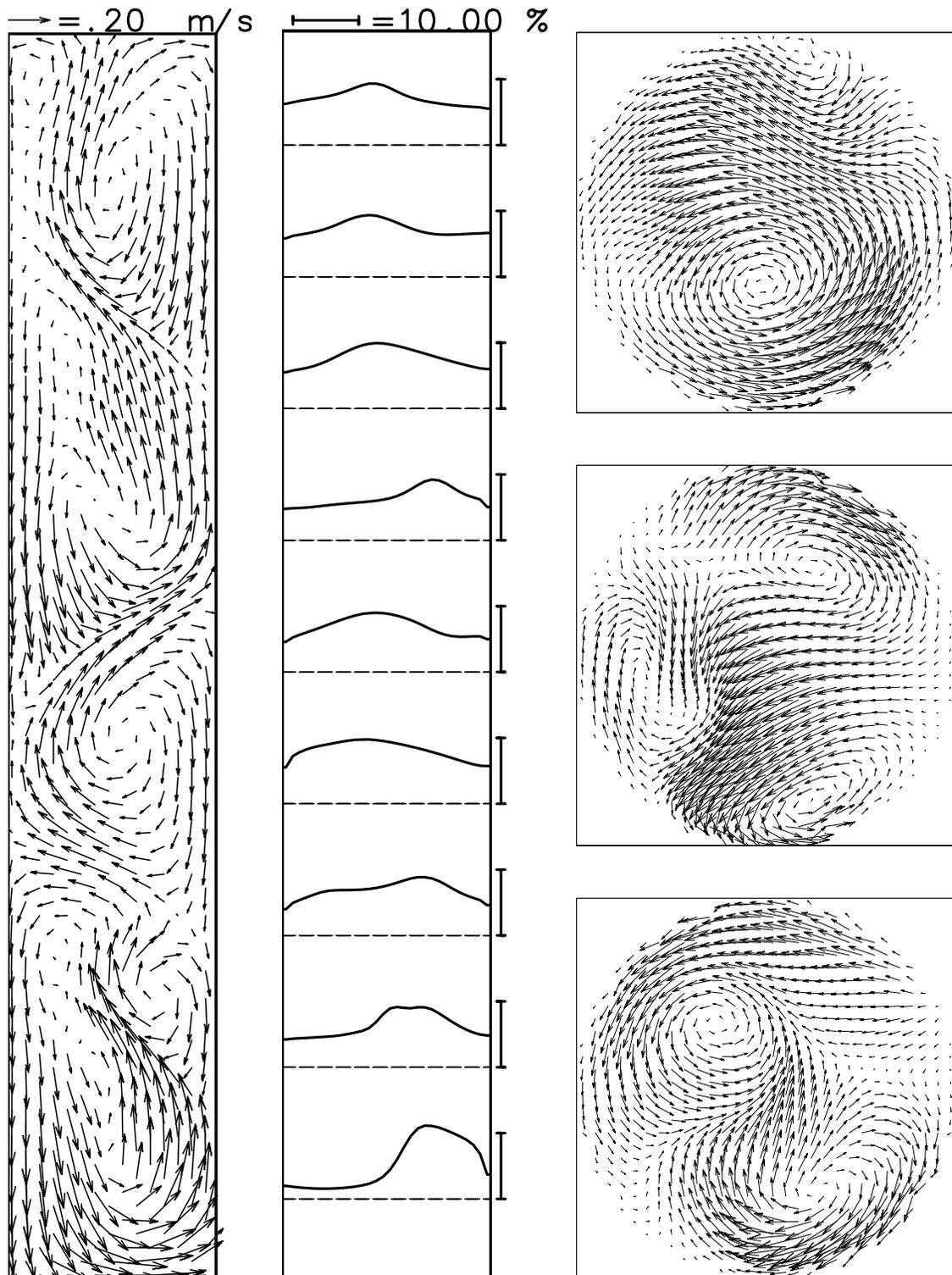


Abbildung 9.10: Wie Abb. 9.7, jedoch für den Fall 7.

Die zu hoch berechnete turbulente Wirbelviskosität kann auf die Vernachlässigung der blaseninduzierten Turbulenz im Basismodell zurückgeführt werden, wobei man dieses mal – im Unterschied zur Blasenströmung in den flachen Schlaufenapparaten – davon ausgehen kann, daß die Gasblasen einen dämpfenden Einfluß auf die Turbulenz in der Flüssigphase ausüben. Wird allerdings neben dem Einfluß der turbulenten Dispersion auch der Einfluß der blaseninduzierten Turbulenz berücksichtigt, so führt der Einsatz des BIT-Modells von *Kataoka und Serizawa* [58] (6.95, 6.96) mit den Werten  $C_k = 1$ ,  $C_\epsilon = 1.2$ , die sich bei der Simulation von flachen Schlaufenapparaten bei höheren Gasdurchsätzen bewährt haben, zu einem *weiteren Anstieg* der turbulenten Wirbelviskosität auf Werte  $\mu_l^t \approx 3.8 \left[ \frac{kg}{m \cdot s} \right]$ , so daß im Falle der zentralen Begasung die Strömung völlig stationär wird (Fall 5, Abb. 9.9, rechts). Im mittleren Teil der Kolonne ist die Gasphase nun absolut gleichmäßig verteilt, in der Flüssigphase kann keine Zirkulation mehr beobachtet werden. Im Falle einer völlig gleichmäßig begasten Kolonne (Fall 6) wird nach wie vor der Ruhezustand berechnet.

Wird allerdings für  $C_\epsilon$  der Wert von 1.92 eingesetzt, so führt das im Falle einer zentralen Begasung (Fall 7) zu einer Reduktion der turbulenten Wirbelviskosität auf Werte  $\mu_l^t \approx 0.3 \left[ \frac{kg}{m \cdot s} \right]$ . Obwohl die Gasgehaltsprofile durch den Einfluß der turbulenten Dispersion im Vergleich zum Fall 1 wesentlich glatter ausfallen, reichen die Unterschiede im horizontalen Verlauf dieser Profile aus, um eine dynamische Strömung aufrechtzuerhalten (Abb. 9.10). Dabei kann eine starke Dynamik nicht nur im unteren Teil, sondern entlang der gesamte Kolonne festgestellt werden. Das Geschwindigkeitsmaximum in der Säulenmitte geht dabei von  $17.2 cm/s$  (Fall 1) auf  $12.3 cm/s$  (Fall 7) zurück (Abb. 9.6). Im Falle einer gleichmäßigen Begasung (Fall 8) wurde allerdings auch mit diesem  $C_\epsilon$ -Wert eine homogene Strömungsform berechnet.

An diesen Testfällen sieht man, daß es mit mehreren Modellvarianten möglich ist, sowohl das chaotische dynamische Verhalten der Strömung, als auch das langzeitgemittelte „parabolische“ Geschwindigkeitsprofil *qualitativ* korrekt wiederzugeben. Ein *quantitativer* Vergleich zwischen den mit unterschiedlichen Modellen berechneten Profilen zeigt jedoch starke Unterschiede. Diese sind vor allem auf die Unsicherheiten bei der Modellierung der turbulenten Effekte in der Blasenströmung zurückzuführen. Insbesondere der Einsatz des BIT-Modells, das eine sehr starke Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von den eingesetzten Modellparametern zeigt, bedarf einer weiteren Validierung. Diese wird vor allem dadurch erschwert, daß bis jetzt kaum Informationen vorliegen, die zur Validierung eines Turbulenzmodells in einer gleichmäßig begasten Blasensäule geeignet sind. Die Strömung in einer gleichmäßig begasten Blasensäule ist **sowohl** turbulent **als auch** instationär. Daher werden die zeitlichen Geschwindigkeitsfluktuationen sowohl durch die turbulenten lokalen Schwankungen als auch durch die großräumigen instationären Wirbel verursacht. Während im Rahmen eines statistischen Turbulenzmodells nur der Beitrag der turbulenten Schwan-

kungen (um den *kurzzeit*gemittelten Mittelwert) zur turbulenten kinetischen Energie modelliert wird, werden in den meisten veröffentlichten Experimenten **alle** Fluktuationen um den *langzeit*gemittelten Mittelwert ausgewertet und können somit nicht zur Validierung eines Turbulenzmodells verwendet werden, da sich die resultierenden Werte der turbulenten kinetischen Energie um fast eine Größenordnung unterscheiden können [85].

## Kapitel 10

# Zusammenfassung

Eine wesentliche Voraussetzung für die numerische Berechnung von Mehrphasenströmungen, wie sie in technischen und industriellen Prozessen vorliegen, ist eine möglichst realistische Modellierung der relevanten physikalischen Effekte, welche das Verhalten der Strömung bestimmen. Auf der Grundlage des Euler-Euler Verfahrens wurden einige wesentliche Aspekte für die Berechnung und Modellierung von dispersen Gas-Flüssigkeits-Blasenströmungen aufgezeigt und neue Entwicklungen vorgestellt. Dabei wurde sowohl auf die Bedeutung der einzelnen Kräfte für die Blasenbewegung eingegangen, als auch Modelle zur Beschreibung der blaseninduzierten Turbulenz einer detaillierten Analyse unterzogen, und anhand experimenteller Daten validiert.

Den allgemeinen Rahmen für die Modellentwicklung bildete ein Two-Fluid-Modell vom Euler-Euler Typ, das sowohl die flüssige als auch die disperse Phase als ein Pseudokontinuum behandelt. Das Two-Fluid-Modell wurde zunächst in einer allgemeinen Form dargestellt, wobei die Terme zur Beschreibung der Wechselwirkungskräfte zwischen beiden Phasen sowie der Turbulenz in der flüssigen Phase nicht genau spezifiziert wurden. Da in der Literatur viele unterschiedliche Ansätze zur Beschreibung dieser Terme existieren, war eines der Ziele dieser Arbeit, den Einfluß der verschiedenen Ansätze zur Modellierung dieser Terme zu untersuchen. Dazu sollten unterschiedliche Modellvarianten durch Vergleiche der Simulationsergebnisse untereinander sowie mit den Experimenten bewertet werden.

