

Technische Universität München  
Institut für Energietechnik

Lehrstuhl für Thermodynamik

# **Entwicklung eines numerischen Modells zur Beschreibung disperser Gas/Flüssigkeits-Zweiphasenströmungen**

**Emad Gharaibah**

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Maschinenwesen der  
Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades  
eines

DOKTOR – INGENIEURS

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender:

Prof. Dr.-Ing. YYY

Prüfer der Dissertation:

Prof. Wolfgang Polifke, PhD

Prof. Dr.-Ing. X Y

Prof. Dr.-Ing. X Y

Die Dissertation wurde am 19. September 2008 bei der Technischen Universität München  
eingereicht und durch die Fakultät für Maschinenwesen am XX.XX.YYYY angenommen.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung und Problemstellung</b>	<b>1</b>
1.1	Einleitung . . . . .	1
1.2	Zielsetzung . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Modellierung disperser Mehrphasenströmungen</b>	<b>7</b>
2.1	Disperse mehrphasige Strömungen und deren Modellierung . .	9
2.2	Euler-Euler-Zweifluid Modell . . . . .	13
2.2.1	Transport- und Erhaltungsgleichungen des Zweifluid-Modells . . . . .	13
2.2.1.1	Kontinuitätsgleichungen . . . . .	14
2.2.1.2	Impulsgleichungen . . . . .	14
2.2.2	Impulsaustausch zwischen den Phasen . . . . .	15
2.2.2.1	Widerstandskraft der Partikel . . . . .	15
2.2.2.2	„Non-Drag“-Kräfte . . . . .	16
2.2.3	Schließung des Modells . . . . .	19
2.3	Partikelgrößenverteilung . . . . .	19
2.3.1	Partikelgrößenverteilung und Verteilungsfunktionen . . .	19
2.3.1.1	Angenommene Verteilungsfunktionen . . . . .	21
2.3.1.2	Momente der Verteilungsfunktionen . . . . .	23
2.3.1.3	Wichtige angenommene Verteilungsfunktionen:	23
2.3.2	Populationsbilanzgleichung . . . . .	26
2.4	Blasenkoaleszenz und -zerfall . . . . .	29
2.4.1	Blasenzerfall . . . . .	33
2.4.1.1	Zerfallfrequenz . . . . .	33
2.4.1.2	Tochterblasengrößenverteilung und deren Anzahl	37
2.4.2	Blasenkoaleszenz . . . . .	39

2.4.2.1	Kollisionsfrequenz . . . . .	41
2.4.2.2	Koaleszenzeffizienz . . . . .	44
<b>3</b>	<b>Das Momenten-Modell</b>	<b>48</b>
3.1	Konzept des Momenten-Modells . . . . .	48
3.2	Formulierung des Momenten-Modells . . . . .	51
3.2.1	Annahmen und Voraussetzungen zur Herleitung des Modells . . . . .	51
3.2.2	CFD-Modellteil . . . . .	53
3.2.2.1	Erhaltungsgleichungen des Momenten-Modells	53
3.2.2.2	<i>Poly-disperser</i> Impulsaustausch im Momenten-Modell . . . . .	53
3.2.2.3	Transportgleichungen für die Momente der Partikelgrößenverteilung . . . . .	55
3.2.3	<i>Pre-processing</i> -Modellteil . . . . .	57
3.2.3.1	Die PBG mit pNDF und ihre Lösung im Datenaufbereitungsschritt: . . . . .	57
3.2.3.2	Lösungsmodell der PBG mit pNDF im <i>Pre-processing</i> . . . . .	60
3.2.3.3	Bildung der Partikelanzahldichte mit Hilfe von pNDFs . . . . .	64
3.2.4	Repräsentierbarkeit der Partikelgrößenverteilung mit pNDF . . . . .	68
3.2.4.1	Abhängigkeit der PBG-Lösung von der Partikelklassenanzahl: . . . . .	69
3.2.4.2	Repräsentierbarkeit der Blasenanzahldichte durch pNDF . . . . .	73
3.3	Generierung von <i>Look-up</i> Tabellen . . . . .	80
<b>4</b>	<b>Validierung des Momenten-Modells</b>	<b>86</b>
4.1	Validierung mit der Blasenströmung im Rührkessel . . . . .	86
4.1.1	Rührreaktoren . . . . .	86
4.1.2	Modellierung der Rührkesselströmung: Theorie . . . . .	90
4.1.3	Beschreibung des Experiments . . . . .	98
4.1.4	Validierung des Momenten-Modells . . . . .	100

4.1.4.1	Einphasige Simulation . . . . .	102
4.1.4.1.1	Messdaten der einphasigen Experiment	102
4.1.4.1.2	Untersuchung des Rechnernetzes . . . . .	103
4.1.4.1.3	Vergleich der einphasigen Simulations- ergebnisse mit dem Experiment . . . . .	105
4.1.4.2	Zweiphasige Simulationen mit dem Momenten Modell . . . . .	114
4.1.4.2.1	Durchführung der zweiphasigen Simu- lation . . . . .	114
4.1.4.2.2	Auswertung der Ergebnisse der zwei- phasigen Simulation . . . . .	117
<b>A</b>	<b>Momenten-Modell für disperse Systeme mit Massen- und Energie- austausch</b>	<b>137</b>
<b>B</b>	<b>Transportgleichungen für die Momente der Partikelgrößenvertei- lung</b>	<b>139</b>

## Nomenklatur

### Lateinische Formelzeichen

$D$	$[m]$	Durchmesser der Partikel
$d$	$[m]$	Durchmesser des Rühreres
$F$	$[N]$	Kraft
$m$	$[kg]$	Masse
$NC$	$[-]$	Partikelgrößenklassenanzahl
$N$	$[-]$	Anzahl der Transportgleichungssätze
$n$	$[rpm]$	Rührerumdrehgeschwindigkeit
$P$	$[W]$	Rührerleistung
$t$	$[s]$	Zeit
$V$	$[m^3]$	Volumen
$\vec{u}$	$[m/s]$	Geschwindigkeit
$\vec{F}$	$[N]$	Kraft
$\bar{D}$	$[m]$	Mittelwert der Partikelgrößenverteilung
$Var$	$[m^2]$	Varianz der Partikelgrößenverteilung
$p$	$[N/m^2]$	Druck
$\hat{T}$	$[N/m^2]$	Schubspannungstensor

### Griechische Formelzeichen

$\alpha$	$[-]$	Volumenanteil
$\epsilon_t$	$[m^2/s^3]$	turbulente Dissipationsrate
$\eta$	$[m^2/s]$	kinematische Viskosität
$\mu$	$[Ns/m^2]$	Dynamische Viskosität
$\rho$	$[kg/m^3]$	Dichte
$\sigma$	$[N/m]$	Oberflächenspannung
$\sigma$	$[m]$	Standerabweichung
$\sigma^2$	$[m^2]$	Varianz

## Kennzahlen

Re	[--]	Reynolds-Zahl
We	[--]	Weber-Zahl
$\sigma_t$	[--]	turbulente Prandtl-Zahl

## Tiefgestellte Indizes

<i>B</i>	Blase
<i>d</i>	disperse Phase
<i>D</i>	Widerstand
<i>f</i>	funktional
<i>F</i>	Flüssige Phase
<i>G</i>	Gasphase
<i>in</i>	Eintritts-
<i>init</i>	Anfangs-
<i>k</i>	kontinuierliche Phase
<i>krit</i>	kritisch
<i>p</i>	Partikel
<i>t</i>	turbulent
<i>slip</i>	Schlupf
<i>VM</i>	virtuelle Masse

**Abkürzungen**

CFD	Computational Fluid Dynamics
DNS	Direkte numerische Simulation
IO	inner-outer
LDA	Laser-Doppler-Anemometrie
MRF	multiple-reference-frames
PAD	Partikelanzahldichte
PBG	Populationsbilanzgleichung
PDA	Phasen-Doppler-Anemometer
pNDF	presumed Number Density Funktion: angenommene Anzahldichtfunktion
SM	sliding mesh

# 1 Einleitung und Problemstellung

## 1.1 Einleitung

Mehrphasenströmungen spielen in vielfältigen technischen und industriellen Anwendungen eine wichtige Rolle. Bei den Produktions- und Transportprozessen von Erdöl liegen häufig Zweiphasenströmungen vor bzw. es werden Gasblasen mit dem Ziel eingespritzt, das schwergewichtige Öl zur Oberfläche zu fördern. Im Energieerzeugungssektor mittels Dampfturbinen stellt das Sieden den wichtigsten Schritt bei der Produktion von Dampf zum Betreiben von Dampfturbinen dar. Hier kommt es durch Verdampfen von Wasser zur Bildung eines Wasser-Dampfgemisches. In vielen verfahrenstechnischen Bereichen werden Gas-Flüssigkeitsrührreaktoren und Blasensäulen eingesetzt, um die Kontaktflächen zwischen den Phasen zu vergrößern und somit die chemischen Reaktionen zu beschleunigen bzw. den Stofftransport zwischen den Phasen zu erhöhen.

Die Gas-Flüssigkeitsströmungen können nach ihrer stofflichen Zusammensetzung in zwei Gruppen unterteilt werden. Hier unterscheidet man zwischen einkomponentigen Zweiphasenströmungssystemen, wie z.B. einem Wasser-Dampfgemisch oder mehrkomponentigen Systemen, wenn beispielsweise Gase in Flüssigkeiten dispergiert werden. Gas-Flüssigkeitsströmungen unterscheiden sich auch bezüglich ihrer Strömungsstruktur. Neben der Gasblasenströmung, deren Modellierung im Fokus dieser Arbeit steht, können je nach Gasgehalt und Strömungsbedingungen weitere Zweiphasenströmungsregime, wie z.B. Kolbenblasen-, Pfropfen-, oder Tropfenströmungen beobachtet werden. Häufig kommt es zu einem Strömungsregimewechsel aufgrund von Änderungen der Strömungsbedingungen bzw. von Interaktionen der Gasblasen untereinander oder mit der Flüssigphase. An den Phasengrenzflächen zwischen dem Gas und der Flüssigkeit kommt es zum Austausch von Impuls

oder auch Masse und Energie. Diese Austauschprozesse bestimmen einerseits die Bewegung des betrachteten Zweiphasensystems, andererseits kontrollieren sie das Strömungsfeld und seine Parameter, wie Geschwindigkeit, Druck und Temperatur. Daher kommt der Berechnung der Phasengrenzflächen eine signifikante Bedeutung in der Modellierung von dispersen Gasblasen-Flüssigkeitsströmungen zu. Die genaue Bestimmung der Phasengrenzflächen kann nur mit der Kenntnis der Größenverteilung und der Form der dispersen Gasblasen realisiert werden. Die Blasengrößenverteilung und Blasenform sind jedoch zeitlich und räumlich veränderlich. Die wichtigsten zur Änderung der Blasengrößenverteilung führenden Mechanismen sind die Neubildung und das Verschwinden von Blasen, die kontinuierliche Blasengrößenänderung aufgrund von Stoffübergängen zwischen den Phasen sowie die diskontinuierliche Größenänderung, die aus Koaleszenz und Zerfall der Blasen resultiert.

In den Auslegungs- und Optimierungsprozessen von den mit Gas-Flüssigkeitsströmungen arbeitenden Apparaten wird zunehmend auf die Modellierung und Simulation der Strömungsvorgänge aus wirtschaftlichen Gründen, sowie aufgrund von Umwelt- und I Sicherheitsfragen Wert gelegt. Die traditionelle Methode zur Prototypentwicklung geschieht nach wie vor hauptsächlich durch das Skalieren von Daten, die mit Hilfe von Labormodellen bestimmt wurden. Dies ist jedoch zeitaufwendig, kostenintensiv, und nicht ganz frei von Risiken, insbesondere für neue Produkte. Dabei ergeben die Skalierungsmodelle nicht immer das richtige Ergebnis. Die sichere Vorhersage von Funktionalität und Effektivität der zu konstruierenden Mehrphasensystemapparate sind daher wesentliche Entwicklungsziele. Eine solche Vorhersage ist aber aufgrund der Komplexität von Zweiphasenströmungen verglichen mit Einphasenströmungen besonders schwierig, da zur Beschreibung von mehrphasigen Strömungen auch Kenntnisse über die physikalischen Prozesse an der Phasengrenzflächen, die Populationsdynamik der dispersen Phase und die Partikelgrößenverteilung notwendig sind. Der Einsatz der numerischen Strömungsberechnung (*Computational Fluid Dynamics*, CFD) gewinnt in nahezu allen Bereichen zunehmend an Bedeutung. Dies gilt auch auf dem Gebiet der Mehrphasenströmung. Eine recht genaue, aber auch sehr aufwendige numerische Strömungsberechnung

des Geschwindigkeits-, Druck- und Temperaturfeldes von Zweiphasenströmungen erlaubt die direkte numerische Simulation, die mit den heutigen Rechenressourcen aufgrund der erforderlichen sehr feinen Auflösung des Raums und der Zeit nicht handhabbar ist. Die CFD-Verfahren I basieren derzeit hauptsächlich auf der Beschreibung nach Euler-Lagrange oder Euler-Euler Verfahren mit gemittelten Transportgleichungen. Diese sind wirtschaftlich vertretbar.

In der Euler-Lagrange-Methode wird die kontinuierliche Phase durch den Eulerschen Ansatz beschrieben, während die disperse Phase statistisch betrachtet und durch Partikelpakete gleicher Eigenschaften repräsentiert wird. Die Bahnen der repräsentativen Partikel werden berechnet und aus diesen die Wechselwirkungsterme mit der kontinuierlichen Phase bestimmt. Die einfache Lösung der gewöhnlichen Differenzialgleichungen der Partikelbahnen stellt einen Vorteil dieses Verfahren dar, während der hohe numerische Aufwand zur Berechnung einer ausreichenden großen Anzahl dieser repräsentativen Pakete zur Beschränkung der Methode führt. Meist können Dispersphasenanteile bis max ca. 5% realisiert werden.

Beim Euler-Euler-Verfahren (auch *Euler-Euler Zwei-Fluid Modell*) werden beide Phasen als kontinuierlich betrachtet und durch den Eulerschen Ansatz beschrieben. Sie erlauben die Beschreibung eines relative hohen Dispersphasenanteil (bis ca. 20%) mit akzeptablem numerischen Aufwand, aber nur, wenn die disperse Phase homogen ist und die Berechnung mit einem mittleren Blasenvolumen (*monodispers*) durchgeführt werden kann. Um eine Modellierung mit mehreren ( $N$ ) Partikelgrößen (*polydisperse Betrachtung der Partikeldurchmesser*) im Rahmen des Euler-Euler Verfahrens zu realisieren, muss ein gekoppeltes Gleichungssystem von  $N + 1$  Sätzen von Transportgleichungen gelöst werden. Hier wird jede Blasengröße (oder -klasse) als eigenständige Phase betrachtet, für die ein Satz der Transportgleichungen gelöst wird. Dies ist rechenintensiv und kann zu Konvergenzproblemen führen. Eine zusätzliche Komplexität erhält die numerischen Simulation durch die Berücksichtigung der Partikelpopulationsdynamik, die die größenmäßige aber auch räumliche Veränderung der Partikel in der Zeit darstellt. Da meist zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung von Partikelgrößenverteilung die

Populationsbilanzgleichung zusätzlich zu der Strömungsberechnung gelöst wird. Diese muss ebenfalls zeitlich und räumlich für jede Partikelgrößenklasse, an jedem Gitterpunkt und zu jedem Zeitschritt diskretisiert und gelöst werden.

Wegen der genannten Komplexitäten der dispersen Gas-Flüssigkeitsströmungen und des hohen Rechenaufwands werden die Wechselwirkungsterme in den meisten Modellierungsmethoden bei kommerziellen CFD-Codes lediglich mit einem mittleren charakteristischen Blasendurchmesser oder im Rahmen der Populationsbilanzgleichung mit wenigen Blasendurchmesserklassen berechnet. Diese stellt eine gravierende Einschränkung der Populationsbilanzmethode und Fälschung der realen Strömungsverhältnisse dar, da die Phasengrenzflächen und damit die Zweiphasenphänomene von der Blasengrößenverteilung abhängig sind. Es kann leicht festgestellt werden, dass die zurzeit in den kommerziellen CFD-Rechenprogrammen implementierten Formulierungen zur Beschreibung von Gas-Flüssigkeitsströmungen fast nur für ausgebildete Blasenströmungen ohne Blasengrößenänderungen zuverlässige Ergebnisse liefern.

## 1.2 Zielsetzung

Das übergeordnete Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Entwicklung und Validierung eines numerischen Modells zur Simulation von dispersen Zweiphasenströmungen, das mit einem neuartigen Konzept der Momentenmethode im Rahmen des *Euler-Euler-Zweifluid* Modells die Partikelgrößenverteilung mit vertretbarem numerischen Aufwand repräsentieren kann. In einer Konzeptstudie wird die entwickelte Momentenmethode geprüft, anhand zweiphasiger Luftblasen-Flüssigkeitsströmung validiert und als Grüst für Modelerweiterungen entwickelt.

Das entwickelte Momenten-Modell basiert auf dem Euler-Euler Ansatz zur Modellierung der Phasen und der Populationsbilanzgleichung mit einer angenommenen funktionalen Form für die Partikelanzahldichte. Die Approximation der Partikelanzahldichte durch eine angenommene funktionale Form

(engl.: *presumed Number Density Funktion*) in der Populationsbilanzgleichung ermöglicht die separate Lösung dieser Gleichung, d.h. nicht direkt in dem Strömungsprogramm, für eine Spanne der Verteilungsfunktionsparameter und der beeinflussenden Strömungsparameter. Die Lösung derselbigen kann dann in Tabellen dargelegt und dem Strömungslöser zugänglich gemacht werden.

Das Momenten-Modell besteht dann aus einem Satz der Transportgleichungen des *Euler-Euler-Zweifluid* Modells für jede Phase mit den entsprechenden Kopplungstermen zur Beschreibung der gegenseitigen Wechselwirkung zwischen den Phasen und nur zwei zusätzlichen Transportgleichungen für den Mittelwert und die Varianz der Partikeldurchmesserverteilung, in denen die Evolution der Partikelgrößen infolge der Dispersionsprozesse mittels Quelltermen beschrieben wird. Diese Quellterme werden während der CFD-Rechnung aus der Lösung der Populationsbilanzgleichung, die in einer „*Look-up*“-Tabelle hinterlegt ist, ausgelesen.

Vorzüge dieser Methode sind:

- Es wird die Lösung der Populationsbilanzgleichung mit einer für die Diskretisierungsunabhängigkeit ausreichenden Anzahl an Partikelgrößenklassen möglich. Dies bringt numerische Stabilität, bessere Konvergenz sowie erhebliche Rechenzeiterparnis bei gleichzeitiger Erhöhung der Genauigkeit bei der Beschreibung der Phasenaustauschprozesse mit sich. Durch die Annahme einer pNDF wird eine polydisperse Betrachtung der partikelvolumenabhängigen Zwischenphasenaustauschprozesse (z.B.: Impuls-, Stoff oder Wärmeaustausch) möglich.
- Beliebige Zerfalls- und Koaleszenz-Modellfunktionen oder auch Verdampfungsansätze können entsprechend der zu simulierenden dispersen Zweiphasenströmung implementiert werden.

Das Modell in seinem aktuellen Entwicklungsstadium ist in der Lage, disperse Gasblasen-Flüssigkeits-Zweiphasenströmungen unter Berücksichtigung von Blasenzerfall und -koaleszenz mit einer für die Diskretisierungsunabhängig-

keit der Populationsbilanzgleichung ausreichenden Größenklassenanzahl zu simulieren. Es bietet die Möglichkeit den *polydispersen* Impuls-, Energie- und Stoffaustausch bzw. den Phasenübergang durch die Integration der Partikelkräfte über die Gesamtblasenverteilung korrekt zu bestimmen; oder auch vereinfachend mit einem äquivalenten Durchmesser den Bestimmungsgleichungen der Austauschprozesse zu arbeiten, der mit dem Durchmesser der Austauschberechnungsgleichung korreliert. Der äquivalente Durchmesser kann aus der mit Hilfe der lokalen Verteilungsmomente gebildeten Partikelgrößenverteilung berechnet werden.

Zu bemerken ist, dass für die disperse Phase angenommen wird, dass die Bewegung der Partikel durch nur ein Geschwindigkeitsfeld beschrieben wird. Das bedeutet, dass sich alle Partikel an einem Ort unabhängig von ihrer Größe mit jeweils der gleichen Geschwindigkeit bewegen. Änderungen in der Partikelgrößenverteilung durch größenabhängige Geschwindigkeiten können wegen dieser Einschränkung nicht abgeleitet werden. Ein Ansatz für eine *größenabhängige* Geschwindigkeit der Partikel hätte den Rahmen der vorliegenden Arbeit gesprengt.

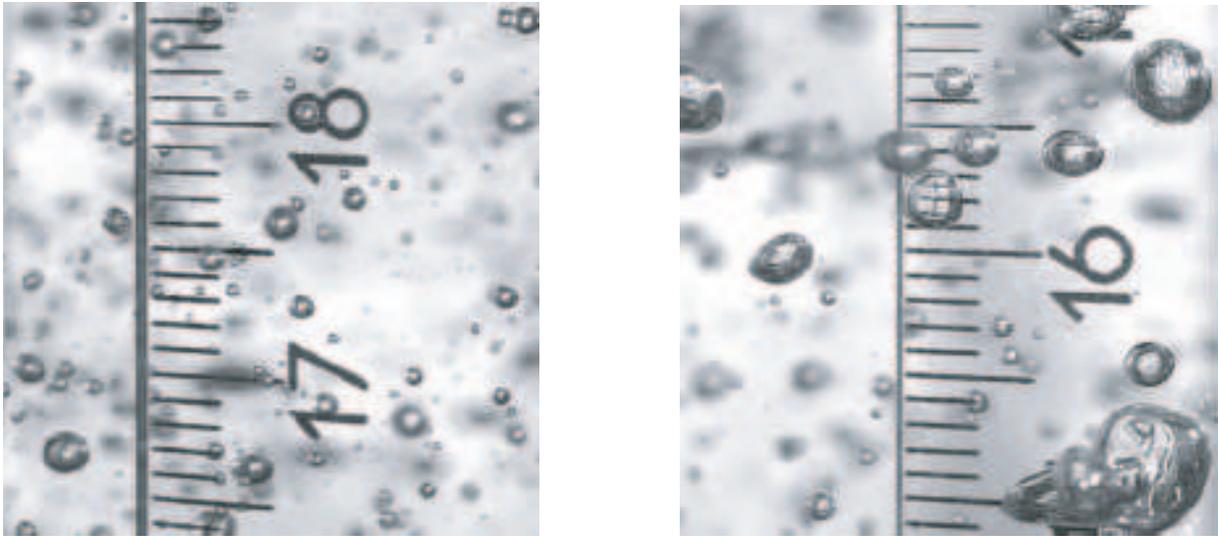
Dieser Arbeit faßt die im Rahmen der Dissertation durchgeführten Arbeiten und gewonnenen Ergebnisse zusammen. Zunächst wird im folgenden Kapitel der derzeitige Stand und die theoretischen Grundlagen der Modellierung von dispersen Zweiphasenströmungen anhand einer Literaturstudie durchleuchtet. Im dritten Kapitel wird das Konzept und die Theorie des entwickelten Momenten-Modells detailliert erläutert. Anschließend wird im vierten Kapitel die Implementierung des Modells in den kommerziellen Strömungslöser CFX beschrieben und auf die durchgeführten Rechnungen zur Validierung der entwickelten Methode gegen experimentelle Daten der Rührkesselströmung eingegangen. Abschließend wird die Arbeit zusammengefasst und auf mögliche Erweiterungen des Modells eingegangen.

## **2 Modellierung disperser Mehrphasenströmungen: Stand der Forschung und theoretische Grundlagen**

Unter mehrphasigen Strömungssystemen versteht man Systeme, die aus mehreren, nicht mischbaren Fluiden (Gas-Flüssigkeits- bzw. Flüssigkeits-Flüssigkeitsgemische) oder aus Gemischen von Fluiden und Feststoffen bestehen. Sie sind durch die Ausbildung von Grenzflächen zwischen den Phasen gekennzeichnet, an denen sich die Stoffwerte der beteiligten Phasen sprunghaft ändern (siehe Abbildung 2.1). Die geometrische Lage und Form der Phasengrenzfläche ändert sich mit der Zeit und ist zu jedem Zeitpunkt eindeutig. Der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit liegt in der Modellierung zweiphasiger disperser Strömungssysteme. Insbesondere werden Gasblasen-Flüssigkeitsströmungen behandelt, da die Validierung des entwickelten Modells anhand von Blasenströmungen erfolgt. Daher wird im Allgemeinen von dispersen Partikeln und Zweiphasenströmungen gesprochen. In den Abschnitten, die speziell Gasblasenströmungen behandeln, wird von dispersen Blasen die Rede sein.

Im Grunde genommen können zweiphasige Gas-Flüssigkeitsströmungen mit Gleichungen der einphasigen Strömungsmechanik (Kontinuitäts- und Impulsgleichungen für jede Phase) beschrieben werden. Diese Gleichungen gelten an jedem Ort des Strömungsgebietes, der gerade entweder von der Gas- oder der Flüssigphase besetzt sein kann, also momentane einphasige Strömung. An den Grenzflächen der Phasen können Bedingungen des Kräftegleichgewichtes und der Gleichheit der Geschwindigkeiten und Drücke der Phasen aufgestellt werden.

Prinzipiell wären diese Transportgleichungen für die direkte numerische Si-



**Abbildung 2.1:** Disperse Gasblasen-Flüssigkeitsströmung als Beispiel eines dispersen Mehrphasensystems [51]

mulation (DNS) eines (isothermen) Zweiphasenströmungssystems ausreichend. Die Anwendung der DNS ist aber mit derzeitigen Rechenressourcen im Allgemeinen schwer zu handhaben und für mehrphasige disperse Strömungen nur zur Simulation von wenigen Partikeln möglich, da sehr feine Rechenetze und sehr kleine Zeitschritte notwendig sind. Eine Mittelung der Gleichungen stellt eine Notwendigkeit dar, um ein für die gegenwärtig zur Verfügung stehende Rechenleistung lösbares Gleichungssystem herzuleiten, in dem die Wechselwirkung zwischen den Phasen durch geeignete Terme dargestellt werden kann. Im gemittelten Gleichungssystem werden die physikalischen Zusammenhänge über die Mittelwerte der Strömungsgrößen und deren Fluktuationen bzw. den entsprechenden Korrelationen beschrieben. Herleitungen zur Mittelung der Gleichungen für die Modellierungsansätze zweiphasiger Systeme findet man bei Drew et al. [20], Enwald et al. [23] sowie in den Arbeiten von Drew und Passman [21]. Basierend auf diesen Arbeiten leitete Bove [8] die gemittelten Gleichungen für die gebräuchlichsten Mehrphasenmodelle (Euler-Euler- und Euler-Lagrange-Verfahren und das Homogenmischungs-Modell) her.

## 2.1 Disperse mehrphasige Strömungen und deren Modellierung

Ein disperses Stoffsystem besteht im Allgemeinen aus mindestens zwei unterscheidbaren Komponenten: der dispersen Phase und dem umgebenden Medium. Das umgebende Medium (Dispersionsmittel oder auch äußere Phase) ist im geometrischen Sinne zusammenhängend, das heißt man kann von jedem Punkt des Mediums zu jedem anderen Punkt des Mediums gelangen, ohne das Medium zu verlassen. Das Medium wird als Kontinuum angesehen und in dieser Arbeit als kontinuierliche Phase bezeichnet. Die disperse Phase (auch dispergierte Phase oder innere Phase) dagegen ist nicht zusammenhängend, d.h., man kann nicht von jedem Punkt zu einem beliebigen Punkt gelangen, ohne sie zu verlassen. Der Weg führt durch das umgebende Medium. Die einzelnen Teile der dispersen Phase sind die dispersen Elemente. Sie bilden eine Menge im Sinne der mathematischen Mengenlehre. Eine andere Bezeichnung für ein disperses Element ist Partikel, Dispersoid oder Teilchen. In bestimmten Fällen spricht man auch von Korn (fest, mittelfein), Stück (fest, grob), Flocke (fest, locker), Tropfen (flüssig), Blase (gasförmig), Pore (gasförmig in festem Medium) oder Krümel. Als diskret-dispers bezeichnet man Systeme, deren Elemente sich nicht berühren. Umgekehrt heißen Systeme, deren Elemente sich berühren, kohärent-dispers. Zu einer vollständigen Beschreibung eines dispersen Systems gehören nicht nur die Eigenschaften der dispersen Elemente, sondern auch ihre räumliche Verteilung im umgebenden Medium. Konzentrationen sind ebenfalls Eigenschaften des Systems. Schließlich können auch physikalische Eigenschaften des Mediums (Viskosität, Dichte, Druck, Temperatur) eine verfahrenstechnische Rolle spielen. Die zielgerechte Beschreibung solcher Systeme ist komplex und ist oftmals einer Berechnung nur schwer zugänglich.

In der Regel sind nur die über die Einzelpartikel gemittelten Eigenschaften der Phasen, wie z.B. die Partikelgröße oder -volumenanteil von Interesse. Disperse Systeme werden nicht durch den Ort und die Eigenschaften einzelner Partikel charakterisiert, sondern durch statistisch gemittelte Größen. Die disperse Phase wird als kontinuierliche Verteilung in der kontinuierlichen Pha-

se betrachtet. Diese Betrachtung erlaubt lediglich die Berechnung gemittelter Werte. Eine wesentliche Größe bei der Beschreibung disperser Systeme ist der Volumenanteil der Phasen, der das Verhältnis des Volumens der einzelnen Phasen zum Gesamtvolumen angibt. Über die Dichten der beteiligten Phasen können massenbezogene Größen abgeleitet werden. Die Anzahl der Partikel pro Volumeneinheit bzw. die Partikelanzahldichte kann auch als charakteristische Größe betrachtet werden.

Disperse Strömungen werden nach der relativen Partikelgrößen in grobdisperse und feindisperse Systeme eingeteilt. Darüber hinaus ergeben sich zwei unterschiedliche Modellierungsmethoden: monodisperse Betrachtung für Systeme, in denen die Partikelgrößenverteilung durch eine mittlere Partikelgröße repräsentiert werden kann, und polydisperse Behandlung für Systeme mit stark variierenden Partikelgrößen.

Zur numerischen Simulation der dispersen Mehrphasensysteme sind Euler-Lagrange- und Euler-Euler-Verfahren gebräuchlich. In der Euler-Lagrange-Methode wird die kontinuierliche Phase durch den Eulerschen Ansatz beschrieben, d.h. die Bilanzgleichungen für die abhängigen Variablen werden im ortsfesten Koordinatensystem aufgestellt und um Phasenwechselwirkungsterme erweitert. Die disperse Phase wird statistisch betrachtet und durch Partikelpakete gleicher Eigenschaften repräsentiert. Die Bahnen der repräsentativen Partikel werden berechnet und mit deren Hilfe werden die Wechselwirkungsterme mit der kontinuierlichen Phase bestimmt. Die Lösung der dabei entstehenden gewöhnlichen Differenzialgleichungen der Paketbahnen stellt einen Vorteil dieses Verfahren dar, während der hohe numerische Aufwand zur Berechnung einer ausreichend großen Anzahl repräsentativer Pakete zur Beschränkung der Methode führt. Meist können Dispersphasenanteile bis max ca. 5% im Rahmen des Euler-Lagrange-Verfahrens realisiert werden. Zur Herleitung und Gegenüberstellungen von anderen Modellen und Anwendungen der Euler-Lagrange Methode sei auf die Arbeiten von Bove [8] verwiesen.

Beim Euler/Euler-Verfahren (bekannt auch als Euler-Euler Zweifluid Modell) werden beide Phasen als kontinuierlich betrachtet und durch den Eulerschen Ansatz beschrieben. Sie erlauben die Beschreibung eines relative hohen Di-

spersphasenanteils (bis ca. 20%) mit akzeptablem numerischen Aufwand [54]. Diese Aussage bezieht sich auf Fälle, in denen die disperse Phase homogen ist und die Berechnung monodispers durchgeführt werden kann. Dabei wird ein Satz der Bilanzgleichungen für die kontinuierliche Phase und ein Satz für die (mono-) disperse Phase gelöst.

Durch die Modellannahme eines mittleren Durchmessers bzw. eines gemeinsamen Geschwindigkeitsfeldes für alle Partikelgrößen geht das Bewegungsverhalten der verschiedenen Partikelgrößenklassen relative zu einander aufgrund von größenabhängigen Partikelkräften verloren. Bezüglich des Impulsaustausches zeigen experimentelle Untersuchungen, dass z.B. neben der Widerstandskraft die laterale Auftriebskraft (*lift force*) in der Gasblasen-Flüssigkeits-Rohrströmung die lokale Konzentration der Gasphase mitbestimmt. Die laterale Auftriebskraft ist dabei für folgendes Verhalten zuständig: kleine, nicht deformierbare Blasen werden in die Richtung der Rohrwand geschoben, während große Blasen durch die Geschwindigkeitsgradienten in der Flüssigphase entlang der Blasenoberfläche deformiert und in das Rohrrinnere getrieben werden [68]. Da die Partikelgrößenverteilung relevant für den Stoff-, Impuls-, und Energieaustausch in dispersen Systemen ist, stellt sich die Notwendigkeit der korrekten Vorhersage der Partikelgrößenverteilung in der Modellierung von dispersen Systemen dar. Die von Hulburt und Katz [35] für Mehrphasensysteme eingeführte Methode der Populationsbilanzen ist der gebräuchlichste Ansatz zur Realisierung der polydispersen Behandlung unter Berücksichtigung der Partikeldynamik. Sie erweist sich im Allgemeinen als eine geeignete Möglichkeit, die Eigenschaftsverteilung der dispersen Phasen in der Modellierung einzubeziehen.

Versucht man zum Beispiel eine polydisperse Modellierung durch die Betrachtung von  $N$  Partikelgrößen im Rahmen des Euler-Euler Zweifluid Modells zu realisieren, so muss ein gekoppeltes Gleichungssystem von  $N + 1$  Sätzen von Transportgleichungen gelöst werden. Dieses Verfahren ist rechenintensiv, tendenziell instabil und führt häufig zu Konvergenzproblemen. Eine zusätzliche Komplexität erhält die numerische Simulation durch die Berücksichtigung der Partikelpopulationsdynamik [25, 26].

Lo et al. [45] schlugen mit dem homogenen *MUSIG*-Modell (*MU*ltiple-*SI*ze-

*Group*) einen Ansatz als Alternative zur Lösung von  $N$  Impulsgleichungen für  $N$  Klassen der Partikelphase vor. Dabei wird die Partikelgrößenverteilung durch  $N$  diskrete Größenklassen im Rahmen des Euler-Euler-Zweifluid Modells und der Populationsbilanzgleichung (PBG) repräsentiert und eine einzige Impulsgleichung für alle Partikelklassen gelöst. Möglich ist dies unter der Annahme, dass die strömungsmechanischen Eigenschaften der Partikel nicht stark variieren und allen Partikelklassen der polydispersen Größenverteilung ein gemeinsames Geschwindigkeitsfeld zugeordnet werden kann. Diese Annahme ist nur dann gerechtfertigt, wenn die Größenverteilung einen eingeschränkten Bereich von Partikelgrößen umfasst. Die Erfahrung zeigt auch, dass im Rahmen dieses Verfahren nur wenige, für die Diskretisierungsunabhängigkeit der Populationsbilanzgleichung unzureichende Anzahl der Partikelklassen betrachtet werden können, da die Populationsbilanzen in der numerischen Strömungsberechnung (CFD) diskretisiert und gelöst werden. Das „*Inhomogeneous MUSIG*“ Model von Frank et al. [22] löst mehrere Impulsgleichungen für die dispersen Partikelklassen (die Gesamtpartikelklassenanzahl  $N$  wird in  $M$  Klassenpakete – „*velocity groups*“ geteilt). Dennoch bleibt die Klassenanzahl aufgrund des hohen numerischen Aufwandes beschränkt, sodass eine diskretisierungsunabhängige Lösung der PBG nicht erreicht wird (siehe hierzu auch Abschnitt 3.2.4, in dem die Diskretisierungsfrage der Populationsgleichung diskutiert wird.)

Eine ausführliche Darstellung der Literatur sowie eine detaillierte Behandlung der Modellierungsmethoden für disperse Systeme würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen. An dieser Stelle sei jedoch auf die ausführliche Literaturzusammenstellung der Formulierungen und Korrelationen für die Zwischenphasenkräfte in dispersen Mehrphasenströmungen von Frank [24, 26, 28], Shi [25] sowie Tomiyama [68] hingewiesen. Eine Übersicht über die Anwendung der Populationsbilanzen findet man in [57, 58, 66] und eine allgemeine Übersicht über den Stand der Modellierungsmethoden von dispersen Zweiphasenströmung geben Tomiyama [68] und Frank [28].

