

## Modellierung und Numerische Simulation von G/L-Blasen-Strömungen\*

Alexander Sokolichin, Stefan Becker  
und Gerhart Eigenberger\*\*

In den letzten Jahren zeigt sich ein Trend zu einer detaillierteren modellmäßigen Beschreibung der Hydrodynamik von Gas(G)/Liquid(L)-Reaktoren, wie z. B. Blasensäulen [1, 2]. Die genauere Erfassung der Hydrodynamik wird dabei als Voraussetzung für eine bessere Reaktorauslegung betrachtet. Wegen der Komplexität der Vorgänge scheint eine enge Kopplung von Experiment und Simulation erforderlich. Über erste Ergebnisse aus einem entsprechenden Forschungsprojekt wird nachstehend berichtet. Zur Berechnung der Strömungsvorgänge wurde ein dynamisches zweidimensionales zweiphasiges Euler-Modell entwickelt. Die disperse Phase wird als Pseudokontinuum behandelt. Die Kopplung zwischen den beiden Phasen erfolgt durch den Volumenanteil der jeweiligen Phase am Gesamtvolumen und durch Wechselwirkungsterme. Zur Formulierung der Wechselwirkungsterme wird von einer einheitlichen Blasengröße ausgegangen. Die Impulsbilanz für die Gasphase wird quasistationär berechnet. Sie kann als Verallgemeinerung der klassischen Schlupfbeziehung für den Fall eines beliebigen dynamischen Druckfeldes betrachtet werden. Mit dem Modell lassen sich die einzelnen Geschwindigkeitskomponenten der beiden Phasen und der Gasgehalt an jeder Position im Reaktor berechnen. Das Modell wird zur numerischen Simulation von G/L-Blasen-Strömungen in Reaktoren mit unterschiedlichen Geometrien verwendet. Die berechneten Größen werden mit

\* Vortrag von A. Sokolichin auf der internen Arbeitssitzung der Fachausschüsse „Mehrphasenströmungen“ und „Wärme- und Stoffübertragung“ der GVC · VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen vom 24. bis 26. März 1993 in Köln.

\*\* Dr. rer. nat. A. Sokolichin, Dipl.-Ing. S. Becker und Prof. Dr.-Ing. G. Eigenberger, Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Böblinger Straße 72, 70199 Stuttgart.

experimentell ermittelten Werten verglichen, wobei auf Einflußgrößen wie Ort und Art der Begasung eingegangen wird. Nachfolgend werden beispielhaft für diese Vorgehensweise die Ergebnisse von Simulationsrechnung und Messung der Strömungsfelder einer asymmetrisch begasten Blasensäule und eines Schlaufenreaktors vorgestellt.

## 1 Modellbildung

Wichtige Erkenntnisse über die Hydrodynamik von Zweiphasenreaktoren lassen sich aus der Kombination von gezielten Experimenten mit detaillierter Modellbildung und Rechnersimulation gewinnen. Die dazu verwendeten Transportgleichungen beinhalten die Annahme, daß zwei Kontinua in der Zweiphasenströmung vorhanden sind. Zu einem Zeitpunkt und an einer Position in der Strömung kann jedoch nur ein Kontinuum vorhanden sein. Da es mit einem numerischen Algorithmus nicht möglich ist, jeden Punkt im Raum aufzulösen, muß über ein gewisses Raumintervall gemittelt werden. Dazu wird das gesamte Berechnungsgebiet in eine endliche Anzahl von finiten Volumen unterteilt. Die Definition einer Volumenkonzentration der Phase  $k$  ergibt daraus, wieviel eines gegebenen Volumens durch die Liquid- oder Gasphase ausgefüllt ist:  $\varepsilon_k = V_k/V$ ,  $k = g, l$ . Um eine physikalisch sinnvolle Bedeutung der Volumenkonzentration zu erhalten, muß der Quotient aus einem Volumen  $\Delta V$  über das gemittelt wird, und dem Volumen einer Einzelblase deutlich größer als eins sein. Die Hydrodynamik der Zweiphasenströmung in so einem Volumenelement wird durch folgende Kenngrößen beschrieben: Gasgehalt  $\varepsilon_g$ , Liquid-Gehalt  $\varepsilon_l$ , Gasgeschwindigkeit  $u_g$ , Liquid-Geschwindigkeit  $u_l$ , Gasdichte  $\rho_g$  und Druck  $p$ . Da angenommen wird, daß der Wert dieser Größen innerhalb eines Volumenelements konstant ist, muß das Volumen  $\Delta V$  andererseits wesentlich kleiner sein als das Gesamtvolumen des Reaktors. Die Differentialgleichungen werden abgeleitet, indem die Erhaltungssätze auf dieses Kontrollvolumen angewendet werden. Als Ergebnis folgen für beide Phasen die volumen- und zeitgemittelten Navier-Stokes-Gleichungen und die Kontinuitätsgleichungen, wobei zusätzliche Vereinbarungen und Voraussetzungen getroffen werden:

- Eulersche Betrachtungsweise mit einem festen kartesischen Koordinatensystem,
- isotherme Betrachtungsweise,
- keine Berücksichtigung der Turbulenz,
- der Gasverteiler erzeugt Primärblasen mit konstanter Masse,
- Vernachlässigung der Blasenkoaleszenz und des Blasenzerfalls,
- Annahme einer zweidimensionalen Strömung,
- Kopplung der beiden Phasen über einen Wechselwirkungsterm, die Widerstandskraft  $F_w$ .

### 1.1 Kontinuitätsgleichungen

Zwischen Flüssigkeit und Gasblasen wird kein Massenaustausch angenommen, so daß die Kontinuitätsgleichungen für beide Phasen getrennt und ohne Austauschglieder formuliert werden können:

$$\frac{\partial(\varepsilon_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla(\varepsilon_k \rho_k u_k) = 0 \quad , \quad k = l, g \quad . \quad (1)$$

### 1.2 Impulsbilanz für die Liquid-Phase

$$\varepsilon_l \rho_l \frac{\partial u_l}{\partial t} + \varepsilon_l \rho_l u_l \nabla u_l = \varepsilon_l \nabla \tau_l - \varepsilon_l \nabla p + \varepsilon_l \rho_l g + F_w \quad . \quad (2)$$

Der erste Term auf der rechten Seite berücksichtigt den molekularen Impulstransport in einer laminaren Strömung. Es gilt:

$$\vec{\tau}_l = \mu_l(\nabla u_l + \nabla u_l^T) \quad . \quad (3)$$

Aufgrund der Dichtedifferenz muß die Schwerkraft in beiden Phasen berücksichtigt werden. Auftriebseffekte ergeben sich infolge der Kopplung beider Phasen durch den Druck. Bewegt sich eine Blase in einer Flüssigkeit, so erfährt sie eine Kraft, die ihrer Bewegung entgegen wirkt, falls die Geschwindigkeit der umgebenden Flüssigkeit kleiner als die Geschwindigkeit der Blase ist. Während die Bewegung der Blase gebremst wird, erfährt die Flüssigkeit eine Beschleunigung in Richtung der Blasenbewegung. Die Widerstandskraft  $F_w$ , wie sie in die Impulsbilanz eingeht, läßt sich in allgemeiner Form wie folgt darstellen:

$$F_w = C_w \varepsilon_g (u_g - u_l) \quad . \quad (4)$$

$C_w$  steht hierbei für einen Ausdruck, für den in der Literatur viele verschiedene Korrelationen angegeben werden. Eine sehr einfache Beziehung stammt von Schwarz [3]:

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

Die Schlupfgeschwindigkeit ergibt sich mit dieser Gleichung ungefähr zu 20 cm/s, was in etwa mit den experimentell gefundenen Werten übereinstimmt. Bei der Modellierung des Wechselwirkungsterms wurde bewußt auf die Berücksichtigung der radialen Migrationseffekte durch die sogenannte Magnus-Kraft (s. z. B. [2]) verzichtet, da die meist verwendete Darstellung dieses zusätzlichen Termes ziemlich umstritten ist.