Eine zuverlässige Validierung von Modellen setzt ein genaues und effizientes numerisches Verfahren voraus. Insbesondere beim Vergleich von verschiedenen mathematischen Modellen bzw. bei Untersuchungen zum Einfluß einzelner Modellparameter auf die Lösung des Gesamtgleichungssystems ist es sehr wichtig, daß die numerische Lösung der exakten Lösung des mathematischen Modells mit hoher Genauigkeit entspricht. Die ausreichende numerische Genauigkeit wurde durch die systematische Fehlerkontrolle und den Einsatz von nichtlinearen Diskretisierungsverfahren höherer Ordnung (TVD-Verfahren) gewährlei-

stet, die im ersten Teil dieser Arbeit ausführlich beschrieben wurden.

Ein weiterer wichtiger Aspekt ist die Konvergenzrate des Iterationsverfahrens bei der numerischen Behandlung der Modellgleichungen, da die Differentialgleichungen in mehreren Hunderttausenden von Gitterpunkten und über Zehntausende von Zeitschritten aufgelöst werden müssen, um das dreidimensionale und zeitabhängige Verhalten der Strömung wiederzugeben. Die Konvergenzrate des Iterationsverfahrens wird wesentlich von der Kopplung zwischen den einzelnen Modellgleichungen beeinflusst. Die Kopplung zwischen der Gasphase und der Flüssigphase wird in einem Two-Fluid-Modell zum einen durch die Wechselwirkungsterme in den Impulsbilanzen für die jeweilige Phase, zum anderen durch den Volumenanteil der jeweiligen Phase am Gesamtvolumen berücksichtigt.

Es wurde gezeigt, daß im Falle einer Gas-Flüssig-Strömung das Two-Fluid-Modell durch ein Drift-Flux-Modell ersetzt werden kann. Das letztere enthält die Wechselwirkungsterme nur in einer der beiden Impulsbilanzen, wodurch das Konvergenzverhalten des Iterationsverfahrens wesentlich beschleunigt werden kann. Abgesehen von der Konvergenzbeschleunigung hat das Drift-Flux-Modell gegenüber dem Two-Fluid-Modell den Vorteil, daß zur Berechnung von Zweiphasenströmungen *Einphasensimulationsprogramme* und -algorithmen verwendet werden können, die nur unwesentlich modifiziert werden müssen. Dabei ist wichtig, daß die weitgehende Äquivalenz des Two-Fluid-Modells und des Drift-Flux-Modells unabhängig vom konkreten Einsatz zur Modellierung der Wechselwirkungskräfte und der Turbulenzterme in der flüssigen Phase erhalten bleibt.

Im Rahmen dieser Arbeit sind wir von der Annahme ausgegangen, daß der Anteil der Gasphase am Gesamtvolumen moderat ist und lokal die 5%-Grenze nicht wesentlich bzw. nur an wenigen Stellen im Reaktor übersteigt. Es wurde gezeigt, daß bei niedrigem Gasphasenanteil die Boussinesq-Approximation für das Drift-Flux-Modell eingesetzt werden kann. Dadurch wird im Modell die Kopplung zwischen beiden Phasen durch den Volumenanteil der jeweiligen Phase am Gesamtvolumen eliminiert, was zu einer weiteren Konvergenzbeschleunigung führt.

Am Beispiel einer 3-D Simulation eines Schlaufenreaktors mit 140000 Stützstellen wurde gezeigt, daß das Two-Fluid-Modell und das Drift-Flux-Modell mit Boussinesq-Approximation sehr ähnliche Ergebnisse liefern, wobei die erforderliche Rechenzeit beim Einsatz des Drift-Flux-Modells um einen Faktor 48 kürzer ausfiel.

Die Bedeutung der einzelnen Kräfte für die Blasenbewegung wurden anhand der Bewegungsgleichung für die Einzelblase separat untersucht. Es wurde gezeigt, daß die einzigen relevanten Kräfte die Druckkraft und die Widerstandskraft sind, wobei nur solche Kräfte als relevant bezeichnet wurden,

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

Ein Vergleich von unterschiedlichen Ansätzen für den Widerstandsbeiwert hat gezeigt, daß für das Wasser/Luft-System die Endgeschwindigkeit der Gasblasen für Blasendurchmesser von  $2\text{mm}$  bis  $6\text{mm}$  in einem engen Bereich zwischen 20 und 25 cm/s liegt. Eine große Unsicherheit betrifft allerdings das Widerstandsverhalten der Blasen im Schwarm. In der Literatur wird sowohl von der Abnahme als auch von der Zunahme der Schwarmgeschwindigkeit mit zunehmendem Gasgehalt berichtet.

Das komplexeste Problem stellt die Modellierung der Turbulenz in einem Zweiphasensystem dar. Am Beispiel einer lokal begasten Blasensäule wurde gezeigt, daß ohne Berücksichtigung des Turbulenzeinflusses mit zunehmender Gitterfeinheit mehr und mehr Wirbel aufgelöst werden und keine Gitterkonvergenz erzielt wird. Deshalb wurde in einem ersten Schritt zur Beschreibung der Turbulenz in Zweiphasensystemen das einphasige  $k$ - $\epsilon$ -Modell eingesetzt.

Ein Modell, das bei der Beschreibung der auf die Gasblase wirkenden Kräfte nur die Druckkraft und die Widerstandskraft berücksichtigt bzw. eine konstante Blasenschlupfgeschwindigkeit von 20 cm/s annimmt und die turbulenten Terme mit Hilfe des einphasigen  $k$ - $\epsilon$ -Modells beschreibt, wurde als Basismodell bezeichnet. Dieses Basismodell wurde an unterschiedlichen Konfigurationen von lokal begasten Blasensäulen, Schlaufenapparaten und gleichmäßig begasten Blasensäulen getestet.

Bei lokal begasten Blasensäulen handelte es sich um Zweiphasenströmungen mit einem niedrigen Gasgehalt (1-2%), wobei die Gasphase nur in einem relativ kleinen Bereich der Apparatur vorhanden war. Der Einsatz des Basismodells zur Berechnung von stationären und instationären Blasenströmungen hat in allen Testfällen zu einer sehr guten Übereinstimmung zwischen Meßdaten und Simulation geführt. Wichtige Voraussetzung war, daß die Simulationen dreidimensional und auf einem hinreichend feinen numerischen Gitter mit der TVD-Diskretisierung der Konvektionsterme durchgeführt wurden. In Vergleichssimulationen mit unterschiedlichen Werten der Schlupfgeschwindigkeit (20 und 25cm/s) hat sich gezeigt, daß die Variation der Schlupfgeschwindigkeit nur wenig Einfluß auf die Simulationsergebnisse besitzt.

Im Falle von flachen Schlaufenreaktoren wurden einige Testfälle mit einem ebenfalls moderaten Gasgehalt untersucht. Die Gasblasen verteilen sich diesmal allerdings über den gesamten Querschnitt des Risers und üben einen beträchtlichen Einfluß auf die Turbulenz in der flüssigen Phase aus. In diesem Fall konnte mit dem Basismodell zwar eine gute qualitative

Übereinstimmung mit den Experimenten erzielt werden, eine quantitative Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit den Meßdaten wurde jedoch erst nach einer Erweiterung des Basismodells durch zusätzliche Terme zur Beschreibung der blaseninduzierten Turbulenz (BIT) erreicht. Dabei wurde festgestellt, daß die Simulationsergebnisse sehr empfindlich gegenüber einer Variation der in den zusätzlichen BIT-Termen enthaltenen Modellkonstanten reagieren, so daß ein Einsatz der BIT-Terme für eine Apriori-Berechnung von Zweiphasenströmungen mit großen Unsicherheiten verbunden ist. Vergleichssimulationen mit unterschiedlichen Werten der Schlupfgeschwindigkeit haben gezeigt, daß die Simulationsergebnisse auf die Änderung dieses Parameters insbesondere dann empfindlich reagieren, wenn der Begaser mit einer hohen Geschwindigkeit seitlich überströmt wird. In einem solchen Fall bestimmt die Höhe der Schlupfgeschwindigkeit die Stärke der horizontalen Auslenkung des Blasenschwarmes.

Es wurde bereits erwähnt, daß beim Aufbau des mathematischen Modells die Annahme getroffen wurde, daß der Anteil der Gasphase am Gesamtvolumen moderat ist und lokal die 5%-Grenze nicht wesentlich bzw. nur an wenigen Stellen im Reaktor übersteigt. Der Grund für diese Einschränkung liegt darin, daß ab einem Gasgehalt von 5% die Blasenwechselwirkungen sehr stark zunehmen. Das betrifft nicht nur die erhöhte Koaleszenzwahrscheinlichkeit und Bildung von größeren Blasen, sondern auch eine starke nichtlineare Wechselwirkung der blaseninduzierten und scherinduzierten Turbulenz, sowie eine Veränderung des Widerstandsverhaltens von Blasenclustern im Vergleich zu Einzelblasen. Die bisher vorhandenen experimentellen Daten sind zum Teil widersprüchlich und reichen nicht aus, um die oben genannte Effekte zuverlässig abzuschätzen. Somit lassen sich die praxisrelevanten Strömungen mit hoher Gasbelastung mit der aktuellen Modellversion noch nicht zuverlässig berechnen. Die zufriedenstellenden Simulationsergebnisse bei der Berechnung von Blasenströmungen mit einem niedrigen Gasgehalt, die in dieser Arbeit präsentiert wurden, lassen jedoch hoffen, daß auch in praxisrelevanten Strömungen mit hoher Gasbelastung genaue Berechnungen möglich sein werden, sobald ausreichend Datenmaterial zur Beschreibung der bis jetzt noch nicht genau verstandenen Phänomenen vorliegt. Dabei können entsprechende Daten sowohl aus gezielten Experimenten oder auch aus der Direkten Numerischen Simulation stammen.