## 2.2 Euler-Euler-Zweifluid Modell

Das Euler-Euler Zweifluid Modell wird vor allem in den letzten Jahren immer mehr als Alternative zum Euler-Lagrange Modell benutzt. Bei diesem Verfahren werden die Phasen als in Wechselwirkung stehende Kontinua (gegenseitiges Durchdringen der Phasen, englisch: *interpenetrating*) betrachtet und mit Kontinuumsbilanzgleichungen beschrieben. Die allgemeine Formulierung unterscheidet dabei die disperse Phase nicht von der kontinuierlichen Phase. Erst bei der Formulierung der Wechselwirkungsterme wird die disperse Phase charakterisiert und die Geometrie der Partikeln einbezogen. Da die Wechselwirkung für jede Phase und nicht wie beim Euler-Lagrange Modell für einzelne Partikelpakete berücksichtigt wird, wird in der Grundformulierung des Euler-Euler Modelles (mit einem Satz der Bilanzgleichungen für jede Phase) von einem monodispersen System ausgegangen, d.h. es wird ein mittlerer repräsentativen Durchmesser für alle beteiligten Partikeln angenommen. Möchte man eine disperse Phase mit verschiedenen Partikelgrößen oder -klassen betrachten, muss jede Partikelgrößenklasse als eigene Phase definiert werden und für jede disperse Phase ein Satz von Transportgleichungen gelöst werden.

### 2.2.1 Transport- und Erhaltungsgleichungen des Zweifluid-Modells

Im Rahmen der Eulerschen Beschreibung einer Mehrphasenströmung wird angenommen, dass sich die verschiedenen Phasen oder Fluide einer Mehrphasenströmung als sich gegenseitig durchdringende Kontinua beschreiben lassen. Lokal ist jedes der beteiligten Fluide durch einen Volumenanteile repräsentiert, wobei die Summe der Volumengehalte über alle Fluide oder Phasen für jeden Ort im Raum und jeden Zeitpunkt jeweils „1“ ergibt [28]. Unter diesen Voraussetzungen führt die Eulersche Mehrphasenmodellierung zu ensemble-gemittelten Transportgleichungen für Masse, Impuls und Energie für jede der beteiligten Phasen. Betrachtet man zunächst vereinfachend eine Zweiphasenströmung ohne Massen- und Energieaustausch, so erhält man ein partielles Differentialgleichungssystem aus zwei Kontinuitätsgleichungen

und zwei Navier-Stokes-Gleichungen [36].

### 2.2.1.1 Kontinuitätsgleichungen

Die Massenerhaltungsgleichungen für die disperse Partikelphase (Index  $p$ ) bzw. die kontinuierliche Phase (Index  $l$ ) lauten:

$$\frac{\partial(\alpha_p \rho_p)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_p \vec{u}_p) = 0. \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial(\alpha_l \rho_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{u}_l) = 0. \quad (2.2)$$

### 2.2.1.2 Impulsgleichungen

Die Impulsgleichungen für die disperse und kontinuierliche Phase lauten:

$$\frac{\partial(\alpha_p \rho_p \vec{u}_p)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_p \vec{u}_p \vec{u}_p) = -\alpha_p \nabla p + \alpha_p \nabla \cdot \hat{T}_l + \nabla \hat{T}_p^{Re} + \alpha_p \rho_p \vec{g} + \vec{F}_w. \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial(\alpha_l \rho_l \vec{u}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{u}_l \vec{u}_l) = -\alpha_l \nabla p + \alpha_l \nabla \cdot \hat{T}_l + \nabla \hat{T}_l^{Re} + \alpha_l \rho_l \vec{g} - \vec{F}_w. \quad (2.4)$$

Der Wechselwirkungsterm  $\vec{F}_w$  in der Impulsgleichung der Partikelphase beinhaltet die Summe aller Kräfte, die von den Partikeln auf die kontinuierliche Phase ausgeübt werden. Da diese Kräfte auf die kontinuierliche Phase in die entgegengesetzte Richtung wirken, geht der Quellterm  $\vec{F}_w$  in der Impulsbilanz für die kontinuierliche Phase mit einem negativen Vorzeichen ein. Im Abschnitt 2.6 wird auf die wichtigste partikelgrößenabhängige Zwischenphasenkraft, die Widerstandskraft, als auch die sogenannten „*non-drag*“-Kräfte eingegangen. Der Term  $\alpha_l \nabla \cdot \hat{T}_l$  in Gl. 2.4 stellt den molekularen Impulstransport in der Flüssigphase dar. Die Größe  $\hat{T}_l$  ist dabei der Schubspannungstensor und wird wie folgt definiert:

$$(T_l)_{ij} = \mu_l \left( \frac{\partial(\vec{u}_l)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(\vec{u}_l)_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial(\vec{u}_l)_n}{\partial x_n} \right), \quad (2.5)$$

wobei  $\mu_l$  die laminare Viskosität der kontinuierlichen Phase ist. Ein ähnlicher Term, gewichtet mit  $\alpha_p$ , tritt auch in der Partikelphase auf. Der Tensor der Reynoldsschen Scheinspannung  $\hat{T}_p^{Re} = -\alpha_p \rho_p \overline{u'_p u'_p}$  bedarf einer Modellierung durch ein Turbulenzmodell. An dieser Stelle wird nicht auf die Turbulenzmodellierung von Zweiphasenströmungen eingegangen. Es sei jedoch erwähnt, dass phasenbezogene Turbulenzmodelle möglich sind und für beide Phasen verschiedene Turbulenzmodelle verwendet werden können. Bezüglich einer detaillierten Darstellung zur Turbulenzmodellierung mehrphasigen Strömungen sei auf [2] verwiesen. Die Konvektionsterme in den Impulsgleichungen  $\nabla \cdot (\alpha_p \rho_p \vec{u}_p \vec{u}_p)$  sind in der Form  $\alpha_p \rho_p (\vec{u}_p \nabla \cdot \vec{u}_p)$  bzw. für die Flüssigphase  $\alpha_l \rho_l (\vec{u}_l \nabla \cdot \vec{u}_l)$  zu interpretieren.

## 2.2.2 Impulsaustausch zwischen den Phasen

### 2.2.2.1 Widerstandskraft der Partikel

Die Widerstandskraft eines kugelförmigen Einzelpartikels, die das Partikel aufgrund seiner Relativbewegung der kontinuierlichen Phase entgegen setzt, lässt sich wie folgt darstellen:

$$\vec{F}_D = \frac{3}{4} \frac{\rho_l}{\rho_p D_p} m_p c_D (\vec{u}_l - \vec{u}_p) |\vec{u}_l - \vec{u}_p|, \quad (2.6)$$

wobei  $\vec{u}_p$  und  $\vec{u}_l$  die Geschwindigkeiten des Partikels bzw. der kontinuierlichen Phase sind. Der Widerstandsbeiwert  $c_D$  ist eine Funktion der Partikel-Reynolds-Zahl. Diese wird wie folgt berechnet:

$$Re_p = \frac{\rho_p D_p |\vec{u}_l - \vec{u}_p|}{\eta_l}, \quad (2.7)$$

wobei  $\eta_l$  die kinematische Viskosität der kontinuierlichen Phase ist.

In diesem Abschnitt wird das Hauptaugenmerk auf die in der Literatur vorgeschlagenen  $c_D$ -Korrelationen für Gasblasen gerichtet, da das in dieser Arbeit entwickelte Momenten-Modell auf Blasen-Flüssigkeitsströmungen angewendet und daran validiert wird.

Für große Werte von  $Re_p$  und kugelförmige, nicht-deformierbare sehr kleine

Blasen kann die Standard-Beziehung nach Schiller-Naumann verwendet werden [2, 31]:

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} \left( 1 + \frac{Re_p^{2/3}}{6} \right) & , \text{ für } Re_p < 1000, \\ 0.44 & , \text{ für } Re_p > 1000. \end{cases} \quad (2.8)$$

Ishii und Zuber [37] schlugen eine Korrelation für größere Blasen vor, die für verschiedene Blasenströmungsregime und Gasvolumenanteile formuliert ist:

$$C_D = \begin{cases} \frac{2}{3} D_p \sqrt{\frac{g \Delta \rho_l}{\sigma}} \left\{ \frac{1 + 17.67 f(\alpha_g)^{\frac{6}{7}}}{18.67 f(\alpha_g)} \right\}^2 & , \text{ für } \alpha_g \leq 0.3; \text{ mit } f(\alpha_g) = (1 - \alpha_g)^{1.5}, \\ \frac{2}{3} D_p \sqrt{\frac{g \Delta \rho_l}{\sigma}} \left\{ \frac{1 + 17.67 f(\alpha_g)^{\frac{6}{7}}}{18.67 f(\alpha_g)} \right\}^2 & , \text{ für } \alpha_g \geq 0.7; \text{ mit } f(\alpha_g) = (\alpha_g)^{3.0}, \\ \frac{8}{3} \alpha_l^2 & , \text{ für } 0.3 < \alpha_g < 0.7. \end{cases} \quad (2.9)$$

Dieses Modell ist im CFD-Programm CFX-11 [2] implementiert und wurde bereits von Mourud [52] zur Blasen-Flüssigkeitsströmungen in Blasensäulen und Rührkesseln verwendet.

### 2.2.2.2 „Non-Drag“-Kräfte

In der Literatur wird der Begriff „Non-Drag-Kräfte“ als Bezeichnung für alle andere Partikelkräfte außer der Widerstandskraft verwendet. Im Weiteren werden die Kräfte aufgelistet, die am häufigsten in Modellen für Blasenströmungen berücksichtigt werden, um aufzuzeigen, welche Größen benötigt werden, um diese Kräfte zu berechnen und in welcher Form sie in den Transportgleichungen des entwickelten Modells erscheinen. Die Relevanz der einzelnen „Non-Drag“-Kräfte für die Beschreibung des Blasenverhaltens im beagsten Rührkessel wird im Kapitel (4) diskutiert.

**Die virtuelle Masse – *virtual mass force* ( $F_{VM}$ )**

Falls eine Gasblase relativ zu der Flüssigphase beschleunigt wird (keine konstante Schlupfgeschwindigkeit), wird ein Teil der Flüssigkeit mitbeschleunigt. Die dabei auftretende zusätzliche Trägheitskraft der Flüssigkeit bremst die Gasblase entsprechend ab. Dieser Einfluss wird durch die sog. „*virtual mass force*“ beschrieben:

$$\vec{F}_{VM} = -C_{VM} V_p \rho_l \frac{D\vec{u}_{slip}}{Dt}. \quad (2.10)$$

Die Größe  $C_{VM}$  beschreibt den Volumenanteil der mitgenommenen Flüssigkeit relativ zu dem Blasenvolumen. Auch für den  $C_{VM}$ -Wert werden in der Literatur verschiedene Korrelationen angegeben. Bei einem niedrigen Volumenanteil der dispersen Phase ist der Wert  $C_{VM} = 0,5$  üblich. Cook et al. [13] verwendet für die Gasblasen in der Flüssigkeit den Wert  $C_{VM} = 0,25$  mit der Begründung, dass im Falle einer Gasblase die Masse der mitgenommenen Flüssigkeit halb so groß ist, wie im Falle eines starren Partikels.

**Die laterale Auftriebskraft – *shear-induced lift force* ( $F_l$ )**

Wird eine starre kugelförmige Blase von einem ungleichmäßigen Strömungsfeld angeströmt, so wirkt auf diese Blase die *laterale Auftriebskraft* in der quer zu der Hauptströmung liegenden Richtung, die einerseits aus der Rotation der Blase und andererseits aus der unterschiedlichen Druckverteilung um die rotierende Blase resultiert. Berechnet wird diese Kraft aus der Schlupfgeschwindigkeit und der Rotation der Flüssigphase:

$$\vec{F}_l = \alpha_p \rho_l C_l (\vec{u}_p - \vec{u}_l) \times (\vec{\nabla} \times \vec{u}_l). \quad (2.11)$$

Der dimensionslose Auftriebskraft Koeffizienten  $C_l$  hängt stark von der Blasengröße ab und ändert nach Tomiyama [68] für Luft-Wasser Strömungen bei einem Blasendurchmesser von ca.  $D_{krit} = 5,8$  mm sein Vorzeichen. In der aufwärtsgerichteten Rohrströmung wirkt die Lift-Kraft für Blasen mit  $D < D_{krit}$  in Richtung Rohrwand, für größere Blasen ( $D > D_{krit}$ ) hingegen in Richtung

Rohrmitte. Für  $C_l$  sind verschiedene empirische Ansätze in der Literatur zu finden [2, 28, 68]. Für reibungsfreie Strömungen wird der Wert von  $C_l$  mit 0,5 und für viskose Strömung mit 0,01 angenommen [2].

Die Auftriebskraft ist proportional zur Dichte der Flüssigphasen und Phasenscherrate. Daher ist sie signifikant, wenn  $\rho_p \leq \rho_l$  bzw. in Scherschichten mit einer zum Partikeldurchmesser vergleichbaren Breite. Die Auftriebskraft ist z.B. von Bedeutung für Blasenströmungen in vertikalen Rohren, wie bereits erläutert. Lo [45] schätzte den Einfluss dieser Kraft auf die Luftblasen in begasten Rührkesseln als irrelevant ein und vernachlässigte sie in seiner Rührkesselströmungssimulation.

### **Turbulente Dispersionskraft ( $F_T$ )**

Diese Kraft ist von der Intensität der Turbulenz in der Flüssigphase und dem Gradienten des Volumenanteils abhängig. Diese Kraftwirkung kann als eine über den Blasenwiderstand vermittelte Wirkung der turbulenten Wirbelbewegung des Fluids auf die Einzelblase verstanden werden. Eine Herleitung eines mathematischen Modells für die turbulente Dispersionskraft findet man in [26]. Nach Lopez de Bertodano et al. [15] lautet die Formel zur Ermittlung der turbulenten Dispersionskraft

$$\vec{F}_{TD} = -C_{TD}\rho_l k_l \nabla \alpha_l, \quad (2.12)$$

wobei verschiedene Werte für den Koeffizient dieser Kraft ( $C_{TD} \approx 0,1 \dots 0,5$ ) verwendet wurden. Mit diesen  $C_{TD}$ -Werten zeigte das Modell von Lopez de Bertodano akzeptable Übereinstimmungen mit Experimenten für sehr kleine Blasendurchmesser [2]. Burns et al. [11] formulierte eine weitere Korrelation der turbulenten Dispersionskraft:

$$\vec{F}_{TD} = C_{TD} C_{pl} \frac{\nu_{t_l}}{\sigma_{t_l}} \left( \frac{\nabla \alpha_p}{\alpha_p} - \frac{\nabla \alpha_l}{\alpha_l} \right). \quad (2.13)$$

$C_{pl}$  ist der Impulsaustauschkoeffizient der Zwischenphasenwiderstandskraft und  $\nu_{t_l}$  und  $\sigma_{t_l}$  sind die turbulente kinematische Viskosität bzw. die turbulente Schmidt-Zahl der kontinuierlichen Phase [2]. Weitere Details der Modellierung dieser Kraft können in [26] nachgelesen werden.

### **Wandkraft – *wall lubrication force***

Die Wandkraft berücksichtigt die Abstoßungskraft auf eine Blase in der Wandnähe, die durch die Oberflächenspannung und die asymmetrische Anströmung der Blase in Wandnähe durch Wandgrenzschichten verursacht wird. Sie wirkt in Normalrichtung von der Wand weg. Diese Kraft ist per Definition lediglich in wandnahen Bereichen aktiv. Typisch ist ein Wandabstand von  $y_w \leq 5D_p$ . Dieser kleine Abstand stellt hohe Ansprüche an die Rechennetauflösung, insbesondere in Wandnähe. Eine numerische Konvergenz für diese Kraft erreicht man nur mit sehr feinen Rechennetzen, sofern das CFD Programm diese Kraft überhaupt berücksichtigt [2]. Sie besitzt keine physikalische Bedeutung und bilanziert lediglich den von der Lift-Kraft in Wandrichtung ausgeübten Blasenanstoß. Somit verhindert man die nicht-physikalische Konzentration der Gasphase an der Wand. Aufgrund des sehr hohen numerischen Aufwands wird sie hier nicht berücksichtigt. Mathematische Ansätze für die quantitative Beschreibung der Wandkraft finden sich bei Antal, Tomiyama und Frank [3].

### **2.2.3 Schließung des Modells**

Das Gleichungssystem des Euler-Euler Zwei-Fluid Modells wird, einerseits durch eine algebraische Beziehung geschlossen, die besagt, dass die Summe der Volumenanteile von Gas- und Flüssigphase am Gesamtvolumen des Zweiphasengemisches gleich 1 sein muss ( $\alpha_g + \alpha_l = 1$ ), andererseits wird angenommen, dass der Druck beider Phasen gleich ist ( $p_g = p_l = p$ ).

## **2.3 Partikelgrößenverteilung**

### **2.3.1 Partikelgrößenverteilung und Verteilungsfunktionen**

Der Begriff der Partikelgrößenverteilung ist der Statistik entliehen, in der Häufigkeiten und Häufigkeitsverteilungen eine beliebigen Eigenschaft betrachtet

werden. Im Allgemeinen unterscheiden sich Partikel eines Partikelkollektives hinsichtlich mehrerer Eigenschaften, wie Größe, Masse, Dichte und Form. Aus der allgemeinen Häufigkeitsverteilung der Statistik entsteht somit die Partikelgrößenverteilung. In den meisten Fällen lässt sich die Vielfalt nicht durch einen Mittelwert beschreiben. Bekannt ist die Beschreibung der Partikelverteilung durch so genannte Verteilungsfunktionen. Die Partikel einer dispersen Phase (Tropfen oder Blasen) werden mit Hilfe eines zu messenden Äquivalentdurchmessers in Partikelklassen unterschieden und eingeordnet. Zur Darstellung einer Partikelgrößenverteilung werden die Mengenanteile bestimmt, mit denen die jeweiligen Partikelklassen an der dispersen Phase beteiligt sind. Die Partikeleigenschaften dienen zum Vergleich der Partikel untereinander. Je nach Mess- oder Modellierungsverfahren werden unterschiedliche Partikeleigenschaften erfasst:

- Geometrische Eigenschaften : bei sphärischen Partikeln ist dies der Durchmesser, ansonsten gibt es vielfältige Definitionsmöglichkeiten, beispielsweise längste bzw. kürzeste Sehnenlänge, Oberfläche, Projektionsfläche, Volumen, etc.
- Partikelmasse
- Sonstige Eigenschaften, wie z.B. Partikelträgheit oder Partikelgeschwindigkeit.

Bei der quantitativen Darstellung der Partikelgrößenverteilung mittels einer Funktion unterscheidet man zwischen Verteilungssumme und Verteilungsdichte. In der folgenden Diskussion wird der Partikeldurchmesser  $D_p$  als Eigenschaft betrachtet:

- Die *Verteilungsfunktion* (oder auch *Verteilungssumme*) gibt den Mengenanteil der Partikel an, deren Eigenschaftsgröße  $D_p$  kleiner oder gleich einer bestimmten Größe  $D$  ist:

$$F(D) = \frac{\text{Menge aller Partikel der Eigenschaft: } D_p < D}{\text{Menge aller Partikel}} \quad (2.14)$$

Die Verteilungsfunktion muss immer in dem Bereich  $[0, 1]$  liegen und ist stets monoton wachsend sein. Es gilt  $F(D_{min}) = 0$  und  $F(D_{max}) = 1$ .

- Die *Anzahldichteverteilung* bezeichnet den Mengenanteil der Partikel, die in ein bestimmtes Partikelgrößenintervall fällt, bezogen auf die Intervallbreite:

$$f(D) = \frac{\text{Menge aller Partikel der Eigenschaft: } (D - \frac{\Delta D}{2}) < D_P < (D + \frac{\Delta D}{2})}{\text{Menge aller Partikel} \cdot \Delta D} \quad (2.15)$$

Die Verteilungsdichte ist stets dimensionsbehaftet und abhängig von dem gewählten Eigenschaft. Aus den obigen Gleichungen 2.14 folgt:

$$f(D) = \frac{F(D + \frac{\Delta D}{2}) - F(D - \frac{\Delta D}{2})}{\Delta D} \quad (2.16)$$

Experimentell ermittelte Verteilungsfunktionen können in der Regel nur punktuell, d.h. für diskrete Intervalle angegeben werden. Gebräuchlich ist dabei die Darstellung der Verteilungsdichte mittels Histogramm, in dem die absolute Anzahl oder der prozentuale Anteil der Partikel eines Kollektives, die innerhalb eines bestimmten Eigenschaftsbereichs liegen, als Funktion dieser Eigenschaft aufgetragen ist. Oft wird die diskrete Verteilung durch eine stetig differenzierbare Verteilungsfunktion approximiert. Dabei wird die Verteilungsdichte stets für die Intervallmitte angegeben, die Verteilungssumme jedoch für die rechte Intervallgrenze (Abbildung (2.2)). Eine solche Approximation ergibt sich aus Gleichung (2.16) durch den Grenzübergang  $\Delta D \rightarrow 0$ :

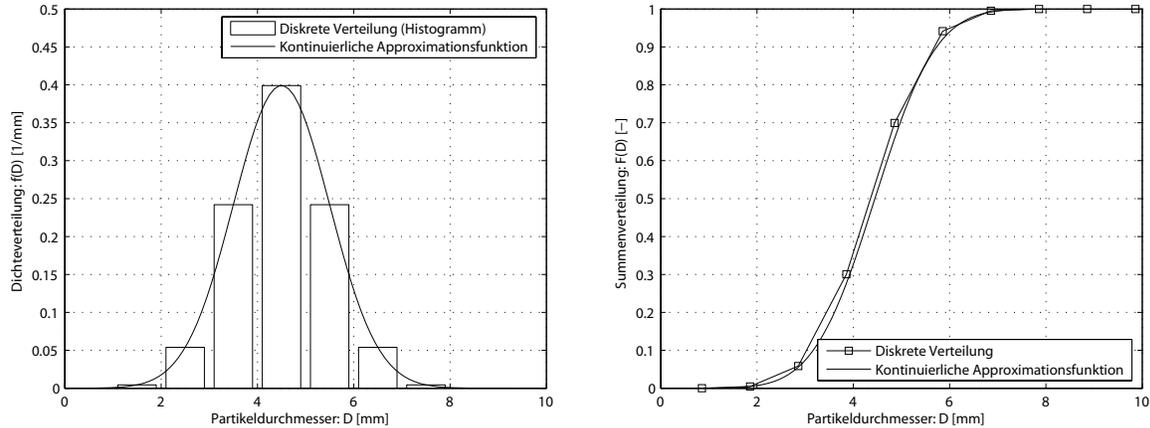
$$f(D) = \frac{dF(D)}{dD} \quad \text{und} \quad F(D_P) = \int_{D_{min}}^{D_P} f(D) dD, \quad (2.17)$$

und es folgt unmittelbar:

$$\int_{D_1}^{D_2} f(D) dD = F(D_2) - F(D_1) \quad \text{und} \quad \int_{D_{min}}^{D_{max}} f(D) dD = 1. \quad (2.18)$$

### 2.3.1.1 Angenommene Verteilungsfunktionen

In der Statistik ist eine theoretische Verteilung die mathematische Formulierung, die die probabilistischen Eigenschaften der vorliegenden Zufallsvaria-



**Abbildung 2.2:** Darstellung von Verteilungs- und Summenfunktionen als diskrete und kontinuierliche Funktionen

ble beschreibt. In der Regel ist dies eine Idealisierung der tatsächlichen Verteilung. Meist handelt es sich um eine unbekannte Verteilung und sie wird deshalb theoretisch angenähert. Sie repräsentiert die vorhandenen Daten somit nur approximativ, auch wenn die Näherung tatsächlich sehr gut sein kann. Sie ist auch als *angenommene* Verteilungsfunktion (englisch: *presumed Probability Density Function pPDF*) bekannt. Die pPDFs sind in der Prozessmodellierung der Fluidodynamik weitverbreitet, da die meisten Fluidprozesse stochastischer Natur sind und die PDFs ein einfaches mathematisches Werkzeug zur Beschreibung dieser komplexen Prozesse sind. Sie geben einen Einblick in das Verhalten der Strömungsvariablen und es fällt somit leichter, das geeignete theoretische Modell für die Zufallsvariablen zu wählen bzw. zu entwickeln.

Eine besondere Eigenschaft ist, dass theoretische Verteilungen durch einige wenige Parameter vollständig festgelegt sind und somit auch parametrische Verteilungen genannt werden. So ist z.B. die Gauß-Normalverteilung eindeutig bestimmt, wenn die Verteilungsparameter Erwartungswert  $\mu$  und Varianz  $\sigma^2$  bekannt sind. Neben der Gauß-Verteilung sind folgende Verteilungen gebräuchlich in der Modellierung von Strömungsvorgängen: Log-normal-, Rosin-Rammler-Verteilung und die Beta-Funktion. Nachfolgend werden die Gauss-Verteilung bzw. deren gestutzte Form und die  $\beta$ -Verteilung näher betrachtet, da sie im Rahmen des hier entwickelten Momenten-Modell zur Beschreibung der Partikelgrößenverteilung verwendet werden.

### 2.3.1.2 Momente der Verteilungsfunktionen

In der Statistik sind *Momente* die Parameter einer Verteilungsfunktion. Sie entsprechen den Parametern der deskriptiven Statistik. Die Begriffe Erwartungswert, Varianz, Schiefe und Wölbung zur Beschreibung der Funktion ergeben sich aus den sog. zentralen Momenten. Wie bereits erwähnt, ist eine Verteilungsfunktion durch die Angabe aller ihrer Momente bestimmt, falls diese existieren. Der Erwartungswert einer Verteilungsfunktion, das erste Moment (Mittelwert  $\mu$ ) und ihr zweites Moment (die Varianz  $\sigma^2$ ) sind definiert als:

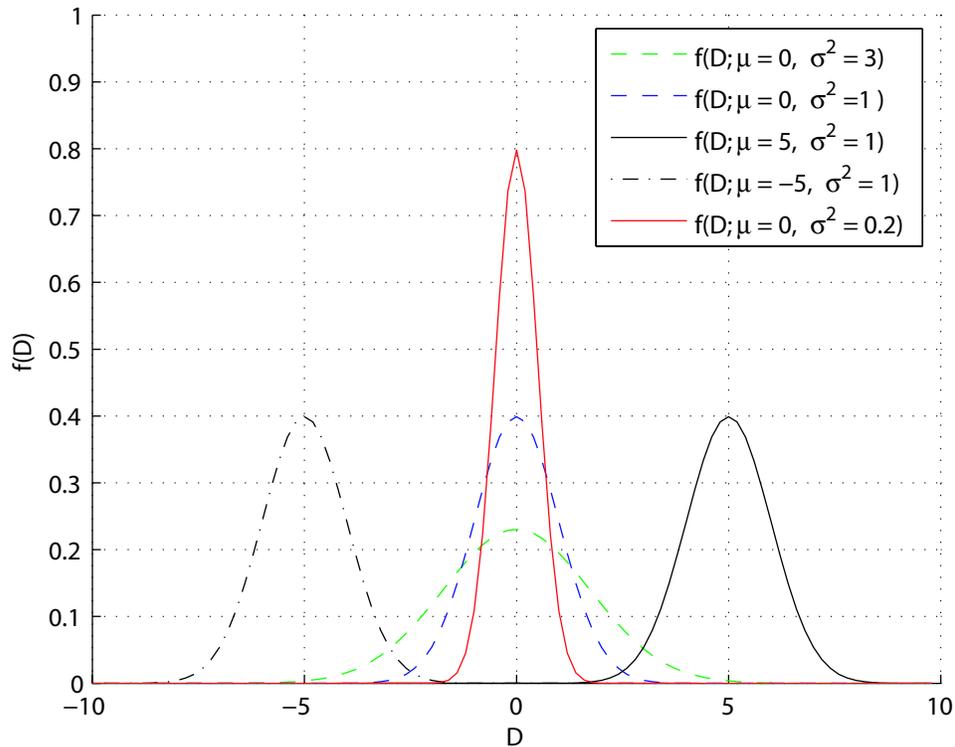
$$\mu = \int_{-\infty}^{\infty} D f(D) dD \quad \text{bzw.} \quad \sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (D - \mu)^2 f(D) dD. \quad (2.19)$$

### 2.3.1.3 Wichtige angenommene Verteilungsfunktionen:

- **Die Normalverteilung** ist die wichtigste kontinuierliche Wahrscheinlichkeitsverteilung. Ihre Wahrscheinlichkeitsdichte wird auch Gauß-Funktion, Gauß-Kurve oder Glockenkurve genannt. Die besondere Bedeutung der Normalverteilung beruht unter anderem auf dem zentralen Grenzwertsatz, der besagt, dass eine Summe von  $n$  unabhängigen, identisch verteilten Zufallsvariablen in der Grenze  $n \rightarrow \infty$  normalverteilt ist. Die Normalverteilung ist durch die Wahrscheinlichkeitsdichte gegeben:

$$f(D) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{D-\mu}{\sigma}\right)^2}, \quad (2.20)$$

wobei  $\sigma$  die Standardabweichung (bzw.  $\sigma^2$  die Varianz) und  $\mu$  der Erwartungswert ist. Ist der Erwartungswert 0 und die Standardabweichung 1, so spricht man von einer standardnormalverteilten Variable. Eine normalverteilte Zufallsvariable  $D$  mit beliebigen Parametern kann mittels der Transformation  $Z = \frac{D-\mu}{\sigma}$  in eine standardnormalverteilte Variable  $Z$  überführt werden. In Abbildung (2.3) sind verschiedene Dichtefunktionen der Normalverteilung bzw. Standardnormalverteilung ( $\mu = 0$ ) dargestellt.



**Abbildung 2.3:** Dichtefunktionen von Normalverteilungen

- **Die  $\beta$ -Verteilung:** Die  $\beta$ -Verteilung ist eine kontinuierliche Wahrscheinlichkeitsverteilung über das Intervall  $[0, 1]$ . Sie ist definiert durch die Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$f(D) = \frac{1}{B(p, q)} e^{p-1(1-D)^{q-1}}. \quad (2.21)$$

Außerhalb des Intervalls  $[0, 1]$  wird sie durch  $f(D) = 0$  fortgesetzt. Sie besitzt die Parameter  $p$  und  $q$ . Um ihre Normierbarkeit zu garantieren, wird  $p, q > 0$  gefordert. Der Vorfaktor  $1/B(p, q)$  in Gleichung (2.21) dient der korrekten Normierung. Der Ausdruck:

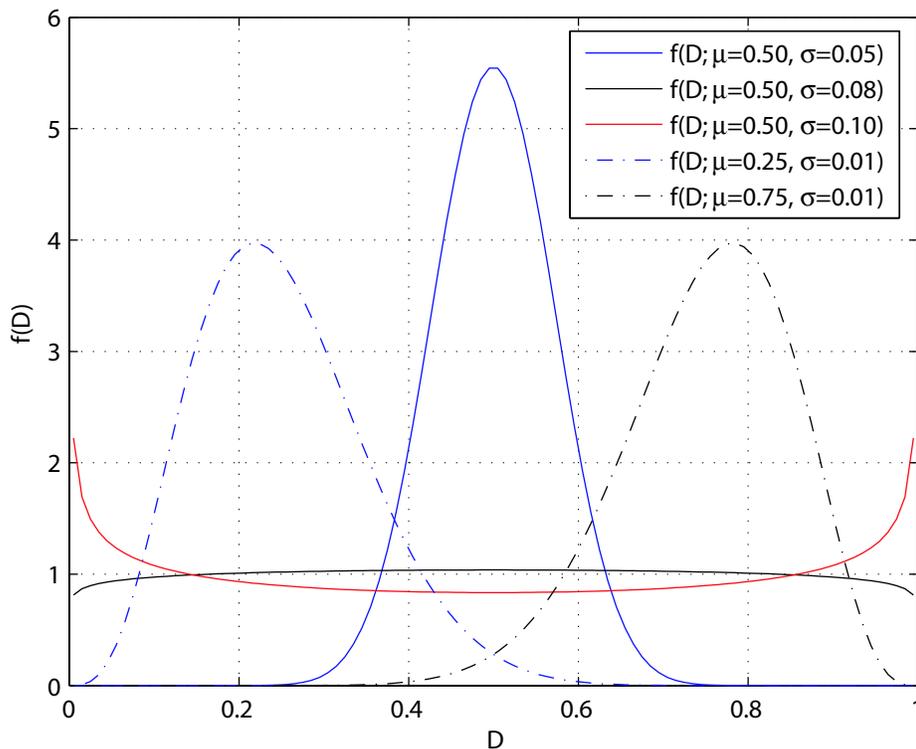
$$B(p, q) = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)} = \int_0^1 u^{p-1}(1-u)^{q-1} du. \quad (2.22)$$

steht für die  $\beta$ -Funktion, nach der die Verteilung auch benannt ist, und  $\Gamma(p)$  steht für die Gammafunktion. Typische  $\beta$ -

Verteilungsdichtefunktionen für verschiedene Parameter  $(p, q)$  sind in Abbildung (2.4) dargestellt.

Erwartungswert und Varianz der *Beta*-Verteilung sind:

$$E(D) = \frac{(p)}{(p+q)} \quad \text{und} \quad V(D) = \frac{(pq)}{(p+q+1)(p+q)^2}. \quad (2.23)$$

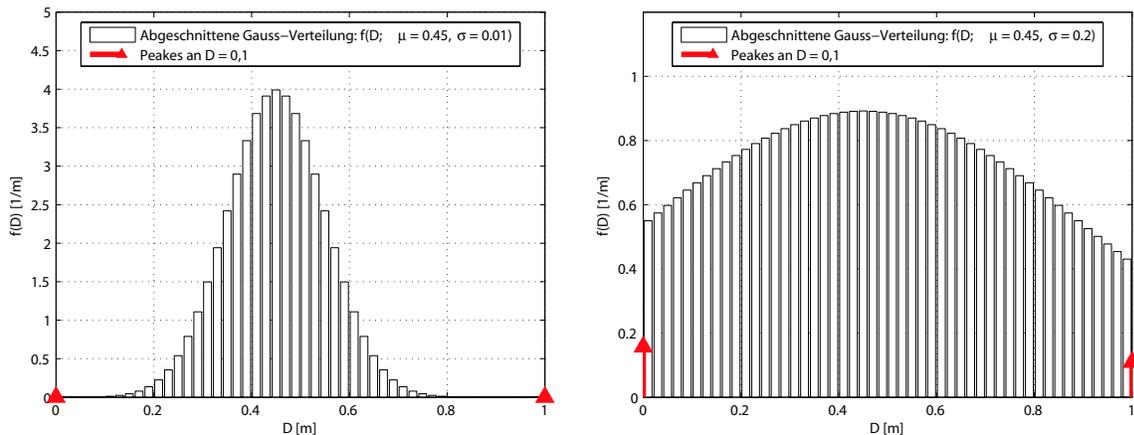


**Abbildung 2.4:** Typische  $\beta$ -Verteilungsdichtefunktionen für verschiedene Parameter  $(p, q)$

- **Die gestutzte Gaußsche Funktion (*clipped Gaussian function*):**

Spannt man die Gauß-Funktion in Gleichung (2.20) nur zwischen einem minimalen Wert, z.B. minimalen Partikeldurchmesser  $D_{min}$  und einem maximalen Wert  $D_{max}$ , erhält man eine abgeschnittene Funktionsform (eng.: *clipped*) mit zwei Spitzenwerten (engl. *peaks*) bei  $D_{min}$  und  $D_{max}$ .

In Abbildung (2.5) ist eine normierte gestutzte Gaußfunktion für den selben Erwartungswert  $\mu$  und unterschiedliche Werte der Varianz  $\sigma^2$ - dargestellt. Die abgeschnittenen Anteile der Gaußverteilung bzw. die Spitzenwerte lassen sich mit Hilfe der komplementären Fehler-Funktion berechnen. Die Momente der resultierenden gestutzten Funktion  $\bar{D}$  und  $Var$  weichen dann von den Parametern der Normalverteilung  $\mu$  und  $\sigma^2$  ab. Die gestutzte Gauß-Verteilung ist in der Anwendung für das Momenten-Modell in Abschnitt (3.2.3.3) detailliert beschrieben.



**Abbildung 2.5:** Gestutzte Gauß-Verteilung für zwei Sätze von Momenten

### 2.3.2 Populationsbilanzgleichung (PBG)

Die Populationsbilanzgleichung (PBG) ist eine verbreitete Modellierungsmethode zur Beschreibung der Evolution von Partikelgrößenverteilungen in dispersen Strömungssystemen. Smoluchowski setzte sie bereits im Jahr 1916 zur Beschreibung von Koagulationsprozessen ein [69]. Sie ist später von Hulburt und Katz im Jahr 1964 für die Anwendung disperser Mehrphasenströmungen benutzt [35], von Randolph [63] weiter entwickelt und von Williams [72] (als Spraygleichung bezeichnet) für die Spraymodellierung angewendet worden. Eine ausführliche Studie der Anwendung von PBG zur Beschreibung disperser Mehrphasenströmungen stellte Ramkrishna in [57] zusammen.