### 1.3 Impulsbilanz für die Gasphase

Bei der Herleitung der Impulsbilanz für die Gasphase wurde von der Annahme der Quasistationarität ausgegangen. Die Impulsbilanz für die Gasphase stellt dann einfach das Kräftegleichgewicht für die Gasblasen dar:

$$0 = -\varepsilon_g \nabla p + \varepsilon_g \rho_g g - F_w \quad (6)$$

bzw. nach Einsetzen des Ausdruckes (4) für  $F_w$  und Teilung durch  $\varepsilon_g$ :

$$0 = -\nabla p + \rho_g g - C_w (u_g - u_l) \quad . \quad (7)$$

Unter der zusätzlichen Annahme  $\nabla p = \rho_l g$  (statische Druckverteilung) geht diese Gleichung in die klassische Schlupfbeziehung über:

$$u_g - u_l = \frac{(\rho_g - \rho_l)g}{C_w} \quad . \quad (8)$$

Für Werte  $\rho_l = 1000 \text{ kg/m}^3$ ,  $\rho_g = 1 \text{ kg/m}^3$ ,  $g = 9,8 \text{ m/s}^2$  ergibt sich eine Schlupfgeschwindigkeit

$$u_{\text{Schlupf}} = u_g - u_l \approx 0,2 \frac{\text{m}}{\text{s}} \quad . \quad (9)$$

Man beachte dabei, daß die Vektoren  $u_{\text{Schlupf}} = u_g - u_l$  und  $g$  gegengerichtet sind. Die beiden Kontinuitätsgleichungen und die beiden Impulsbilanzen ergeben ein geschlossenes System von Differentialgleichungen, das zusammen mit den algebraischen Beziehungen

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_g = 1 \quad , \quad (10)$$

$$\rho_g = \frac{p}{RT_0} \quad , \quad T_0 = \text{const} \quad (11)$$

für die acht unabhängigen Variablen  $\varepsilon_g$ ,  $\varepsilon_1$ ,  $u_g$  (2 Variablen),  $u_1$  (2 Variablen),  $\rho_g$  und  $p$  gelöst werden kann. Die Modellgleichungen werden bzgl. der örtlichen Koordinaten mit der Methode der Finiten Volumen [4] diskretisiert. Dadurch entsteht ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen in der Zeit und von algebraischen Gleichungen, ein sog. DA-System. Die Gleichungen des DA-Systems werden gekoppelt integriert. Es wurde dafür der Zeitintegrator LIMEX [5] verwendet, der sich als außerordentlich leistungsfähig gezeigt hat.

## 2 Versuchstechnik

Zur experimentellen Überprüfung der Simulationsergebnisse wurden hydrodynamische Untersuchungen in einer Flachapparatur mit rechteckiger Querschnittsfläche durchgeführt (Hauptabmessungen: 0,5 m Breite, 0,08 m Tiefe, 2 m Höhe). In der Apparatur liegen aufgrund ihrer geringen Tiefe weitgehend zweidimensionale Strömungsverhältnisse vor. Somit sind die Ergebnisse aus der Simulation mit dem oben beschriebenen zweidimensionalen Strömungsmodell und die durch Experimente in der Flachapparatur gewonnenen Ergebnisse gut miteinander vergleichbar. Glasplatten auf Vorder- und Rückseite der Apparatur lassen die Beobachtung und Dokumentation der Mehrphasenströmung zu. Gerade die Beobachtung hat sich als sehr vorteilhaft für das Verständnis der örtlichen Strömungsvorgänge erwiesen. Die Strömungsform in der Apparatur läßt sich durch Einbauten leicht modifizieren.

Als Gasverteiler wird bei diesen Untersuchungen eine poröse Sinter-Kunststoffscheibe mit 4 cm Durchmesser und einer Porenweite von etwa 40  $\mu\text{m}$  eingesetzt. Sie erzeugt bei den hier untersuchten kleinen Gasdurchsätzen von wenigen Litern/Minute eine enge Blasengrößenverteilung mit einem mittleren Durchmesser von etwa 3 mm.

Zur qualitativen Überprüfung der Simulationsergebnisse werden in der Flachapparatur entsprechende Betriebsbedingungen eingestellt und die Strömungsvorgänge dokumentiert. Für die Gas-Phase reichen dazu photographische Aufnahmen, da die Blasen ihren Strömungsweg sichtbar markieren. Die Strömung der Liquid-Phase wird mit Hilfe eines Laser-Doppler-Anemometers (LDA) untersucht. Dazu werden der Flüssigkeit kleine Streupartikeln zugegeben, deren Geschwindigkeit das LDA mißt. Da die Partikeln der Flüssigkeit ungehindert folgen, entspricht ihre Geschwindigkeit der Momentangeschwindigkeit der L-Phase. In den Bereichen mit Blasen überlagern sich die Blasenauftiegs-geschwindigkeiten, da diese ebenfalls vom LDA detektiert werden. Aus diesem Grund sind die Ergebnisse der LDA-Messungen an den Orten mit Zweiphasenströmung nicht zum quantitativen Vergleich geeignet.