Die im letzten Kapitel präsentierten Simulationsergebnisse für gleichmäßig begaste Blasensäulen zeigen, daß bereits mit der aktuellen Modellversion das sehr komplexe Strömungsverhalten in diesen Apparaten zumindest qualitativ korrekt wiedergegeben werden kann. Die starke Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von eingesetzten BIT-Modellparametern zeigt jedoch, daß die Entwicklung von zuverlässigen und ausreichend validierten Modellen für turbulente Effekte eine dringende Voraussetzung für die modellgestützte numerische Simulation praxisrelevanter Blasenströmungen ist.

## Anhang A

# Ausgelagerte Beweise zu einzelnen Theoremen

### A.1 Beweis des Theorems 3

Es sei  $\bar{U}$  eine monotone Gitterfunktion mit  $\bar{U}_{i+1} \geq \bar{U}_i$  für alle  $i$  und  $TV(\bar{U}) < \infty$ , dann gilt

$$TV(\bar{U}) = |\bar{U}_{+\infty} - \bar{U}_{-\infty}| \quad (\text{A.1})$$

mit

$$\bar{U}_{\pm\infty} := \lim_{i \rightarrow \pm\infty} \bar{U}_i. \quad (\text{A.2})$$

Wir werden zunächst annehmen, daß für  $U = FV(\bar{U})$  gilt

$$U_{\pm\infty} = \bar{U}_{\pm\infty}. \quad (\text{A.3})$$

Daraus folgt, daß

$$TV(U) \geq |\bar{U}_{+\infty} - \bar{U}_{-\infty}| \quad (\text{A.4})$$

ist. Auf der anderen Seite folgt aus der TVD-Eigenschaft, daß

$$TV(U) \leq TV(\bar{U}) = |\bar{U}_{+\infty} - \bar{U}_{-\infty}| \quad (\text{A.5})$$

und somit

$$TV(U) = |\bar{U}_{+\infty} - \bar{U}_{-\infty}| \quad (\text{A.6})$$

ist. Jede Monotonie-Verletzung in  $U$  würde allerdings zu einer höheren totalen Variation führen und ist somit nicht möglich.

Wir müssen noch die vorher getroffene Annahme (A.3) überprüfen. Hier kommt die Lipschitz-Stetigkeit der Funktion  $F(U; i - 1/2)$  ins Spiel. Wir erinnern uns, daß der numerische Konvektionsstrom von einer endlichen Anzahl der Elemente des Vektors  $U$  abhängt, die um das Element  $U_i$  „zentriert“ sind. Wir nehmen an, daß diese Elemente Indizes  $i + i_1, i + i_2, \dots, i + i_m$  haben, wobei  $i_1, \dots, i_m$  sowohl negativ als auch positiv sein können. Aus (1.53) folgt dann

$$\begin{aligned} |U_i - \bar{U}_i| &= \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot |F(U; i + 1/2) - F(U; i - 1/2)| \\ &\leq \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot \sum_{j=i_1, i_2, \dots, i_m} L_j \cdot |U_{i+j+1} - U_{i+j}|. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Hier bezeichnen  $L_j$  die Lipschitz-Konstanten. Wegen  $TV(U) < \infty$  gilt  $|U_{i+1} - U_i| \rightarrow 0$ , wenn  $i \rightarrow \pm\infty$ . Deshalb führt ein Grenzübergang  $i \rightarrow \pm\infty$  in (A.7) zu (A.3).  $\square$

## A.2 Beweis des Theorems 4

Wir schreiben den Ausdruck (1.141) für Indizes  $i + 1$  und  $i$  auf und bilden die Differenz aus beiden:

$$\begin{aligned} U_{i+1} &= \bar{U}_{i+1} - C_i(U_{i+1} - U_i) + D_{i+1}(U_{i+2} - U_{i+1}) \\ &- \\ U_i &= \bar{U}_i - C_{i-1}(U_i - U_{i-1}) + D_i(U_{i+1} - U_i) \end{aligned}$$

---


$$\begin{aligned} (U_{i+1} - U_i) &= (\bar{U}_{i+1} - \bar{U}_i) - C_i(U_{i+1} - U_i) + C_{i-1}(U_i - U_{i-1}) \\ &+ D_{i+1}(U_{i+2} - U_{i+1}) - D_i(U_{i+1} - U_i) \end{aligned}$$

bzw.

$$(1 + C_i + D_i)(U_{i+1} - U_i) = (\bar{U}_{i+1} - \bar{U}_i) + C_{i-1}(U_i - U_{i-1}) + D_{i+1}(U_{i+2} - U_{i+1}).$$

Daraus folgt wegen (1.142, 1.143)

$$\begin{aligned} (1 + C_i + D_i)|U_{i+1} - U_i| &\leq |\bar{U}_{i+1} - \bar{U}_i| \\ &+ C_{i-1}|U_i - U_{i-1}| + D_{i+1}|U_{i+2} - U_{i+1}|. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Wir summieren die Ungleichung (A.8) von  $i_1$  bis  $i_2$  ( $i_1 < i_2$ ) auf und streichen die auf beiden Seiten doppelt auftretenden Terme:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=i_1}^{i=i_2} |U_{i+1} - U_i| + C_{i_2} |U_{i_2+1} - U_{i_2}| + D_{i_1} |U_{i_1+1} - U_{i_1}| \leq \\ & \sum_{i=i_1}^{i=i_2} |\bar{U}_{i+1} - \bar{U}_i| + C_{i_1-1} |U_{i_1} - U_{i_1-1}| + D_{i_2+1} |U_{i_2+2} - U_{i_2+1}| \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Ein Grenzübergang  $i_1 \rightarrow -\infty, i_2 \rightarrow +\infty$  führt wegen (1.142, 1.143, 1.144) zu

$$\sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |U_{i+1} - U_i| \leq \sum_{i=-\infty}^{i=+\infty} |\bar{U}_{i+1} - \bar{U}_i|.$$

Das entspricht genau der Definition eines TVD-Verfahrens.  $\square$

### A.3 Beweis des Theorems 6

Man kann den lokalen Abbruchfehler  $L^{tvd}(\Delta x)$  des Verfahrens (1.153) folgendermaßen darstellen:

$$\begin{aligned} L^{tvd}(\Delta x) &= L^{cds}(\Delta x) \\ &+ \frac{a}{2\Delta x} \left( (u_{i+1} - u_i)(\phi_r - 1) - (u_i - u_{i-1})(\phi_l - 1) \right)_{x_i=x}, \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

wobei  $L^{cds}(\Delta x)$  den lokalen Abbruchfehler des CDS-Verfahrens bezeichnet (1.103). Da das CDS-Verfahren die Approximationsordnung 2 hat (s. (1.105)), reicht es zu zeigen, daß für

$$L^\Delta := \frac{a}{2\Delta x} \left( (u_{i+1} - u_i)(\phi_r - 1) - (u_i - u_{i-1})(\phi_l - 1) \right)_{x_i=x} \quad (\text{A.11})$$

gilt

$$L^\Delta = O(\Delta x^2). \quad (\text{A.12})$$

Die Taylorentwicklung von  $u_{i-1}, u_{i+1}$  führt zu

$$\begin{aligned} L^\Delta &= \frac{a}{2\Delta x} \left\{ \left( u + \Delta x u_x + \frac{\Delta x^2}{2} u_{xx} + O(\Delta x^3) - u \right) (\phi_r - 1) \right. \\ &\quad \left. - \left( u - u + \Delta x u_x - \frac{\Delta x^2}{2} u_{xx} + O(\Delta x^3) \right) (\phi_l - 1) \right\} \end{aligned}$$

bzw.

$$L^\Delta = \frac{a}{2} \left( u_x(\phi_r - \phi_l) + \frac{\Delta x}{2} u_{xx}((\phi_r - 1) + (\phi_l - 1)) \right) + O(\Delta x^2).$$

Für (A.12) reicht es zu zeigen, daß

$$\phi_r - 1 = O(\Delta x), \quad \phi_l - 1 = O(\Delta x) \quad (\text{A.13})$$

und

$$\phi_r - \phi_l = O(\Delta x^2). \quad (\text{A.14})$$

gilt.

Wegen  $u_x(x, t) \neq 0$  existiert ein  $K > 0$  und  $\Delta x_0 > 0$ , so daß für alle  $\Delta x < \Delta x_0$  gilt:

$$|u(x \pm \Delta x, t) - u(x, t)| > K \Delta x. \quad (\text{A.15})$$

Wir können daher annehmen, daß  $\theta_l$  und  $\theta_r$  für hinreichend kleine  $\Delta x$  wohldefiniert sind, und  $\phi_l = \phi(\theta_l)$  bzw.  $\phi_r = \phi(\theta_r)$  in die Bedingungen (A.13, A.14) einsetzen.