Die PBG als Erhaltungsgleichung für die Partikelanzahldichte  $f$  bilanziert die konvektiven Flüsse über die räumlichen Kontrollvolumengrenzen und die Flüsse über Intervallgrenzen von Eigenschaftskordinaten aufgrund der Veränderung von Partikeleigenschaften. In der Populationsbilanzgleichung zur Beschreibung disperser Systeme wird die disperse Phase durch eine Verteilungsfunktion in Raum, Zeit und Eigenschaftskordinate (Partikelmasse, -volumen bzw. -durchmesser) beschrieben. Somit ergibt sich der Partikelzustandsvektor  $\vec{c} = (\vec{D}_p, \vec{x})$  für den Partikelzustandsraum  $V_c$  mit der Ortskoordinate  $\vec{x}$  und dem Partikeldurchmesser  $\vec{D}_p$  als Eigenschaftskordinate. Der Zustand der Population wird dann durch die Partikelanzahldichte  $f(\vec{D}_p; \vec{x}, t)$  charakterisiert [27]:

$$f(\vec{D}; \vec{x}, t) = \frac{dN}{dV_c} = \frac{dN}{dV_x dD_p} = \frac{dN}{dx_1 dx_2 dx_3 dD_p} \quad (2.24)$$

Die allgemeine Form der Populationsbilanzgleichung für den Partikeldurchmesser als Eigenschaftskordinate kann folgendermaßen geschrieben werden (vgl. [54]):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla(\vec{u}f) + \sum_i \frac{\partial}{\partial \vec{D}_p} \left( \frac{\partial \vec{D}_p}{\partial t} f \right) = S_B - S_D. \quad (2.25)$$

Der erste Term beschreibt die zeitliche Änderung der Partikelgrößenverteilung, während der zweite Term deren Änderung infolge der konvektiven Durchströmung des Kontrollvolumens charakterisiert. Die Größe  $\vec{u}$  ist hier die partikelgrößenabhängige Partikelgeschwindigkeit. Der dritte Term entspricht der Konvektion entlang der Eigenschaftskordinate  $\vec{D}_p$ , die beispielsweise die Partikelgrößenänderung infolge des Stoffaustausches beschreibt. Der Quell- und Senkterme auf der rechten Gleichungsseite  $S_B$  und  $S_D$  stehen für das Entstehen (B=Birth) oder das Verschwinden (D=Death) von Partikeln oder die diskontinuierliche Änderung von  $\vec{D}_p$  z.B. die Partikelgrößenänderung infolge der Dispersion und Koaleszen der Partikel.

Die Anzahldichtefunktion  $f(\vec{D}_p; \vec{x}, t)$  dient der lokalen Beschreibung der dispersen Phase zu einem bestimmten Zeitpunkt. Die Einheit von  $f$  ist:

$$[f(\vec{D}_p; \vec{x}, t)] = \frac{\text{Anzahl}}{m^3 m} \quad (2.26)$$

Die Größe  $N(t)$  gibt dann die Gesamtanzahl der Partikeln an, die sich zum Zeitpunkt  $t$  im Volumen  $V_{\vec{D}_p}$  im Raum der Eigenschaftskordinaten und  $V_{\vec{x}}$  im Raum der Ortskoordinaten befinden:

$$N(t) = \int_{V_{\vec{x}}} \int_{V_{\vec{D}_p}} f(\vec{D}_p; \vec{x}, t) dV_{\vec{D}_p} dV_{\vec{x}}. \quad (2.27)$$

Betrachtet man die Größe von kugelförmigen dispersen Partikel als *ortsunabhängige* Eigenschaftskordinate, dann kann  $f(\vec{D}_p; \vec{x}, t)$  für die Eigenschaftskordinate Partikeldurchmesser zu  $f(D_p, t)$  vereinfacht werden. Die Gesamtzahl der ortsunabhängigen Partikel im betrachteten Kontrollvolumen ergibt sich aus der Integration:

$$N(t) = \int_{D_{min}}^{D_{max}} f(D_p, t) dD_p. \quad (2.28)$$

Analog dazu ergibt sich die Anzahldichtefunktion  $f_{V_p}(V_p, t)$  für das Partikelvolumen als *ortsunabhängige* Eigenschaftskordinate mit der Einheiten:

$$[f_{V_p}(V_p, t)] = \frac{\text{Anzahl}}{m^3 m^3} \quad (2.29)$$

und der Gesamtzahl der ortsunabhängigen Partikel im Kontrollvolumen:

$$N(t) = \int_{V_{min}}^{V_{max}} f_{V_p}(V_p, t) dV_p. \quad (2.30)$$

Mit dem Faktor  $k_{vd}$  kann die Formulierung der Populationsbilanzen der Partikeln transformiert werden:

$$V_p = k_{vd} D_p^3 \quad \text{bzw.} \quad m_p = k_{vd} D_p^3 \rho_p, \quad (2.31)$$

wobei  $k_{vd} = \pi/6$  für kugelförmige Partikel ist. Für das differentielle Volumen  $dV_p$  folgt dann:  $dV_p = 3k_{vd} D_p^2 dD_p$ . Aus Gleichung (2.28) und (2.30) ergibt sich die Verknüpfung der beiden Anzahldichtefunktionen  $f_{V_p}$  und  $f$ :

$$f_{V_p}(V_p, t) = \frac{f_{D_p}(D_p, t)}{3k_{vd} D_p^2}. \quad (2.32)$$

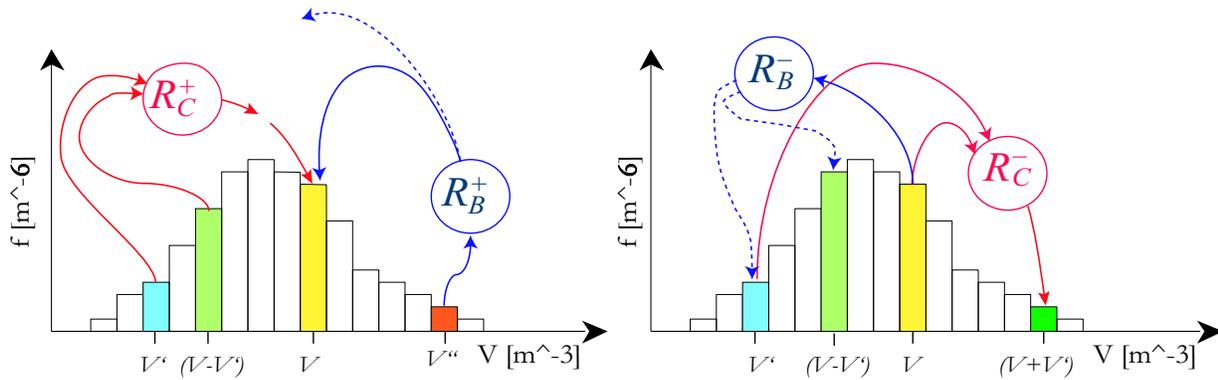
Analytische Lösungen dieser PBG (2.25) sind nur unter speziellen Annahmen und Vereinfachungen möglich, die die Anwendbarkeit der Populationsbilanzmethode beschränken [50]. Für die genaue Beschreibung der Dispersphase ist daher eine Einteilung der Größenverteilung in Größenklassen (*Klassenmethode*) notwendig, wobei jede Partikelklasse als eigene Phase betrachtet werden muss. Das entstehende Gleichungssystem wird dann numerisch gelöst. Nur so können alle von der Partikelgröße abhängigen Wechselwirkungskräfte richtig bestimmt werden. Der numerische Aufwand, der sich aufgrund einer realistischen Klasseneinteilung in der Größenordnung von 50-100 Klassen für die Partikeldurchmesser ergibt (siehe hierzu Abschnitt 3.2.4), ist derzeit nicht zu handhaben. Diese gilt insbesondere dann, wenn es wegen unterschiedlicher physikalischer Prozesse, z.B. Zerfall oder Koaleszenz, zu einer Änderung der Größenverteilung und dadurch zu einer Kopplung zwischen den Bilanzen der einzelnen Partikelklassen kommt [54].

Eine erfolgreiche Anwendung der PBG Modellierungsmethode setzt die Kenntnis der Funktionen für Partikelbildung, Partikelkoaleszenz and Partikelzerfall voraus, mit denen die Terme  $S_B$  und  $S_D$  in Gleichung (2.25) formuliert werden. Im Abschnitt 2.4 wird auf die Prozesse der Blasenkoaleszenz und des Blasenzerfalls und deren Modellierungsmethoden eingegangen. Speziell die Bestimmung der Terme  $S_B$  und  $S_D$ , die für die Anwendung des hier entwickelten Modelles an dispersen Gasblasen-Flüssigkeits-Zweiphasenströmung von Bedeutung sind, wird erläutert.

## 2.4 Blasenkoaleszenz und -zerfall

Die Bedeutung der Quell- und Senkenterme in der PBG (2.25) kann anhand der Abbildung 2.6 beleuchtet werden. In dieser Abbildung ist das Partikelgrößenspektrum in Partikelvolumenklassen äquidistant diskretisiert. Es können vier Prozesse unterschieden werden, die zur diskontinuierlichen Blasengrößenänderung im dispersen Luftblasen-Flüssigkeitssystem führen. Diese Prozesse können als Quelle oder Senke

in der betrachteten Blasengrößenklasse dargestellt werden. Dabei wird vereinfachend davon ausgegangen, dass Koaleszenz lediglich zwischen zwei Partikel stattfindet und beim Zerteilen der Blase nur zwei Partikel entstehen:



**Abbildung 2.6:** Quellterm  $S_B$  und Senkenterm  $S_D$  der PBG

- **Quelle:** Blasen der Größe  $V$  können infolge von Koaleszenz zweier Blasen der Größe  $V'$  und  $V - V'$  oder durch Zerfall größerer Blasen  $V''$  gebildet werden (Abb. 2.6-links).
- **Senke:** Blasen mit dem Volumen  $V$  koaleszieren mit beliebigen anderen Blasen  $V'$  oder zerfallen in kleinere Blasen  $V'$  und  $V - V'$ . Somit verliert die Klasse der Blasengröße  $V$  in Abb. 2.6-(rechts) Volumenanteile.

Die Geschwindigkeiten dieser Mechanismen  $R_{C+}$ ,  $R_{C-}$ ,  $R_{B+}$  und  $R_{B-}$  werden in der Literatur als Kernfunktionen der Blasenkoaleszenz und des Blasenzerfalls bezeichnet, wobei  $(-)$  und  $(+)$  für Verlust bzw. Zuwachs sowie  $(C)$  und  $(B)$  für Koaleszenz bzw. Zerfall der Blasen stehen.

Mit Hilfe dieser Kernfunktionen können die Quell- und Senkenterme für Blasenzerfall und -koaleszenz in Gleichung (2.25) dann wie folgt formuliert werden:

$$S_B(V, t) = \underbrace{\frac{1}{2} \int_{V_{min}}^V R_C^+(V - V', V', t) dV'}_{\text{Zuwachs durch Koaleszenz}} + \underbrace{\int_V^{V_{max}} R_B^+(V, V', t) dV'}_{\text{Zuwachs durch Zerfall}}, \quad (2.33)$$

$$S_D(V, t) = \underbrace{\int_{V_{min}}^{V_{max}} R_C^-(V, V', t) dV'}_{\text{Verlust durch Koaleszenz}} + \underbrace{R_B^-(V, t)}_{\text{Verlust durch Zerfall}}. \quad (2.34)$$

Der erste Term der Gleichung (2.33) beschreibt den Zuwachs in der Größenklasse  $V$  durch Koaleszenz von kleineren Blasen  $V'$  mit  $V - V'$ , während der zweite Term den Zuwachs in dieser Zielklasse durch Zerfall größerer Blasen  $V''$  darstellt (Abb. 2.6-links). Gleichung (2.34) repräsentiert die rechte Seite der Abbildung 2.6 und bestimmt die Verluste in der Zielklasse  $V$  durch die Koaleszenz der Blasen dieser Klasse mit Blasen anderer Klassen sowie durch den Zerfall eigener Blasen.

Die Zerfalls- und Koaleszenzgeschwindigkeiten werden in der Literatur folgendermassen definiert [27]:

$$R_B^-(V, t) = g(V) f(V, t), \quad (2.35)$$

$$R_B^+(V, V', t) = \nu(V') \beta(V, V') R_B^-(V, V', t),$$

$$R_B^+(V, V', t) = \nu(V') \beta(V, V') g(V') f(V', t), \quad (2.36)$$

$$R_C^-(V, V', t) = \lambda(V, V') h(V, V') f(V, t) f(V', t), \quad (2.37)$$

$$R_C^+(V - V', V', t) = \lambda(V - V', V') h(V - V', V') f(V - V', t) f(V', t). \quad (2.38)$$

Die Zerfallsfrequenz  $g(V)$  (Einheit:  $[s^{-1} m^{-3}]$ ) ist dabei die Proportionalitätskonstante zwischen der Zerfallsgeschwindigkeit  $R_B^-$  und der Partikel-dichte  $f$ . Die Rate  $R_B^+$ , mit der Blasen der Größe  $V$  durch Zerfall größerer Blasen  $V'$  gebildet werden, ist proportional zur Zerfallsgeschwindigkeit der Blasen  $V'$ , nämlich  $R_B^-(V, V', t)$ . Die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\beta(V, V')$ , auch bekannt als Tochterblasengrößenverteilung bestimmt den Anteil der im Zerfallvorgang entstehenden Tochterblasen, die die Größe der Zielklasse  $V$  besitzen. Der Faktor  $\nu$  definiert dabei die Anzahl aller Tochterblasen in einem Zerfallsvorgang. Geht man von einem binären Zerfall aus, ist  $\nu = 2$ .

Wie im Abschnitt 2.4.2 noch erläutert werden wird, bestimmt die Kollisionsgeschwindigkeit zweier Blasen bzw. die Koaleszenzeffektivität  $\lambda$  die

Koaleszenzgeschwindigkeit  $R_C^{+/-}$  dieser Blasen. Die Kollisionsgeschwindigkeit ist proportional zu den Partikeldichten  $f$  der beteiligten Partikelklassen mit der Proportionalitätskonstante  $h$ , die als Kollisionsfrequenz bezeichnet wird. Die Koaleszenzeffektivität  $\lambda$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der ein Kollisionsereignis zweier Blasen zu einer Koaleszenz führt. Nicht jede Kollision zweier Blasen resultiert in Koaleszenz.

Das Einsetzen der Geschwindigkeiten aus den Gleichungen (2.35) - (2.38) in den Gleichungen des Quell- und Senkenterms (2.33) und (2.34) bzw. des daraus resultierenden Quell- und Senkenterms in der PBG (2.25), ergibt die allgemeine PBG unter Berücksichtigung von Konvektion, Wachstum sowie Zerfall und Koaleszenz der Blasen:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f(V, t)}{\partial t} = & -\nabla(\vec{v}f(V, t)) - \sum_i \frac{\partial}{\partial \vec{V}} \left( \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} f(V, t) \right) \\
 & + \frac{1}{2} \int_{V_{min}}^V \lambda(V - V', V') h(V - V', V') f(V - V', t) f(V', t) dV' \\
 & + \int_V^{V_{max}} \nu(V') \beta(V, V') g(V) f(V', t) dV' \\
 & - \int_{V_{min}}^{V_{max}} \lambda(V, V') h(V, V') f(V, t) f(V', t) dV' \\
 & - g(V) f(V, t).
 \end{aligned} \tag{2.39}$$

In der Literatur sind eine Vielzahl von Modellen für die kinetischen Parameter  $g$ ,  $\nu$ ,  $\beta$ ,  $h$  und  $\lambda$  zu finden. Die Modelle sind empirisch anhand experimenteller Daten hergeleitet oder analytisch ermittelt. Außerdem unterscheiden sie sich in ihrer Struktur, also den Abhängigkeiten von verschiedenen Strömungsparametern und Stoffeigenschaften, wie Blasengröße, turbulente Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie, Viskosität, Oberflächenspannung, usw.. Nachfolgend wird auf Modelle der oben genannten kinetischen Parameter eingegangen, die im Rahmen dieser Arbeit für die Modellierung von Blasenzerfall und -koaleszenz berücksichtigt werden.

### 2.4.1 Blasenzerfall

Der Blasenzerfall kann durch verschiedene Phänomene der dispersen Zweiphasenströmung hervorgerufen werden, die zur Deformation der Blasenform und somit zu Instabilitäten an deren Oberfläche führen. Durch turbulente Scherspannungen, Druck- und Geschwindigkeitsunterschiede entlang der Blasenoberfläche kann eine Blase in Fragmente zerfallen, wenn die kinetische Energie der Blasenoszillation die Zunahme ihrer Oberflächenenergie durch den Blasenzerfall übersteigt.

Wie in Gl. (2.36) gezeigt, ist die Blasenzerfallsrate proportional zur Zerfallsfrequenz  $g(V')$ . Letztere gibt an, wie viele Zerfallereignisse pro Zeit- und Volumeneinheit stattfinden. Das Ergebnis der Zerfallsprozesse, d.h. die Größe und die Anzahl der entstehenden Tochterblasen bestimmen neben der Zerfallfrequenz auch die sich im System einstellende Blasengrößenverteilung. Die Art des Zerfallprozesses wird durch die Tochterblasenverteilung  $\beta(V, V')$  und die Anzahl der Tochterblasen  $\nu(V')$  bestimmt. Diese zur Ermittlung der Zerfallrate benötigten Größen werden im Folgenden ausführlicher behandelt.

#### 2.4.1.1 Zerfallfrequenz

In der Literatur lassen sich die verschiedenen Ansätze zur Berechnung der Zerfallfrequenz in zwei Gruppen aufteilen: a) Modelle mit der Annahme eines stabilen Blasendurchmessers  $D_{zerf}$ , unterhalb dessen die Blasen stabil und nicht weiter zerteilbar sind und b) Modelle, die auf einer kontinuierlichen Zerfallsfrequenz für das gesamte Blasendurchmesserspektrum basieren.

#### **Zerfallsfrequenzmodell nach Hesketh:**

Dieses Modell stellt eines der gebräuchlichsten Zerfallsfrequenzmodelle dar. Es arbeitet mit einem maximalen stabilen Durchmesser  $D_{zerf}$  und besagt, dass Blasen mit  $D > D_{zerf}$  mit einer bestimmten, von den Strömungsparametern und Stoffeigenschaften abhängigen Rate zerfallen, während kleinere Blasen mit  $D \leq D_{zerf}$  nicht zerfallen. Das empirische Modell von Hesketh lautet [33, 34]:

$$\begin{aligned}
 g(D) &= 0 && \text{für } D \leq D_{zerf}, \\
 g(D) &= 2.7 \left( \frac{\rho_l^{0.1} \rho_g^{0.3}}{\sigma^{0.4}} \right) \epsilon_t^{0.6} && \text{für } D > D_{zerf}.
 \end{aligned} \tag{2.40}$$

Mit:

$$D_{zerf} = \left( \frac{We_{krit}}{2} \right)^{0.6} \left( \frac{\sigma^{0.6}}{\rho_l^{0.4} \rho_g^{0.2}} \right) \epsilon_t^{-0.4}, \tag{2.41}$$

wobei  $\epsilon_t$  die spezifische turbulente Energiedissipationsrate der Flüssigphase bzw.  $We_{krit}$  die kritische Weber-Zahl sind. Die kritische Weber-Zahl beschreibt das Verhältnis der kinetischen Energie der Blasenoberflächenbewegung zur Oberflächenspannungsenergie und wird folgendermaßen definiert:

$$We_{krit} = \frac{\bar{u}^2 D_{zerf} \rho_l}{\sigma}. \tag{2.42}$$

Dabei ist  $\bar{u}$  der mittlere relative Geschwindigkeitsunterschied zwischen zwei gegenüberliegenden Punkten auf der Blasenoberfläche.  $We_{krit}$  wird in der Regel experimentell bestimmt. Für Luftblasen-Flüssigkeitssysteme beträgt sie typischerweise 1.1 [27].

Die Zerfallsfrequenz nach Hesketh ist für  $D = D_{zerf}$  unstetig, wie sie in Abbildung (2.7) für Blasen-Dimethylsulfoxid (DMSO) mittels Gleichung (2.40) ermittelt wurde. Daher ist das Heskeths Modell für die Bestimmung der Blasenzerfallsfrequenz physikalisch nicht sinnvoll. Außerdem nimmt die Zerfallsfrequenz einen vom Blasendurchmesser unabhängigen konstanten Wert für alle Blasen mit  $D > D_{zerf}$  an.

### Zerfallsfrequenzmodell nach Lee

Im Gegensatz zum experimentellen Modell von Hesketh basiert das Zerfallsfrequenzmodell von Lee auf anderen physikalischen Überlegungen. Er führt die Oszillationen der Blasen um ihr kugelförmiges Gleichgewicht auf den von der Turbulenz verursachten Geschwindigkeitsunterschied an der Blasenoberfläche zurück. Eine Mutterblase zerfällt in zwei Tochterblasen, wenn die kinetische Energie der auf ihre Oberfläche treffenden turbulenten Wirbel groß genug ist, um die

Zunahme der Oberflächenenergie beim Zerfallen aufzubringen. Die Blasenzerfallsfrequenz nach Lee kann wie folgt dargestellt werden:

$$g(D) = C_1 \epsilon_t^{1/3} D^{-5/3} \int_0^D \left( 1 - \int_0^{X_c} (2\pi)^{-1/2} x^{1/2} e^{-x/2} dx \right) dl,$$

mit:

$$X_c = C_2 (2\pi)^{5/3} \sigma(\rho_l)^{-1} \epsilon_t^{-2/3} D^2 l^{-11/3}. \quad (2.43)$$

Hier ist  $l$  die Längenskala der Wirbel. Die Parameter  $C_1$  und  $C_2$  bestimmen die pro Zeiteinheit auf die Blasenoberfläche auftreffende Anzahl der Wirbel bzw. den für den Zerfall notwendigen Bruchteil an Oberflächenenergie und müssen anhand experimenteller Daten angepasst werden [27, 44]. In Abbildung (2.7) ist die Zerfallsfrequenz nach Lee für Blasen mit Durchmesser von 0 – 10 mm und  $\epsilon_t = 10 \text{ m}^2/\text{s}^3$  dargestellt. Die Zerfallsfrequenz nach Lee steigt mit zunehmendem Blasendurchmesser an, weist ein Maximum auf und sinkt für größere Blasen wieder ab. Dieses Verhalten lässt sich mit der raschen Abnahme der Anzahl von turbulenten Wirbeln für den Bereich  $D > l_t$  erklären. Eine ausführliche Herleitung von Lees Modell ist in [44] zu finden.

### Zerfallsfrequenzmodell nach Grienberger

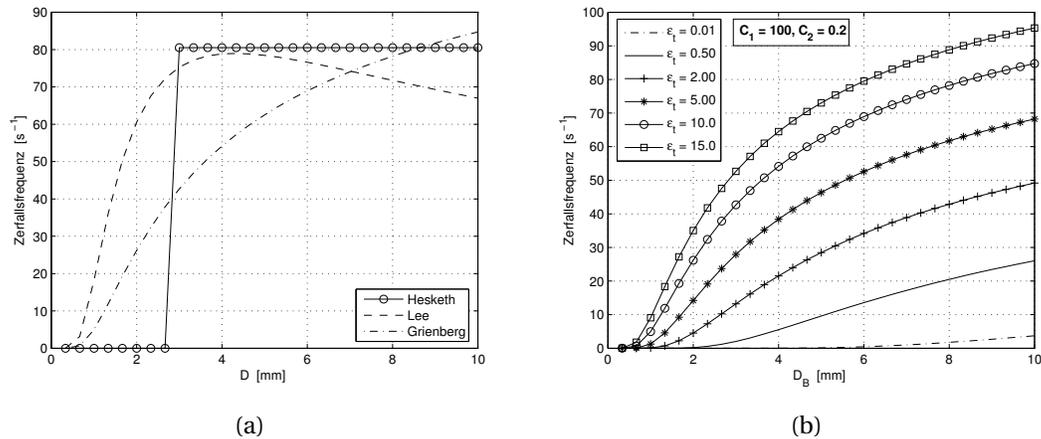
Grienberger [32] führte das unphysikalische Verhalten von Lees Modell (die hohe Stabilität von großen Blasen und die damit verbundene niedrigere Zerfallsfrequenz von großen Blasen) auf Lees Korrelation zur Bestimmung der Wirbelanzahl zurück. Er schlug anhand experimenteller Beobachtungen eine alternative Korrelation vor und modifizierte Lees Modell zu:

$$g(D) = C_1 \epsilon_t^{1/6} D^{-1} \int_0^D \left( 1 - \int_0^{X_c} (2\pi)^{-1/2} x^{1/2} e^{-x/2} dx \right) dl,$$

mit:

$$X_c = C_2 (2\pi)^{5/3} \sigma(\rho_l)^{-1} \epsilon_t^{-2/3} D^2 l^{-11/3}. \quad (2.44)$$

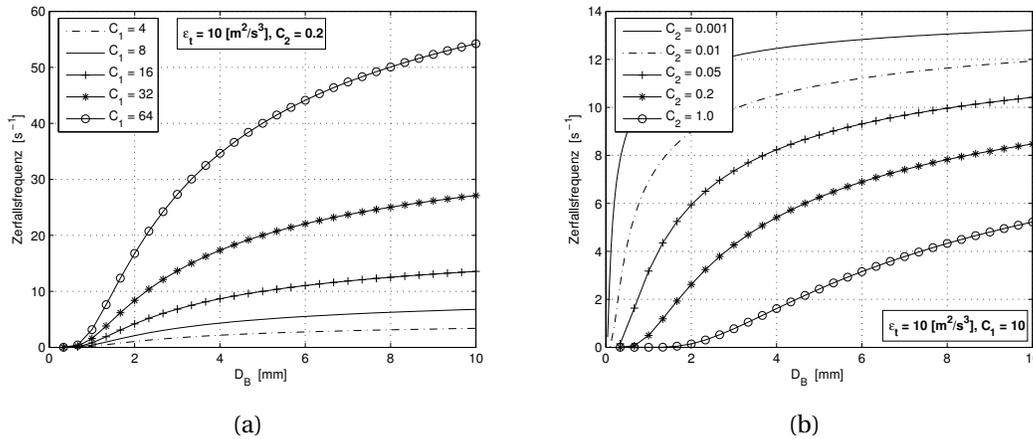
Der Verlauf der Zerfallsfunktionen von Grienberger und Lee sind in Abbildung 2.7 einander gegenüber gestellt. Es ist ersichtlich, dass beide Modelle in dem Blasendurchmesserbereich  $D_B > D_{zerfall}$  (der sich durch Heskeths Modell ergibt) einen ähnlichen Verlauf aufweisen: steigende



**Abbildung 2.7:** a) Gegenüberstellung der Blasenzerfallfrequenzmodelle von Hesketh, Lee und Grienerger (Luftblasen/DMSO-System mit  $\epsilon_t = 10\text{m}^2/\text{s}^3$ ).  
 b) Einfluss von  $\epsilon_t$  auf die Zerfallfrequenz nach Grienerger ( $C_1 = 100$  und  $C_2 = 0,2$ ).

Instabilitäten der größer werdenden Blasen und folglich eine stetig höher werdende Zerfallsfrequenz. Die quantitative Unstimmigkeit der Kurvenverläufe in diesem Bereich kann auf die Werte der Parameter  $C_1$  zurückgeführt werden. In diesem Vergleich ist zu beachten, dass  $C_{1Lee} \neq C_{1Grienerger}$ , da beide Modelle unterschiedliche Korrelationen zur Bestimmung der zerfallsbestimmenden Wirbelanzahl verwenden. Für die Zerfallsfrequenzen in Abbildung (2.7) sind Werte von  $C_{1Lee} = 2,5$  und  $C_{2Lee} = 0,2$ ,  $C_{1Grienerger} = 100$ ,  $C_{2Grienerger} = 0,2$  nach Richtwerten für Gasblasen-Flüssigkeitssysteme nach Lee [44] und Fleicher [27] angenommen. In dem Bereich  $D_B > D_{zerfall}$  werden nach Grienerger die Blasen mit größer werdendem Durchmesser stetig instabiler, wodurch ihre Zerfallsfrequenz steigt. Weiterhin wurde der Einfluß der turbulente Energiedissipationsrate  $\epsilon_t$  und der Parameter  $C_1$  bzw.  $C_2$  auf die Zerfallfrequenz nach Grienerger untersucht. Abbildung (2.7-b) zeigt, dass eine zunehmende Energiedissipationsrate  $\epsilon_t$  die Zerfallsfrequenz erhöht. In Abbildung (2.8 a) und (b) wird die Zunahme der Zerfallfrequenz mit steigendem  $C_1$ -Wert und sinkendem  $C_2$ -Wert gezeigt. Mit größer werden-

der Wirbelanzahl (repräsentiert durch  $C_1$ ) und mit niedriger werdendem Oberflächenenergieanteil (repräsentiert durch  $C_2$ ) steigt die Instabilität der Blasen und damit die Zerfallsfrequenz an.



**Abbildung 2.8:** Blasenzerfallfrequenzmodell von Grienberger für ein Lufblasen/DMSO-System:

a) Einfluss von  $C_1$  auf Zerfallsfrequenz ( $\epsilon_t = 10 \frac{\text{m}^2}{\text{s}^3}$ ,  $C_2 = 0,2$ ).

b) Einfluss von  $C_2$  auf die Zerfallsfrequenz ( $\epsilon_t = 10 \frac{\text{m}^2}{\text{s}^3}$ ,  $C_1 = 10$ ).

#### 2.4.1.2 Tochterblasengrößenverteilung und deren Anzahl

Die Oberfläche der Blase wird durch auftreffende Turbulenzwirbel deformiert und zerreißt schließlich, wenn die kinetische Wirbelenergie die Oberflächenenergie übersteigt. Es bilden sich zwei oder mehrere Tochterblasen. Die sich im System nach einem Zerfallsvorgang einstellende Blasengrößenverteilung wird nicht nur von der bereits behandelten Zerfallsfrequenz bestimmt, sondern auch von Anzahl und Größe der entstehenden Tochterblasen. Bislang wird in der Modellierung des Blasenzerfalls meist von einem binären Zerfall ausgegangen, obwohl experimentelle Beobachtungen die Bildung von mehreren Tochterblasen gezeigt haben [42]. Die Größen der beim Zerfall entstehenden Tochterblasen sind statistisch verteilt und werden in der Literatur mittels einer Größenverteilungsfunktion  $\beta(V, V')$  angenommen. Diese Tochterblasenver-

teilung beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass beim Zerfall der Blase mit einer Größe  $V'$  eine Tochterblase mit dem Volumen  $V$  entsteht. Gleichverteilung, monodisperse Verteilung (Zerfall in zwei gleichgroße Blasen), U- bzw. V-förmige Verteilungen oder auch die  $\beta$ -Verteilung sind Beispiele für die verwendeten Tochterblasenverteilungsfunktionen. An dieser Stelle wird lediglich die von Lee [44] vorgeschlagene  $\beta$ -Verteilung vorgestellt, da die Formulierung dieser Verteilung größenabhängig und für Binär- und Multizerfall modifizierbar ist. Fleischer [27] stellte verschiedene Tochterblasenverteilungsfunktionen gegenüber. In seiner Beta-Tochterblasenverteilung berücksichtigt Lee die Möglichkeit, dass Blasen auch in mehr als zwei Tochterblasen zerfallen können und bestimmt die Tochterblasenzahl durch die mit dem Blasenvolumen monoton steigenden Funktion:

$$\nu(V') = 2 + cV'^{n'} \quad (2.45)$$

Dabei sind  $c$  und  $n'$  empirische Konstanten. Für  $c = 0$  ergibt sich der binäre Zerfall. Lee verwendete Werte von  $c = 10$  und  $n' = 0,5$  für Multizerfallsvorgänge in Gleichung (2.45) und beschreibt die Tochterblasenverteilung mittels folgender Beziehung:

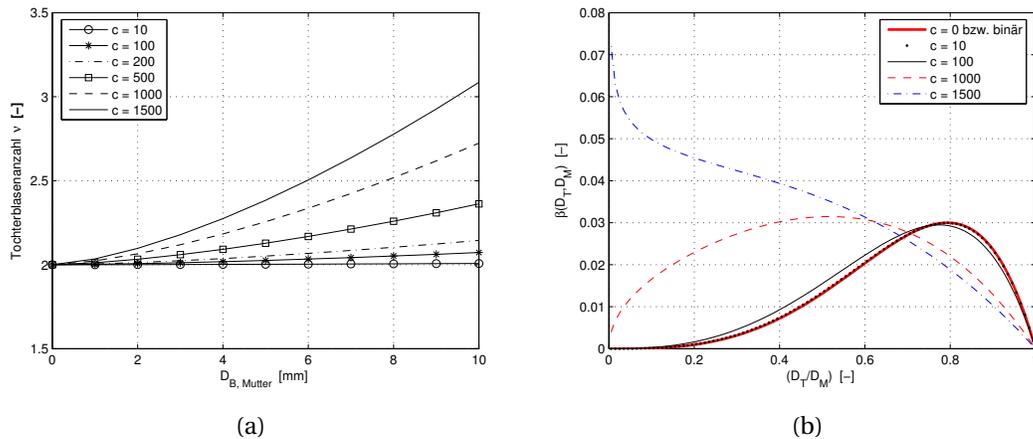
$$\beta(D, D') = \frac{2(\nu + 1)}{(\nu - 1)^2} \frac{6}{\rho_p \pi D'^3} \left[ \left( \frac{D^3}{D'^3} \right)^{\frac{3-\nu}{\nu-1}} - \left( \frac{D^3}{D'^3} \right)^{\frac{2}{\nu-1}} \right] \quad (2.46)$$

Für einen binären Zerfallsvorgang ( $\nu = 2$ ) nimmt die Tochterblasenverteilung somit diese Form an:

$$\beta(D, D') = \frac{36}{\rho_p \pi D'^3} \left[ \left( \frac{D^3}{D'^3} \right) - \left( \frac{D^3}{D'^3} \right)^2 \right] \quad (2.47)$$

In Abbildung (2.9-a) ist die Tochterblasenanzahl  $\nu$  nach Gleichung (2.45) für verschiedene Werte des Faktors  $c$  dargestellt. Die Kurven zeigen, dass sich für Mutterblasen mit einem Durchmesser bis 10mm und  $c = 10$  ein Binärzerfallsvorgang ergibt. Erst bei Werten von  $c = 1500$  und einem Mutterblasendurchmesser von 9,3 mm ergeben sich drei Blasen aus dem Zerfallsvorgang. Wie in Abbildung (2.9-b) erkennbar, ergeben sich auch gleiche Tochterblasenverteilungen aus einer Mutterblase mit einem Durchmesser von 10mm für  $c$ -Werte von 0 bis 100. Das bedeutet, dass sowohl

für einen binären Zerfall nach Gleichung (2.47) als auch für Multizerfallsvorgänge mit  $c < 100$  die Tochterblasenverteilung nahezu die gleiche bogenförmige Form annimmt. Erst bei großen  $c$ -Werten ( $c > 100$ ) nimmt die Wahrscheinlichkeit der Entstehung von sehr kleinen Tochterblasen zu.