## 3 Ergebnisse

Als Beispiele für die Simulationen mehrphasiger G/L-Strömungen mit der oben beschriebenen Modellbildung werden nachfolgend die Ergebnisse der hydrodynamischen Berechnung zweier verschiedener Strömungsformen vorgestellt. Die den Rechnungen zugrunde gelegten geometrischen Hauptabmessungen entsprechen jeweils denen der Flachapparatur (Breite: 0,5 m, Tiefe: 0,08 m) mit einem Liquid-Niveau von 1,5 m. Die Orte der LDA-Messungen werden im folgenden Beispiel zur besseren

Vergleichbarkeit so gewählt, daß sie den Gitterpunkten der Simulationsrechnungen entsprechen.

Das erste Beispiel ist eine außermittig begaste Blasensäule. Der Begasungsort ist 10 cm von der Apparatemitte nach links versetzt (Abb. 1b). Es stellt sich bei einem Gasdurchsatz von 8 l/min eine großräumige Umlaufströmung der L-Phase ein, in die zum Teil auch Blasen eingezogen werden. Das gemessene Geschwindigkeitsfeld der umlaufenden L-Phase (Abb. 2b) stimmt mit dem Simulationsergebnis (Abb. 2a) qualitativ weitgehend überein. Die Umlaufströmung resultiert aus der lokalen Gasgehaltsverteilung, die auf der linken Apparateseite deutlich größer als auf der rechten ist. Auf der Photographie (Abb. 1b) ist dies an den unterschiedlichen Blasendichten zu erkennen. Die Simulationsrechnung zeigt die entsprechenden lokalen Verteilungen des Gasgehalts über die Apparatequerschnitte in verschiedenen Höhen (Abb. 1a). Nach unten nimmt der Gasgehalt in der Abwärtsströmung ab, da die Blasen im Zentrum der Umlaufströmung, in dem die Umlaufgeschwindigkeit zunehmend gebremst wird, nach oben steigen.

Wird der Gasdurchsatz verkleinert, zeigen die Simulationsergebnisse, daß sich in der Apparatur mehrere Umlaufströmungen ausbilden (Abb. 3a), wodurch der Blasenschwarm mäanderförmig aufsteigt (Abb. 4a). Durch die kleinen Flüssigkeitgeschwindigkeiten werden in diese Wirbel kaum Gasblasen eingezogen. Auch in diesem Fall wurden die Ergebnisse in der Flachapparatur überprüft. Die Photographie in Abb. 4b zeigt das durch die Simulation vorausgesagte Verhalten des Gasblasenschwarms bei  $\dot{V}_G = 1,6 \text{ l/min}$ . Die LDA-Messungen ergeben das dazugehörige Geschwindigkeitsfeld der L-Phase. Orte und Größen der Umlaufströmungen entsprechen im zeitlichen Mittel weitgehend den berechneten (Abb. 3b). Das instationäre Strömungsverhalten ist deutlich ausgeprägter als bei dem größeren Gasdurchsatz. Die Umlaufströmungen verändern sich zeitlich, wodurch der Blasen-