Es wird zunächst die Bedingung (A.13) geprüft. Für hinreichend kleine  $\Delta x$  gilt  $\theta_r \approx 1$ , und es folgt aus den Voraussetzungen dieses Theorems:

$$\begin{aligned} |\phi_r - 1| &= |\phi(\theta_r) - \phi(1)| \leq L \cdot |\theta_r - 1| = \\ &= L \cdot \left| \frac{u_i - u_{i-1}}{u_{i+1} - u_i} - 1 \right|_{x_i=x} = L \cdot \left| \frac{2u_i - u_{i-1} - u_{i+1}}{u_{i+1} - u_i} \right|_{x_i=x} \leq \\ &\leq \frac{L}{K \Delta x} \cdot \left| 2u - u + \Delta x u_x - \frac{\Delta x^2}{2} u_{xx} - u - \Delta x u_x - \frac{\Delta x^2}{2} u_{xx} + O(\Delta x^3) \right| = \\ &= \frac{L}{K \Delta x} \cdot |\Delta x^2 u_{xx} + O(\Delta x^3)| = O(\Delta x). \end{aligned}$$

Hier bezeichnet  $L$  die Lipschitz-Konstante. Die zweite Hälfte der Bedingung (A.13) sowie die Bedingung (A.14) können analog überprüft werden.  $\square$

## A.4 Beweis des Theorems 7

1. Setzt man die Funktion  $\psi(\theta) = \phi(\theta)/\theta$  in die Ungleichungen (1.189) ein, so erhält man

$$0 \leq 2 + \frac{\phi(\theta_r)}{\theta_r} - \phi(\theta_l) \leq C \quad (\text{A.16})$$

Diese Ungleichungen stimmen jedoch mit Bedingungen (1.171) überein, die unter den Voraussetzungen des Theorems 5 erfüllt sind.

2. Setzt man stattdessen  $\psi(\theta) = \phi(1/\theta)$  in die Ungleichungen (1.189) ein, so erhält man

$$0 \leq 2 + \phi\left(\frac{1}{\theta_r}\right) - \phi\left(\frac{1}{\theta_l}\right) \theta_l \leq C \quad (\text{A.17})$$

Einfachheitshalber ersetzen wir  $1/\theta_r$  durch  $\bar{\theta}_r$  und  $1/\theta_l$  durch  $\bar{\theta}_l$ :

$$0 \leq 2 + \phi(\bar{\theta}_r) - \frac{\phi(\bar{\theta}_l)}{\bar{\theta}_l} \leq C \quad (\text{A.18})$$

Aus (1.156, 1.157, 1.173) folgt nun:

$$2 + \phi(\bar{\theta}_r) - \frac{\phi(\bar{\theta}_l)}{\bar{\theta}_l} \geq 2 + \phi(\bar{\theta}_r) - \frac{2\bar{\theta}_l}{\bar{\theta}_l} = \phi(\bar{\theta}_r) \geq 0 \quad (\text{A.19})$$

Auf der anderen Seite gilt wegen (1.156, 1.157, 1.172):

$$2 + \phi(\bar{\theta}_r) - \frac{\phi(\bar{\theta}_l)}{\bar{\theta}_l} \leq 2 + \phi(\bar{\theta}_r) \leq 4. \quad (\text{A.20})$$

Das Theorem ist bewiesen.  $\square$

## A.5 Beweis des Theorems 8

Wir definieren zunächst analog zu  $U_l$  die Geschwindigkeit  $U_r$  am rechten Rand des  $i$ -ten Volumenelements:

$$U_r := \frac{1}{2}(U_i + U_{i+1}). \quad (\text{A.21})$$

Wir werden nun das resultierende TVD-Verfahren in Form (1.141) darstellen und zeigen, daß die Ungleichungen (1.142) und (1.143) erfüllt sind. Die konkrete Darstellung des resultierenden TVD-Verfahrens hängt von den Vorzeichen der Werte  $U_l$  und  $U_r$  ab. Es müssen daher 4 Fälle berücksichtigt werden.

**Fall 1:**  $U_l > 0, U_r > 0$ .

Dieser Fall wurde bereits bei der Behandlung der positiven Lösungsfunktion berücksichtigt (s. (3.39)).

**Fall 2:**  $U_l < 0, U_r < 0$ .

Analog zu (3.39) gilt in diesem Fall:

$$\begin{aligned} U_i &= \bar{U}_i - \frac{(U_{i+1} + U_i)\Delta t}{4\Delta x} \left( 2 - \phi(\theta_r) + \frac{\phi(\theta_l)}{\theta_l} \right) (U_{i+1} - U_i) \\ &= \bar{U}_i + \frac{|U_r|\Delta t}{2\Delta x} \left( 2 - \phi(\theta_r) + \frac{\phi(\theta_l)}{\theta_l} \right) (U_{i+1} - U_i) \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Das entspricht (1.141) mit

$$\begin{aligned} C_{i-1} &= 0 \\ D_i &= \frac{|U_r|\Delta t}{2\Delta x} \left( 2 - \phi(\theta_r) + \frac{\phi(\theta_l)}{\theta_l} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Damit die Bedingung (1.143) erfüllt ist, müssen folgende Ungleichungen gelten

$$\boxed{0 \leq 2 - \phi(\theta_r) + \frac{\phi(\theta_l)}{\theta_l} \leq D.} \quad (\text{A.24})$$

Unter den Voraussetzungen des Theorems 5 kann die Gültigkeit dieser Bedingungen völlig analog zu (1.171) gezeigt werden.

**Fall 3:**  $U_l > 0, U_r < 0$ .

Einsatz von (3.44) in die Finite-Volumen-Formulierung (3.29) führt in diesem Fall zu folgender Diskretisierung der Burger-Gleichung:

$$\frac{U_i - \bar{U}_i}{\Delta t} + \frac{\frac{1}{2}U_{i+1}^2 - \frac{\phi_r}{2} \cdot \frac{U_{i+1}^2 - U_i^2}{2} - \frac{1}{2}U_{i-1}^2 - \frac{\phi_l}{2} \cdot \frac{U_i^2 - U_{i-1}^2}{2}}{\Delta x} = 0 \quad (\text{A.25})$$

bzw. (vorausgesetzt, daß  $\theta_l$  und  $\theta_r$  wohldefiniert sind):

$$U_i = \bar{U}_i - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left( U_{i+1}^2 - \frac{\phi(\theta_r)}{2}(U_{i+1}^2 - U_i^2) - U_{i-1}^2 - \frac{\phi(\theta_l)}{2}(U_i^2 - U_{i-1}^2) \right) \quad (\text{A.26})$$

Eine Addition und Subtraktion von  $\frac{\Delta t}{2\Delta x} \cdot U_i^2$  auf der rechten Seite führt zu:

$$\begin{aligned} U_i = \bar{U}_i &- \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left( U_{i+1}^2 - U_i^2 - \frac{\phi(\theta_r)}{2}(U_{i+1}^2 - U_i^2) \right) \\ &- \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left( U_i^2 - U_{i-1}^2 - \frac{\phi(\theta_l)}{2}(U_i^2 - U_{i-1}^2) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

bzw.

$$U_i = \bar{U}_i - \frac{\Delta t}{4\Delta x} \cdot (2 - \phi(\theta_r)) \cdot (U_{i+1}^2 - U_i^2)$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{\Delta t}{4\Delta x} \cdot (2 - \phi(\theta_l)) \cdot (U_i^2 - U_{i-1}^2) \\
& = \bar{U}_i + \frac{|U_r|\Delta t}{2\Delta x} \cdot (2 - \phi(\theta_r)) \cdot (U_{i+1} - U_i) \\
& - \frac{U_l\Delta t}{2\Delta x} \cdot (2 - \phi(\theta_l)) \cdot (U_i - U_{i-1})
\end{aligned} \tag{A.28}$$

Das entspricht (1.141) mit

$$\begin{aligned}
C_{i-1} & = \frac{U_l\Delta t}{2\Delta x} \cdot (2 - \phi(\theta_l)) \\
D_i & = \frac{|U_r|\Delta t}{2\Delta x} \cdot (2 - \phi(\theta_r))
\end{aligned} \tag{A.29}$$

Da für alle TVD-Limiter gilt

$$0 \leq \phi(\theta) \leq 2, \tag{A.30}$$

sind die Bedingungen (1.142) und (1.143) des Harten-Theorems erfüllt.

**Fall 4:**  $U_l < 0, U_r > 0$ .

Einsatz von (3.44) in (3.29) führt zu:

$$\frac{U_i - \bar{U}_i}{\Delta t} + \frac{\frac{1}{2}U_i^2 + \frac{\phi_r}{2} \cdot \frac{U_{i+1}^2 - U_i^2}{2} - \frac{1}{2}U_i^2 + \frac{\phi_l}{2} \cdot \frac{U_i^2 - U_{i-1}^2}{2}}{\Delta x} = 0. \tag{A.31}$$

bzw.

$$U_i = \bar{U}_i - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left( \frac{\phi(\theta_r)}{2} (U_{i+1}^2 - U_i^2) + \frac{\phi(\theta_l)}{2} (U_i^2 - U_{i-1}^2) \right) \tag{A.32}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned}
U_i & = \bar{U}_i - \frac{\Delta t}{4\Delta x} \cdot \phi(\theta_r) \cdot (U_{i+1}^2 - U_i^2) - \frac{\Delta t}{4\Delta x} \cdot \phi(\theta_l) \cdot (U_i^2 - U_{i-1}^2) \\
& = \bar{U}_i - \frac{U_r\Delta t}{2\Delta x} \cdot \phi(\theta_r) \cdot (U_{i+1} - U_i) + \frac{|U_l|\Delta t}{2\Delta x} \cdot \phi(\theta_l) \cdot (U_i - U_{i-1})
\end{aligned}$$

Das entspricht (1.141) mit

$$\begin{aligned}
C_{i-1} & = -\frac{|U_l|\Delta t}{2\Delta x} \cdot \phi(\theta_l) \\
D_i & = -\frac{U_r\Delta t}{2\Delta x} \cdot \phi(\theta_r)
\end{aligned} \tag{A.33}$$

Damit die Bedingungen (1.142) und (1.143) des Harten-Theorems erfüllt sind, muß in diesem Fall  $\phi(\theta_l) = \phi(\theta_r) = 0$  gelten.