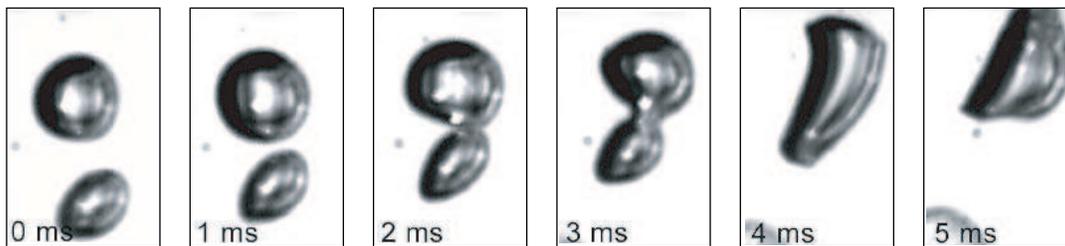


**Abbildung 2.9:** Tochterblasenanzahl und -verteilung nach Lee.

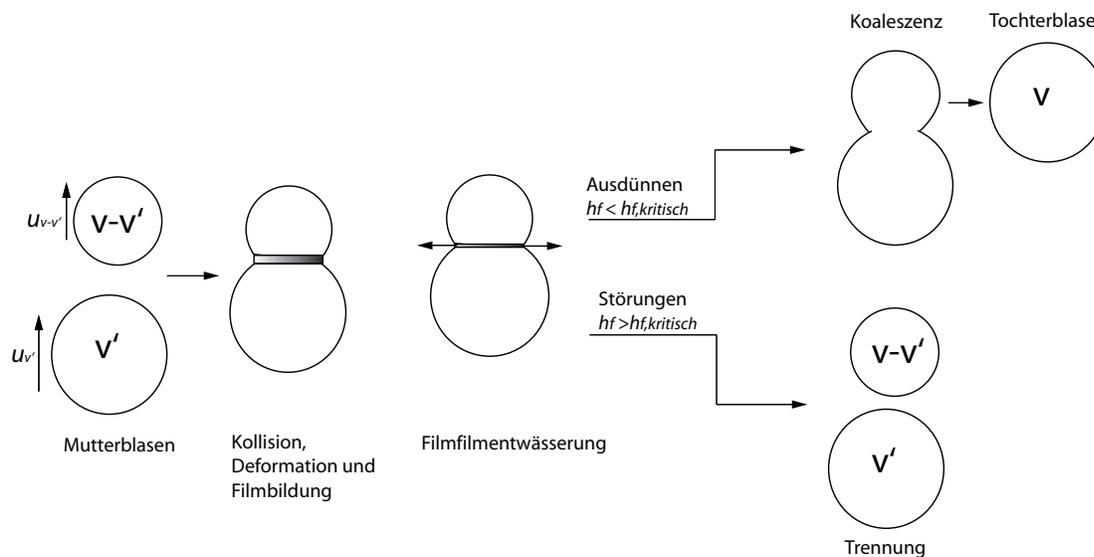
## 2.4.2 Blasenkoaleszenz

Die ständige Bewegung der Blasen in der Flüssigphase führt zu Kollisionen der Blasen miteinander. Dabei besteht die Möglichkeit der Blasenvereinigung, also Blasenkoaleszenz. Jedoch nicht jedes Kollisionsereignis zweier Blasen führt zur Koaleszenz. In der Literatur wird der Koaleszenzvorgang üblicherweise in drei Schritte unterteilt. Im ersten Schritt kollidieren zwei Blasen und schließen dabei einen dünnen Flüssigkeitsfilm zwischen beiden deformierten Oberflächen ein. Die Anfangsdicke des Filmes  $h_{f,0}$  beträgt nach Literaturangaben  $10 \mu\text{m}$  bis  $100 \mu\text{m}$  [6]. Die Blasen bleiben für eine Zeit aneinander haften. Diese Zeit wird mittlere Kontaktzeit  $\bar{t}$  genannt. Ist sie länger als die benötigte Koaleszenzzeit  $t_{koal}$ , kommt es zum Entwässern des Filmes bis zur kritischen Dicke ( $h_{f,krit} = 0.01 \mu\text{m} - 0.1 \mu\text{m}$ ) und können Oszillationen und Instabilitäten auf der Filmoberfläche zum Aufreißen des Filmes führen. Die Mutter-

blasen koaleszieren dann zu einer Tochterblase. Ist die Kontaktzeit nicht ausreichend um den Film auf die kritische Dicke zu reduzieren, unterliegen die koalierenden Blasen äußeren Stoßkräften und die Blasen trennen sich. Die Kollision führt somit zu keiner Koaleszenz. In Abbildung (2.10) sind die drei Schritte eines Koaleszenzvorganges zweier Blasen dargestellt: Kollision, Filmentwässerung und Koaleszenz in einem Experiment entnommen aus [67]. In Abbildung (2.11) ist der Vorgang schematisch skizziert.



**Abbildung 2.10:** Im Experiment betrachteten Kollision und Koaleszenz zweier Luftblasen in Flüssigkeitsphase [67]



**Abbildung 2.11:** Vorstellung des Koaleszenzmechanismus

Die obengenannten drei Schritte des Koaleszenzvorganges werden in der Modellierung normalerweise durch zwei Faktoren repräsentiert:

- Die Kollisionsfrequenz  $h$  ist maßgebend für den ersten Schritt und stellt die Proportionalitätskonstante der Kollisionsgeschwindigkeit zur Partikeldichte  $f$  der an der Kollision beteiligten Partikel dar (Gleichung (2.37)).
- Die Koaleszenzeffektivität  $\lambda$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der ein Kollisionsereignis zweier Blasen zu einer Koaleszenz führt ( $\bar{t} \geq \tau_{koal}$ ) und repräsentiert damit den zweiten und dritten Schritt des Koaleszenzmechanismus.

Im Folgenden wird auf die Modellierung dieser Faktoren eingegangen.

#### 2.4.2.1 Kollisionsfrequenz

Es werden drei Mechanismen unterschieden, die separat oder zusammen zur Kollision zweier Luftblasen  $D_i$  und  $D_j$  in einer Flüssigkeitsphase führen können:

1. Die Blasengeschwindigkeitsschwankungen aufgrund des turbulenten Geschwindigkeitsfeldes der kontinuierlichen Flüssigphase führen zu turbulenzinduzierten Kollisionen. Sie wird bezeichnet als  $h^T(D_i, D_j)$ ,
2. Aufgrund der Schwerkraft bzw. der dadurch resultierenden Schlupfgeschwindigkeit holen große Luftblasen mit höherer Geschwindigkeit die langsameren kleinen Blasen ein und kollidieren mit ihnen:  $h^A(D_i, D_j)$ ,
3. Die Scherkräfte der Flüssigphase können eine Kollision der Blasen hervorrufen:  $h^S(D_i, D_j)$ ,

Damit ergibt sich die Gesamtkollisionsfrequenz  $h(D_i, D_j)$  durch die Addition der beschriebenen drei Mechanismen:

$$h(D_i, D_j) = h^T(D_i, D_j) + h^A(D_i, D_j) + h^S(D_i, D_j). \quad (2.48)$$

#### **Turbulenzinduzierte Blasenollision**

Analog zum Stoßverhalten der Gasmoleküle in der kinetischen Gastheo-

rie können Blasen im Geschwindigkeitsfeld der Flüssigphase beschrieben werden [19]. Darauf aufbauend leiteten Prince und Blanch [56] folgenden Ansatz für die Frequenz der turbulentinduzierten Blasenkollision ab:

$$h(D_i, D_j) = S_{i,j}(\overline{u}_{t,i}^2 + \overline{u}_{t,j}^2)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.49)$$

Dabei sind  $\overline{u}_{t,i}^2$  und  $S_{i,j}$  die mittlere quadratische Geschwindigkeitsschwankung bzw. der effektive Stoßquerschnitt der Blasen. Sie sind wie folgt definiert:

$$\overline{u}_{t,i}^2 = C(\epsilon_t D_i)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.50)$$

$$S_{i,j} = \frac{\pi}{4}(D_i + D_j)^2. \quad (2.51)$$

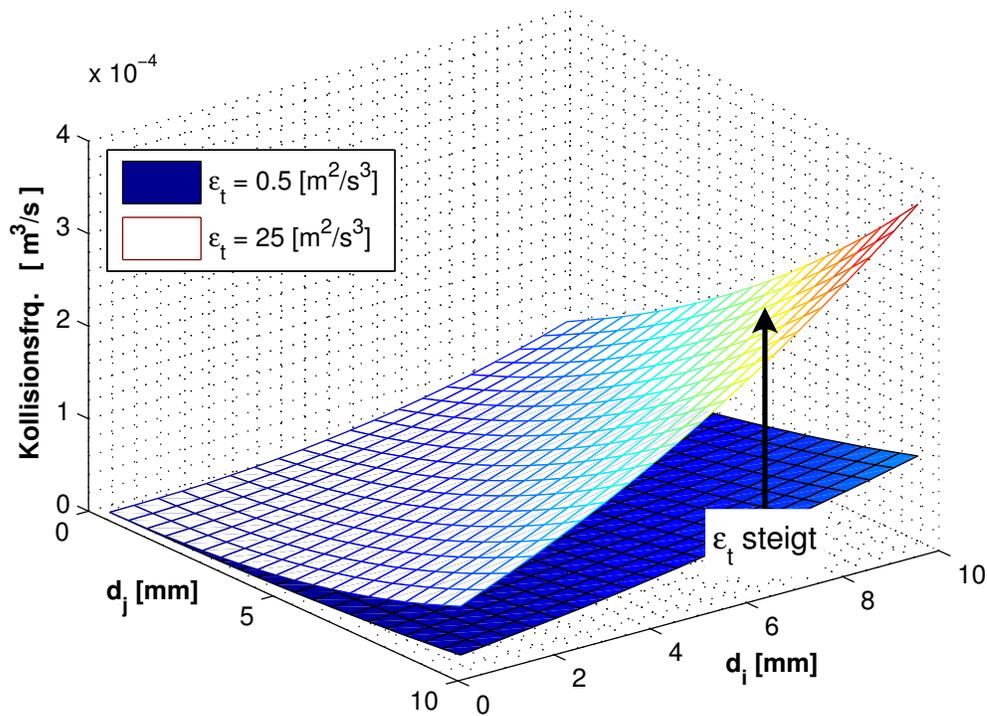
Mit der Konstante  $C = 2$  nach Batchelor [5] ergibt sich die turbulente Kollisionsfrequenz:

$$h^T(D_i, D_j) = C_q \pi \epsilon_t^{1/3} (D_i + D_j)^2 (D_i^{2/3} + D_j^{2/3})^{\frac{1}{2}}. \quad (2.52)$$

In Abbildung 2.12 ist die turbulente Kollisionsfrequenz von Blasen mit Durchmessern  $D_{i,j} = 0 - 10$  mm für  $\epsilon_t = 0,5 \text{ m}^2/\text{s}^3$  und  $25 \text{ m}^2/\text{s}^3$  mit  $C_q = \frac{\sqrt{2}}{4}$  nach Gleichung (2.52) dargestellt. Es ist ersichtlich, dass große Luftblasen mit großem Stoßquerschnitt eine höhere Kollisionsrate aufweisen. Desweiteren steigt die Kollisionsfrequenz mit steigender turbulenter Dissipationsrate der Flüssigphase. Fleischer verwendet in Gleichung (2.52) den Wert  $C_q = \frac{\sqrt{2}}{4}$ , der sich aus der Berechnung des effektiven Stoßquerschnitts  $S_{i,j}$  mit den Durchmessern der beteiligten Blasen ergibt. Im Gegensatz dazu verwendeten Prince und Blanch den Radius der Blasen zur Berechnung des effektiven Stoßquerschnitts (vergleiche dazu [56] und [27]).

### **Auftriebsinduzierte Blasenollision**

Die auftriebsinduzierte Blasenollision tritt auf, wenn die disperse Gasphase eine wesentlich geringere Dichte als die Flüssigphase hat. Hierbei entsteht die Möglichkeit der Kollision von kleinen mit großen Blasen dadurch, dass kleine Blasen von größeren Blasen eingeholt werden bzw.



**Abbildung 2.12:** Turbulente Kollisionsfrequenz  $h^T = f(D_i, D_j)$  für  $\epsilon_t = 0.5$  und  $25 \text{ m}^2/\text{s}^3$

kleine Blasen durch die Nachlaufwirbel der großen Blasen in deren turbulente Nachlaufgebiet hineingerissen werden.

Prince und Blanch schlugen einen einfachen Ansatz zur Beschreibung der Blaskollision in Abhängigkeit unterschiedlichen Blasenschlupfs vor [56]:

$$h^A(D_i, D_j) = S_{i,j} |u_i - u_j|. \quad (2.53)$$

Der von Fleischer durchgeführte Vergleich der Blaskollisionsfrequenz infolge unterschiedlicher Blasenschlupfgeschwindigkeiten nach Gleichung (2.53) mit der Frequenz der turbulenzinduzierten Kollision zeigt, dass  $h^A(D_i, D_j) \ll h^T(D_i, D_j)$  für turbulente Strömungen ist und daher vernachlässigt werden kann [27]. In Stömungen mit sehr geringer Energiedissipationsrate (wie z.B. Blasenströmung in Blasensäulen) kann

$h^A(D_i, D_j)$  von Bedeutung für die Blasenkoaleszenz sein. An dieser Stelle wird nicht detailliert auf die Modellierung dieser Art der Koaleszenz eingegangen, da sie in der für die Validierung des Momenten-Modell betrachteten Blasenströmung im begasten Rührreaktor nicht relevant ist und daher vernachlässigt werden kann.

### **Blasenollision infolge von Scherströmung der Flüssigphase**

Laminare Scherströmungen können zu Blasenollisionen führen. Besonders in Blasensäulen verursacht der Aufstieg von großen Blasen in der Säulenmitte Zirkulationen in der Flüssigkeit, wodurch es zu Kollisionen von Gasblasen kommt. Solche Zirkulationszonen können auch in Rührkesselströmungen beobachtet werden. Jedoch überwiegt die turbulentinduzierte Blasenollision im Rührkessel (siehe Kapitel 4). Die Frequenz der turbulenzinduzierten Blasenollision ist in turbulenten Strömungen um eine Größenordnung größer als die durch Scherströmung induzierte Blasenollision. Dies hat Fleischer in einem Vergleich der beiden Kollisionfrequenzen festgestellt [27]. Daher wird an dieser Stelle lediglich auf die Korrelation von Prince und Blanch zur Berechnung der Frequenz der Scherströmungskollision eingegangen, da im Validierungsfall der Rührkesselströmung vorwiegend turbulenzinduzierte Blasenollision vorliegt. Diese ist wie folgt definiert:

$$h^S(D_i, D_j) = \frac{1}{6} (d_i + d_j)^3 \bar{\tau}, \quad (2.54)$$

mit der mittleren Schergeschwindigkeit  $\bar{\tau}$ .

#### **2.4.2.2 Koaleszenzeffizienz**

Zwei miteinander kollidierende Luftblasen können koalieren, wenn die mittlere Kontaktzeit  $\bar{t}$  größer als die Ausflußzeit  $t_{koal}$  des eingeschlossenen Flüssigkeitsfilm ist, die zum Erreichen der kritischen Filmdicke  $h_{f,krit}$  erforderlich ist (siehe oben). Dies bedeutet, dass nicht jede Kollision zum Koaleszenzereignis führen muss. In der Literatur wird dieser Prozess über eine Wahrscheinlichkeit ausgedrückt, die die Koaleszenzeffektivität  $\lambda$  repräsentiert. Daher bestimmt die Koaleszenzeffektivität den Anteil an Kollisionen, die zu einem Koaleszenzereignis führen. Da lange

Kontaktzeiten mit geringerer Wahrscheinlichkeit als kurze Kontaktzeiten auftreten, beschreibt Coualaloglou et al. [14] die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Kontaktzeiten größer als die Koaleszenzzeit mit dem exponentiellen Ansatz:

$$\lambda(D_i, D_j) = P[t(D_i, D_j) \geq t_{koal}(D_i, D_j)] = \exp\left(-\frac{t_{koal}(D_i, D_j)}{\bar{t}(D_i, D_j)}\right). \quad (2.55)$$

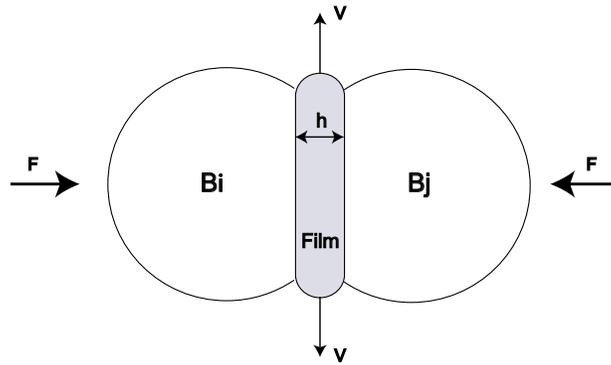
Messungen von Blasenkontaktzeiten in turbulenten Blasenströmungen sind in der Literatur nicht zu finden (siehe auch [6]). Theoretische Überlegungen bringen die Blasenkontaktzeit in Abhängigkeit von der Turbulenz der Flüssigphase, der Blasengröße und der Blasenoberflächendeformation. Bezüglich des Turbulenzeinflusses gehen Prince und Blanch von der Beobachtung aus, dass zwei kontaktierende Blasen durch Wirbel in der flüssigen Phase wieder auseinandergerissen werden können. Andererseits weisen große Blasen wegen der großen Kontaktflächen längere Kontaktzeiten auf. Beide Effekte sind durch eine Dimensionsanalyse in dem ersten Term von Gleichung (2.56) erfasst. Den Einfluss der Blasen- deformationen auf die Kontaktzeit berücksichtigte Colin et al. [12] in Abhängigkeit von der Dichte der Flüssigphase, dem äquivalenten Blasenradius und der Oberflächenspannung in dem zweiten Term dieser Gleichung. Der Effekt der Blasen- deformationen tritt stark bei auftriebsinduzierten Kollisionen auf, wie z.B. in Blasenströmungen in Blasensäulen. Die meisten Autoren gehen in vielen Fällen von kugelförmigen, nicht deformierbaren Blasen aus und vernachlässigen diesen Effekt.

$$\bar{t}(d_i, d_j) = \frac{r_{i,j}^{2/3}}{\epsilon_t^{1/3}} + \left(\frac{\rho_l r_{i,j}^3 C_{vm}}{24\sigma}\right). \quad (2.56)$$

Die Größe  $C_{vm}$  bezeichnet den virtuellen Massenkoeffizienten und wird nach [12] mit 0.785 angenommen. Der Radius  $r_{i,j}$  ist der äquivalente Blasenradius und wird wie folgt definiert:

$$r_{i,j} = 2\left(\frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j}\right)^{-1}. \quad (2.57)$$

Die Koaleszenzzeit  $t_{koal}$  stellt die Entwässerungsdauer des Films von der Anfangsfilmdicke  $h_0$  auf die kritische Filmdicke  $h_{krit}$  dar. Sie ist von den physikalisch-chemischen Eigenschaften des betrachteten Systems abhängig, wie z.B. der Flüssigkeitsdichte  $\rho_l$ , der Oberflächenspannung  $\sigma$  und dem Filmdickenverhältnis  $h_0/h_{krit}$ . Kirckpatrick et al. [41] entwickelten ein Modell zur Beschreibung des Filmentwässerungsprozesses, in dem der Film als eine zwischen die kollidierenden Blasen gepreßte Platte dargestellt wird und die Entwässerung lediglich durch die Blasenpreßkräfte des Kapillardrucks verursacht wird.



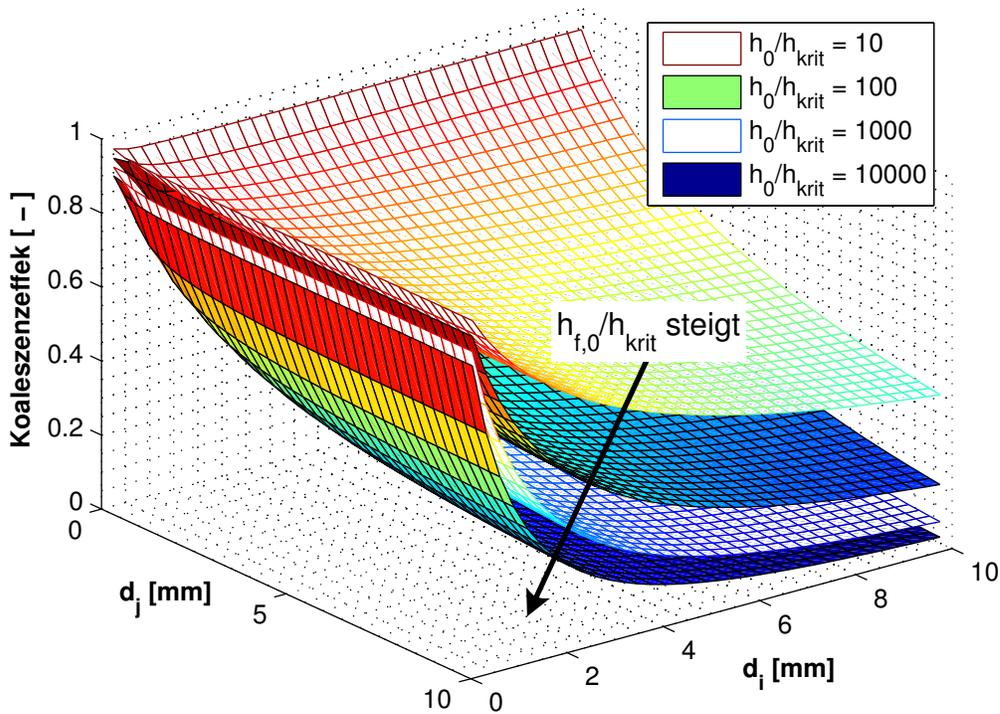
**Abbildung 2.13:** Filmentwässerungsmodell von Kirckpatrick

Abbildung (2.13) zeigt schematisch das Prinzip dieses Modells. Aus dem Modell von Kirckpatrick läßt sich zur Berechnung der Koaleszenzzeit folgende Gleichung ableiten:

$$t_{koal}(D_i, D_j) = \left( \frac{\rho_l r_{i,j}^3}{16 \sigma} \right)^{1/2} \ln \left( \frac{h_{f,0}}{h_{f,krit}} \right). \quad (2.58)$$

Der Einfluß des Filmdickenverhältnisses  $\frac{h_{f,0}}{h_{f,krit}}$  auf die Koaleszenzeffektivität  $\lambda(d_i, d_j)$  ist in Abbildung (2.14) für ein System zweier Luftblasen ( $D_i, D_j$ ) mit einem Durchmesser von 0mm – 10mm und einer Energiedissipationsrate  $\epsilon = 10\text{m}^2/\text{s}^3$  dargestellt. Mit steigendem Dickenverhältnis des Flüssigkeitsfilms  $\frac{h_{f,0}}{h_{f,krit}}$  nimmt die Koaleszenzeffektivität ab. Ausserdem ist die Koaleszenzeffektivität für zwei große Blasen sehr gering, während sie für eine große und kleine Blase gegen den Wert 1 strebt.

Grienberger verwendet ebenso die von Coulaloglou [14] formulierte Berechnungsbeziehung der Koaleszenzeffektivität (Gl. 2.55). Jedoch schlug er andere Modelle zur Bestimmung der Kontaktzeit und Koaleszenzzeit vor. Er führt eine Referenzkoaleszenzzeit bei einem Referenzblasendurchmesser in sein Koaleszenzzeitmodell ein, die experimentell bestimmt werden soll [32].



**Abbildung 2.14:** Koaleszenzeffektivität  $\lambda = f(D_i, D_j)$  für  $\epsilon_t = 10 \text{ m}^2/\text{s}^3$  und verschiedene Filmdickenverhältnisse  $\frac{h_{f,0}}{h_{f,krit}}$ .

# 3 Das Momenten-Modell für Gas-Flüssigkeitsströmungen

In diesem Kapitel wird zunächst das Konzept des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Momenten-Modells vorgestellt. Die theoretischen Grundlagen der Modellierungsmethode sind das für das entwickelte Momenten-Modell formulierte Euler-Euler-Zweifluid Modell mit den Transportgleichungen der Partikelverteilungsmomente sowie die erforderlichen Schließungsterme, die im Folgenden ausführlich erläutert werden. In den weiteren Abschnitten wird die Populationsbilanzgleichung für die Partikelgrößenverteilung und deren Lösung mit einer angenommenen Partikelverteilungsfunktionen, das entwickelte Tabellierungssystem und die Implementierung des Momenten-Modells in das CFD-Berechnungsprogramm CFX beschrieben.

## 3.1 Konzept des Momenten-Modells

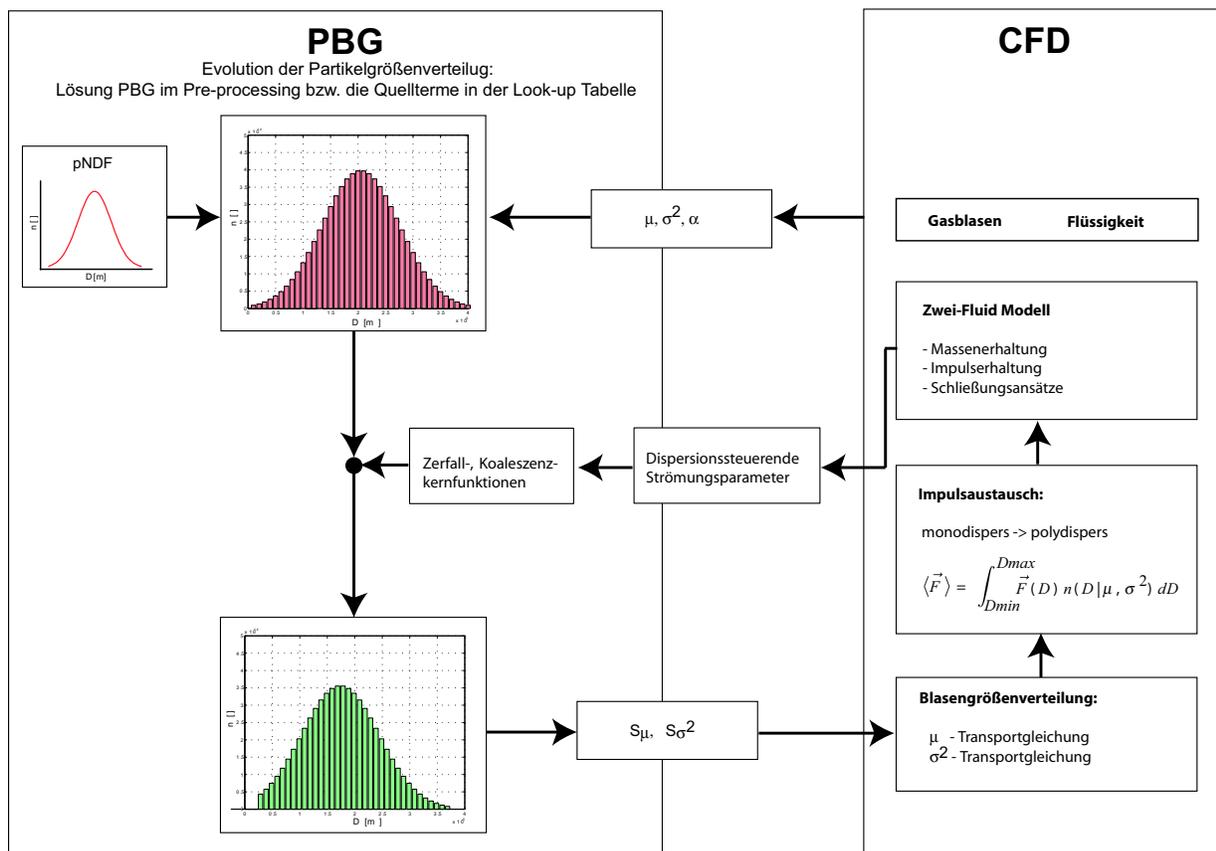
Das Momenten-Modell basiert auf den Massen-, Impuls- und Energiegleichungen des Euler-Euler Zweifluid-Ansatzes und der Populationsbilanzgleichung (PBG) mit angenommener Anzahldichtefunktion (*engl.: presumed Number Density Function, pNDF*) für die Partikelgrößenverteilung zur Berücksichtigung von Partikelgrößenänderungen durch Phänomene wie z.B. Zerfall und Koaleszenz. Abbildung (3.1) zeigt schematisch das Konzept des Momenten-Modells und dient der Beschreibung der Funktionalität des Momenten-Modelles. Der Übersichtlichkeit halber wird das Modell in zwei Teile aufgeteilt:

- A) **Der CFD-Teil** (Abbildung 3.1-rechts): Das Modell löst zunächst für jede Phase (disperse, kontinuierliche) einen Satz von Erhaltungsglei-

chungen. Weiterhin werden für die ersten beiden Momente der Partikelgrößenverteilung (Mittelwert  $\bar{D}$  und Varianz  $Var$ ) zwei Transportgleichungen gelöst, in denen die Änderung der Partikelgrößenverteilung aufgrund von Dispersion und Koaleszenz als Quellterm erscheinen. Mit den lokalen Werten dieser ersten beiden Momente und der pNDF für die Anzahldichte kann die Partikeldurchmesser-*verteilung lokal rekonstruiert* werden. Dies ermöglicht eine *polydisperse* Betrachtung der vom Blasenvolumen abhängigen Zwischenphasenwechselwirkungen. So kann z.B. der Impulsaustausch zwischen dispersen Partikeln und der kontinuierlichen Phase durch die Integration der Partikelkräfte über die rekonstruierte Verteilungsfunktion in Abhängigkeit verschiedener Partikelgrößen und nicht nur eines mittleren Partikeldurchmessers wiedergegeben werden (Abschnitt (3.2.2.2)).

- B) **Die Populationsdynamik der Partikel** (Abbildung 3.1-links): Hier wird die Populationsdynamik der Partikel, z.B. aufgrund von Partikelzerfall und -koaleszenz im „Pre-processing“-Schritt berücksichtigt. Diese Effekte ändern die Durchmesser-*verteilung der Partikel* und werden durch die Quellterme  $S_{\bar{D}}$  und  $S_{Var}$  in den Transportgleichungen für Mittelwert und Varianz des Partikeldurchmessers repräsentiert (Abschnitt (3.2.2.3)). Die Quellterme werden durch die Lösung der PBG mit der pNDF für ein räumlich homogenes Partikelsystem berechnet und als Funktion der Verteilungsmomente und der die Dispersionsprozesse steuerenden Strömungsparameter in einer *Look-up*-Tabelle gespeichert. Eine *Look-up* Tabelle ist ein Datei, in der bestimmte Einträge (Eigenschaften) Sätzen von Daten (Argumenten der Tabelle) zugeordnet sind. In vorliegendem Fall stellen die Verteilungsmomente und die Strömungsparameter die Argumente der Tabelle und die Quellterme die zugeordneten Einträge dar. Durch die Annahme einer funktionalen Form der pNDF für die Anzahldichte der Partikel in der PBG wird die separate Lösung der PBG im „Pre-processing“-Schritt möglich. Da die PBG für das räumlich-homogene System in dem Pre-processing und nicht direkt in der CFD diskretisiert und gelöst wird, kann ohne weiteres

mit einer großen Klassenanzahl der Partikelgrößen gearbeitet werden, sodass eine Diskretisierungsunabhängigkeit bezüglich der Eigenschaftscoordinate "Partikelgrößen" erreicht werden kann. Die Repräsentierbarkeit der Partikelanzahldichte durch eine pNDF in der PBG wird im Abschnitt (3.2.4) untersucht. Im Verlauf der CFD-Simulation werden die Quellterme für  $S_{\bar{D}}$  und  $S_{Var}$  entsprechend der lokalen Verhältnissen wiederholt aus den Look-up-Tabellen ausgelesen und in die Transportgleichungen eingefügt. Der Einsatz von Look-up-Tabellen hat den Vorteil, dass eine umfangreiche Berechnung zur Laufzeit der numerischen Berechnung durch eine einfache Suchoperation ersetzt werden kann. Der Geschwindigkeitsvorteil kann signifikant sein, da das Auffinden der Daten in dem Speicher sehr viel schneller als die Berechnung ist.



**Abbildung 3.1:** Das Momenten-Modells: Funktionalität und Anbindung an die CFD

## 3.2 Formulierung des Momenten-Modells

Abbildung (3.1) zeigt die Abfolge der einzelnen Schritte während einer CFD-Iteration (rechts) und die Bestimmung der Quellterme (links). Während des CFD-Laufes werden die Quellterme aus der Look-up Tabellen ausgelesen, die bereits im *pre-processing*-Schritt durch die Lösung der PBG mit der pNDF für den erwarteten Bereich der Strömungsparameter erzeugt wurden. Die eigentlichen CFD Simulationsschritte, einschließlich des Auslesens der Quellterme aus der Look-up Tabelle sind im Flussdiagramms in Abbildung (3.2) dargestellt.

Weiterhin wird in der folgenden Diskussion der Modelldetails mit der gleichen Unterteilung wie im vorigen Abschnitt gearbeitet:

- A: CFD-Modellteil, in dem auf die Erhaltungsgleichungen, die Transportgleichungen der Verteilungsmomente ( $\bar{D}$  und  $Var$ ), die Wechselwirkungssterme und die Bindung zu den Look-up Tabellen eingegangen wird. Dies stellt den Modellteil dar, der in der CFD gelöst wird (Abbildung 3.2).
- B: Pre-processing-Modellteil, in dem die Lösung der PBG mit der angenommenen Verteilungsdichtefunktion durchgeführt und die Repräsentierbarkeit der pNDF geprüft wird. Die Generierung der Look-up Tabellen und das Tabullierungssystem werden hierbei erläutert.

### 3.2.1 Annahmen und Voraussetzungen zur Herleitung des Modells

Folgende Voraussetzungen müssen bei der Herleitung und Anwendung des entwickelten Momenten-Modells erfüllt sein:

1. In der allgemeinen Formulierung der Modellgleichungen wird von einem dispersen System ausgegangen. Die disperse Phase liegt in Form disperser Partikel in einer sie umgebenden kontinuierlichen Phase vor. Die zwei Phasen werden im Rahmen des Euler-Euler Zweifluid Modells getrennt behandelt und durch Schließungsrelationen und Terme für den Impuls-, Massen- und Energieaustausch gekoppelt.

2. Der Impulsaustausch wird in der allgemeinen Formulierung durch einen Term als Summe aller Kräfte (Widerstands- und *non-drag*-Kräfte) berücksichtigt, die die Phasen aufeinander ausüben. Erst in den Validierungsstudien werden die relevanten Kräfte des jeweiligen behandelten dispersen System definiert und in den Impulsgleichungen implementiert.
3. Die Partikeln besitzen verschiedene Durchmesser und sind in verschiedenen Blasenklassen eingeordnet. Dies gilt in der Lösung der PBG genauso wie bei der numerischen Strömungssimulation (CFD) zur Rekonstruieren der Partikelgrößenverteilung für die Integration der Partikelkräfte über die verschiedenen Partikelgrößen. Auf diesem Wege kann eine polydisperse Betrachtung des Impulsaustausches realisiert werden. Es wird ein maximaler und ein minimaler Partikeldurchmesser und die Partikelklassenanzahl definiert.
4. Es wird eine Impulsgleichung für die disperse Phase für alle Partikelklassen gelöst. Partikel verschiedener Größen bewegen sich mit der selben Geschwindigkeit. Es werden allgemeine Transportgleichungen für die Momente der Verteilungsfunktion hergeleitet, die die Terme zur Berücksichtigung von verschiedenen Partikelgeschwindigkeiten beinhalten. Bei der Validierung werden jedoch approximierte Transportgleichungen der Momente verwendet, da der CFD-Code CFX eine vordefinierte Form für skalare Transportgleichung löst und keine Modifikationen seiner Gleichungen erlaubt. Dieser Aspekt wird im Abschnitt (3.2.2.3 und 3.2.2.3) ausführlicher diskutiert.
5. Bei der Behandlung der PBG wird von einem Gas-Flüssigkeits-Blasensystem ausgegangen. Die Lösung wird unter Berücksichtigung von Prozessen des Blasenzerfalls und der Blasenkoaleszenz erfolgen. Einerseits stellen Gasblasen-Flüssigkeitssysteme die Validierungsfälle dar, andererseits sind reale Kern-Funktionen der Partikeldynamik für die Untersuchung der Repräsentierbarkeit der Partikelanzahldichte durch die pNDF in der PBG erforderlich.
6. Die Turbulenzmodellierung ist spezifisch für das behandelte disperse System. Daher wird die Turbulenzbehandlung erst in der Validie-

rungsstudie des jeweiligen System durchgeführt.

### 3.2.2 CFD-Modellteil

Dieser Teil des Momenten-Modells stellt die Simulationsschritte in dem CFD-Code, das Verbinden mit den Look-up Tabellen und das Auslesen der Quellterme aus ihnen während des CFD-Schrittes dar (Abbildung 3.2). Nachfolgend wird die Herleitung der Modellgleichungen (Massen-, Impuls- und Energieerhaltungsgleichungen sowie die Transportgleichungen der Verteilungsmomente ( $\bar{D}$  und  $Var$ ) und die Kopplung der Phasen mit den Wechselwirkungstermen dargestellt.

#### 3.2.2.1 Erhaltungsgleichungen des Momenten-Modells

Betrachtet man zunächst vereinfachend eine Zweiphasenströmung ohne Massen- und Energieaustausch, so übernimmt das Momenten-Modell das partielle Differentialgleichungssystem des Zweifluidmodells. Es besteht aus zwei Kontinuitätsgleichungen (Gleichungen (2.1-2.2)) und zwei Impulsgleichungen (Navier-Stokes Gleichungen (2.3-2.4)), wie sie im Abschnitt (2.2) eingeführt sind.