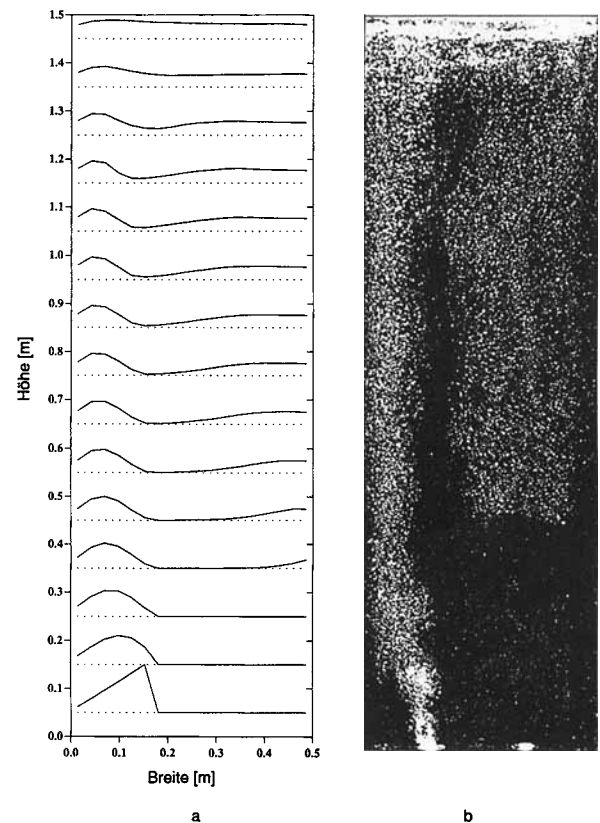


Abb. 1. Berechnung des lokalen Gasgehalts (a) und Photographie der Strömung (b) in einer außermittig begasten Blasensäule ( $\dot{V}_G = 8 \text{ l/min}$ ).

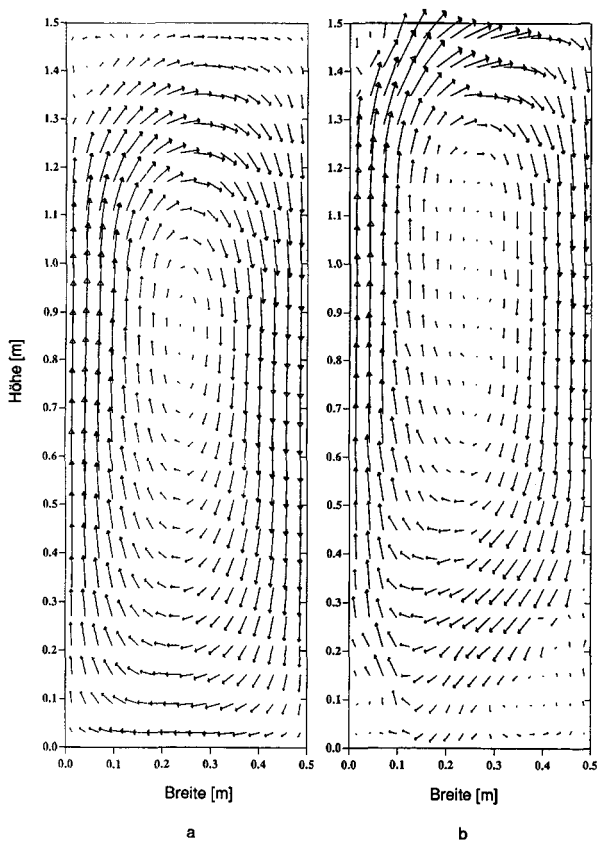


Abb. 2. Berechnung (a) und Messung (b) des Geschwindigkeitsfeldes der L-Phase in einer außermittig begasten Blasensäule ( $V_G = 8$  l/min).

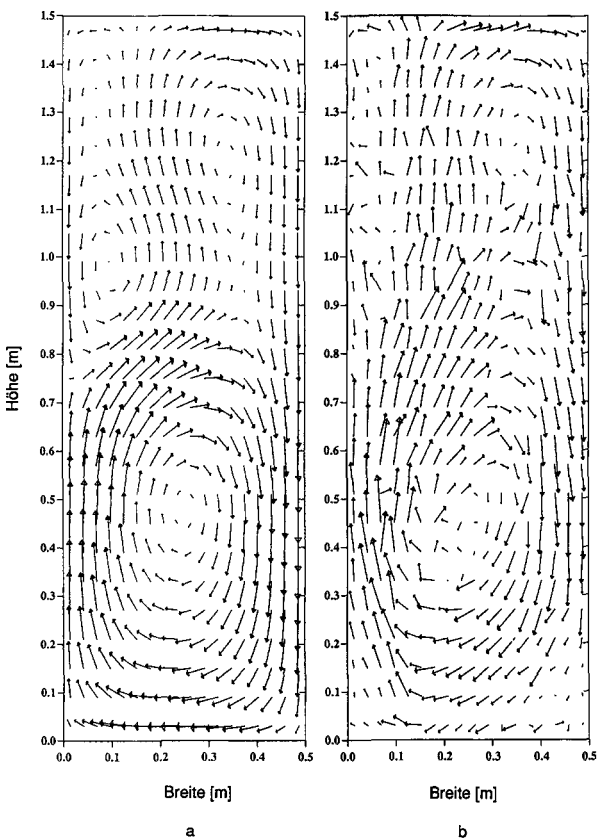


Abb. 3. Berechnung (a) und Messung (b) des Geschwindigkeitsfeldes der L-Phase in einer außermittig begasten Blasensäule ( $V_G = 1,6$  l/min).