Aus (3.45, 3.46) folgt wegen  $U_l < 0$ :

$$\theta_l = \frac{U_{i+1}^2 - U_i^2}{U_i^2 - U_{i-1}^2} = \frac{U_{i+1} - U_i}{U_i - U_{i-1}} \cdot \frac{U_r}{U_l} \quad (\text{A.34})$$

Der letzte Bruch auf der rechten Seite ist wegen der getroffenen Annahme ( $U_l < 0$ ,  $U_r > 0$ ) negativ. Gilt  $U_{i-1} < U_i < U_{i+1}$ , so ist  $\frac{U_{i+1} - U_i}{U_i - U_{i-1}}$  positiv, und damit  $\theta_l < 0$ . In diesem Fall gilt  $\phi(\theta_l) = 0$ .

Liegt der Wert  $U_i$  nicht innerhalb des Intervalls  $(U_{i-1}, U_{i+1})$ , so ist  $\theta_l > 0$ , und die Bedingung (1.142) ist nicht erfüllt. Man beachte, daß in diesem Fall  $U_i$  die Stelle des lokalen Extremums der Gitterfunktion ist. Bei der TVD-Diskretisierung der linearen Konvektionsgleichung wurde in der Nähe solcher Stellen das Upwind-Verfahren 1. Ordnung eingesetzt. Wir können auch im Falle der Burger-Gleichung ähnlich vorgehen, wofür eine leichte Modifikation in der Definition der Größe  $\theta_l$  notwendig ist:

$$\theta_l := \frac{U_I + U_{I-1}}{U_i + U_{i-1}} \cdot \max\left(\frac{U_I - U_{I-1}}{U_i - U_{i-1}}, 0\right). \quad (\text{A.35})$$

Durch diese Modifikation wird erreicht, daß im Falle  $U_l < 0$ ,  $U_r > 0$  die Bedingung  $\phi(\theta_l) = 0$  und somit (1.142) erfüllt ist. Aus Symmetriegründen ist auch  $\phi(\theta_r) = 0$  und es gilt somit  $D_i = 0$ .  $\square$

Man kann leicht zeigen, daß die Modifikation (A.35) keinen Einfluß auf den Nachweis der TVD-Eigenschaft in Fällen 1 bis 3 hat, da die neue Definition von  $\theta_l$  restriktiver als die alte ist (d.h. den Upwind-Strom noch stärker gewichtet). Man beachte, daß in Bereichen mit positiver bzw. negativer Lösungsfunktion die lokalen Extremstellen von  $\{U_i\}$  und  $\{U_i^2\}$  übereinstimmen, so daß beide Definitionen — (3.45) und (A.35) — zum selben Wert des Gewichtungsfaktors  $\phi_l$  führen. Die Unterschiede ergeben sich nur in einem eher seltenen Fall, daß ein Vorzeichenwechsel der Lösungsfunktion in der Nähe der lokalen Extremumstelle stattfindet.

## A.6 Beweis des Theorems 9

Wir wollen untersuchen, ob das resultierende Slope-Limiter-Verfahren die TVD-Eigenschaft hat. Wir beschränken uns diesmal auf den Fall einer positiven Lösungsfunktion, so daß  $U_l > 0$  und  $U_r > 0$  gilt. Einsatz von (3.47) in die Finite-Volumen-Formulierung (3.29) führt

zu folgender Diskretisierung der Burger-Gleichung:

**TVD (Slope – Limiter) :**

$$\frac{U_i - \bar{U}_i}{\Delta t} + \frac{\frac{1}{2} \left( U_i + \phi_r \frac{U_{i+1} - U_i}{2} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( U_{i-1} + \phi_l \frac{U_i - U_{i-1}}{2} \right)^2}{\Delta x} = 0. \quad (\text{A.36})$$

Daraus folgt (vorausgesetzt, daß  $\theta_l$  und  $\theta_r$  wohldefiniert sind):

$$\begin{aligned} U_i &= \bar{U}_i - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left\{ \left( U_i + \phi(\theta_r) \frac{U_{i+1} - U_i}{2} \right)^2 - \left( U_{i-1} + \phi(\theta_l) \frac{U_i - U_{i-1}}{2} \right)^2 \right\} \\ &= \bar{U}_i - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left( U_i + \phi(\theta_r) \frac{U_{i+1} - U_i}{2} + U_{i-1} + \phi(\theta_l) \frac{U_i - U_{i-1}}{2} \right) \cdot \\ &\quad \cdot \left( U_i + \phi(\theta_r) \frac{U_{i+1} - U_i}{2} - U_{i-1} - \phi(\theta_l) \frac{U_i - U_{i-1}}{2} \right) \\ &= \bar{U}_i - \frac{\Delta t}{4\Delta x} \left\{ U_i + U_{i-1} + \frac{U_i - U_{i-1}}{2} \left( \frac{\phi(\theta_r)}{\theta_r} + \phi(\theta_l) \right) \right\} \cdot \\ &\quad \cdot \left( 2 - \phi(\theta_l) + \frac{\phi(\theta_r)}{\theta_r} \right) (U_i - U_{i-1}) \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

Das entspricht (1.141) mit

$$\begin{aligned} C_{i-1} &= \frac{\Delta t}{4\Delta x} \left\{ U_i + U_{i-1} + \frac{U_i - U_{i-1}}{2} \left( \frac{\phi(\theta_r)}{\theta_r} + \phi(\theta_l) \right) \right\} \cdot \left( 2 - \phi(\theta_l) + \frac{\phi(\theta_r)}{\theta_r} \right) \\ D_i &= 0 \end{aligned}$$

Unter den Voraussetzungen des Theorems 5 gelten die Ungleichungen (1.171). Damit die Bedingung (1.142) erfüllt ist, reicht es deshalb zu zeigen, daß der Ausdruck

$$A := \left\{ U_i + U_{i-1} + \frac{U_i - U_{i-1}}{2} \left( \frac{\phi(\theta_r)}{\theta_r} + \phi(\theta_l) \right) \right\} \quad (\text{A.38})$$

nicht negativ ist. Unter den gemachten Voraussetzungen gilt  $U_i + U_{i-1} > 0$  sowie  $(\phi(\theta_r)/\theta_r + \phi(\theta_l)) \geq 0$ , so daß  $A$  nur dann negativ sein kann, wenn  $U_i - U_{i-1} < 0$  ist. In diesem Fall folgt aus  $\phi(\theta) \leq 2$  :

$$A \geq \left\{ U_i + U_{i-1} + \frac{U_i - U_{i-1}}{2} \left( \frac{\phi(\theta_r)}{\theta_r} + 2 \right) \right\}$$

$$= \left\{ 2U_i + \frac{U_i - U_{i-1}}{2} \cdot \frac{\phi(\theta_r)}{\theta_r} \right\} := A_1 \quad (\text{A.39})$$

Wir unterscheiden nun 3 Fälle.

**Fall 1:**  $\theta_r < 0$ .

Es gilt  $\phi(\theta_r) = 0$  und somit

$$A \geq A_1 = 2U_i > 0. \quad (\text{A.40})$$

**Fall 2:**  $0 < \theta_r < 1$ .

Die Ungleichung  $0 < \theta_r$  bedeutet

$$0 < \frac{U_i - U_{i-1}}{U_{i+1} - U_i}.$$

Wegen  $U_i - U_{i-1} < 0$  gilt auch  $U_{i+1} - U_i < 0$ . Aus der Ungleichung  $\theta_r < 1$  folgt nun:

$$\begin{aligned} \theta_r = \frac{U_i - U_{i-1}}{U_{i+1} - U_i} < 1 &\implies \\ U_{i-1} - U_i < U_i - U_{i+1} &\implies \\ U_{i+1} < 2U_i - U_{i-1}. \end{aligned}$$

Auf der anderen Seite folgt aus  $0 < \theta_r < 1$  sowie (1.172, 1.173) die Ungleichung  $\phi(\theta_r) \leq 2\theta_r$  und somit

$$A \geq A_1 \geq \left\{ 2U_i + \frac{U_i - U_{i-1}}{2} \cdot 2 \right\} = 3U_i - U_{i-1} > U_i + U_{i+1} > 0 \quad (\text{A.41})$$

**Fall 3:**  $\theta_r > 1$ .

Aus (1.172, 1.173) folgt, daß in diesem  $\theta_r$ -Bereich  $\phi(\theta_r) \leq 2$  ist, und deshalb

$$A \geq A_1 \geq \left\{ 2U_i + \frac{U_i - U_{i-1}}{\theta_r} \right\} = 2U_i + U_{i+1} - U_i = U_i + U_{i+1} > 0$$

Wir haben somit gezeigt, daß im Falle einer positiven Lösungsfunktion das konstruierte Slope-Limiter-Verfahren unter den Voraussetzungen des Theorems 5 die TVD-Eigenschaft besitzt.  $\square$