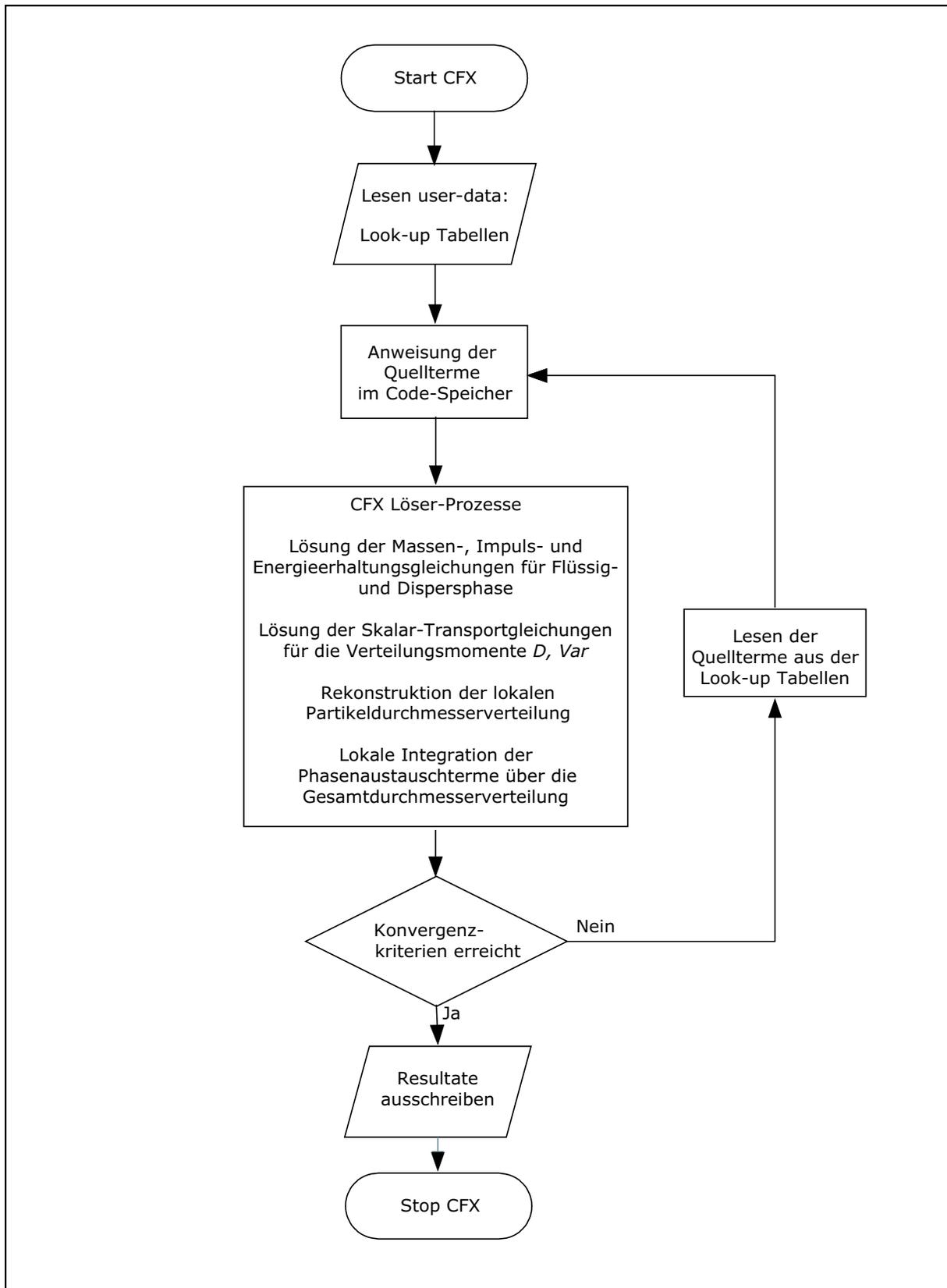
Zur Anwendung des Momenten-Modells für disperse Strömungssysteme mit Masse- und Energieaustausch sind detaillierte Modellgleichungen im Anhang A behandelt.

Wie bereits im Abschnitt (2.2) erläutert, beinhaltet der Wechselwirkungsterm  $\vec{F}_w$  in der Impulsgleichungen der Flüssigkeits- und Partikelphase die Summe aller Kräfte, die von jeder Phase auf die andere ausgeübt werden. Im Abschnitt (2.2.2) wurde auf die Widerstandskraft und die sog. *non-drag*-Kräfte als die wichtigsten partikelgrößenabhängige Zwischenphasenkräfte eingegangen und werden daher an dieser Stelle nicht weiter erläutert. Für die Validierungsstudien werden die relevanten Partikelkräfte für die jeweilige Blasenströmung definiert und der Term  $\vec{F}_w$  wird hergeleitet.

Die Schließungsbedingungen des Zweifluid Modells aus dem Abschnitt (2.2.3) gelten auch für das hier besprochene Momenten-Modell.

#### 3.2.2.2 Poly-disperser Impulsaustausch im Momenten-Modell

Um die Partikelkräfte für die Gesamtpartikelgrößen (poly-dispers) und nicht nur für einen mittleren oder repräsentativen Partikeldurchmesser (mono-dispers) berücksich-



**Abbildung 3.2:** Das Momenten-Modell: CFD-Prozesse und Kopplung zu Look-up Tabellen

tigen zu können, müssen die Partikelkräfte über das Gesamtspektrum der Partikeldurchmesser integriert werden. Wie einleitend beschrieben, kann die Partikeldurchmesserverteilung mit den lokalen Werten von Mittelwert und Varianz sowie einer pNDF für die Anzahldichte rekonstruiert werden.

Die Integration der Partikelkräfte über die Verteilungsfunktion ist in Gl. 3.1 dargestellt.

$$\langle \vec{F} \rangle = \int_{Dmin}^{Dmax} \vec{F}(D) f(D|\bar{D}, Var) dD \quad (3.1)$$

In einem Zweiphasenströmungssystem mit Stoff- bzw. Energieaustausch können die Austauschterme analog zu dem oben beschriebenen Ansatz der poly-dispersen Impulsaustausch realisiert werden. Die Methode ist in Anhang A dargestellt. Sie wurde bereits zur Beschreibung der Ausbreitung und Verdampfung von Dieselsprays angewandt [40].

#### 3.2.2.3 Transportgleichungen für die Momente der Partikelgrößenverteilung

Der Transport von Momenten (Mittelwert  $\bar{D}$  und Varianz  $Var$ ) der Partikelgrößenverteilung wird als Transport von Eigenschaften (Skalaren) dargestellt werden. Diese Annahme wird hier getroffen, da das CFD-Programm CFX die Lösung von zusätzlichen Skalar-Transportgleichungen nur in der selben Form wie die Zweifluidmodellgleichungen (Gleichung (3.2)) erlaubt. Die Terme der Transportgleichungen von zusätzlichen Skalaren in CFX sind somit mit dem Volumenanteil der transportierenden Phase gewichtet. Daher werden die allgemeinen Transportgleichungen der Momente, die im Rahmen des entwickelten Momenten-Modells hergeleitet wurden (B.10–B.11 im Anhang B) angenähert, so dass sie den Gleichungsformen, die das Programm CFX verwendet, entsprechen. Dadurch kann der Lösungsalgorithmus von CFX benutzt werden. Die an das Programm CFX angepassten Transportgleichungen werden im nächsten Abschnitt hergeleitet.

Die allgemeine Form einer Transportgleichung eines “zusätzlichen Skalars“  $\Phi_p$  im CFD-Programm CFX, der in der dispersen Phase transportiert wird, sieht wie folgt aus [2]:

$$\frac{\partial \alpha_p \Phi_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_p \vec{u}_p \Phi_p) - \nabla \cdot \left( \alpha_p \left( \Lambda_p^{(\Phi)} + \frac{\mu_{t_p}}{Sc_{t_p}} \right) \nabla \cdot (\Phi_p) \right) = S_p^\Phi. \quad (3.2)$$

Hierbei ist  $\Phi_p$  die konservierte Größe per Volumeneinheit der Partikelphase  $p$  ( $\Phi_p = \rho_p \phi_p$ , mit  $\phi_p$  als massenbezogene Größe). Weiterhin ist  $\alpha_p$  der Volumenanteil der dispersen Phase,  $\Lambda_p^{(\Phi)}$  die kinematische Diffusivität der transportierten Größe,  $\mu_{t_p}$  die turbulente Viskosität und  $Sc_{t_p}$  die turbulente Schmidtzahl. Der Quellterm auf der rechten Gleichungsseite  $S_p^\Phi$  steht für die externe volumetrische Änderung der Größe  $\Phi_p$  pro Zeit- und Volumeneinheit.

Unter folgenden Annahmen kann der Transport der Blasen im entwickelten Momenten-Modell durch den Transport der Größenverteilungsmomente mit Gleichung (3.2) repräsentiert werden:

**Transport durch Konvektion:** Blasen werden mit der Strömung transportiert. Dies wird durch die Konvektion des Mittelwerts und der Varianz der Blasendurchmesser-Verteilung mit der Blasengeschwindigkeit repräsentiert, die in der Impulsgleichung der Dispersionsphase berechnet wurde.

**Lokale Änderung der Blasengrößenverteilung:** Sie resultiert aus dem Zerfall bzw. der Koaleszenz der Blasen. Die Rate der Größenänderung ist in der Transportgleichungen für Mittelwert und Varianz als Quellterme vertreten, die aus der Look-up Tabelle während der CFD-Lösung ausgelesen wird.

**Transport durch Diffusion:** Aufgrund der Annahme, dass Blasendiffusion nur für sehr kleine Blasen relevant ist, wird hier von einem diffusionsarmen System ausgegangen und der turbulente Diffusionsterm in Gleichung (3.2) vernachlässigt. Die turbulente Blasendiffusion in der Literatur ist bislang kaum untersucht worden.

Unter diesen Voraussetzungen erhält man die in CFX implementierbaren Transportgleichungen für Mittelwert und Varianz der Blasendurchmesser-Verteilung:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_p \bar{D}) + \nabla \cdot (\alpha_p \bar{u}_p \bar{D}) = S^{\bar{D}}, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_p Var) + \nabla \cdot (\alpha_p \bar{u}_p Var) = S^{Var} + S^{(G_{\bar{D}})}. \quad (3.4)$$

Hierbei gilt:

- $S^{\bar{D}}$ : Quellterm zur Beschreibung der zeitlichen Änderung des Mittelwerts vom Blasendurchmesser aufgrund der Dispersion und Koaleszenz. Dies wird durch die Lösung der PBG im *Pre-processing*-Schritt ermittelt, in der Look-up Tabelle gespeichert und während der CFD-Lösung ausgelesen.
- $S^{Var}$ : Quellterm zur Beschreibung der zeitlichen Varianzänderung aufgrund der Dispersion und Koaleszenz. Dies wird ebenfalls durch die Lösung der PBG im *Pre-processing*-Schritt ermittelt, in der Look-up Tabelle gespeichert und während der CFD-Lösung ausgelesen.
- $S^{G_{\bar{D}}}$ : Quellterm, der den Einfluss des Mittelwertgradienten auf die Varianz beschreibt. Er ist definiert durch:

$$S^{G\bar{D}} = C_g \bar{D} (\nabla \bar{D})^2 - C_d \rho_l \frac{\epsilon}{k} Var \quad (3.5)$$

mit den Konstanten  $C_g = 2.86$  nach [65] und  $C_d = 0.0$ , da die turbulente Diffusion der Varianz vernachlässigt wird. Die Größen  $k$  und  $\epsilon$  sind die turbulente kinetische Energie bzw. Dissipationsrate.

Der Vergleich zwischen den hier angenäherten Momententransportgleichungen (3.3–3.4) mit den im Rahmen des entwickelten Momenten-Modells hergeleiteten Gleichungen (B.10–B.11 im Anhang B) im Anhang B zeigt, dass der Unterschied in der Gewichtung mit dem Volumenanteil der dispersen Phase  $\alpha_p$  der angenäherten Gleichungen besteht. Die angenäherte Formulierung ist richtig, wenn der Volumenanteil der dispersen Phase konstant ist und alle Partikel sich mit der gleichen Geschwindigkeit bewegen. Diese Näherung stellt für die hier interessierten Anwendungen eine brauchbare Näherung dar, da der Gasvolumenanteil im begasten Rührreaktor konstant bleibt, wenn die numerische Lösung einen quasi-stationären Stand erreicht hat und die Lösung unter der Annahme einer Geschwindigkeit für all Blasengrößen durchgeführt wird. Die Momente der Verteilungsfunktion (in den Gleichungen (3.3–3.4)) werden mit dieser Blasengeschwindigkeit transportiert.

### 3.2.3 *Pre-processing*-Modellteil

In diesem Abschnitt wird die PBG mit der angenommenen Verteilungsfunktion (pNDF) vorgestellt. Die Repräsentierbarkeit der Anzahldichte über der angenommenen Verteilungsfunktion wird geprüft. Die separate Lösung der PBG mit der pNDF bzw. die Generierung der Look-up Tabellen für die Terme der Partikelgrößenevolution wird nachfolgend beschrieben.

#### 3.2.3.1 Die PBG mit pNDF und ihre Lösung im Datenaufbereitungsschritt:

Im Rahmen des entwickelten Momenten-Modell wird die PBG im Datenaufbereitungsschritt (*Pre-Processing*) mit einer angenommenen Verteilungsfunktion gelöst. Die Lösung bzw. die Änderung der Partikelgrößen wird in

Look-up Tabellen in Form von Quelltermen gespeichert, die während der eigentlichen CFD-Lösung aus den Tabellen ausgelesen werden. In diesem Abschnitt wird dieser Datenaufbereitungsschritt entwickelt und erläutert.

In der Populationsbilanzgleichung zur Beschreibung disperser Systeme werden die dispersen Partikel durch eine Verteilungsfunktion in Raum, Zeit und Eigenschaftskordinaten beschrieben (Abschnitt 3.2.3.1). Bei der Entwicklung des Modells zum Repräsentieren PBG-Verteilungsfunktion durch angenommene Verteilungsfunktion wird von der allgemeine Form der PBG als Erhaltungsgleichung für die Partikelanzahldichte  $f$ , Gleichung (2.25) und folgenden Annahmen ausgegangen:

- Die PBG wird für ein räumlich homogen-verteiltes Partikelsystem betrachtet. Die Verteilung berücksichtigt lediglich die Eigenschaftskordinate Partikeldurchmesser  $D_p$ . Die örtliche Verteilung für das homogene System bleibt unberücksichtigt und somit verschwindet der Term der Partikelgrößenänderung infolge der konvektiven Durchströmung des Bilanzelements.
- Da keine Partikelgrößenänderung infolge des Stoffaustausches berücksichtigt ist, wird der Term der Konvektion entlang der Eigenschaftskordinate  $D_p$  (der dritte Term in Gleichung (2.25)) vernachlässigt. Im Fall einer Partikeldurchmesseränderung infolge des Stoffaustausches kann die Partikelgrößenänderung mit einer einfachen Modifikation in der Lösung berücksichtigt und als Quellterm tabelliert werden. Dieser Term kann dann in den Massenerhaltungsgleichungen der Strömungslösung eingesetzt werden (Anhang A).

Unter diesen Voraussetzungen reduziert sich die eindimensionale PBG (2.25) zu:

$$\frac{\partial f(D_p, t)}{\partial t} = S_B - S_D. \quad (3.6)$$

In dieser Gleichung ist die zeitlichen Änderung der Partikelgrößenvertei-

lung lediglich abhängig von den Quelltermen  $S_B$  und  $S_D$ , die die Änderung des Partikeldurchmessers infolge der Dispersion und Koaleszenz von Blasen beschreiben. Die PBG (3.6) für die Anzahldichte des Blasendurchmessers  $f(D_p, t)$  unter Berücksichtigung der Modelle für die Quellterme  $S_B$  und  $S_D$  (Abschnitt 2.4) ergibt sich zu:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f(D_p, t)}{\partial t} = & \frac{D_p^2}{2} \int_{D_{pmin}}^{D_p} \lambda((D_p^3 - D_p'^3)^{1/3}, D_p') h((D_p^3 - D_p'^3)^{1/3}, D_p') \\
 & f((D_p^3 - D_p'^3)^{1/3}, t) f(D_p', t) \frac{1}{(D_p^3 - D_p'^3)^{2/3}} dD_p' \\
 & + \int_D^{D_{pmax}} \nu(D_p') \beta(D_p, D_p') g(D_p) f(D_p', t) dD_p' \\
 & - \int_{D_{pmin}}^{D_{pmax}} \lambda(D_p, D_p') h(D_p, D_p') f(D_p, t) f(D_p', t) dD_p' \\
 & - g(D_p) f(D_p, t). \tag{3.7}
 \end{aligned}$$

Im Abschnitt (2.4) wurden die kinetischen Parameter ( $g$ ,  $\nu$ ,  $\beta$ ,  $h$  und  $\lambda$ ) zur Modellierung von Blasenzerfall und -koaleszenz ausführlich diskutiert. An dieser Stelle muss erwähnt werden, dass die Mechanismen der Blasenzerfall und -koaleszenz auf der rechten Seite der Gleichung (3.7) nur für die realen Verhältnisse der Partikel eingesetzt werden können. Mit den realen Verhältnissen sind die realen Partikelgrößen (-durchmesser) und -anzahl gemeint. Daher stellt die Partikelanzahldichte  $f$  in Gleichung (3.7) die mit dem Volumenanteil der dispersen Phase aus der pNDF skalierte Partikelanzahldichte dar. Sie ist an dem realen Partikeldurchmesser Intervall  $[D_{pmin} - D_{pmax}]$  definiert. Nachfolgend wird  $f(D_p, t)$  als reale Partikelanzahldichte, während die pNDF als funktionale Partikelanzahldichte  $\tilde{f}(D, t)$  bezeichnet. Die letzte ist an dem normierten Intervall der Partikeldurchmesser  $[0 - 1]$  definiert. Im Abschnitt (3.2.3.3) wird auf die Skalierung der Partikelgrößenverteilung näher eingegangen.

Untersuchungen zur Repräsentierbarkeit der Anzahldichtefunktion in der

PBG durch pNDF in einem dispersen Luftblasen-Flüssigkeits-System zeigen eine sehr gute Übereinstimmung der zeitlichen Entwicklung von Blasengrößenverteilungen (siehe Abschnitt (3.2.4)). Dabei wurde die direkten PBG-Lösung mit der Lösung unter der Annahme der *gestutzten* Normalverteilung bzw.  $\beta$ -Funktion für die Blasenanzahldichte verglichen.

### 3.2.3.2 Lösungsmodell der PBG mit pNDF im Pre-processing

Für die numerische Behandlung der Blasengrößenverteilung werden die Blasen entsprechend ihrer Größen in Blasenklassen eingeteilt. Da in den Quell- und Senkentermen die Koaleszenz- und Zerfallsprozesse der Blasen über den Blasendurchmesser bilanziert werden, wird weiterhin mit einer Aufteilung der Durchmesserklassen gearbeitet. Die Diskretisierung nach dem Blasendurchmesser hat den Vorteil gegenüber der Massendiskretisierung, dass bei äquidistanter Massendiskretisierung die Intervalle sehr ungleichmäßig über den Blasendurchmesser verteilt sein können. Im Gebiet kleiner Blasen existieren nur sehr wenige Blasenklassen, während im Bereich großer Blasen sehr viele Klassen vorhanden sind. In Untersuchungen, die mit Massendiskretisierung arbeiten, wird die Massenteilung auf eine anfängliche äquidistante Durchmesserdiskretisierung aufgebaut. Das hier vorgeschlagene Modell für die Lösung der PBG mit einer pNDF im Pre-processing ist als Flussdiagramm in Abbildung (3.3) dargestellt und kann in folgenden Schritten gegliedert werden:

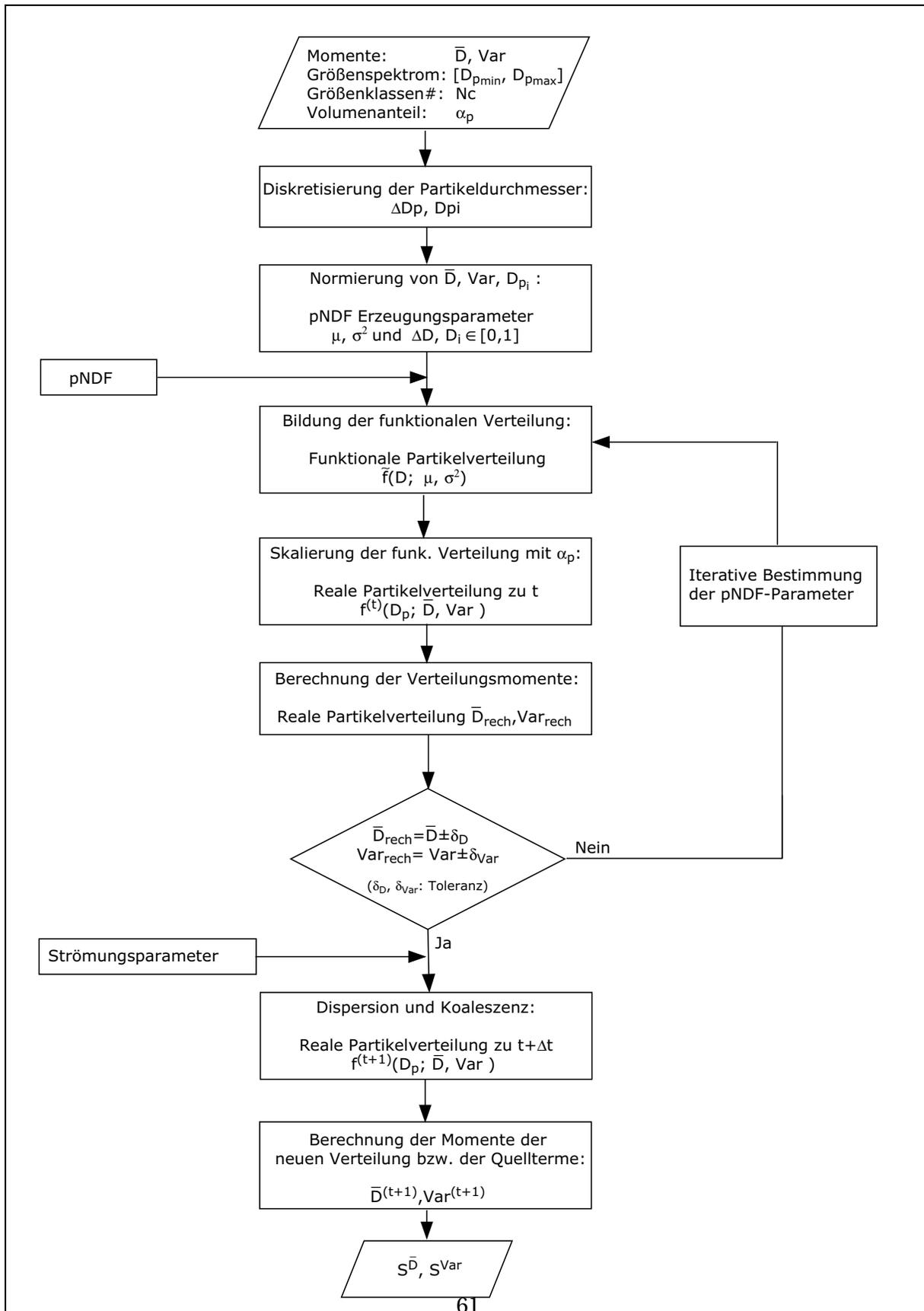
1. Diskretisierung der Partikelgrößenverteilung: Der gegebene Bereich des Partikeldurchmessers  $[D_{pmin}, D_{pmax}]$  wird entsprechend der gewählten Anzahl an Größenklassen ( $NC$ ) äquidistant eingeteilt. Der mittlere Durchmesser einer Klasse wird als charakteristischer Durchmesser ( $D_{pi}$ ) betrachtet:

$$D_{pi} = D_{pmin} + \Delta D_p \left( i - \frac{1}{2} \right), \quad (3.8)$$

mit:

$$\Delta D_p = \frac{D_{pmax} - D_{pmin}}{NC}. \quad (3.9)$$

### 3.2 Formulierung des Momenten-Modells



**Abbildung 3.3:** Flussdiagramm des Datenaufbereitungsschritts im entwickelten Momenten-Modells

2. Normierung der Verteilungsmomente  $\bar{D}$  und  $Var$  bzw. des charakteristischen Durchmessers  $D_{pi}$ :

$$\mu = \frac{\bar{D} - D_{pmin}}{D_{pmax} - D_{pmin}}, \quad (3.10)$$

$$\sigma^2 = \frac{Var}{(D_{pmax} - D_{pmin})^2}, \quad (3.11)$$

$$D_i = \frac{D_{pi} - D_{pmin}}{D_{max} - D_{pmin}}, \quad (3.12)$$

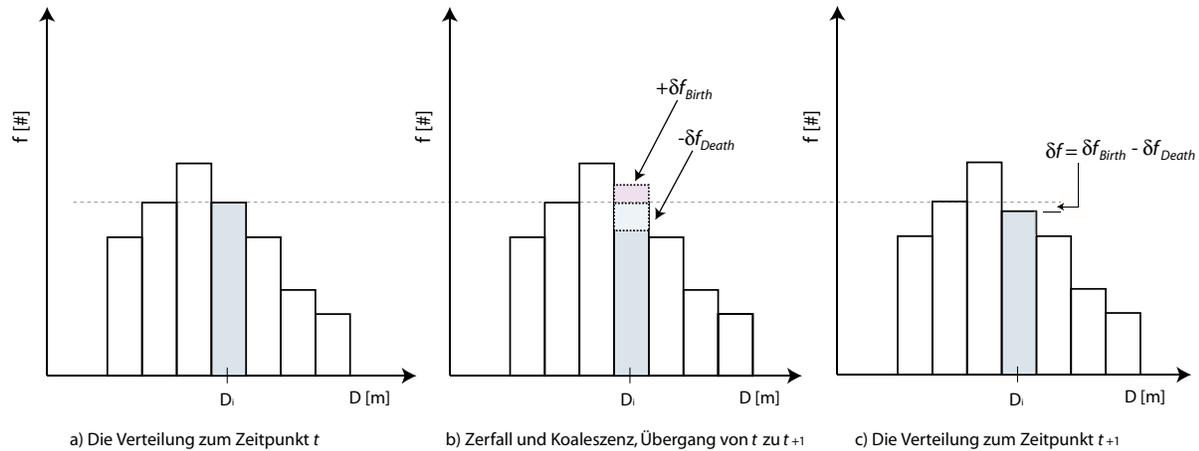
wobei  $\mu$  und  $\sigma^2$  die Erzeugungparameter der funktionalen pNDF darstellen, während  $\bar{D}$  und  $Var$  die Momente der realen Verteilung sind, für sie die zusätzlichen Transportgleichungen in dem CFD-Code gelöst werden. Die mittleren Durchmesser ( $D_i$ ) repräsentieren dann die normierte charakteristischen Durchmesser in dem Intervall der Partikeldurchmesser  $[0 - 1]$ .

3. Mit den Erzeugungparametern  $\mu$  bzw.  $\sigma^2$  und einer pNDF (*gestutzte Gauß- oder  $\beta$ -Verteilung*) wird die funktionale Partikelverteilung  $\tilde{f}(D; \mu, \sigma^2)$  gebildet und entsprechend des Volumenanteils der Partikelphase  $\alpha_p$  skaliert. Mit der Skalierung erhält man die Partikelanzahldichte der realen Verhältnisse  $f(D_p, t; \bar{D}, Var)$  zum Zeitpunkt  $t$ . Dieser Schritt ist in Abschnitt (3.2.3.3) näher erläutert.
4. Die Partikelverteilung nach den Dispersionsvorgängen  $f(D_p, t + 1; \bar{D}, Var)$  wird dann entsprechend der gegebenen Strömungsparameter und die Applikation der Zerfalls- und Koaleszenzmechanismen auf die diskreten Klassen der realen Verteilung im Rahmen der PBG (3.7) berechnet. Abbildung (3.4) zeigt den für die Berechnung der Anzahldichte verwendeten Algorithmus schematisch auf:
- (a) Diagramm a: zeigt die Partikelverteilung  $f(D_p, t; \bar{D}, Var)$  vor der Dispersion,
  - (b) Diagramm b: zeigt die Anzahldichteänderung einer Durchmesserklasse ( $i$ ) infolge von Koaleszenz und Zerfall, wobei  $\delta n_{Birth}$  bzw.

$\delta n_{Death}$  das Anzahldichteinkrement und -dekrement der betrachteten Klasse ist:

$$\frac{d}{dt} \int_{D_{pi-\frac{1}{2}}}^{D_{pi+\frac{1}{2}}} f(D_p, t) = \delta n_{Birth} - \delta n_{Death} \quad (3.13)$$

(c) Diagramm c: stellt die Partikelanzahldichte  $f(D_p, t + 1; \bar{D}, Var)$  im nächsten Zeitschritt (nach der Dispersion) dar.



**Abbildung 3.4:** Schematische Darstellung des Algorithmus zur Bestimmung der Anzahldichteänderung aufgrund von Zerfall und Koaleszenz von Blasen

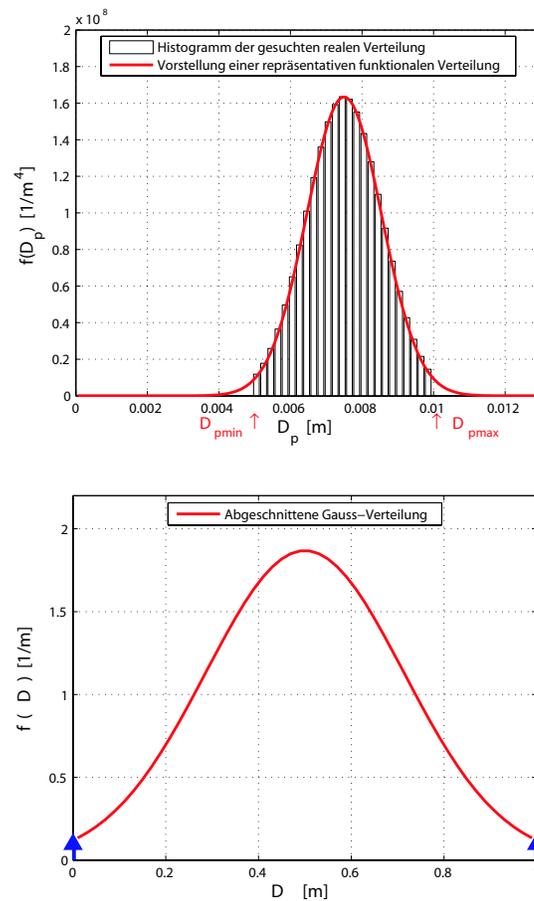
- Die Momente der nach dem Dispersionsvorgang entstehenden Verteilung ( $\bar{D}^{(t+1)}$  und  $Var^{(t+1)}$ ) werden dann numerisch berechnet. Aus den Differenzen zwischen den Momenten der Verteilung vor und nach der Dispersion werden die Quellterme  $S^{\bar{D}}$  bzw.  $S^{Var}$  für den CFD-Zeitschritt  $\Delta t$  ermittelt:

$$S^{\bar{D}} = \frac{\bar{D}^{(t+1)} - \bar{D}^{(t)}}{\Delta t} \left[ \frac{m}{m^3 s} \right] \quad (3.14)$$

$$S^{Var} = \frac{Var^{(t+1)} - Var^{(t)}}{\Delta t} \left[ \frac{1}{m^3 s} \right] \quad (3.15)$$

- Die berechneten Quellterme werden anschließend in *Look-up* Tabellen gespeichert und dem Strömungslöser zur Verfügung gestellt. Die Quell-

terme werden zum Start der CFD-Rechnung aus den *Look-up* Tabellen vom CFD-Code ausgelesen und im Speicher hinterlegt. Während des CFD-Berechnung werden die Quellterme entsprechend der lokalen Strömungsparameter ( $\bar{D}$ ,  $Var$ ,  $\alpha_p$ ,  $\epsilon_t$ , etc.) in den Transportgleichungen der Momente (Gl. 3.3 bzw. 3.4) zu jedem Zeitschritt eingesetzt.



**Abbildung 3.5:** Schematische Darstellung der Repräsentierbarkeit der Partikelanzahldichte durch eine funktionale Form

### 3.2.3.3 Bildung der Partikelanzahldichte mit Hilfe von pNDFs

Ein wichtiges Element der Datenaufbereitung im Pre-processing ist die Bildung der Partikelanzahldichteverteilung mit angenommener pNDF (sie-

he auch Schritt 3 der Lösung der PBG mittels pNDF (Absch. 3.2.3.2)). Im Folgenden wird auf diesen Schritt 3 näher eingegangen. Die Behandlung wird anhand einer funktionalen Verteilungen, der *gestutzte Gauß-Verteilung* durchgeführt.

**Ausgangssituation:** Gesucht wird die reale Verteilung der Partikelgrößen, für die die Momente  $\bar{D}$  und  $Var$ , der maximale und minimale Partikeldurchmesser  $D_{p_{min}}$  und  $D_{p_{max}}$  und der Disperphasenvolumenanteil  $\alpha_p$  vorliegen. Das Histogramm in Abbildung (3.5-oben) stellt die gesuchte Verteilung dar. Das Histogramm kann durch die kontinuierliche funktionale Verteilung (z.B. die durchgehende Linie in Abbildung (3.5-oben)) repräsentiert werden.

**Auswahl der pNDF:** Die funktionale Verteilung kann eine beliebige pNDF sein, die jedoch zur Darstellung der realen Partikelverteilung physikalisch sinnvoll sein soll. Sie muss die reale Verteilung zwischen der minimalen und maximalen Partikelgröße gut annähern können. Beispielsweise kann die Normal-Verteilung (durchgehende Linie in Abbildung 3.5-oben) das Histogramm der realen Partikelverteilung sehr gut repräsentieren. Jedoch ist sie im Bereich  $-\infty < D_p < +\infty$  definiert, was physikalisch nicht sinnvoll ist. Geeignete pNDFs können Verteilungen sein, die in endlichen Bereichen definierbar sind, wie z.B. die  $\beta$ -Verteilung bzw. die *gestutzte-Gauß-Verteilung*. Erstere ist per Definition im Bereich  $[0, 1]$  definiert. Die zweite stellt einen Teil der Normal-Verteilung zwischen 0 und 1 dar und ersetzt die abgeschnittenen Teile mit Hilfe eines Dirac Impuls bei  $D = 0$  bzw.  $D = 1$  (Abbildung 3.5-unten), siehe hierzu Abschnitt (2.3.1.3) bzw. [7]. Da die Durchmesser  $D_{min}$  und  $D_{max}$  nicht notwendigerweise 0 und 1 sein müssen, besteht die Möglichkeit, die im Bereich  $[0, 1]$  definierten funktionalen Verteilungen auf die realen Verhältnisse in den Bereich  $[D_{min}, D_{max}]$  zu skalieren. Die *gestutzte-Gauß-Verteilung* ist

wie folgt definiert:

$$\tilde{f}(D) = \begin{cases} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{1}{2}(\frac{D-\mu}{\sigma})^2), & 0 < D < 1 \\ \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{\mu}{\sqrt{2}\sigma}\right), & D=0 \\ \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{1-\mu}{\sqrt{2}\sigma}\right), & D=1 \end{cases} \quad (3.16)$$

**Modifikation der pNDF:** Wie bereits erwähnt wird die funktionale (*gestutzte-Gauß*) Verteilung mit den aus den realen Verteilungsmomenten  $\bar{D}$  und  $Var$  normierten Parametern  $\mu$  und  $\sigma^2$  gebildet. Die resultierende funktionale Verteilung besitzt nicht immer Momente, deren Werte den Erzeugungsparametern entsprechen. Dies ist aufgrund der abgeschnittenen Teile der Normal-Verteilung in dem Bereichen  $D \leq 0$  und  $D \geq 1$ . Die Abweichung ist abhängig von der Breite der Verteilung ( $\sigma^2$ -Wert). Das bedeutet aber, dass die aus der funktionalen Verteilung skalierte reale Verteilung nicht die selben Ausgangsmomente  $\bar{D}$  und  $Var$  aufweisen kann. Um dieses Problem zu umgehen, wurde ein iteratives Verfahren entwickelt. Das Verfahren erzeugt eine anfängliche *gestutzte-Gauß-Verteilung* mit den aus den realen Werten  $\bar{D}$  und  $Var$  normierten Verteilungsparametern  $\mu$  und  $\sigma^2$ . Die Momente der erzeugten Verteilung werden berechnet und ggf. korrigiert, falls sie nicht mit den Erzeugungsparametern übereinstimmen. Mit den korrigierten Werten der Momente wird eine neue Verteilung erzeugt und deren Momente erneut berechnet und korrigiert bis die Abweichung der errechneten Momente von der Erzeugungsparametern unterhalb eines zulässigen Fehlers liegt (Iteration). Dies garantiert eine Übereinstimmung der Momente der mit Hilfe der *gestutzte-Gauss-Verteilung* gebildeten realen Partikelverteilung mit der Ausgangsmomenten  $\bar{D}$  und  $Var$ . Bei der Berechnung der Momente wird die Verteilung unter Vernachlässigung der Maxima normiert, so dass die Eigenschaft der funktionalen pNDF ( $\int f(D_p) dD_p = 1$ ) erhalten bleibt.