schwarm annähernd periodisch mit einer Periodendauer von etwa 40 s zwischen der linken Wand und der Mitte der Apparatur hin und her wandert. Da die LDA-Messungen nacheinander durchgeführt werden und jeder Meßpunkt nur über 30 bis 60 s gemittelt wird, liegen die Meßwerte für benachbarte Punkte mitunter bei unterschiedlichen Strömungszuständen vor, so daß die gemessenen Richtungen der benachbarten Geschwindigkeitsvektoren zum Teil nicht konsistent erscheinen.

Im zweiten Anwendungsbeispiel wird die Hydrodynamik eines Mammut-Schlaufenreaktors mit den Abmessungen der Flachapparatur berechnet. Im Gegensatz zum ersten Beispiel wird hier die Umlaufströmung durch eine Leitplatte, die die Auf- und Abströmungen räumlich voneinander trennt, definiert gelenkt. Die beiden Strömungsbereiche werden nachfolgend Auf- und Abströmer genannt. Die Begasung erfolgt gleichmäßig über den gesamten Querschnitt im unteren Teil des Aufströmers. Im stationären Geschwindigkeitsfeld der Liquid-Phase ergeben sich drei charakteristische Wirbelgebiete (Abb. 5a). Zum einen bilden sich am oberen und am unteren Ende der Leitplatte bei den  $180^\circ\text{C}$ -Strömungsumlenkungen Ablösewirbel, die *Blenke* [6] auch in zylindrischen Schlaufenreaktoren feststellte und als Einschlagwirbel bezeichnete. Zum anderen entsteht im Entgasungsbereich eine Umlaufströmung, die entlang der Außenwand im oberen Teil des Aufströmers abwärtsströmt. Grund dafür ist die Ungleichverteilung des Gasmassenstroms im Aufströmer (Abb. 5b), die durch den Ablösewirbel am Beginn des Aufströmers verursacht wird. Im Abströmer folgen die mitgenommenen Gasblasen der Flüssigkeitsströmung und steigen an der Innenwand des Abströmers wieder auf. Bemerkenswert ist die dadurch entstehende Rezirkulation von Gasblasen im oberen Bereich des Abströmers.

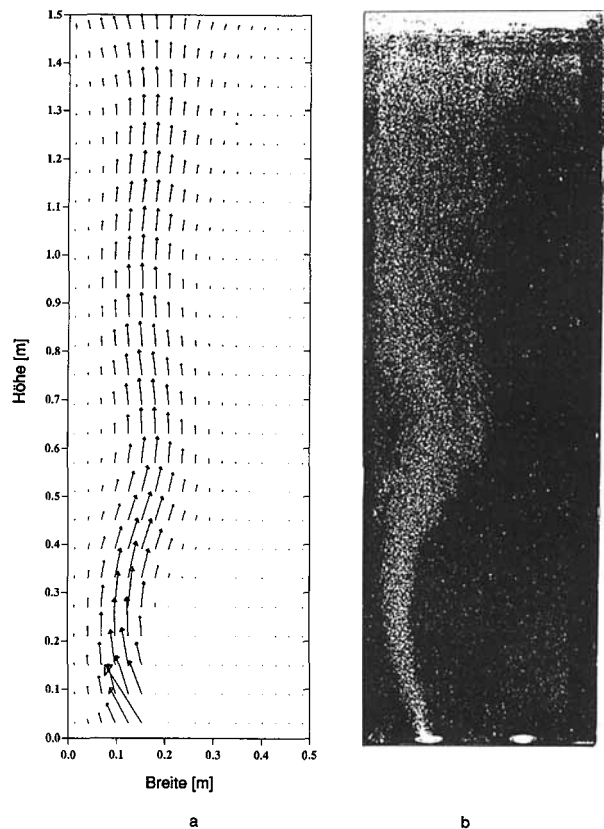


Abb. 4. Berechnung der Gasmassenstromdichten (a) und Photographie der Strömung (b) in einer außermittig begasten Blasensäule ( $V_G = 1,6$  l/min).