# Literaturverzeichnis

- [1] Agarwal, R.K.: *A Third-Order Accurate Upwind Scheme for Navier-Stokes Solutions in Three Dimensions*. Proc. of Symposium in Flow Predictions and Fluid Dynamics Experiment, ASME Winter Annual Meeting, Washington DC, 73-82, 1981.
- [2] Antal, S.P., Lahey Jr., R.T., Flaherty, J.E.: *Analysis of Phase Distribution in Fully Developed Laminar Bubbly Two-Phase Flow*. Int. J. Multiphase Flow, Vol. 17, 635-652, 1991.
- [3] Arnold, G.S., Drew, D.A. and Lahey Jr., R.T.: *Derivation of Constitutive Equations for Interfacial Force and Reynolds Stress for a Suspension of Spheres Using Ensemble Averaging*. Journal of Chemical Engineering Communications, Vol. 86, 43-54, 1988.
- [4] Arnold, G.S., Drew, D.A. and Lahey Jr., R.T.: *An Assessment of Multiphase Flow Models Using the Second Law of Thermodynamics*. Int. J. Multiphase Flow, Vol. 16, 481-494, 1990.
- [5] Auton, T.R.: *The Dynamics of Bubbles, Drops and Particles in Motion in Liquids*. Ph. D. thesis, University of Cambridge, Cambridge, U.K., 1983.
- [6] Auton, T.R.: *The Lift Force on a Spherical Body in a Rotational Flow*. J. Fluid Mech., Vol. 183, 199-218, 1987.
- [7] Banerjee, S.: *Modelling Considerations for Turbulent Multiphase Flows*. In: Engineering Turbulence Modelling and Experiments, W.Rodi and E.N.Ganic (Edts.), 831-866, 1990.
- [8] Becker, S., Sokolichin, A. and Eigenberger, G.: *Gas-Liquid Flow in Bubble Columns and Loop Reactors: Part II. Comparison of Detailed Experiments and Flow Simulations*. Chem. Eng. Sci., Vol. 49, 5747-5762, 1994.
- [9] Becker, S.: *Experimentelle Untersuchungen von Blasensäulen als Basis für detaillierte Modellrechnungen*. VDI-Verlag, Düsseldorf, 1997.

- [10] Bhanu, C., Mazumdar, D: *Numerical Prediction of Melting Rates in Gas Bubble Driven Systems*. Trans. Indian. Inst. Met., Vol. 50, 249-258, 1997.
- [11] Boisson, N. and Malin, M.R.: *Numerical Prediction of Two-Phase Flow in Bubble Columns*. Int. J. Num. Meth. Fluids, Vol. 23, 1289-1310, 1996.
- [12] Borchers, O., Busch, C., Sokolichin, A., Eigenberger, G.: *Applicability of the Standard  $k-\epsilon$  Turbulence Model to the Dynamic Simulation of Bubble Columns. Part II: Comparison of Detailed Experiments and Flow Simulations*. Chem. Eng. Sci., Vol. 54, 5927-5935, 1999.
- [13] Boussinesq, T.V.: *Theorie de l'ecoulement tourbillant*. Mem. pres. Acad. Sci., Third Edition, Paris, XXIII, 46, 1877.
- [14] Boussinesq, J.: *Theorie analytic de la chaleur*. Gauthier-Villars, Paris, Vol.2, 1903.
- [15] Chen, J.J.J., Jamialahmadi, M., Li, S.M.: *Effect of Liquid Depth on Circulation in Bubble Columns: a Visual Study*. Chem. Engng Res. Des., Vol. 67, 203-207, 1989.
- [16] Clift, R., Grace, J.R. and Weber, M.E.: *Bubbles, Drops and Particles*. Academic Press, New York, U.S.A., 1978.
- [17] Cook, T.L. and Harlow, F.H.: *Vortices in Bubbly Two-Phase Flow*. Int. J. Multiphase Flow., Vol. 12, 35-610, 1986.
- [18] Crowe, C.T., Sharma, M.P. and Stock, D.E.: *The Particle-Source-in-Cell (PSI-Cell) Model for Gas-Droplet Flows*. J. Fluids Engr., Vol. 99, 325, 1977.
- [19] Deckwer, W.-D.: *Reaktionstechnik in Blasensäulen*. Verlag Salle und Sauerländer, 1988.
- [20] Delnoij, E., Lammers, F.A., Kuipers, J.A.M. and van Swaaij, W.P.M.: *Dynamic Simulation of Dispersed Gas-Liquid Two-Phase Flow Using a Discrete Bubble Model*. Chem. Engng. Sci., Vol. 52, 1429-1458, 1997.
- [21] Delnoij, E., Kuipers, J.A.M. and van Swaaij, W.P.M.: *Dynamic Simulation of Gas-Liquid Two-Phase Flow: Effect of Column Aspect Ratio on the Flow Structure*. Chem. Engng. Sci., Vol. 52, 3759-3772, 1997.
- [22] Delnoij, E., Kuipers, J.A.M. and van Swaaij, W.P.M.: *A Three-Dimensional CFD Model for Gas-Liquid Bubble Columns*. Chem. Engng. Sci., Vol. 54, 2217-2226, 1999.
- [23] Deng, H., Mehta, R.K. and Warren, G.W.: *Numerical Modeling of Flows in Flotation Columns*. Int. J. Miner. Process., Vol. 48, 61-72, 1996.

- [24] Devanathan, N., Dudukovic, M.P., Lapin, A., Lübbert, A.: *Chaotic Flow in Bubble Column Reactors*. Chem. Engng. Sci., Vol. 50, 2661-2667, 1995.
- [25] Djebbar, R., Roustan, M., Line, A.: *Numerical Computation of Turbulent Gas-Liquid Dispersion in Mechanically Agitated Vessels*. Trans IChemE, Vol. 74, Part A, 492-498, 1996.
- [26] Drew, D.A.: *Mathematical Modeling of Two-Phase Flow*. Ann. Rev. Fluid Mech., Vol.15, 261-291, 1983.
- [27] Elghobashi, S.E., Abou-Arab, T.W.: *A Two-Equation Turbulence Model for Two-Phase Flows*. Phys. Fluids, Vol. 26, 931-938, 1983.
- [28] Esmaeeli, A., Ervin, E., Tryggvason, G.: *Numerical Simulations of Rising Bubbles*. In: *Bubble Dynamics and Interface Phenomena*; Blake, J.R., Ed.; Kluwer Academic, Dordrecht, 1994.
- [29] Fan, L.-S., Tsuchiya, K.: *Bubble Wake Dynamics in Liquids and Liquid-Solid Suspensions*. Butterworth-Heinemann, Boston, 1990.
- [30] Ferziger, J.H. and Peric, M.: *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, Berlin, 1996.
- [31] Freitas, C.J.: *Editorial*. ASME Journal of Fluids Engineering, Vol. 115, 339-340, 1993.
- [32] Goodman, J.B. and LeVeque, R.J.: *On the Accuracy of Stable Schemes for 2D Scalar Conservation Laws*. Math. Comp., Vol. 45, 15-21, 1985.
- [33] Gosman, A.D., Lekakou, C., Politis, S., Issa, R.I. and Looney, M.K.: *Multidimensional Modeling of Turbulent Two-Phase Flows in Stirred Vessels*. AIChE Journal, Vol. 38, 1946-1956, 1992.
- [34] Grienberger, J. and Hofmann, H.: *Investigations and Modelling of Bubble Columns*. Chem. Eng. Sci., Vol. 47, 2215-2220, 1992.
- [35] Grienberger, J.: *Untersuchung und Modellierung von Blasensäulen*. Dissertation, Universität Erlangen-Nürnberg, 1992.
- [36] Guder, R.: *Fluidodynamik von Dreiphasenströmungen in Treibstrahlschlaufenreaktoren*. Dissertation, Universität Bremen, 1997.
- [37] Haberman, W.L. and Morton, R.K.: *An Experimental Investigation of the Drag and Shape of Air Bubbles Rising in Various Liquids*. David W. Taylor Model Basin Report 802, Navy Dept., Washington, DC, 1953.

- [38] Harlow, F.H. and Welch, J.E.: *Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flows of Fluid with Free Surface*. Phys. Fluids, Vol. 8, 2182-2189, 1965.
- [39] Harlow, F.H. and Nakayama, P.: *Transport of Turbulence Energy Decay Rate*. Los Alamos Science Lab., University California Report LA-3854, 1968.
- [40] Harten, A.: *High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws*. J. Comput. Phys., Vol. 49, 357-393, 1983.
- [41] Harten, A.: *On a Class of High Resolution Total-Variation-Stable Finite-Difference Schemes*. SIAM J. Numer. Anal., Vol. 21, 1-23, 1984.
- [42] Harvey, P.S. and Greaves, M.: *Turbulent Flow in an Agitated Vessel*. Trans. I. Chem. Engrs., Vol. 60, 195-210, 1982.
- [43] Hillmer, G., Weismantel, L. and Hofmann, H.: *Investigations and Modelling of Slurry Bubble Columns*. Chem. Eng. Sci., Vol. 49, 837-843, 1994.
- [44] Hills, J.H.: *Radial Non-Uniformity of Velocity and Voidage in a Bubble Column*. Trans. Instn. Chem. Engrs., Vol. 52, 1-9, 1974.
- [45] Hirsch, C.: *Numerical Computation of Internal and External Flows. Volume I: Fundamentals of Numerical Discretization*. John Wiley & Sons, Chichester, New York, Brisbane, Toronto, Singapore, 1988.
- [46] Hirsch, C.: *Numerical Computation of Internal and External Flows. Volume II: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows*. John Wiley & Sons, Chichester, New York, Brisbane, Toronto, Singapore, 1990.
- [47] Hsieh, D.Y.: *On Dynamics of Bubbly Liquids*. Advances in Applied Mechanics, Vol. 26, 63-133, 1988.
- [48] Ilegbusi, O.J., Iguchi, M., Nakajima, K., Mitsuhiro, S. and Sakamoto, M.: *Modeling Mean Flow and Turbulence Characteristics in Gas-Agitated Bath with Top Layer*. Metallurgical and Materials Transactions B., Vol. 29B, 211-222, 1998.
- [49] Issa, R.I. und Gosman, A.D.: *The Computation of Three-Dimensional Turbulent Two-Phase Flows in Mixer Vessels*. Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow, Prineridge Press, SWANSEA, 1981.
- [50] Ishii, M.: *Thermo-Fluid Dynamic Theory of Two-Phase Flow*. Eyrolles, Paris, 1975.
- [51] Ishii, M., Zuber, N.: *Drag Coefficient and Relative Velocity in Bubbly, Droplet or Particulate Flows*. AIChE J., Vol. 25, 843-855, 1979.