**Skalierung der pNDF zur realen Verteilung:** Die Skalierung der normierten gestutzten Normalverteilung (siehe vorherigen Schritt) mit Hilfe des

Volumenanteils der dispersen Phase soll die reale Partikelanzahldichteverteilung ergeben. Sie beschreibt die physikalischen Verhältnisse der Partikelverteilung und weist deren Verteilungsmomente auf. Dieser Schritt ist notwendig, damit die Dispersionsprozesse direkt auf die realen Partikeldurchmesser einwirken können und somit eine komplizierte Umformulierung der Kern-Funktionen der Dispersion vermieden werden kann. Die Skalierung wird volumenbezogen durchgeführt, um zu gewährleisten, dass das Volumen unter der Partikeldurchmesserverteilung (bezogen auf  $1 \text{ m}^3$ ) gleich dem Volumenanteil der realen Partikel ist. Berechnet man die Momente der skalierten Verteilung, sollen sie gleich der Ausgangsmomente  $\bar{D}$  und  $Var$  sein. Aus der Skalierung erhält man schließlich die Verteilung  $f(D)$  in Abhängigkeit der Partikeldurchmesser.

Der Skalierungsfaktor  $\gamma$  berechnet man aus dem Gesamtvolumen der Partikel unter der normierten Verteilung und dem Volumen der realen Partikel.

$$\gamma = \frac{V_f}{V_{\tilde{f}}}. \quad (3.17)$$

Das Volumen unter der realen Verteilung der Partikeldurchmesser, bezogen auf  $1 \text{ m}^3$ , muss dem Volumenanteil der dispersen Phase  $\alpha_p$  entsprechen:

$$\alpha_p = \frac{V_f}{V_{total}} = \frac{V_f}{1 \text{ m}^3} \rightarrow \alpha_p = V_f, \quad (3.18)$$

während das Volumen unter der funktionalen Verteilung  $V_{\tilde{f}}$  sich durch numerische Integration über alle Größenklassen bestimmen lässt:

$$V_{\tilde{f}} = \int D^3 \tilde{f}(D) dD. \quad (3.19)$$

Mit:

$$V_f = \int D_p^3 f(D_p) dD_p \quad (3.20)$$

ergibt sich für eine diskrete Verteilung:

$$\gamma = \frac{V_f}{V_{\tilde{f}}} = \frac{\sum_{i=1}^{NC} D_{pi}^3 f(D_{pi}) dD_p}{\sum_{i=1}^{NC} D_i^3 \tilde{f}(D_i) dD}. \quad (3.21)$$

Diese Beziehung muss bei einer diskreten Betrachtung der Verteilung in Größenklassen für jede dieser Klassen erfüllt sein. Man kann daher auch schreiben:

$$\frac{D_{pi}^3 f(D_{pi}) dD_p}{D_i^3 \tilde{f}(D_i) dD} = \gamma. \quad (3.22)$$

Stellt man nach  $f(D_{pi})$  um, erhält man die skalierte reale Anzahldichte der Klasse  $i$ :

$$f(D_{pi}) = \gamma \frac{D_i^3}{D_{pi}^3} \frac{dD}{dD_p} \tilde{f}(D_i). \quad (3.23)$$

### 3.2.4 Repräsentierbarkeit der Partikelengrößenverteilung durch eine pNDF

Um die Repräsentierbarkeit der pNDF für die Anzahldichte in der PBG bei zeitlicher Änderung der Partikelgrößenverteilung zu überprüfen, werden an dieser Stelle die direkte Lösung der diskretisierten PBG mit der Lösung mit angenommenen Funktionen verglichen. Dabei wird auch die Diskretisierungsunabhängigkeit der numerischen Lösung der PBG und die Bestimmung der minimal erforderlichen Größenklassenanzahl ( $NC$ ) untersucht.

Die Untersuchungen werden anhand eines homogen-verteilten dispersen Luftblasen-Flüssigkeitssystems durchgeführt, in dem die zeitliche Änderung der Blasengrößenverteilung durch Blasenkoaleszenz und -zerfall hervorgerufen wird. Die zeitliche Änderung der Blasenverteilungsmomente bzw. der Phasengrenzflächen beider Lösungen werden dabei verglichen. Mit dem Volumenanteil der dispersen Blasenphase wird die Erhaltung des Volumens bzw. der Masse überprüft. Zwei funktionale Verteilungen werden für die Blasenanzahldichte in der PBG (3.7) eingesetzt: die gestutzte Normalverteilung und die  $\beta$ -Funktion.

Die Simulation der zeitlichen Blasengrößenänderung wird in drei Varianten durchgeführt: zuerst mittels Blasenzerfall, danach allein unter Berücksichtigung der Koaleszenz und schließlich mit beiden Prozessen – Zerfall und Koaleszenz. Diese Vorgehensweise ermöglicht die getrennte Betrachtung des

Verhaltens der Blasen unter Zerfall und Koaleszenz. Darüberhinaus kann ermittelt werden, inwieweit die pNDF die Blasenanzahldichte unter Berücksichtigung der einzelnen Prozesse repräsentieren kann. Zudem können mehrere Zerfallsfrequenzmodelle, wie sie im Kapitel (2.4.1) beschrieben sind, eingesetzt und deren Eigenschaften veranschaulicht werden.

### 3.2.4.1 Abhängigkeit der PBG-Lösung von der Partikelklassenanzahl:

Die Diskretisierungsunabhängigkeit der Partikelgrößenverteilung für die direkte PBG-Lösung wurde anhand eines Luftblasensystems mit dem Blasengrößenspektrum von 0 – 10 mm für das System mit Zerfall und von 0 – 20 mm für das System mit Koaleszenz untersucht und festgelegt. Dabei wurde die Simulation mit variierender Klassenanzahl ( $NC = 10, 20, \dots, 200$ ) für das Blasenspektrum durchgeführt. Das Blasenzerfallmodell von Grienberger (Gleichung (2.44)) wird dabei benutzt. Die Tochterblasenverteilung wird unter der Annahme binären Blasenzerfalls mit der von Lee vorgeschlagenen  $\beta$ -Tochterblasenverteilung (Gleichung (2.47)) bestimmt. Für die Kollisionsfrequenz und Koaleszenzeffizienz werden folgende im Abschnitt (2.4.2) diskutierten Modelle verwendet:

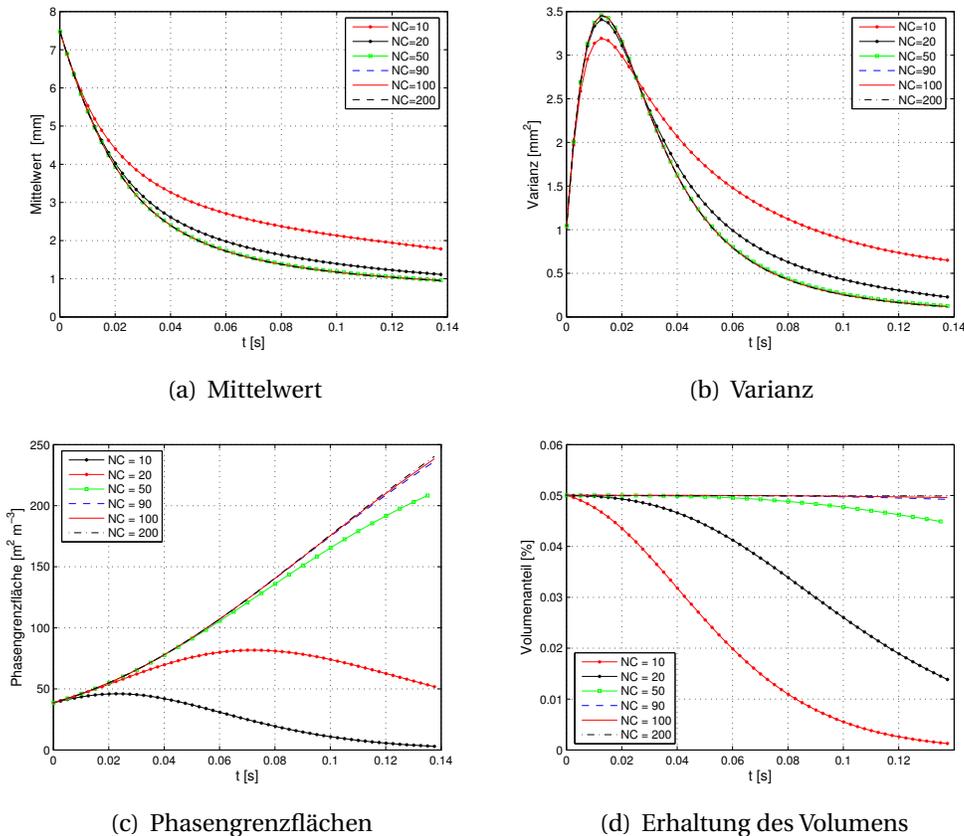
- Es wird lediglich die turbulenzinduzierte Blasenollision mit dem Ansatz nach Prince und Blanch (Gleichung (2.49)) berücksichtigt.
- Für die Koaleszenzeffizienz wird der von Coualaloglou formulierte exponentielle Ansatz, Gleichung (2.55) verwendet.
- Die Kontaktzeit wird mit Gleichung (2.56) unter der Annahme von kugelförmigen Blasen und keine Blasendeformation bestimmt. Die Koaleszenzzeit wird nach Kirckpatrick mit Gleichung (2.58) und mit dem Dickenverhältnis des Flüssigkeitsfilms  $\frac{h_{f,0}}{h_{f,krit}} = 100$  gerechnet.

Dabei zeigte sich, dass ab einem Wert von  $NC = 100$  für die Größenklassenanzahl das Blasenvolumen erhalten bleibt. Dies Aussage gilt, wie es in den Ab-

bildungen (3.6-d) und (3.7-d) veranschaulicht wird, sowohl für die Simulation mit Zerfall als auch für die mit Koaleszenz. In Abbildung (3.6-c) und (3.7-c) ist die zeitliche Entwicklung der spezifischen Phasengrenzfläche für die verschiedenen Klassenanzahlen dargestellt. Erst bei einer Klassenanzahl von  $NC > 90$  nimmt die spezifische Phasengrenzfläche ihren endgültigen Verlauf über die Simulationszeit an. In einem dispersen Zweiphasenströmungssystem ist die akurate Ermittlung der Phasengrenzflächen entscheidend, da über sie Energie, Impuls und Stoff zwischen den Phasen ausgetauscht wird.

Die zeitliche Änderung des Mittelwerts bzw. der Varianz der Blasengrößenverteilung sind ebenfalls in Abbildung (3.6-a bzw. -b) für das koaleszenzgehemmte System und in Abbildung (3.7-a bzw. -b) für das System mit ausschließlicher Koaleszenz dargestellt. Für das System mit Zerfall nimmt der Mittelwert mit der Zeit ab und die Masse der kleinen Blasen konzentriert sich in einer schmalen Verteilung (d.h. Abnahme der Varianz) in den Klassen der geringeren Durchmesser. Bis auf die Lösung mit  $NC = 10$  zeigen die Kurven von Mittelwert und Varianz ähnliche Verläufe für alle Variationen der Klassenanzahl.

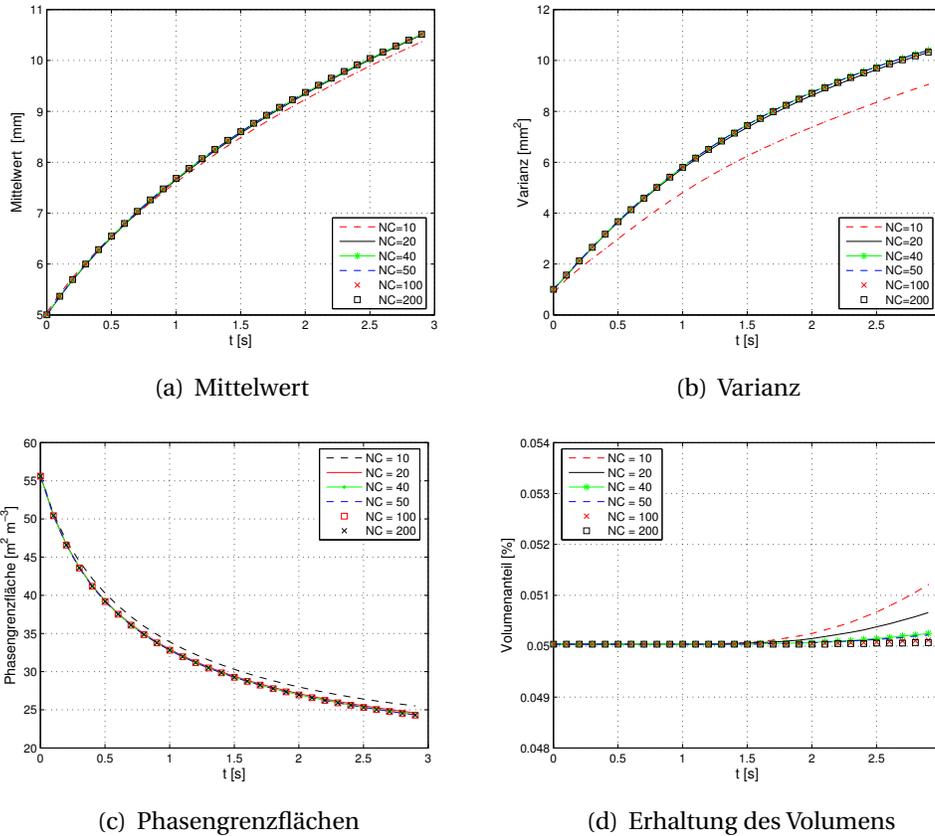
Bei der Blasenkoaleszenz zeigt sich ein unphysikalisches Verhalten der Lösung für ein Blasensystem mit dem Spektrum von 0 – 10 mm bereits nach wenigen Schritten der Simulationszeit, insbesondere für niedrige Klassenanzahlen  $NC < 10$ . Deswegen wurden die Koaleszenzsimulationen an einem Blasensystem mit einem  $D_{min} = 0$  und  $D_{max} = 20$  mm durchgeführt. Diese extreme Divergenz der PBG-Lösung mit Koaleszenz an schmaltem Blasenspektrum gegenüber der Lösung mit Zerfall kann in der Natur der Kernfunktionen beider Prozesse liegen. Bei dem Zerfallprozess bestimmt die Tochterblasenverteilungsfunktion, dass die aus dem Zerfall einer Mutterblase  $V$  resultierenden Tochterblasen in Blasenklassen zwischen  $V_{min}$  und  $V$  verteilt sind. Dabei bleibt das Volumen erhalten. Bei der Koaleszenz können Blasen koaleszieren, so dass das Volumen der neugebildeten Blase außerhalb des angenommenen maximalen Blasenvolumens liegt. Wenn das Blasengrößenspektrum mit wenigen Klassen diskretisiert wird, steigt die Häufigkeit von Koaleszenzereignissen, die Blasen von  $V > V_{max}$  ergeben und es kommt schnell zur Divergenz der Lösung. Diese Erscheinung kann vermieden werden, indem  $V_{max}$  als sehr groß angenommen wird, was wiederum eine große Klassenanzahl bedingt und damit erhöhten Rechenaufwand verursacht.



**Abbildung 3.6:** Abhängigkeit der PBG-Lösung von Größenklassenanzahl  $NC$  nur mit Zerfall: a) und b) die zeitliche Entwicklung der Verteilungsmomente Mittelwert und Varianz, c) die Evolution der Phasengrenzfläche der Blasen und d) die Erhaltung des Volumens über die Simulationszeit.

Es können anhand der Untersuchungen der direkten Lösung der PBG folgende Schlüsse gezogen werden:

1. Für die untersuchten Blasensysteme mit Zerfall und Koaleszenz ändern sich die charakteristischen Größen, der Mittelwert und die Varianz der Größenverteilung sowie der Volumenanteil und die spezifische Phasengrenzfläche der dispersen Blasen nur noch marginal ab einer Größenklassenanzahl ( $NC$ ) größer als 100. Ab diesem Wert kann von einer Diskretisierungsunabhängigkeit der PBG-Lösung ausgegangen werden.



**Abbildung 3.7:** Abhängigkeit der PBG-Lösung von Größenzahl  $NC$  nur mit Koaleszenz: a) und b) die zeitliche Entwicklung der Verteilungsmomente Mittelwert und Varianz, c) die Evolution der Phasengrenzfläche der Blasen und d) die Erhaltung des Volumens über die Simulationszeit.

Allerdings liegt der Fehler ab einer Größenzahl von 50 auch schon im akzeptablen Bereich von  $< 0.05$ , was in Hinblick auf erzielbaren Rechenzeitverkürzung durchaus attraktiv ist.

- Die Blasenkoaleszenz erfordert ein breites Partikelgrößenspektrum mit einem  $V_{max}$  viel größer als die Volumina der Partikel im Bereich der Koaleszenzereignisse, um die Erhaltung des Blasenvolumens zu garantieren. Dies ist bedingt durch die Kernfunktion von Koaleszenz. Beim Blasenzerfall stellt sich dieses Problem nicht, da die Tochterblasenverteilung die beim Zerfallereignis entstehenden Tochterblasen im betrachteten

Blasenspektrum wieder verteilt.

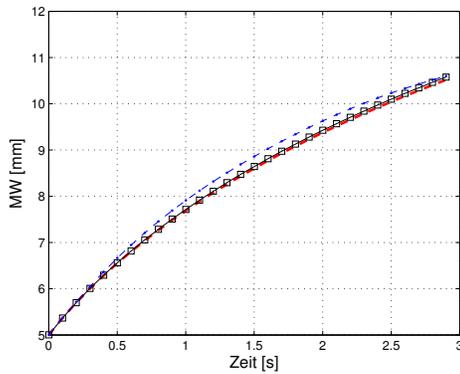
3. Die Diskretisierung der PBG mit einer für die Genauigkeit der Lösung ausreichenden Klassenanzahl in der Strömungsberechnung (CFD) erfordert einen enormen Rechenaufwand. Dies übersteigt gegenwärtig zur Verfügung stehende Rechenressourcen.

### 3.2.4.2 Repräsentierbarkeit der Blasenanzahldichte durch pNDF

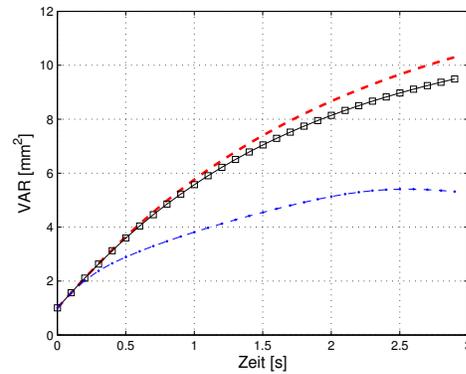
Aufbauend auf die Ergebnisse der Diskretisierungsabhängigkeit der PBG-Lösung im vorherigen Abschnitt werden die Untersuchung der Repräsentierbarkeit der Partikelanzahldichte durch eine pNDF mit einer Größenklassenanzahl von 100 durchgeführt.

Zunächst wird die Simulation mit Koaleszenz für ein Blasensystem mit einem Blasenspektrum von 0 – 20 mm analysiert. Dabei wird die direkte Lösung der PBG mit ihrer Lösung für die funktionalen Verteilungen: gestutzte Gauß- und  $\beta$ -Verteilung verglichen. Für die Kollisionsfrequenz und Koaleszenzeffizienz werden die im vorigen Abschnitt verwendeten Modelle eingesetzt.

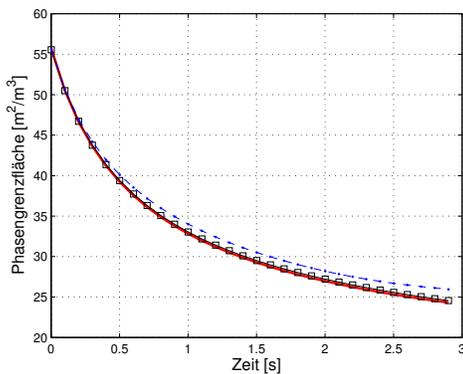
Abbildung (3.10) zeigt Momentaufnahmen der Blasengrößenverteilung zu verschiedenen Zeitschritten der Simulation mit Koaleszenz. Dabei ist ersichtlich, dass die Anzahldichteverteilung der Blasen durch die  $\beta$ -Verteilung sehr gut angenähert wird, während die gestutzte Gauß-Verteilung weniger gut zur Repräsentation der zeitlichen Entwicklung der Blasengrößenverteilung geeignet ist. Die  $\beta$ -Verteilung entwickelt sich so, dass sie nahezu eine Form identisch zu der durch Koaleszenz resultierenden Verteilung zu jedem Zeitschritt annimmt. Dieses Verhalten wird auch quantitativ mit der zeitlichen Entwicklung der Verteilungsmomente  $\bar{D}$  und  $Var$  (Abbildung (3.8-a und b)) sowie der spezifischen Phasengrenzfläche (Abbildung (3.8-c)) bestätigt. Die gestutzte Gauß-Verteilung gibt den Mittelwert der Verteilung mit guter Genauigkeit wieder, scheitert jedoch durch ihre symmetrische Natur bei der Wiedergabe der Verteilungsbreite, vergleich Abbildung (3.10). Dies wird auch in der ungenauen Reproduktion der spezifischen Phasengrenzfläche deutlich. Das Volumen der Blasen bleibt bei den Lösungen mit beiden funktionalen



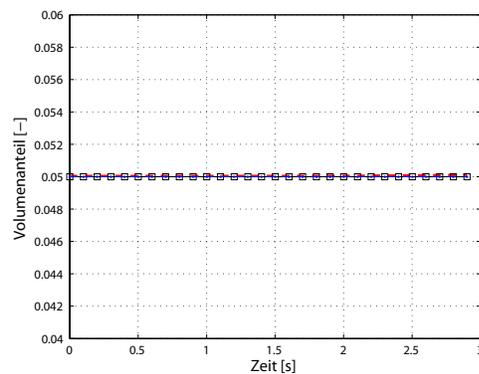
(a) Zeitliche Entwicklung des Mittelwerts



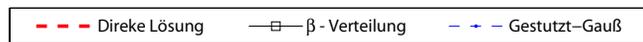
(b) Zeitliche Entwicklung der Varianz



(c) Zeitliche Entwicklung der Blasengrenzfläche



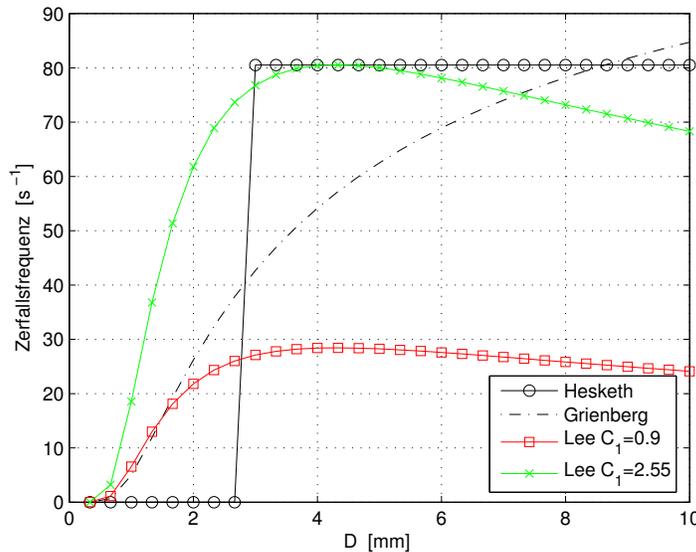
(d) Volumenerhaltung



**Abbildung 3.8:** Vergleich direkter Lösung der PBG mit der Lösung mit pNDF unter Berücksichtigung nur von Koaleszenz

Verteilungen erhalten. Das Verhalten ist durch die zeitliche Entwicklung des Volumenanteils in Abbildung (3.8-d) zu erkennen.

Weiterhin wird die Repräsentierbarkeit der Anzahldichteverteilung durch die pNDF in einem koaleszenzgehemmten dispersen System mit einem Blasenpektrum von 0 – 10 mm untersucht. Hier wird die PBG ebenso direkt und mit den beiden oben verwendeten pNDFs gelöst und die charakteristischen Größen der Lösungen miteinander verglichen. Die Lösungen werden mit den verschiedenen im Abschnitt (2.4.1) diskutierten Zerfallfrequenzmodellen durchgeführt. Drei Blasenzerfallsmodelle werden eingesetzt und einander



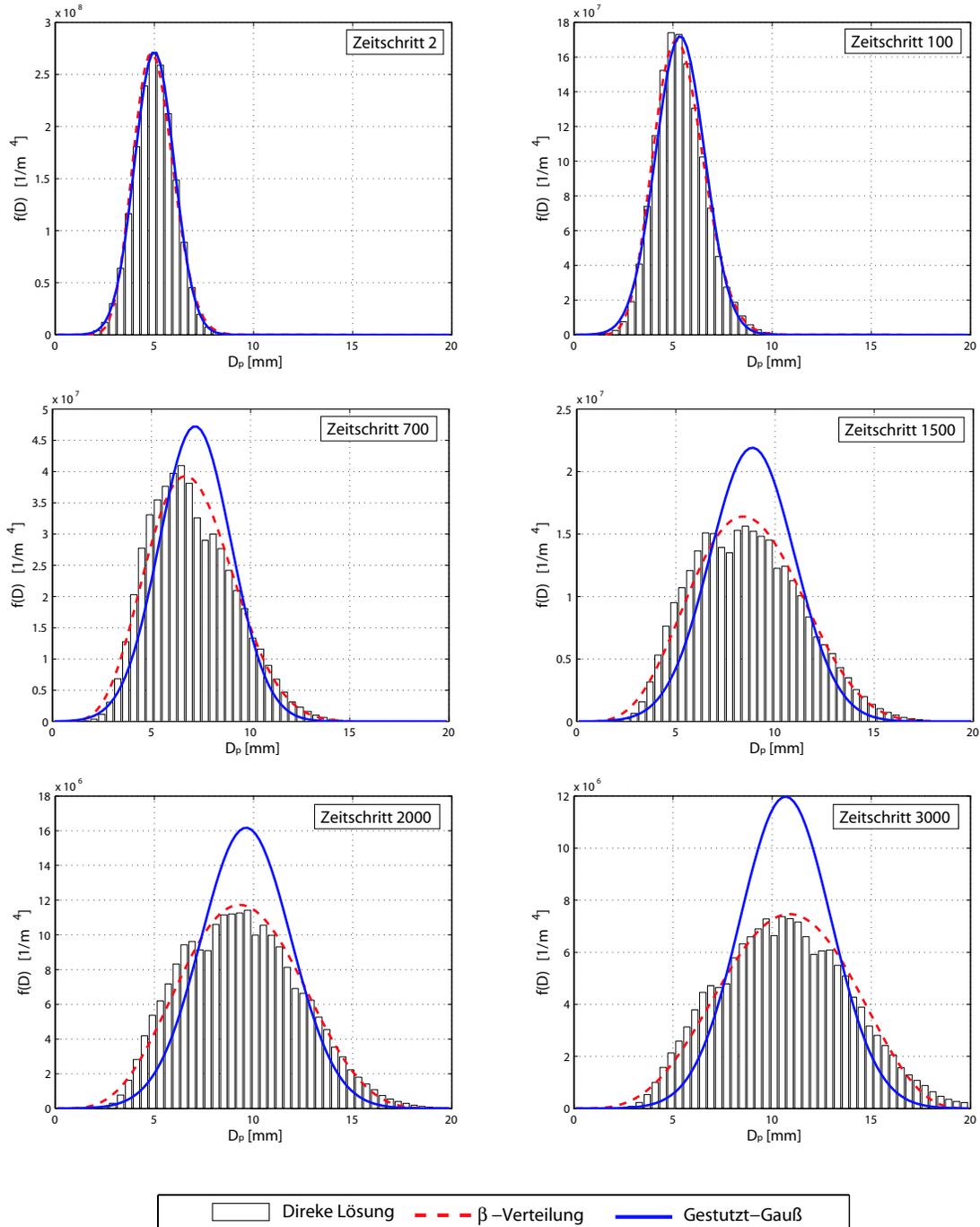
**Abbildung 3.9:** Zerfallsfrequenz nach Hesketh, Grienerger und Lee

gegenübergestellt. Im Einzelnen sind dies das Modell von Hesketh (Gl. (2.40)) mit der kritischen Weber-Zahl  $We_{krit} = 1.1$  nach [27], das Lees Modell (Gl. (2.43)) und der Ansatz von Grienerger (Gl. (2.44)). Die Tochterblasenverteilung wird unter der Annahme binären Blasenzerfalls mit der von Lee vorgeschlagenen  $\beta$ -Tochterblasenverteilung (Gl. (2.47)) bestimmt.

Die Diskussion der Ergebnisse lässt sich wie folgt unterteilen:

1. Gegenüberstellung der drei verwendeten Zerfallsfrequenzmodelle. Der Vergleich wird anhand der direkten Lösung der PBG mit den drei untersuchten Modellen durchgeführt.
2. Untersuchung der Repräsentierbarkeit der direkten Lösung durch die Lösung mit den pNDFs. Die Ergebnisse werden durch den Vergleich der direkten Lösung der PBG mit den Lösungen der zu prüfenden pNDFs, der gestutzten Gauß- und der  $\beta$ -Verteilung diskutiert.

Abbildung (3.11) zeigt Momentaufnahmen der Blasengrößenverteilung zu bestimmten Punkten der Simulationszeit mit den drei untersuchten Zerfallsmodellen. In Spalte a) wird die Lösung nach Hesketh, in Spalte b) die Lösung nach



**Abbildung 3.10:** Vergleich direkter Lösung der PBG mit der Lösung mit pNDF unter Berücksichtigung nur von Koaleszenz

Lee und in Spalte c) die nach Grienberger gezeigt. In der Abbildung ist die direkte Lösung neben den Lösungen mit den beiden pNDFs dargestellt. Zuerst wird die direkte Lösung der PBG betrachtet, um die unterschiedlichen Modelle der Zerfallfrequenz miteinander zu vergleichen. In der ersten Reihe der Abbildung sind die Anfangsverteilungen der Blasengrößen gezeigt. Alle drei Simulationen gehen von der selben Anfangsverteilung, der Normalverteilung mit  $\bar{D} = 5 \text{ mm}$  und  $Var = 1 \text{ mm}^2$  aus. Das Hesketh Modell mit der Annahme eines maximalen stabilen Durchmessers  $D_{zerfall}$  (Abschnitt (2.4.1.1)), unterhalb dessen die Blasen stabil sind und nicht weiter zerfallen, zeigt eine Unstetigkeit der Lösung bereits in den ersten Zeitschritten. Die Unstetigkeitsstelle liegt für die Simulationsbedingungen bei  $D_{zerfall} = 2,7 \text{ mm}$ . Das Modell arbeitet mit einer konstanten Zerfallfrequenz für die Blasen mit dem Durchmesser  $D > D_{zerfall}$ . Diese Frequenz hat den Wert von  $80 \text{ 1/s}$  und stellt damit die höchste Zerfallfrequenz bei den betrachteten Modellen dar (Abbildung 3.9). Diese Frequenz verursacht die hohe Änderungsrate der Blasengrößenverteilung mit dem Zerfallsmodell nach Hesketh, und ist quantitativ an Hand der zeitlichen Änderung von Mittelwert, Varianz und Phasengrenzfläche in Abbildung (3.12) zu erkennen. Der Mittelwert und die Varianz der Blasengrößenverteilung nehmen schnell ab. Die Blasen mit dem Durchmesser  $D > D_{zerfall}$  zerteilen sich innerhalb kurzer Zeit ( $t = 0.05 \text{ s}$ ), sammeln sich in dem Durchmesserbereich  $D < D_{zerfall} = 2,7 \text{ mm}$  an und zerfallen nicht weiter. Die konstant bleibenden Werte von  $\bar{D}$ ,  $Var$  und Phasengrenzfläche über dem Rest der Simulationszeit  $t > 0.05 \text{ s}$  (Abbildung 3.12-Spalte a) verdeutlicht dieses Verhalten. Zieht man die Modell von Lee und Grienberger zum Vergleich heran, zeigen die beiden Modell ähnliches Verhalten bezüglich der zeitlichen Änderung der Blasengrößenverteilung sowie der Entwicklung des Mittelwerts, der Varianz und der spezifischen Phasengrenzflächen (Spalte b und c in Abb. (3.11) und (3.12)). Beide Modell unterscheiden sich jedoch von dem Modell nach Hesketh in dem kontinuierlichen Blasenzerfall.

Der Unterschied zwischen dem Modell von Lee und von Grienberger liegt darin, dass das Lee'sche Modell bei größeren Blasen eine höhere Stabilität bzw. niedrigere Blasenzerfallsfrequenz ergibt (Abschnitt 2.4.1.1). Mit den Konstanten  $C_1$  und  $C_2$  beider Modell kann man die Zerfallsfrequenzraten abstimmen. Jedoch besteht nur die Möglichkeit, entweder die Zerfallfrequenz der kleinen

Blasen oder die der größeren Blasen beider Modell aufeinander abzustimmen, wie es in Abbildung (3.9) dargestellt ist. Bei der Änderung von  $C_1$  und  $C_2$  in Lees Modell ergibt sich die gleiche Zerfallfrequenz wie Grienberger für niedrige  $C_1$ -Werte und identische Zerfallfrequenzraten wie bei Hesketh für hohe  $C_1$ -Werte. Die Ergebnisse in den hier durchgeführten Vergleichen sind für kleine Werte von  $C_1$  in Lees Modell gültig. Das bedeutet, dass das Modell von Lee mit dem Modell von Grienberger für kleine Blasen abgestimmt ist. Dies ist, auch ersichtlich aus den höheren Werten des Mittelwerts und der Varianz für das Leesche Modell, da die großen Blasen nach Lee mit kleiner Frequenzrate zerfallen. Betrachtet man die Entwicklung des Volumenanteiles der diskutierten Modelle in Abbildung (3.12), stellt man fest, dass das Volumen bei allen Modellen erhalten bleibt.

Für die Untersuchung der Repräsentierbarkeit der Anzahldichte in der PBG für die gestutzte Gauß- bzw. die  $\beta$ -Verteilung wird mit dem Modell von Grienberger gearbeitet. Der Grund hierfür sind die unphysikalischen Eigenschaften der anderen Modelle wie die Unstetigkeit und konstante Zerfallsfrequenz bei Heskeths Modell und die niedriger werdende Zerfallsfrequenz für größer werdende Blasen in Lees Modell. Konzentriert man sich auf die Lösungen der PBG mit der gestutzten Gauß und  $\beta$ -Verteilung für das System mit Zerfall (Abbildung (3.11)) und vergleicht man dabei die zeitliche Änderung der Blasengrößenverteilung beider Lösungen mit der direkten Lösung, so stellt man fest, dass

- die  $\beta$ -Verteilung erneut eine sehr gute Übereinstimmung mit der direkten Lösung der PBG zeigt
- und die gestutzte Gauß-Verteilung wieder aufgrund ihrer symmetrischen Form weniger für die Repräsentation der Blasendurchmesser-Verteilung geeignet ist.
- beide funktionale Formen die Blasengrößenverteilung nach Hesketh infolge der Unstetigkeit in der Lösung nicht mit der guter Genauigkeit repräsentieren können.

Abbildung (3.12) zeigt die ideale Übereinstimmung der  $\beta$ -Lösung mit der

direkten Lösung anhand des zeitlichen Verlaufs von Mittelwert, Varianz und Phasengrenzfläche. Dass die gestutzten Gauß-Verteilung zur Repräsentation der Anzahldichte in der PBG nicht anwendbar ist, verdeutlicht der Verlauf der Varianz und der Phasengrenzflächen. Jedoch zeigen alle Lösungen eine genaue Wiedergabe des Volumenanteiles der dispersen Phase.

Für die Repräsentierbarkeit der pNDF unter Berücksichtigung von Blasenzerfall und Koaleszenz wurde die PBG (3.6) mit Quell- und Senkentermen, die sich jeweils aus dem Zerfall und Koaleszenz ergeben, diskretisiert und gelöst. Die Lösung erfolgte, wie bei den oben diskutierten separaten Prozessen, direkt und mit der angenommenen Verteilungen. In den den Abbildungen (3.13) und (3.14) sind die Ergebnisse miteinander verglichen. Es zeigt sich wieder die Eignung der  $\beta$ -Verteilung zur Repräsentation der Lösung der PBG.

Aufbauend auf den Ergebnissen dieses Abschnitts können folgende Schlüsse gezogen werden:

1. Die  $\beta$ -Verteilung eignet sich hervorragend als angenommene funktionale Verteilung für die Anzahldichteverteilung in der PBG (3.6)
2. Das Grienberger Zerfallsmodell kann zur Berechnung der Validierungsfälle in dieser Arbeit benutzt werden.