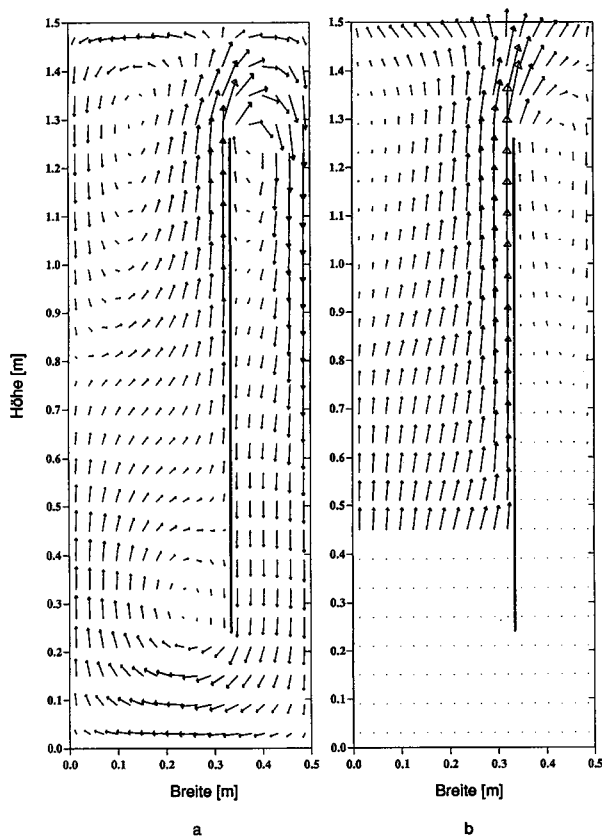


Abb. 5. Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes (a) und der Gasmassenstromdichten (b) in einem Schlaufenreaktor.

Die bei diesem Anwendungsbeispiel beschriebenen Effekte werden hier nicht experimentell belegt. Sie stimmen jedoch mit den visuellen Beobachtungen der Verfasser in der Flachapparatur überein.

Die Förderung dieser Forschungsarbeit durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft sowie die BASF AG wird dankbar anerkannt.

Eingegangen am 20. August 1993 [K 1636]

## Formelzeichen

$C_w$	[kg/(m <sup>3</sup> s)]	Widerstandskoeffizient
$F_w$	[N/m <sup>3</sup> ]	Widerstandskraftdichte
$g$	[m/s <sup>2</sup> ]	Erdbeschleunigung
$p$	[N/m <sup>2</sup> ]	Druck
$t$	[s]	Zeit
$T_0$	[K]	Temperatur
$u$	[m/s]	Geschwindigkeit
$V$	[m <sup>3</sup> ]	Volumenelement
$\dot{V}_G$	[l/min]	Gasdurchsatz
$\varepsilon$	[-]	Volumenkonzentration
$\mu$	[kg/(m s)]	dynamische Viskosität
$\rho$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Dichte
$\vec{\tau}_1$	[N/m <sup>2</sup> ]	Schubspannungstensor
$\nabla$	[-]	Nabla-Vektor (= $\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z$ )

## Indices

g	Gas-Phase
l	Liquid-Phase

## Literatur

- [1] *Grienberger, J.; Hofmann, H.:* Chem. Eng. Sci. 47 (1992) S. 2215/2220.
- [2] *Svendsen, H. F.; Jakobsen, H. A.; Torvik, R.:* Chem. Eng. Sci. 47 (1992) S. 3297/3304.
- [3] *Schwarz, M. P.; Turner, W. J.:* Appl. Math. Modelling 12 (1988) S. 273/279.
- [4] *Patankar, S. V.:* Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere, Washington 1980.
- [5] *Deufhard, P.; Hairer, E.; Zguck, J.:* Numer. Math. 51 (1987) S. 501/516.
- [6] *Blenke, H.; Bohner, K.; Hirner, W.:* Verfahrenstechnik (Mainz) 3 (1969) Nr. 10, S. 444/452.