- [52] Jakobsen H.A., Svendsen H.F. and Hjarbo K.W.: *On the Prediction of Local Flow Structures in Internal Loop and Bubble Column Reactors Using a Two-Fluid Model*. European Symposium on Computer Aided Process Engineering-2, 531-536, 1993.
- [53] Jakobsen, H.A., Sannaes, B.H., Grevskott, S., Svendsen, H.F.: *Modeling of Vertical Bubble-Driven Flows*. Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 36, 4052-4074, 1997.
- [54] Jenne, M.: *Modellierung und Simulation der Strömungsverhältnisse in begasten Rührkesselreaktoren*. MVK-Verlag, Tübingen, 1999.
- [55] Johansen, S.T. and Boysan, F.: *Fluid Dynamics in Bubble Stirred Ladles: Part II. Mathematical Modeling*. Metallurgical Transactions B., Vol. 19B, 755-764, 1988.
- [56] Kataoka, I.: *Local Instant Formulation of Two-Phase Flow*. Int. J. Multiphase Flow, Vol. 12, 745-758, 1986.
- [57] Kataoka, I., Serizawa, A.: *Interfacial Area Concentration and its Roles in Local Instant Formulation of Two-Phase Flow*. In: N. M. Afgan, Edt, Transient Phenomena in Multiphase Flow, 77-102, 1987.
- [58] Kataoka, I., Serizawa, A.: *Basic Equations of Turbulence in Gas-Liquid Two-Phase Flow*. Int. J. Multiphase Flow, Vol. 15, 843-855, 1989.
- [59] Khosla, P.K., Rubin, S.G.: *A Diagonally Dominant Second-Order Accurate Implicit Scheme*. Computers Fluids, Vol.2, 207-209, 1974.
- [60] Krishna, R., van Baten, J.M., Urseanu, M.I.: *Three-Phase Eulerian Simulations of bubble Column Reactors in the Churn-Turbulent Regime. A Scale-Up Strategy*. Chem. Eng. Sci., Vol. 55, 3275-3286, 2000.
- [61] Kuo, J.T. and Wallis, G.B.: *Flow of Bubbles through Nozzles*. Int. J. Multiphase Flow, Vol. 14, 547, 1988.
- [62] Kuo, T.C., Pan, C., Chieng, C.C. and Yang, A.S.: *Eulerian-Lagrangian Computations on Phase Distribution of Two-Phase Bubbly Flows*. Int. J. Num. Meth. Fluids, Vol. 24, 579-593, 1997.
- [63] Kuwagi, K., Ozoe, H.: *Three-Dimensional Oscillation of Bubbly Flow in a Vertical Cylinder*. Int. J. Multiphase Flow, Vol. 25, 175-182, 1999.
- [64] Kuzmin, D.: *Numerical Simulations of Reactive Bubbly Flows*. Ph. D. thesis, University of Jyväskylä, Jyväskylä, 1999.
- [65] Lahey Jr., R.T.: *The Analysis of Phase Separation and Phase Distribution Phenomena Using Two-Fluid Models*. Nucl. Eng. Des., Vol. 122, 17-40, 1990.

- [66] Lahey Jr., R.T., Drew, D.A.: *On the Development of Multidimensional Two-Fluid Models For Vapor/Liquid Two-Phase Flows*. Chem. Eng. Commun., Vol. 118, 125-139, 1992.
- [67] Lain, S., Bröder, D., Sommerfeld, M.: *Experimental and Numerical Studies of the Hydrodynamics in a Bubble Column*. Chem. Engng Sci., Vol. 54, 4913-4920, 1999.
- [68] Lance, M., Bataille, J.: *Turbulence in the Liquid Phase of a Uniform Bubbly Air-Water Flow*. Journal of Fluid Mechanics, Vol. 22, 95-118, 1991.
- [69] Lapin, A. and Lübbert, A.: *Numerical Simulation of the Dynamics of Two-Phase Gas-Liquid Flow in Bubble Columns*. Chem. Eng. Sci., Vol.49, No.21, 3661-3674, 1994.
- [70] Lapin, A. und Lübbert, A.: *Dynamic Simulation of the Two-Phase Flow Mixing in Bubble Columns*. IChemE Symposium Ser., Vol.136, 365-373, 1994.
- [71] Lapin, A., Maul, C., Junghans, K. and Lübbert, A.: *Industrial-Scale Bubble Column Reactors: Gas-Liquid Flow and Chemical Reaction*. Chem. Eng. Sci., Vol. 56, No.1, 239-246, 2001.
- [72] Lapin, A.: *Private communication*.
- [73] Launder, B.E. and Spalding, D.B.: *Mathematical Models of Turbulence*. Academic Press, London, 1972.
- [74] Lax, P.D.: *Hyperbolic Systems of Conservation Laws and the Mathematical Theory of Shock Waves*. SIAM Publications, Philadelphia, 1973.
- [75] Leister, H.-J., Peric, M.: *Vectorized Strongly Implicit Solving Procedure for Seven-Diagonal Coefficient Matrix*. Int. J. Heat Fluid Flow, Vol. 4, 159-172, 1994.
- [76] Leonard, B.P.: *A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation*. Comp. Methods in Appl. Mech. and Eng., Vol. 19, 59-98, 1979.
- [77] LeVeque, R.J.: *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhäuser Verlag, Basel, 1990.
- [78] LeVeque, R.J.: *High-Resolution Conservative Algorithms for Advection in Incompressible Flow*. SIAM J. Numer. Anal., Vol. 33, 627-665, 1996.
- [79] Lin, T.-J., Reese, J., Hong, T. and Fan, L.-S.: *Quantitative Analysis and Computation of Two-Dimensional Bubble Columns*. AIChE Journal, Vol. 42, 301-318, 1996.

- [80] Liu., T.J.: *Experimental Investigation of Turbulence Structure in Two-Phase Bubbly Flow*. Ph. D. Thesis, Northwest University, 1989.
- [81] Lopez de Bertodano, M., Lahey Jr., R.T. and Jones, O.C.: *Development of a  $k$ - $\epsilon$  Model for Bubbly Two-Phase Flow*. Transactions of the ASME, Vol. 116, 128-134, 1994.
- [82] Lopez de Bertodano, M., Lahey Jr., R.T. and Jones, O.C.: *Phase Distribution in Bubbly Two-Phase Flow in Vertical Ducts*. Int. J. Multiphase Flow, Vol. 20, 805-818, 1994.
- [83] Morud, K.E.: *Turbulent Two-Phase Flow in Bubble Columns and Stirred Fermenters*. Dr. Ing. Thesis, NTH, TMIH, Porsgrunn, 1994.
- [84] Morud, K.E. and Hjertager, B.H.: *LDA Measurements and CFD Modelling of Gas-Liquid Flow in a Stirred Vessel*. Chem. Engng Sci., Vol. 51, 233-249, 1996.
- [85] Mudde, R.F., Lee, D.J., Reese, J., Fan, L.-S.: *Role of Coherent Structures on Reynolds Stresses in a 2-D Bubble Column*. AIChE Journal, Vol. 43, 913-926, 1997.
- [86] Mudde, R.F., Simonin, O.: *Two- and Three-Dimensional Simulations of a Bubble Plume Using a Two-Fluid Model*. Chem. Eng. Sci., Vol. 54, 5061-5069, 1999.
- [87] Murai, Y., Matsumoto, Y.: *Numerical Analysis of Detailed Flow Structures of a Bubble Plume*. JSME International Journal, Series B, Vol. 41, 568-574, 1998.
- [88] Nigmatulin, R.I., Lahey Jr., R.T., Drew, D.A.: *On the Different Forms of Momentum Equations and on the Intra- and Interphase Interaction in the Hydromechanics of a Monodispersed Mixture*. Chem. Eng. Commun., Vol. 141-142, 287-302, 1996.
- [89] Pan, S.-M., Ho, Y.-H., Hwang, W.-S.: *Three-Dimensional Fluid Flow Model for Gas-Stirred Ladles*. J. of Materials Engineering and Performance (JMEPEG), Vol. 6, 311-318, 1997.
- [90] Pan, Y., Dudukovic, M.P., Chang, M.: *Dynamic Simulation of Bubbly Flow in Bubble Columns*. Chem. Engng Sci., Vol. 54, 2481-2489, 1999.
- [91] Pan, Y., Dudukovic, M.P., Chang, M.: *Numerical Investigation of Gas-Driven Flow in 2-D Bubble Columns*. AIChE J., Vol. 46, 434-449, 2000.
- [92] Park, H.-J., Yang, W.-J.: *Turbulent Two-Phase Mixing in Gas-Stirred Ladle Systems for Continuous Casting Applications*. Numerical Heat Transfer, Part A, Vol. 31, 493-515, 1997.
- [93] Patankar, S.V.: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. McGraw-Hill Book Company, New York, 1980.