### 3.3 Generierung von *Look-up* Tabellen

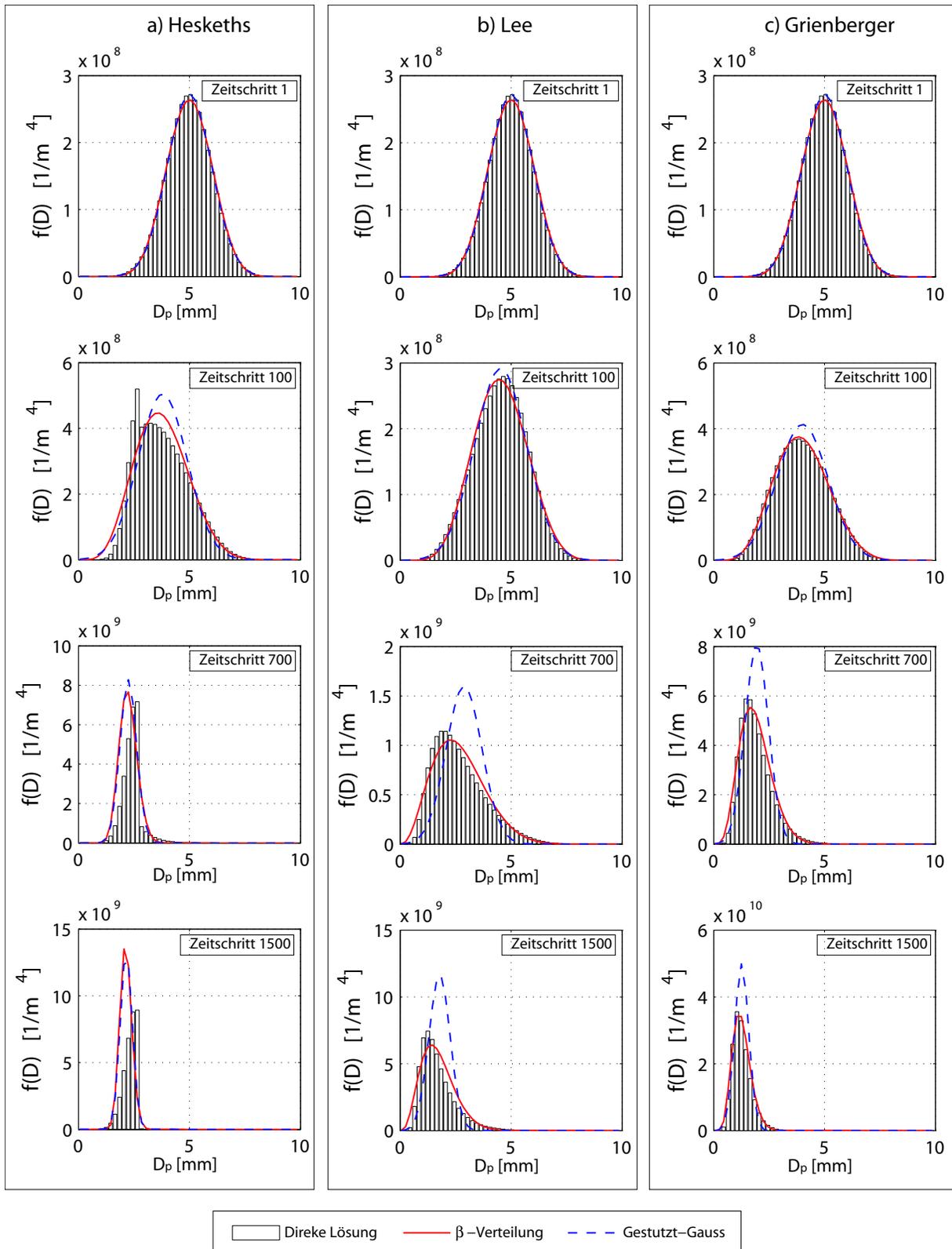
Im Rahmen des Momenten-Modells wird die Populationsbilanzgleichung mit Hilfe einer angenommenen Partikelgrößenverteilung in dem Pre-processor Schritt gelöst und die Lösung in Form von *Look-up* Tabellen hinterlegt. Aus diesen Tabellen werden in der numerischen Strömungsberechnung (CFD) die Quellterme für die zusätzlichen Transportgleichungen für Mittelwert und Varianz der Partikelgrößenverteilung berechnet. Die Theorie hierzu wurde im vorherigen Abschnitt bereits erläutert. Sämtliche hier verwendeten Zahlenwerte beziehen sich auf die *Look-up*-Tabellen, die für die Validierung des entwickelten Modells anhand des Rührkessel-experiments erstellt wurden. Es sei angemerkt, dass für einen anderen Anwendungsfall diese Einstellungen selbstverständlich überprüft werden müssen.

Die Generierung der *Look-up* Tabellen geschieht im wesentlichen durch eine Parametervariation der Größen Mittelwert und Varianz einer Partikelanzahldichtefunktion, des Volumenanteils der dispersen Partikelphase sowie der Strömungsparameter, die die Dispersionsprozesse bestimmen. Für jede Kombination wird die PBG gelöst und die Momente der resultierenden Verteilung berechnet. Als Eingangswerte werden die Minima und Maxima aller vier Parameter sowie die Anzahl ihrer Variationsschritte abgebildet. Diese Werte werden aufgrund von Erfahrung mit dem zu simulierenden dispersen System abgeschätzt. Experimentelle Daten oder auch eine einphasige Simulation mit der kontinuierlichen Phasen können dabei eine Orientierungshilfe anbieten.

Durch entsprechende Modell-Routinen wird für jede Kombination der o.g. Parametergrößen eine diskrete pNDF aus Mittelwert, Varianz und dispersem Volumenanteil generiert. Diese stellt die Partikelgrößenverteilung zum Zeitpunkt  $t$  dar. Die Diskretisierung dieser pNDF geschieht dabei anhand des Partikeldurchmessers in den einzelnen Partikelgrößenklassen. Dabei soll die Diskretisierungsunabhängigkeit berücksichtigt werden. Die für eine diskretisierungsunabhängige Lösung notwendige Größenklassenanzahl kann dem vorigen Abschnitt entnommen werden oder analog zu den dort durchgeführten Untersuchungen bestimmt werden.

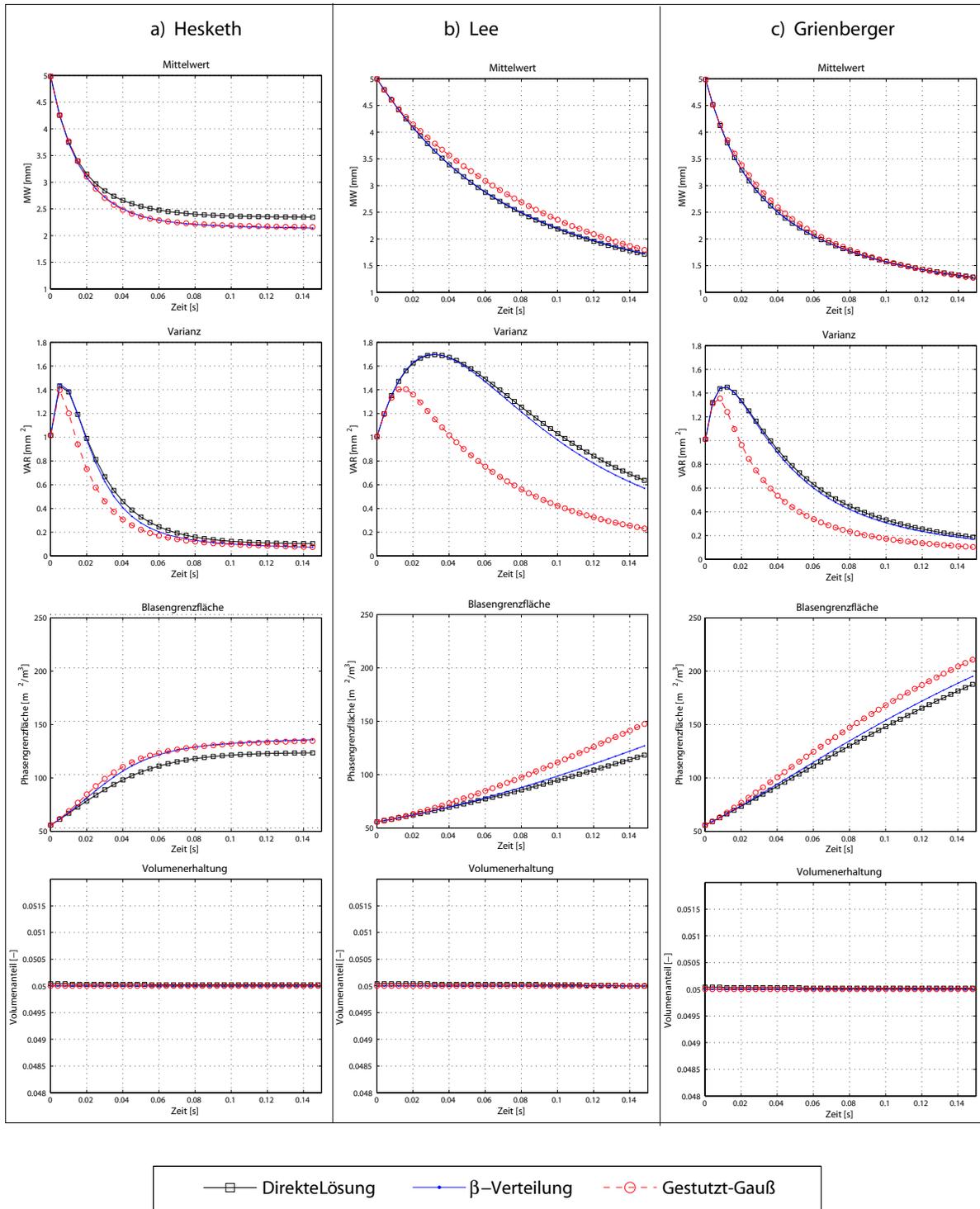
Die Dispersion der Partikelgrößenklassen erfolgt anschließend anhand der Lösung der diskretisierten PBG. Daraus resultiert die Verteilung der Partikelgrößen zum nächsten Zeitpunkt  $t + \Delta t$ . Aus dieser Verteilung werden die Momente  $\bar{D}$  und  $Var$  bestimmt. Diese Berechnung ist für Mittelwert und Varianz unabhängig vom dispersen Volumenanteil, da dieser praktisch nur als Skalierungsfaktor für die pNDF dient. Damit ergibt sich jeweils eine *Look-up* Tabelle mit  $3 + n$  Dimensionen für die Werte von Mittelwert bzw. Varianz zum Zeitschritt  $t + \Delta t$  in Abhängigkeit der Parametergrößen Mittelwert, Varianz, Volumenanteil und  $n$  Strömungsparameter zum Zeitschritt  $t$ . Die Quellterme für Mittelwert und Varianz werden, wie schon erwähnt, in der numerischen Strömungsberechnung ermittelt. Es hat sich gezeigt, dass dieses Vorgehen weniger fehlerbehaftet ist als eine direkte Tabellierung der Quellterme. Der Grund hierfür liegt in der größeren Streuung des Wertebereichs der Quellterme und dem daraus resultierenden größeren Interpolationsfehler. Dies würde sich nur durch eine Erhöhung der Diskretisierung des zu tabellierenden Wertebereichs verbessern, was zu einer unnötigen Erhöhung des Rechenzeitbedarfs im Pre-processing führen würde, während in der Strömungsberechnung (CFD) lediglich eine einfache algebraische Beziehung zu lösen ist.

Die *Look-up* Tabelle kann von strukturierter oder unstrukturierter Art sein. Die Art der *Look-up* Tabelle kann durch die Dimensionen der Tabelle bestimmt werden. Für kleine Dimensionen der Tabelle ( $n < 5$ ) kann die strukturierte Generierung der Tabelle und einfache Suchalgorithmen besser geeignet sein. Für größere Dimensionen kann jedoch die strukturierte Generierung der Tabellen zu rechenintensiv sein. Die resultierenden Tabellen haben außerdem einen sehr großen Bedarf an Speicher und erfordern aufwendige Suchalgorithmen. Für die Generierung von unstrukturierten Tabellen können adaptive Generierungsmethoden eingesetzt werden. Eine Methode ist bei Gharaibah et al. [30] detailliert beschrieben.

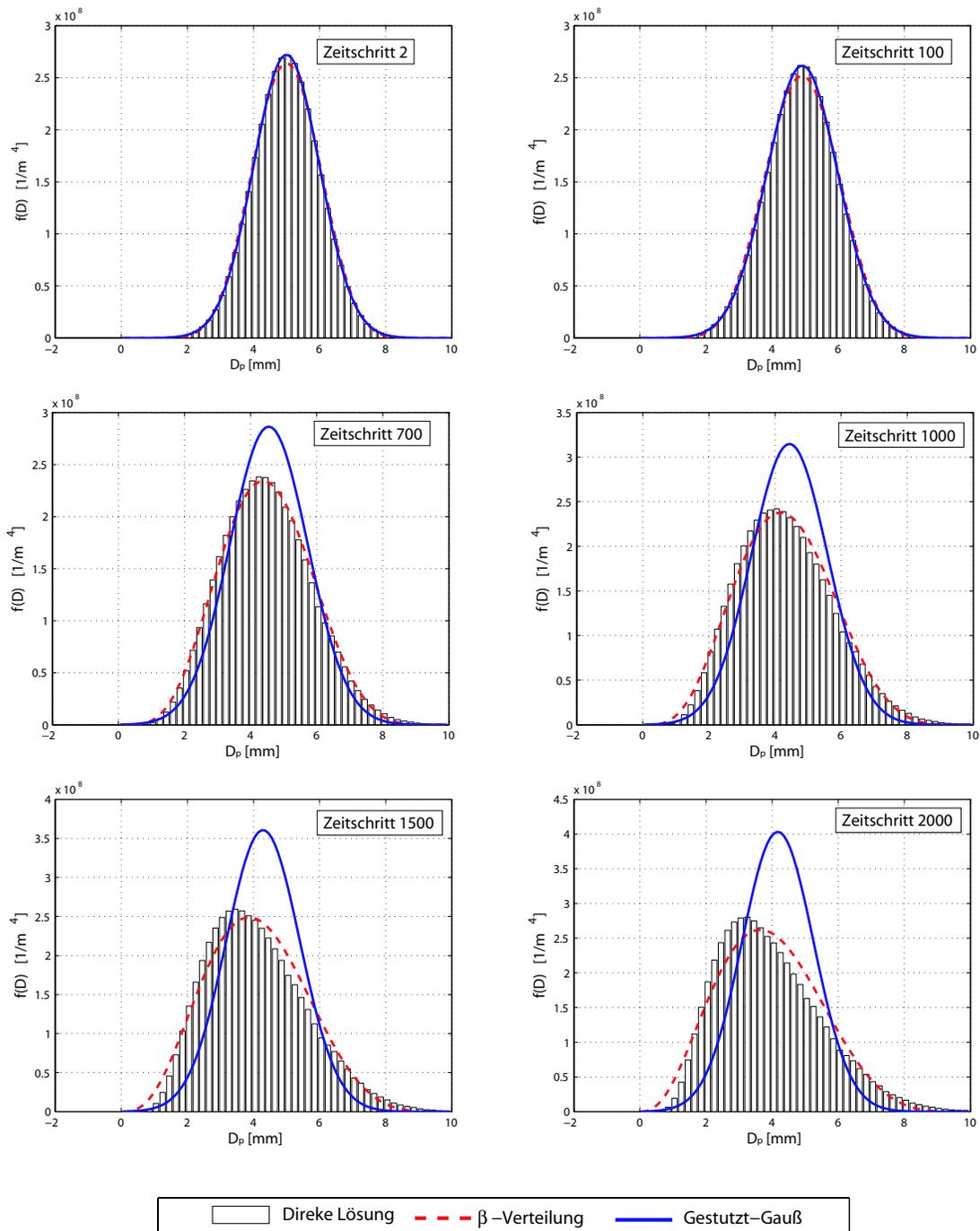


**Abbildung 3.11:** Vergleich direkter Lösung der PBG mit der Lösung mit pNDF, nur Zerfall

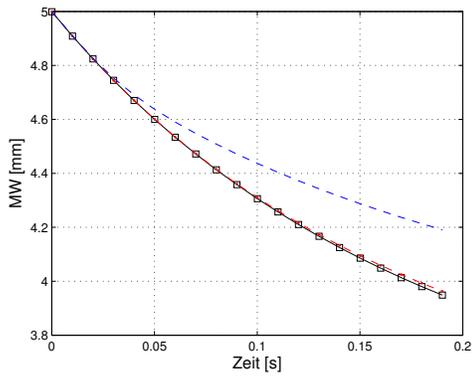
### 3.3 Generierung von *Look-up* Tabellen



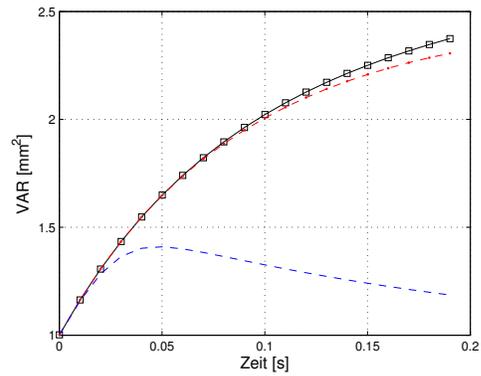
**Abbildung 3.12:** Vergleich direkter Lösung der PBG mit der Lösung mit pNDF, nur Zerfall



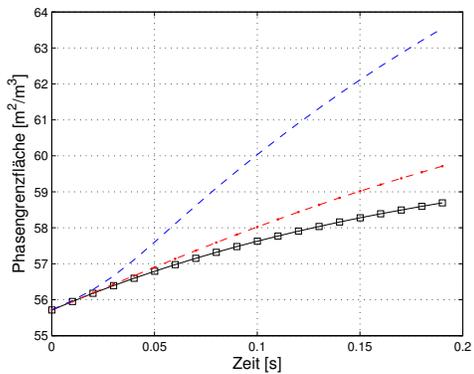
**Abbildung 3.13:** Vergleich direkter Lösung der PBG mit der Lösung mit pNDF unter Berücksichtigung von Zerfall und Koaleszenz



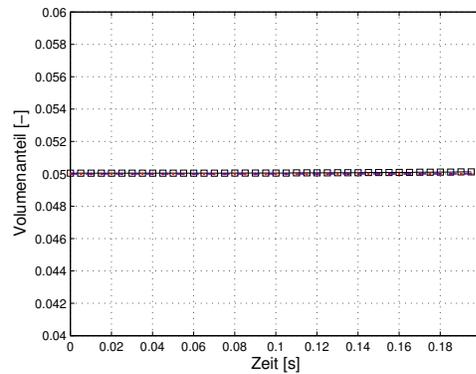
(a) Zeitliche Entwicklung des Mittelwerts



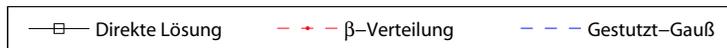
(b) Zeitliche Entwicklung der Varianz



(c) Zeitliche Entwicklung der Blasengrenzflächen



(d) Volumenerhaltung



**Abbildung 3.14:** Vergleich direkter Lösung der PBG mit der Lösung mit pNDF unter Berücksichtigung von Zerfall und Koaleszenz

## **4 Validierung des Momenten-Modells**

In diesem Kapitel wird das Momenten-Modell mit der bereits in Kapitel 3 erläuterten Basis-Formulierung durch Vergleiche mit Experimenten validiert und an die Validierungsanwendungen angepasst.

Eine typische zweiphasige Strömung, die Gasblasen-Flüssigkeitsströmung im begasten Rührreaktor, für die experimentelle Daten zur Verfügung stehen, wird nachgerechnet.

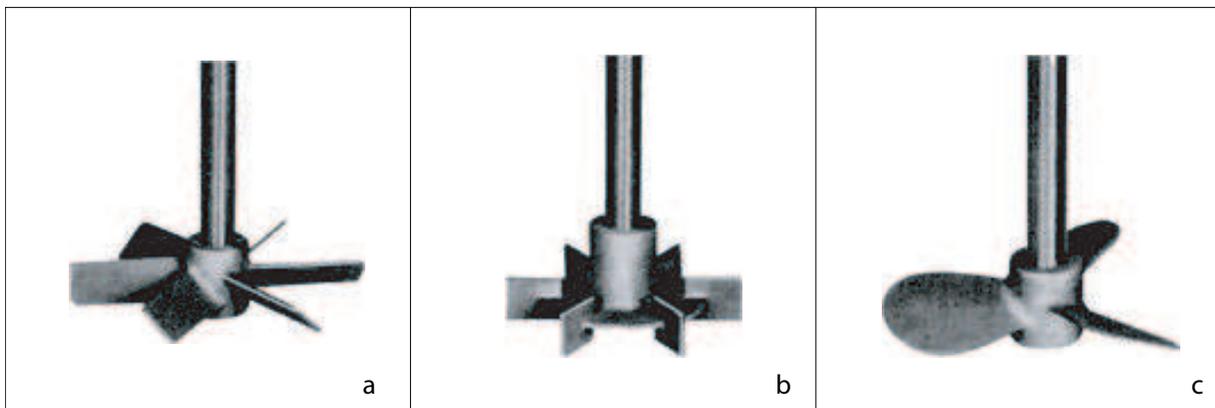
Da die Modellgleichungen numerisch gelöst werden bzw. in einen kommerziellen Strömungslöser implementiert werden, steht die Validierung des Momenten-Modells in engem Zusammenhang mit der Qualität des numerischen Verfahrens. Daher werden zunächst numerische Aspekte der Anwendung diskutiert und die Eignung des verwendeten CFD Programms überprüft.

### **4.1 Validierung des Momenten-Modells anhand der Blasenströmung im begasten Rührkessel**

#### **4.1.1 Rührreaktoren**

Dispergieren von Gasen in Flüssigkeiten ist eine weit verbreitete Technik in der chemischen Industrie, der Lebensmittelproduktion, sowie im allgemeinen in Gasabsorptionsprozessen chemischer Reaktoren. In den genannten Prozessen strebt man eine Reaktion bzw. einen effektiven Wärme- und Stoffaustausch zwischen der dispersen Gasphase und der kontinuierlichen Flüssigkeitsphase an. Die Beschleunigung der Reaktionen, Erhöhung der Reaktionsrate und Intensivierung der genannten Austauschprozesse werden durch die Vergrößerung der Phasengrenzfläche und Verlängerung der Verweilzeit

der Gasphase in der Flüssigphase erreicht. In der Regel findet dieser Prozess im begasten Rührreaktor statt, in dem die Phasengrenzfläche durch das Zerteilen der Gasblasen vergrößert wird. Das Zerteilen der Gasblasen erfolgt durch das Rühren und die dadurch induzierte Scherkraft der Flüssigphase. Kleinere Blasen, deren Auftrieb nicht mehr die Zirkulationskraft der Flüssigphase am Rande des Rührorgans überwinden können, zirkulieren weiter und verlängern damit ihre Verweilzeit im Rührbehälter. Neben der Erzeugung von relativ großen Phasengrenzflächen sind die Rührreaktoren auch aufgrund ihres einfachen Aufbaus, der geringen Störanfälligkeit und der einfachen Wärmezuführung sehr verbreitet in der Verfahrenstechnik. Im Rührreaktor wird die mechanische Energie mittels des rotierenden Rührorgans (Turbine oder Rührer genannt) vom antreibenden elektrischen Motor zur Fluidphase transportiert. Diese Energie induziert dann die Rotation der Flüssigphase bzw. turbulente Bewegung. Unterschiedliche Rührerformen können je nach Rühraufgabe zum Einsatz kommen. Abbildung 4.1 zeigt drei Typen der so genannten Schnellläufer-Rührerfamilie: a) Schrägblatt-, b) Scheiben- und c) Propeller-Rührer.



**Abbildung 4.1:** Drei Typen der Schnellläufer-Rührerfamilie:  
a) Schrägblatt-, b) Scheiben- und c) Propeller-Rührer

Die Rührkesselströmung kann mit der Rührer-Reynolds-Zahl ( $Re_R$ ) charakterisiert werden:

$$\text{Re}_R = \frac{n d^2 \rho}{\mu_k} = \frac{n d^2}{\eta_k}. \quad (4.1)$$

Wobei das charakteristische Längenmaß  $d$  der Rührerdurchmesser ist. Die Größe  $n$  ist die Rotationsgeschwindigkeit des Rührers und  $\mu_k$  bzw.  $\eta_k$  die dynamische bzw. kinematische Viskosität der gerührten Flüssigkeit.

Charakteristisch für einen Rührreaktor sind die Förderleistung, der Leistungseintrag, die Mischzeit, sowie die Zirkulationszeit. Die Förderleistung oder auch Pumpleistung eines Rührers ist der Flüssigkeitsvolumenstrom  $\dot{V}_R$ , den der Rührer bei einer bestimmten Drehzahl  $n$  fördert. Aus der Dimensionsanalyse gilt folgende Korrelation für die Förderleistung [64]:

$$\dot{V}_R = B_{\dot{V}_R} d^3 n, \quad (4.2)$$

Wobei  $d$  der Rührerdurchmesser und  $n$  seine Drehzahl ([1/s]) ist. Die Proportionalitätskonstante  $B_{\dot{V}_R}$  wird als Pumpenkennzahl des Rührers bezeichnet und ist von den Rührerproportionen abhängig. Für den Sechs-Blatt-Scheibenrührer liegt der Wert der Pumpenkennzahl im Bereich zwischen 0,5 und 1,0 [64]. Die Leistungs- oder Newtonkennzahl stellt den mechanischen Leistungseintrag dar und ist definiert als Verhältnis der Rührerleistung  $P$  zur Trägheitskraft des gerührten Mittels:

$$P = Ne \rho n^3 d^5. \quad (4.3)$$

Die Newtonkennzahl  $Ne$  ist von Rührertyp- und geometrie, sowie vom Strömungsregime (laminar, turbulent oder Übergangsströmung) abhängig und kann experimentell ermittelt werden [64]. Die Mischzeit ist das Maß für die Effizienz des Vermischungsprozesses im Rührreaktor. Sie stellt die benötigte Zeit dar, einen bestimmten Grad an Homogenität der zu mischenden Stoffe in einem gegebenen Volumen herzustellen. Die Zirkulationszeit bezeichnet die Zeit, die ein Fluidteilchen braucht, um wieder zum Ausgangspunkt am Rührer zurückzukehren, nach dem es im Kessel eine Schleife durchlaufen hat. Sie ist eine verteilte Größe.

In den begasten Rührreaktoren wird das Gas durch Düsen injiziert, die sich in den typischen Konfigurationen am Reaktorboden befinden. Hier unterschei-

det man mehrere Arten von Begasern, die je nach Anwendung, Belüftungsgrad und Rührertyp gewählt werden können. Der Begaser kann aus einem oder mehreren Löchern bestehen, die im Boden des Kessels oder in einem Sparger-Ring mit Bodenabstand integriert sind. Poröse Oberflächen als Begasungsorgan kommen eher selten zum Einsatz.

Die Hauptanforderungen an die Rührreaktoren sind hohe Effizienz, geringe Abmessungen und niedriger Energieverbrauch der Apparate. Die Effizienz der Apparate kann mit dem Dispergierungsgrad und der Verweilzeit der dispersen Partikel ausgedrückt werden. Diese werden hauptsächlich von der Partikelgrößenverteilung, der physikalischen Prozesse an der Phasengrenzflächen und der Populationsdynamik der dispersen Phase bestimmt.

Zur Optimierungen der Dispersions- und Vermischungsprozesse in begasten Rührreaktoren werden normalerweise empirische Korrelationen oder analytische Herangehensweisen erzielt. Meistens erfolgt die experimentelle Auslegung vom Rührkessel mit dem Verfahren der Maßstabsübertragung. Hier werden die in einem Labormaßstab gemessenen Daten mit Hilfe von empirisch ermittelten Scaleup-Verfahren zur Vergrößerung der Anlage verwendet. Die Ähnlichkeit für verschiedene Phänomene gleichermaßen zu erhalten ist jedoch schwierig. [17].

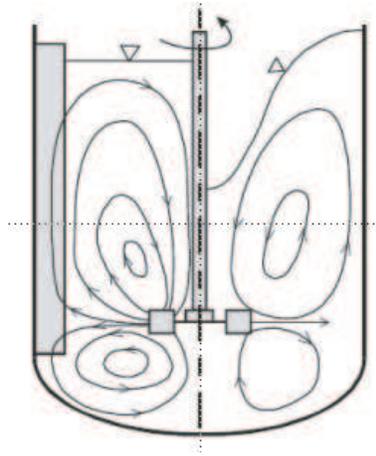
Die Methoden der numerischen Strömungssimulation CFD können heute die Grundlage für detaillierte Untersuchungen der turbulenten (einphasigen) Strömung im Rührkesselreaktor liefern. Jedoch bringen die Erweiterungen den verwendeten numerischen Verfahren durch die Populationsbilanzen zur Berücksichtigung der Partikeldynamik infolge von Partikelentstehung, -zerfall oder -koaleszenz eine zusätzliche Komplexität mit sich, da meistens die Populationsbilanzgleichung direkt in der numerischen Berechnung diskretisiert und gelöst wird.

Hier wird das entwickelte Momenten-Modell für die zweiphasige Strömungssimulation begasten Rührreaktor eingesetzt und Validiert. Die numerische Effizienz des Momenten-Modells resultiert aus der Näherung der Partikelanzahldichte in der PBG durch eine angenommene funktionale Form. Somit ist die separate (nicht in der Strömungsberechnung simultane) Lösung dieser

Gleichung möglich.

#### **4.1.2 Modellierung der Rührkesselströmung: Theorie und Stand des Wissens**

Eine zufriedenstellende Modellierung der Rührkesselströmung ist aufgrund der komplizierten Strömungsverhältnisse im Rührkessel sehr kompliziert. Bisher mangelt es am allgemeinen Verständnis für die Turbulenz in Rührreaktoren, insbesondere für Zweiphasenströmungen. Die Strömung im Rührreaktor ist eine rotierende Strömung. Besonders durch die Existenz der Stomstörer entstehen zwei sekundäre Strömungen, eine ist in der radialen Richtung eingereicht und die andere ist axial geleitet durch die Stomstörer. Entsprechend der dominierenden Pumpenrichtung können zwei Arten der Rührer unterschieden werden: radialpumpende und axial pumpende Rührer. Beispiele aus der Praxis sind: der Scheiben-Rührer als radial pumpender und der Schräg-blatt-Rührer als axial-pumpender Rührer bekannt. Typische Zirkulationen der Strömung in den mit den Scheiben-Rührer betriebenen Kesseln sind in Abbildung (4.2) dargestellt: radiale Strahlströmung wird durch den Pumpeffekt des Rührers induziert, deren Impuls bis zur zylindrischen Wand des Kessels reicht und in zwei Richtungen, nach oben und nach unten weiter zirkuliert. Der obere Strahl strömt entlang der Wand mit weniger werdender Intensität. Bevor er die freie Oberfläche erreicht hat, werden seine Fluidelemente wieder entlang der Rotationsachse in Rührerrichtung eingesaugt. Der nach unten strömende Strahlteil stößt auf den Kesselboden und wird durch den geleitet und wieder in Richtung des Rührers eingesaugt. Im Zentrum beider Zirkulationszonen existieren hohe Turbulenzgrade. Die Zirkulationsströmung ist von Bedeutung für das Mischen in Rührreaktoren. Entsprechend dem Turbulenzstruktur im Rührreaktor unterscheidet man zwischen Micro- und Macro-Mischungen. Während die Micro-Mischung aufgrund der molekularen Diffusion und der Bewegung der klein-skaligen Wirbel basiert, ist die Macro-Mischung (full-tank Mixing) vergleichbar mit Konvektion und wird durch die langsame Zirkulation der groß-skaligen instationären Wirbelstrukturen, sowie die turbulente Diffusion induziert.



**Abbildung 4.2:** Radiales Pumpen induziert durch den Scheiben-Rührer und die entstehenden zwei Zirkulationszonen überhalb und unterhalb der Rührerebene: links mit Stromstörern und rechts ohne Stromstörer

Die Dispersionsphänomene in begasten Rührkesseln, wie beispielsweise die Koaleszenz und der Zerfall von Gasblasen, sowie die Phasenoberflächenkräfte stellen eine weitere Schwierigkeit für die Modellierung zweiphasiger Strömungen, da sie nur unzureichend erforscht sind. Dies gilt auch für andere Dispersionsapparate, wie z.B. Blasensäulen.

Ein weiteres Problem bei der Modellierung des Rührreaktors stellt die starke Wirbelbildung bzw. -bewegung dar, die sich nur dreidimensional darstellen lässt, im Gegensatz zur Modellierung der axialsymmetrischen Blasensäulenströmung, die zweidimensional erfolgen kann. Schwierig ist ebenfalls die Modellierung des Rührorgans im Rührreaktor, das relativ zu der feststehenden Kesselwand und den Stromstörern rotiert. In der Literatur existieren mehrere Methoden der Strömungsmodellierung im Rührkessel. Sie unterscheiden sich durch ihre Komplexität, Genauigkeit und ihren Rechenaufwand. Einen Überblick über die verschiedenen Verfahren geben Brucato [10] und Sommerfeld [16]. Im Allgemeinen kann man diese Methoden in zwei Gruppen einordnen. Die eine Modellgruppe simuliert das Gesamtrechengebiet des Rührkessels in einem ortsfesten Koordinatensystem, während die andere das Rechengebiet in zwei Domänen aufteilt. Dabei rotiert die innere Rechendomäne mit

dem Rührer relativ zu dem mit der Kesselwand und den Strombrechern feststehenden äußeren Rechengebiet. Im Folgenden werden beide Modellgruppen erläutert.

- **Modell mit raumfesten Koordinaten:** Diese stellen die einfachsten Modelle für die Simulation der Strömung im Rührkessel dar, in denen der Rotationseffekt des Rührorgans mit einer der folgenden Methoden simuliert wird:
  1. Simulation des Rührers durch das Einführen von Randbedingungen in dem von den Rührerblättern überstrichenen Bereich (*imposed boundary conditions – IBC*). Diese Methode wurde zuerst von Ranade [59] eingeführt und von Kresta [43] und Jenne [38] verwendet. Der Nachteil dieser Methode besteht darin, dass die eingeführten Rührerrandbedingungen auf experimentellen Daten oder empirischen Modelle basieren. Oftmals sind diese Daten nicht vorhanden, besonders für mehrphasige Simulationen.
  2. Simulationen, in denen Quellterme zur Repräsentation des Rührereffektes in den Impulsgleichungen hinzugefügt werden. In dieser Methode sind mehrere Simulationen für verschiedene Positionen (mehrere Schnappschüsse, daher *snap shot*-Methode) des Rührers zur Repräsentation der Interaktion vom Rührer mit den Stromstörern erforderlich. Die Lösung erhält man dann mit der Mittlung der Simulationen für die Rührerpositionen. Ranade et al. [60] und [62] benutzten die *snapshot*-Methode zur stationären Simulation der Strömung in einem Rührreaktor mit Blattrührer. Diese Methode lieferte eine akzeptable Übereinstimmung mit den Messungen.

Die genannten Modelle der raumfesten Koordinatensysteme kommen für die fluiddynamische Berechnung der Rührkesselströmung in dieser Arbeit nicht zum Einsatz und werden nicht weiter diskutiert.

- **Modelle mit rotierenden Koordinatensystemen:** Erst nach der Entwicklung fähigerer Netzgeneratoren, mit denen sich Rechennetze für komplizierte Geometrien generieren lassen, und mit dem Ansteigen der Rechenkapazität wurden neue, rechenaufwendigere, aber genauere und

nicht auf Messdaten beruhende Rührermodelle entwickelt, bei denen die Geometrie des Rührorgans im Rechengbiet abgebildet und in einem relativ zum Laborkoordinatensystem rotierenden Koordinatensystem simuliert wird. Das Rechennetz wird in zwei konzentrische zylindrische Gitter geteilt, ein inneres, mit dem Rührer rotierendes Gitter, und ein äußeres, mit der Kesselwand und den Stromstörern feststehendes Gitter (Abbildung (4.4) und (4.6)). Der Vorteil dieser Methode besteht darin, dass keine experimentellen oder empirischen Daten für die Rührerrandbedingungen erforderlich sind und beliebige Rührorgangeometrien bzw. Kesselkonfigurationen simuliert werden können. Hier können drei Methoden unterschieden werden:

1. Die *Multiple-Reference-Frames* Methoden (MRF) von Luo [46], in der die Transportgleichungen der beiden rotierenden und feststehenden Rechenbereiche separat simultan gelöst werden. Die Lösung ist stationär und erfolgt für wenige Positionen des Rührers. In einer MRF-Simulation mit einem einzigen Schnappschuss (einer Position des Rührers) ist die Relativbewegung Rührer/ Strombrecher vernachlässigt. Das MRF Modell, ist für Geometriekonfigurationen des Rührkessels geeignet, bei denen der Abstand zwischen den Rührerblättern und den Stromstörern vergleichbar oder größer als der Rührerdurchmesser ist. In solchen Konfigurationen ist die rührernahe Strömung nicht wesentlich von der Strömung in den restlichen Kesselgebieten beeinflusst. Die Strömung in dieser Region kann in einem Bezugssystem, das sich mit dem Rührer dreht, stationär berechnet werden. In gewisser Entfernung vom Rührer wird angenommen, dass die Strömung azimuthal symmetrisch ist. Die Strömung in der Nähe der Kesselwände ist auch zeitunabhängig und kann stationär in dem ruhenden Kesselbezugssystem berechnet werden. Die inneren und die äußeren stationären Strömungslösungen werden an der Schnittfläche zwischen den beiden Bezugssystemen gekoppelt.
2. Die *Inner-Outer*-Methode (IO) von Brucato et al. [9]. Diese Methode ist ähnlich dem MRF-Verfahren, mit dem Unterschied, dass die Gitter der beiden rotierenden und feststehenden Domänen sich in einem schmalen Bereich des Interfaces überschneiden. Dadurch ist ei-

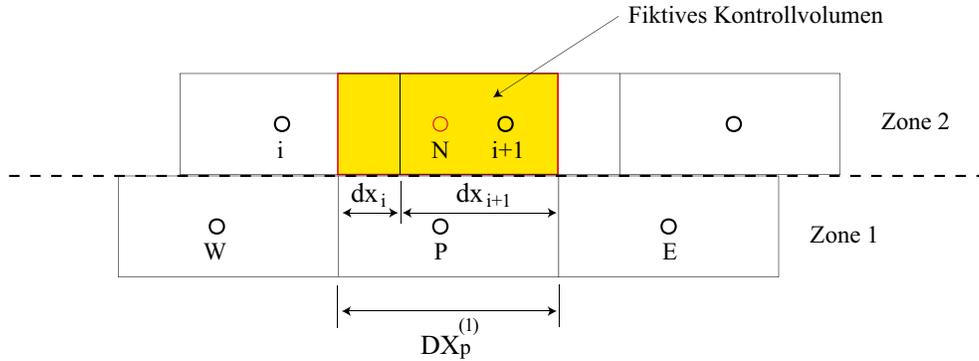
ne bestimmte Anzahl äußerer Iterationen erforderlich, um die Kontinuität der Lösung über das Interface zu garantieren. Dies bringt eine erhöhte Rechenzeit im Vergleich zur MRF-Methode mit sich. [18].