- [94] Pflieger, D., Becker, S.: *Modelling and Simulation of the Dynamic Flow Behaviour in a Bubble Column*. Chem. Eng. Sci., Vol. 56, No.4, 1737-1747, 2001.
- [95] Pokharna, H., Mori, M., Ransom, V.H.: *The Particle Fluid Model and Using Lagrangian Representation in Two-Phase Flow Modeling*. Nuclear Engng and Design, Vol. 175, 59-69, 1997.
- [96] Price, H.S., Varga, R.S., Warren J.E.: *Application of Oscillation Matrices to Diffusion-Convection Equations*. J. Math. and Phys., Vol.45, 301-311, 1966.
- [97] Ranade, V.V., van den Akker, H.E.A.: *A Computational Snapshot of Gas-Liquid Flow in Baffled Stirred Reactors*. Chem. Eng. Sci., Vol. 49, 5175-5192, 1994.
- [98] Ranade, V.V.: *Modelling of Turbulent Flow in a Bubble Column Reactor*. Trans. Inst. Chem. Eng., Vol. 75A, 14-23, 1997.
- [99] Richtmyer, R.D., Morton, K.W.: *Difference Methods for Initial Value Problems*. Wiley-Interscience, London, 1967.
- [100] Rietema, K.: *Science and Technology of Dispersed Two-Phase Systems - I and II*. Chem. Eng. Sci., Vol. 37, 1125-1150, 1982.
- [101] Roe, P.L.: *Some Contributions to the Modelling of Discontinuous Flows*. Lect. Notes Appl. Math., Vol. 22, 163-193, SIAM, Philadelphia, 1985.
- [102] Sato, Y. and Sekoguchi, K.: *Liquid Velocity Distribution in Two-Phase Bubble Flow*. Int. J. Multiphase Flow, Vol. 2, 79-95, 1975.
- [103] Sato, Y., Sadatomi, M. and Sekoguchi, K.: *Momentum and Heat Transfer in Two-Phase Bubble Flow*. Int. J. Multiphase Flow, Vol. 7, 167-177, 1981.
- [104] Schlueter, M., Raebiger, N.: *Bubble Swarm Velocity in Two Phase Flows*. HTD-Vol. 361, Proceedings of the ASME Heat Transfer Division, Volume 5, ASME 1998.
- [105] Schwarz, M.P., Turner, W.J.: *Applicability of the Standard  $k$ - $\epsilon$  Turbulence Model to Gas-Stirred Baths*. Appl. Math. Modelling., Vol. 12, 273-279, 1988.
- [106] Serizawa, A.: *Fluid-Dynamic Characteristics of Two-Phase Flow*. Ph. D. thesis, Kyoto University, 1974.
- [107] Serizawa, A., Kataoka, I., Michiyoshi, I.: *Phase Distribution in Bubbly Flow*. Proc. of the 2nd Int. Workshop on Two-Phase Flow Fundamentals, Data Set No. 24, 1986.

- [108] Simonin, O., Violet, P.: *Modelling of Turbulent Two-Phase Jets Loaded with Discrete Particles*. In F.G. Hewitt, et al., *Phenomena in Multiphase Flow* (pp. 259-269), Washington DC, Hemisphere, 1990.
- [109] Smith, B.L. and Milelli, M.: *An Investigation of Confined Bubble Plumes*. Proceedings of Third Int. Conf. Multiphase Flow, ICMF 1998, Lyon, France, June 8-12, 1998 (on CD-ROM).
- [110] Sokolichin, A. and Eigenberger, G.: *Gas-Liquid Flow in Bubble Columns and Loop Reactors: Part I. Detailed Modeling and Numerical Simulation*. Chem. Eng. Sci., Vol. 49, 5735-5746, 1994.
- [111] Sokolichin, A., Eigenberger, G., Lapin, A. and Lübbert, A.: *Dynamic Numerical Simulation of Gas-Liquid Two-Phase Flows: Euler-Euler versus Euler-Lagrange*. Chem. Eng. Sci., Vol. 52, 611-626, 1997.
- [112] Sokolichin, A., Eigenberger, G.: *Applicability of the Standard  $k-\epsilon$  Turbulence Model to the Dynamic Simulation of Bubble Columns: Part I. Detailed Numerical Simulations*. Chem. Eng. Sci., Vol. 54, 2273-2284, 1999.
- [113] Solbakken, T., Hiertager, B.: *A Computational and Experimental Study of Flow Pattern in a Pilot and a Full Scale Bubble Column*. Proceedings of Third Int. Conf. Multiphase Flow, ICMF 1998, Lyon, France, June 8-12, 1998 (on CD-ROM).
- [114] Sommerfeld, M., Kohnen, G., Rüger, M.: *Some Open Questions and Inconsistencies of Lagrangian Particle Dispersion Models*. Proceedings Ninth Symposium on Turbulent Shear Flows, Kyoto, Aug. 1993, Paper 15.1, 1993.
- [115] Sommerfeld, M., Decker, S. and Kohnen, G.: *Time-Dependent Calculation of Bubble Columns Based on Reynolds-Averaged Navier-Stokes Equations with  $k-\epsilon$  Turbulence Model*. Preprints of the Japan-German Symposium on Multiphase Flow, Tokyo, September 1997, 1997.
- [116] Spalding, D.B.: *The Calculation of Free-Convection Phenomena in Gas-Liquid Mixtures*. Imperial College, London, HTS No. 76, 1976.
- [117] Spalding, D.B.: *Computer Simulation of Two-Phase Flows With Special Reference to Nuclear Reactor Systems*. In: *Computational Techniques in Heat Transfer*, Ed.: R.W. Lewis, K. Morgan, J.A. Johnson, W.R. Smith. Pineridge Press, 1-44, 1985.
- [118] Stone, H.L.: *Iterative Solution of Implicit Approximations of Multidimensional Partial Differential Equations*. SIAM J. Numer. Anal., Vol.5, 530-558, 1968.

- [119] Svendsen, H.F., Jakobsen, H.A. and Torvik, R.: *Local Flow Structures in Internal Loop and Bubble Column Reactors*. Chem. Eng. Sci., Vol.47, 3297-3304, 1992.
- [120] Thomas, N.H., Auton, T.R., Sene, K. and Hunt, J.C.R.: *Entrapment and Transport of Bubbles in Transient Large Eddies in Multiphase Turbulent Shear Flows*. International Conference on the Physical Modelling of Multi-Phase Flows, Coventry, UK, 169-184, 1983.
- [121] Tomiyama, A., Kataoka, I. and Sakaguchi, T.: *Drag Coefficients of Bubbles, 1st Report: Drag Coefficient of a Single Bubble in a Stagnant Liquid*. Trans. JSME, Ser. B., Vol. 61, 2357, 1995 (in Japanese).
- [122] Tomiyama, A., Sou, A., Zun, I., Kanami, N., Sakaguchi, T.: *Effect of Eötvös Number and Dimensionless Liquid Volumetric Flux on Lateral Motion of a Bubble in a Laminar Duct Flow*. Proc. 2nd Int. Conf. Multiphase Flow, Kyoto, PD1, 11-18, 1995.
- [123] Tomiyama, A.: *Struggle with Computational Bubble Dynamics*. Proceedings of Third Int. Conf. Multiphase Flow, ICMF 1998, Lyon, France, June 8-12, 1998 (on CD-ROM).
- [124] Torvik, R. and Svendsen, H.F.: *Modelling of Slurry Reactors: A Fundamental Approach*. Chem. Eng. Sci., Vol. 45, 2325-2332, 1990.
- [125] Tryggvason, G., Bunner, B., Esmaeeli, A. and Mortazavi, S.: *Direct Numerical Simulations of Dispersed Flows*. Proceedings of Third Int. Conf. Multiphase Flow, ICMF 1998, Lyon, France, June 8-12, 1998 (on CD-ROM).
- [126] Tsuchiya, K., Furumoto, A., Fan, L.-S. and Zhang, J.: *Suspension Viscosity and Bubble Rise Velocity in Liquid-Solid Fluidized Beds*. Chem. Engng Sci., Vol.52, 3053-3066, 1997.
- [127] van den Akker, H.E.A.: *Momentum Equations in Dispersed Two-Phase Flows*. In: Encyclopedia of Fluid Mechanics, Vol.3, N. P. Charemsinoff (Edt.), Gulf Publishing, Houston, U.S.A, 371-400, 1986.
- [128] van Leer, B.: *Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. II. Monotonicity and Conservation Combined in a Second Order Scheme*. J. Comput. Phys., Vol. 14, 361-370, 1974.
- [129] van Leer, B.: *Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. IV. A New Approach to Numerical Convection*. J. Comput. Phys., Vol. 23, 276-299, 1977.
- [130] Wachi, S., Yates, J.G.: *Comments on Modelling of Slurry Reactors: A Fundamental Approach*. Chem. Eng. Sci., Vol.46, 1528-1529, 1991.

- [131] Wang, S.K., Lee, S.J., Jones Jr., O.C., Lahey Jr., R.T.: *3-D Turbulence Structure and Phase Distribution Measurements in Bubbly Two-Phase Flows*. Int. J. Multiphase Flow, Vol. 13, 327-343, 1987.
- [132] Wesselingh, J.A.: *The Velocity of Particles, Drops and Bubbles*. Chem. Eng. Process., Vol. 21, 9-14, 1987.
- [133] Whitham, G.: *Linear and Nonlinear Waves*. Wiley-Interscience, London, 1974.
- [134] Yadigaroglu, G., Lahey Jr., R.T.: *On the Various Forms of the Conservation Equations in Two-Phase Flow*. Int. J. Multiphase Flow, Vol. 2, 477-494, 1976.
- [135] Yee, H.C.: *Construction of Explicit and Implicit Symmetric TVD Schemes and Their Applications*. J. Comput. Phys., Vol. 68, 151-179, 1987.