3. Die *sliding mesh*-Technik (SM), die erstmals für die Simulation der Rührkesselströmung von Perng und Murthy [55] und Luo et al. [47] verwendet wurde. Im sliding mesh-Modell kann die Rotation des Rührorgans und seine Form exakt reproduziert werden, da das Netz der inneren Region rotiert und an der Schnittstelle mit der Außenregion entlang gleitet. Diese Methode eliminiert abgesehen von Diskretisierungsfehler jegliche Approximation der Wechselwirkung zwischen dem rotierenden Rührer und den feststehenden Stromstörern. Die Wechselwirkung – Strömungsgrößen und die Durchflussmengen – erfolgt über die Schnittstelle zwischen beiden Netzen und wird implizit mittels einer Interpolationsroutine ermittelt. Dabei werden fiktive Zellen an beiden Seiten der sliding-Schnittflächen angenommen und generiert. Zum Beispiel stellt der Knoten  $N$  der fiktiven Nordzelle von Zone 2 den fiktiven Nachbarknoten für den Knoten  $P$  der Zone 1 (Abbildung 4.3) dar. Ähnliche fiktive Nachbarknoten werden auch für die Netzknoten in der Zone 2 generiert [29]. Der Wert einer Größe  $\phi$  im fiktiven Punkt wird durch lineare Interpolation ermittelt:

$$\phi_p^{(1)} = \frac{\phi_i^{(2)} dx_i^{(2)} + \phi_{i+1}^{(2)} dx_{i+1}^{(2)}}{DX_p^{(1)}}. \quad (4.4)$$

In diesem Fall müssen die Zellen in der tangentialen Richtung gleich groß sein. Die fiktiven Punkte werden auf dieselbe Weise wie die regulären Punkte aktualisiert. Die implizite Behandlung erlaubt die gleichzeitige Strömungsberechnung im gesamten Rechenggebiet und erhöht die numerische Stabilität. Die sliding mesh-Methode kann das Strömungsverhalten im Rührkessel genauer wiedergeben, ist aber wesentlich rechenaufwändiger als die MRF Methode, in der stationäre Rechnungen ohne Netzbewegung durchgeführt werden.

Brucato et al. [10] verglichen die IBC, IO und SM Methoden. Sie stellten fest, dass die SM Methode die besten Ergebnisse liefert, während



**Abbildung 4.3:** Interpolation der Strömungsgrößen über der Schnittstelle zwischen rotierendem und feststehendem Gitter in der sliding mesh-Modell

die Ergebnisse der IBC Methode sehr von den Rührerrandbedingungen abhängen. Friberg [29] verglich ebenfalls die SM und IBC Methoden und kam zu den gleichen Ergebnissen wie Brucato. Eine weitere Option des sliding mesh-Verfahrens stellt die *clicking grid*-Methode dar, in der die Zeitschritte so gewählt werden, dass sich an der Grenzfläche zwischen rotierendem und feststehendem Block immer zwei Kontrollvolumina – Rechenzellen – direkt gegenüberliegen und sich keine Überlagerung der gegenüberliegenden Rechenzellen ergibt.

Detaillierte Beschreibungen der verschiedenen Methoden, sowie deren Vor- und Nachteile finden sich in [10], [16] und [61]. In dieser Arbeit werden die Methoden MRF und SM getestet und verwendet. Daher wird im Folgenden kurz auf die Modellgleichungen dieser Methoden eingegangen.

Die zeitlich gemittelten Kontinuitäts- und die Impulsgleichungen (Reynolds Averaged Navier-Stokes – RANS) für die Methoden der rotierenden Koordinatensysteme (MRF und SM) unter Berücksichtigung der Rührerrotation für eine inkompressible und isotherme Strömung lauten:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \hat{T} + \nabla \hat{T}^{Re} + \rho \vec{g} + \vec{s}. \quad (4.6)$$

wobei  $\vec{u}$  die Geschwindigkeit relativ zum Bezugssystem ist und  $\vec{s}$  einen Quellterm zur Präsentation der durch die Rotation resultierenden Kräfte, *Flieh-* und *Coriolis*-Kraft darstellt.

$$\vec{s} = -2\rho\vec{\Omega} \times \vec{u} - \rho\vec{\Omega} \times (\vec{\Omega} \times \vec{r}). \quad (4.7)$$

Die Größe  $\vec{\Omega}$  ist die Winkelgeschwindigkeit des rotierenden Blocks. Der Term  $\nabla \cdot \hat{T}$  in Gleichung (4.6) stellt den molekularen Impulstransport in der Flüssigkeit dar. Die Größe  $\hat{T}$  ist dabei der Schubspannungstensor und wird wie folgt definiert:

$$(\hat{T})_{ij} = \mu \left( \frac{\partial(\vec{u})_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(\vec{u})_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial(\vec{u})_n}{\partial x_n} \right), \quad (4.8)$$

wobei  $\mu$  die laminare Viskosität der Flüssigkeit ist.

In turbulenten Strömungen bedarf der Tensor der Reynoldsschen Schein-  
spannung  $\hat{T}^{Re} = -\rho_p \overline{u'u'}$  in der Impulsgleichung einer Modellierung zur  
Schließung des Gleichungssystems (4.5 - 4.6). Dies erfolgt normalerweise durch ein Turbulenzmodell. In der Industrie sind die Zwei-Gleichungs-  
Turbulenzmodelle (besonders das Standard  $k$ - $\epsilon$ - und  $k$ - $\omega$ -Modell) verbreitet, da sie einen Kompromiss zwischen Rechenaufwand und Genauigkeit bieten. Sie benutzen die Diffusionsgradientenhypothese um eine Relation zwischen den Reynolds-Spannungen mit den Geschwindigkeitsgradienten herzustellen. Die turbulente Viskosität wird dabei modelliert als Produktion von turbulenter Geschwindigkeit und turbulentem Längenmaß. Die Turbulenzgeschwindigkeit wird mit Hilfe der turbulenten kinetischen Energie  $k$  berechnet, für die eine Transportgleichung gelöst wird. Das turbulente Längenmaß wird aber aus der turbulenten kinetischen Energie und deren Dissipationsrate  $\epsilon$  ermittelt. Für  $\epsilon$  wird ebenfalls eine Transportgleichung gelöst.

Das am häufigsten in den Simulationen von Rührkesselströmungen verwendete Turbulenzmodell ist das Standard  $k$ - $\epsilon$ -Modell (Jones Launder [39] bzw. Launder und Spalding [65]). Selten wurde das in den letzten Jahren von Wilcox [70] entwickelte  $k$ - $\omega$ -Modell für die Simulation von Rührkesselströmungen eingesetzt. Der Vorteil des  $k$ - $\omega$ -Modells besteht in der Behandlung der

Strömung in den wandnahen Bereichen. Es umfasst keine komplexen nicht-linearen Dämpfungsfunktionen, die im Rahmen des Standard  $k$ - $\epsilon$ -Modelle erforderlich sind. Daher liefert das  $k$ - $\omega$ -Modell korrekte Ergebnisse und Robustheit [2]. Ein Nachteil des  $k$ - $\omega$ -Modells ist seine Empfindlichkeit für die Einlass-Turbulenz Randbedingungen. Menter [49] nutzte die Vorteile des Standard  $k$ - $\epsilon$ -Modells im Kern der Strömung und die Vorzüge der Nahwandbehandlung des  $k$ - $\omega$ -Modells in seinem *Shear Stress Transport* (SST). In dieser Arbeit werden alle drei Turbulenzmodelle eingesetzt und deren Simulationsergebnisse verglichen. Für eine detaillierte Herleitung der Modelle sei auf die Arbeiten [39], [70], [71], [48] und [49] hingewiesen.

Die Bewertung der Publikationen bezüglich der Simulation von Strömungsverhältnissen in Rührkesselreaktoren kann in folgenden Punkten zusammengefasst werden:

1. Die kommerziellen Strömungslöser verfügen über Modelle zur Simulation der Rührkesselströmung, die u. a. Rotationsmodelle und eine Reihe von Turbulenz- und Nahwandbehandlungsmodellen beinhalten. Diese ermöglichen eine Vielzahl von numerischen Untersuchungen der Strömung in Rührreaktoren.
2. Aufgrund der immer noch sehr großen Rechenzeiten für instationäre Simulationen mit der sliding-mesh Technik, bei der bis zum Erreichen einer periodisch stationären Lösung mehrere Rührerumdrehungen dynamisch simuliert werden müssen, hat sich die Methode für Rührkesselströmungen noch nicht durchgesetzt.
3. Mit stationären Methoden (snapshot-, inner-outer-, multiple-reference-frames Methode) werden mit sehr viel geringerem Berechnungsaufwand vergleichbar gute Ergebnisse erzielt, so dass diese Art der Rührermodellierung sicher ein Erfolg versprechender Weg ist.
4. Nahezu alle Autoren verwenden das Standard  $k$  –  $\epsilon$ -Modell zur Turbulenzmodellierung, obwohl seine Anwendung häufig als mögliche Ursache für die Unterschätzung der turbulenten kinetischen Energie in der Rührzone genannt wird.

### 4.1.3 Beschreibung des Experiments von Nassar:

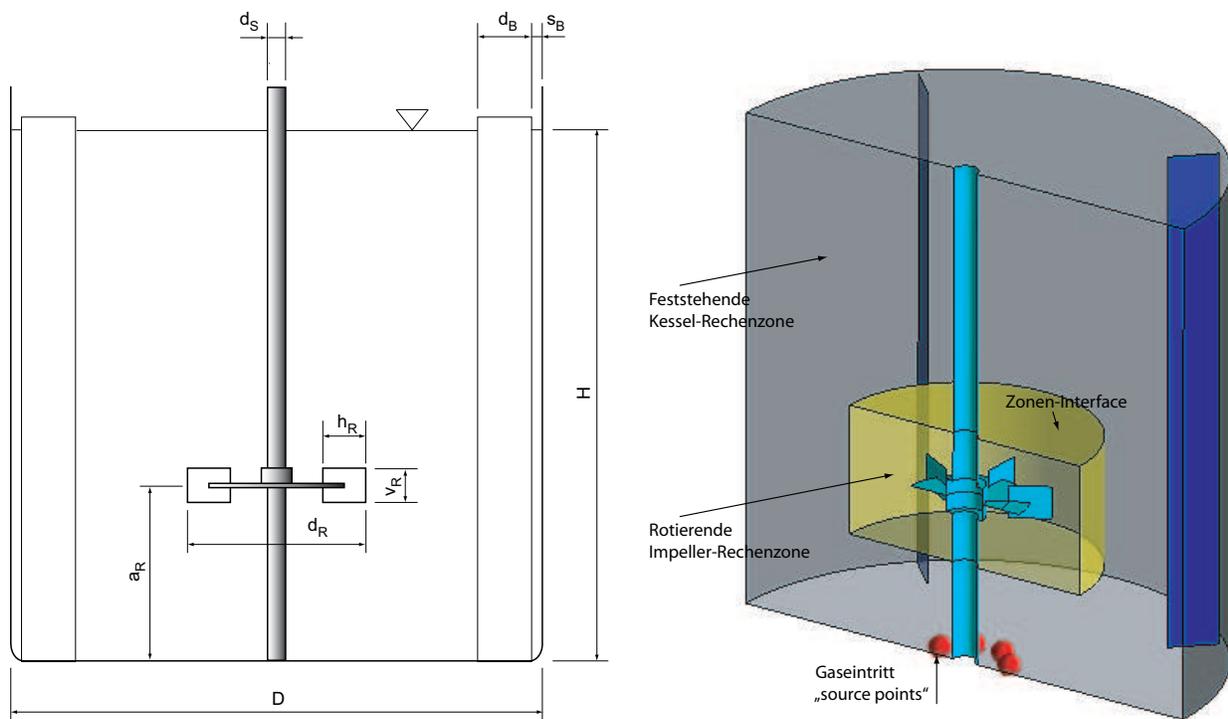
Das Verhalten der einphasigen und zweiphasigen Strömung in einem typischen Rührkessel wurde von Nassar [53] am Institut für Fluidmechanik der Universität Erlangen im Detail experimentell untersucht. Laser-Doppler-Anemometrie (LDA) - Messungen des Geschwindigkeitsfeldes der einphasigen Strömung wurden dabei an einer Kesselkonfiguration mit einem 6-Blatt-Rührer und 4 Stromstörern durchgeführt. Die Kesselgeometrie und Stoffwerte sind der Tabelle (4.1.3) in Verbindung mit Abbildung (4.4-links) zu entnehmen. Weitere zweiphasige Messungen der lokalen Blasenverteilungen und -geschwindigkeiten wurden mittels Phasen-Doppler-Anemometer (PDA) an dem selben Rührkessel durchgeführt. Nassars Arbeiten eignen sich für die Validierung des hier entwickelten Momenten-Modells aus folgenden Gründen:

- Die einphasige Erfassung der Strömungsgeschwindigkeiten und der daraus ermittelten kinetischen turbulenten Energie stellt die Validierungsdaten für den CFD-Code CFX und seine Untermodelle (Rotationsmodelle, Turbulenzmodelle, etc.), in den das Momenten-Modell implementiert wird. Dabei wird im Voraus überprüft, in wieweit CFX die für die Dispersion und den Transport von Blasen bedeutenden Strömungsparameter korrekt wiedergibt.
- Die Kesselkonfiguration mit der durchgehenden Welle minimiert die numerische Unsicherheit und Ungenauigkeit bei der Simulation nur einer Hälfte des Rührkessels mit dem Ziel, den Rechenaufwand zu halbieren. Die Kesselgeometrie mit dem 6-Blatt-Rührer und den 4 Stromstörern ist spiegelsymmetrisch (180°-Sektor). Somit kann die Strömung einer Hälfte der Konfiguration repräsentativ für die Rührkesselströmung sein. Dies wird normalerweise mit dem Festlegen von periodischen Randbedingungen an den Schnittflächen des Rechengebietes realisiert. Im Fall einer nicht durchgehenden Welle werden die periodischen Schnittflächen in dem Bereich unter dem Rührer aufeinander stoßen. Dies widerspricht der Definition der Periodizität in der numerischen Berechnung. Ein Umweg wäre, einen schmalen Zylinder des Rechengebietes unter dem Rührer wegzulassen und eine symmetrische Berandung an dieser Stelle zu

definieren. Mit der durchgehenden Welle sind die periodischen Flächen automatisch voneinander getrennt und das Rechengebiet bleibt unverfälscht.

- Eintrittsblasengrößen und -geschwindigkeiten wurden gemessen und werden in der zweiphasigen Simulation nicht abgeschätzt.
- Nassars Simulationen mit einem anderen Modell und einem anderen CFD-Code liegen vor und können mit den Ergebnissen des Momenten-Modells direkt verglichen werden.

Die Messergebnisse der einphasigen und zweiphasigen Rührkesselströmung von Nassar werden näher in dem Kapitel der Validierungsstudie erläutert.



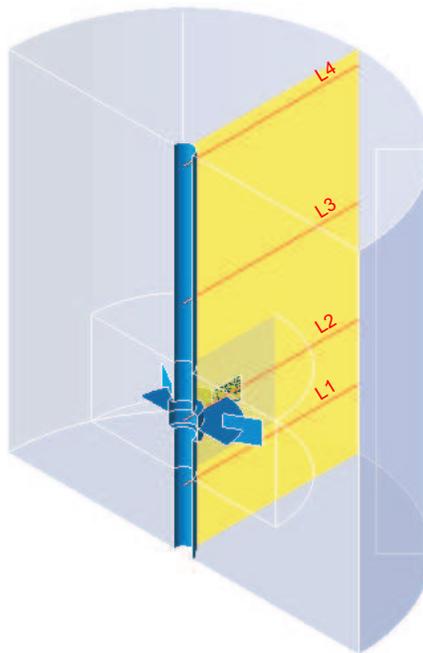
**Abbildung 4.4:** Rührkessel Dimensionen im Experiment und CFD Geometrie und Setup.

Parameter	Symbol in Abb (4.4)	Wert	Einheit
Kesselhöhe	$H$	152	mm
Kesseldurchmesser	$D$	152	mm
Flüssigkeitshöhe	$H$	152	mm
Rührerhöhe vom Boden	$h_s$	50	mm
Schaftdurchmesser	$d_s$	8	mm
Nabendurchmesser	$d_n$	12.5	mm
Scheibendurchmesser	$d_{sC}$	37.5	mm
Zahl der Rührerblätter		6	
Blattbreite	$h_R$	10	mm
Blatthöhe	$V_R$	12.5	mm
Rührerdurchmesser	$d_R$	50	mm
Zahl der Stromstörer		4	
Höhe der Stromstörer	$h_B$	152	mm
Breite der Stromstörer	$d_B$	15	mm
<b>Injektor:</b>			
8-Loch Spager-Ring	$D_{loch}$	0.5	mm
Nozzel	$D_{Nozzel}$	0.5	mm
<b>DMSO:</b>			
Dichte	$\rho_{DMSO}$	1100	$kg/m^3$
Viskosität	$\mu_{DMSO}$	2.14	$mPa \cdot s$
Rührerdrehzahl 1	$n_1$	340	rpm
Rührerdrehzahl 2	$n_2$	1354	rpm

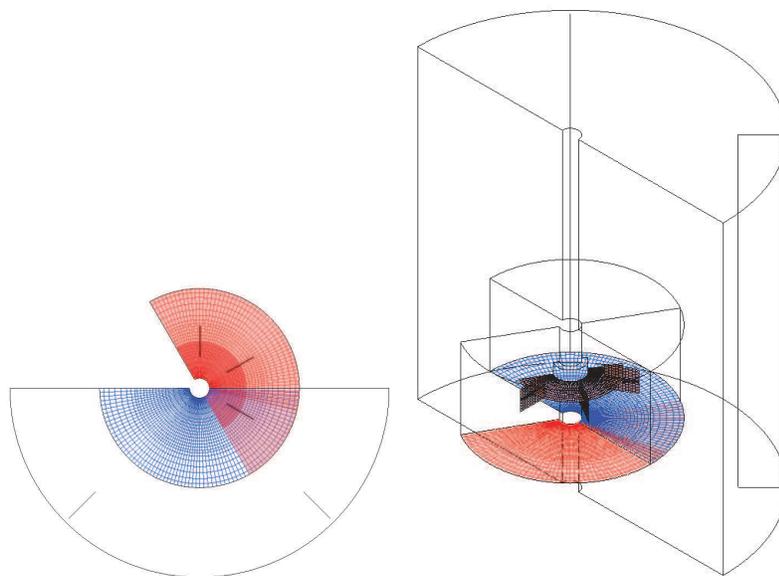
**Tabelle 4.1:** Dimensionen, Stoff- und Testdaten des experimentell untersuchten Rührkessels

#### 4.1.4 Validierungen: ein- und zweiphasige Simulation der Rührkesselströmung

Das Momenten-Modell wird anhand eines Rührkessels mit typischen Geometrien und Strömungsverhältnissen gegenüber Experimenten validiert. Zunächst wird die einphasige Strömungssimulation der von Nassar untersuchten Reaktorkonfigurationen mit einem Einfachrührer (6-Blatt-Scheiben-Rührer) untersucht. Als Einflussfaktoren werden die im Experiment untersuchten Größen (Rührerdrehzahl bzw. -Reynolds-Zahl, Kessel- und Rührergeometrien, etc.), sowie die gemessenen Strömungsparameter (turbulente kinetische Energie, die turbulente Dissipationsrate und die Geschwindigkeits-



**Abbildung 4.5:** LDA-Messebene und Position der Linien, auf denen der Vergleich zwischen Experiment und Rechnung erfolgt



**Abbildung 4.6:** Netztopologie in dem sliding mesh-Verfahren

felder der Phasen) betrachtet. Ziel der einphasigen Simulation ist die Untersuchung des kommerziellen Strömungsprogramms CFX und seiner Modelle, in das das entwickelte Momenten-Modell implementiert wird. Darauf aufbauend wird das Momenten-Modell in CFX implementiert und zweiphasige blasenbeladene Strömungssimulationen durchgeführt. Dabei werden die Strömungsfelder der Phasen und die dazugehörigen Verteilungen der Phasen, insbesondere die Größenverteilung der dispersen Gasphase und deren Phasenflächenkonzentration, ermittelt und mit dem Experiment verglichen.

#### 4.1.4.1 Einphasige Simulation

Bei Rührkesseln kommt aufgrund der Bewegung des Rührorgans der korrekten Darstellung der einphasigen Strömung besondere Wichtigkeit zu. Die Validierung einphasiger Strömungssimulationen anhand experimenteller Ergebnisse läßt bereits schließen, inwieweit die für verschiedene Phänomene der dispergierenden Systeme wesentlichen fluiddynamischen Parameter (die kinetische turbulente Dissipationsrate, die Geschwindigkeitsfelder und -gradienten etc.) korrekt vorhergesagt werden können.

**4.1.4.1.1 Messdaten der einphasigen Experiment** Nassar untersuchte das Verhalten der einphasigen Rührkesselströmung mit einem 6-Blatt-Scheibenrührer und der Flüssigkeit Dimethylsulfoxid (DMSO) für zwei verschiedene Rührerdrehzahlen  $n_1 = 340$  und  $n_2 = 1354$  1/min. Dies entspricht einer Rührerblattgeschwindigkeit  $U_{tip_1} = 0,89$  m/s und Rührer-Reynolds-Zahl  $Re_1 = 7282$  bzw.  $U_{tip_2} = 3,54$  m/s und  $Re_2 = 29000$ . Wobei  $U_{tip} = \pi d n$  ist mit  $d$  dem Durchmesser und  $n$  der Rotationsgeschwindigkeit des Rührers. Die zwei Experimente stellen zwei Regim der Rührkesselströmung dar. Bei dem ersten Experiment handelt es sich um eine Rührkesselströmung niedriger Reynolds-Zahl, während die zweite eine voll-turbulente Strömung ist. Die letzte wurde gewählt für die Validierung der einphasigen Simulation mit dem Code CFX. Details der Kesselkonfiguration und Experimentsbedingungen sind der Tabelle (4.1.3) zu entnehmen. Die experimentellen Untersuchungen liefern die LDA-Daten der Geschwindigkeitsfelder und deren Schwankungen, woraus die turbulen-

te kinetische Energie ermittelt wurde. Die Geschwindigkeiten wurden auf einer vertikalen, zwischen zwei benachbarten Strombrechern stehenden Ebene gemessen, wie in Abbildung (4.1.3) dargestellt. Die im Experiment gemessenen Geschwindigkeiten sind zeitgemittelt, mit der Rührerblattgeschwindigkeit  $U_{tip}$  normiert und über die mit dem Kesseldurchmesser normierten Koordinaten dargestellt. Die turbulente kinetische Energie ist mit den Komponenten der Geschwindigkeitsfluktuationen (RMS) der Radial-, Tangential- und Axialrichtungen ( $u'$ ,  $v'$  und  $w'$ ) berechnet:

$$k = \frac{1}{2} (u'^2 + v'^2 + w'^2) \quad (4.9)$$

und mit der Quadrat der Rührerblattgeschwindigkeit normiert.

**4.1.4.1.2 Untersuchung des Rechennetzes** Zuerst wurde die Gitterabhängigkeit der numerischen Lösung mit Rechennetzen verschiedener Auflösungen überprüft und erreicht. Alle untersuchten Rechennetze sind blockstrukturiert (Hexahedrale Blöcke) und bestehen aus zwei Hauptdomänen, einer mit dem Rührer rotierenden Domäne und einer mit der Kesselwand ruhenden Domäne (Abbildung (4.4 - rechts) und (4.6)). In der hier simulierten Rührkesselkonfiguration ist der Abstand zwischen dem Rührerumfang und den Strombrechern gleich dem Rührerdurchmesser. Die Schnittstelle zwischen dem rotierenden und dem stehenden Gitter wurde etwa in der Mitte des Abstandes zwischen den Rührerblättern und den Stromstörern angelegt. Angst et al. [1] untersuchten den Einfluss der Dimensionen der rotierenden Domäne (Höhe und Durchmesser) auf die Rechenergebnisse einer sliding mesh-Simulation. Sie fanden keinen Einfluss auf die resultierenden Axialgeschwindigkeiten bei der Variation des Durchmessers der rotierenden Domäne von 0,51–0,70 des Kesselradius.

Der Rührkessel mit dem 6-Blattrührer und den 4 Stromstörern ist spiegelsymmetrisch um eine Ebene angeordnet, die den Rührkessel in die Axialrichtung in zwei Hälften teilt. Daher genügt es, eine Hälfte des Kessels (180°- Sektor) mit zylindrischen Randbedingungen zu simulieren, wodurch sich die Rechenzeit halbiert. Auf Abbildung (4.4 - rechts) ist die CFD Konfiguration des Rührkes-

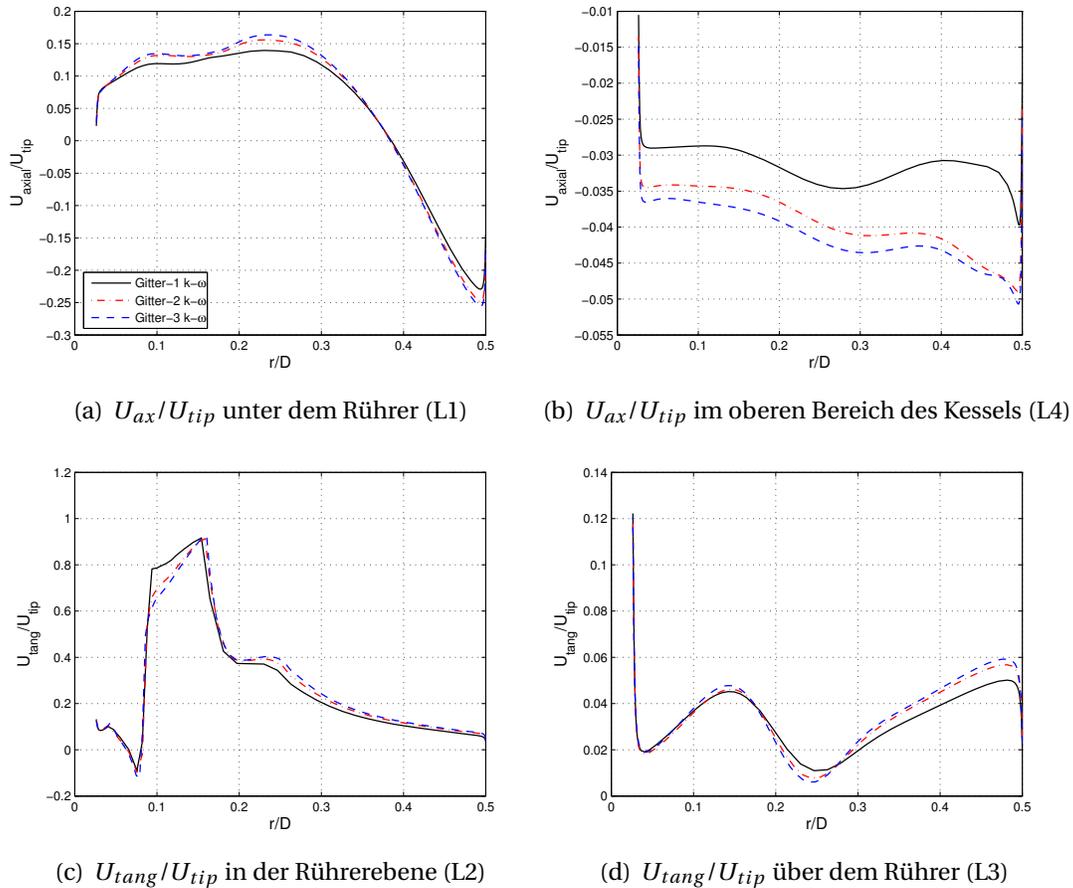
sels zu sehen. Abbildung (4.6) zeigt eine Momentaufnahme des Rechennetzes nach mehreren Umdrehungen des mit dem Rührer rotierenden Blocks in der Simulation mit der sliding mesh-Methode.

Die Rührerblätter und die Stromstörer wurden als unendliche dünne Flächen angenommen und nicht als reale Körper endlicher Dicke modelliert, entsprechend der tatsächlichen Geometrie. Periodische Randbedingungen wurden an den Flächen, welche die Schnittstelle mit der fehlenden Kesselhälfte darstellen, definiert. An den Rührer-, Stromstörer- und Wandoberflächen wurde die Standardwandfunktion angewendet. Für die obere, freie Oberfläche der Flüssigkeit wurde eine „*free slip*“-Randbedingung definiert. Zur Untersuchung der Gitterabhängigkeit der numerischen Lösung wurden die Rechnungen mit drei unterschiedlichen Rechennetzen durchgeführt, einem groben Rechengitter mit 180000 Rechenzellen (im folgenden Gitter 1) und zwei besonders im Rührernahgebiet feine Gittern mit 600000 und 1.6 Millionen Zellen (Gitter 2 und 3). Alle drei Netze sind im Kesselwandbereich fein und haben die gleiche Wandauflösung. Somit sind alle Netze bezüglich der Werte  $y^+$  konsistent, da in der CFX Version 11.0 eine automatische Auswahl der Wandfunktion entsprechend dem Werte von  $y^+$  betätigt wird. Die für Rührkesselsimulationen unüblich hohen Zellenzahlen ergeben sich hier durch die sehr feinen Rechenzellen an Kesselwand, -boden und Drehwelle. Dies ist motiviert durch die Anwendung des  $k-\omega$ - bzw. SST-Turbulenzmodells, die bis lang für die Simulation der Rührkesselströmung in der Literatur kaum erwähnt wurden. Die genannten Modelle arbeiten mit Wandfunktionen, die sehr niedrige  $y^+$ -Werte voraussetzen. Die Wände der Rührerblätter in den drei Netzen sind nicht extra fein aufgelöst. In einem Experiment, in dem auch an den Rührerblättern feine Netze zu generieren versucht wurde, deformierten sich die Rechenzellen in den inneren Bereichen. Dabei werden die Zellenwinkel kleiner und nicht mehr skalierbar. Skalierbare Zellenwinkel stellen eine Voraussetzung für die Netzunabhängigkeitsstudie dar. Es lässt sich außerdem vermuten, dass sich keine gewöhnliche Grenzschicht an diesen Rührerblättern formt. Es ergibt sich ein Staupunkt und ein Geschwindigkeitsprofil, das sich mit der Voraussetzung der Wandfunktionstheorie nicht vereinbaren lässt. Die numerische Simulation mit den feinen Zellen an den Rührerblätterwänden zeigte außerdem eine schlechte Konvergenz (maximale Residualen in der Ordnung

von  $10^{-1}$ ).

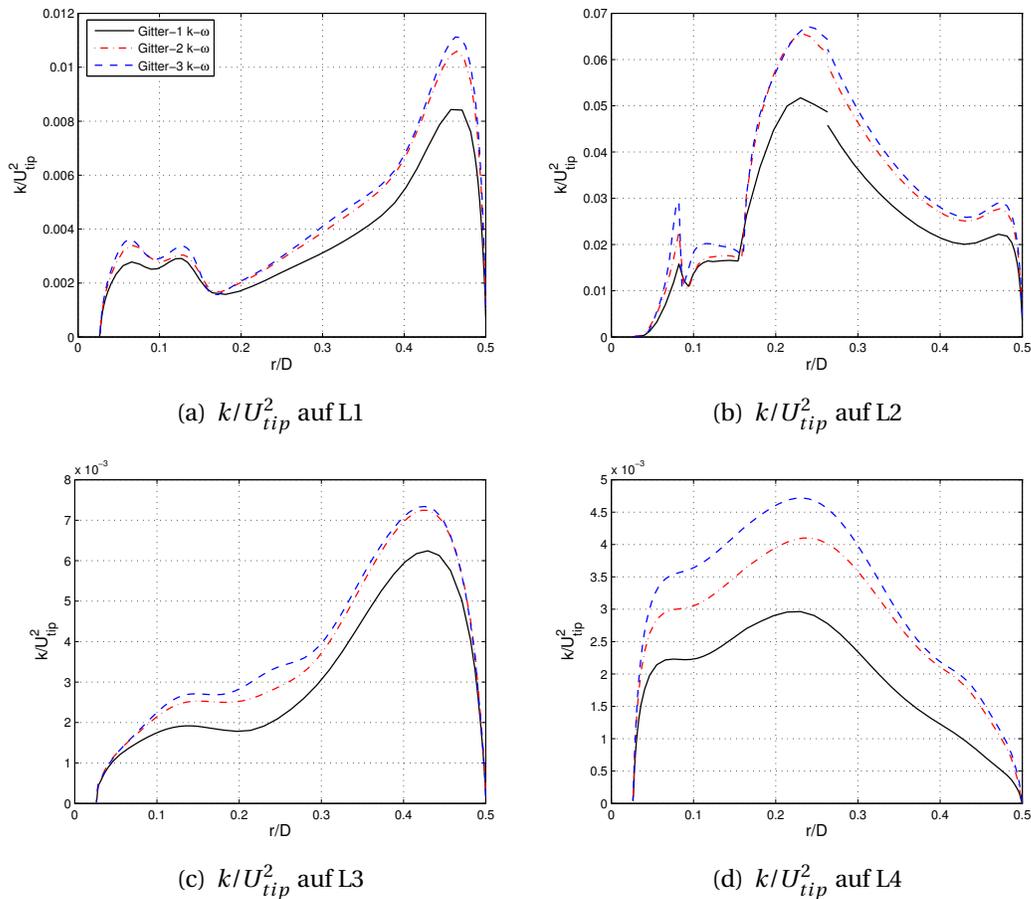
Die Netzabhängigkeitsstudie wurde mit der MRF-Methode für einen Schnappschuss (eine Position des Rührers, die  $0^\circ$ -Position in Abbildung (4.9)) durchgeführt. Dabei wurde das  $k$ - $\omega$ -Turbulenzmodell verwendet. Die Simulationsergebnisse mit den drei untersuchten Gittern und den Strömungsparametern des Experiments der voll-turbulenten Strömung ( $Re_R = 29.000$ ) sind in den Abbildungen (4.7) und (4.8) dargestellt. Abbildung (4.7-a und -b) zeigt die mit den drei Netzen errechnete Axialgeschwindigkeit auf zwei Höhen des Kessels (Linie 1 bzw. 4 in der Messebene in Abbildung (4.1.3)). Im oberen Bereich des Rechengebietes zeigt sich ein deutlicher Unterschied zwischen den mit den untersuchten Netzen berechneten Axialgeschwindigkeiten. Abbildung (4.7-c und -d) sind die Umfangsgeschwindigkeiten auf der Rüherebene (L2) und direkt unter der rotierenden Domäne (L3). Es zeigen sich nahezu identische Verläufe der Umfangsgeschwindigkeiten mit Gitter 2 und Gitter 3. Weiterhin ist die resultierende kinetische turbulente Energie (TKE) auf verschiedenen Höhen des Kessels (L1 bis L4) in Abbildung (4.8) dargestellt. Die Verbesserung der Ergebnisse mit der feiner werdenden Netzauflösung ist bei der TKE deutlicher. Auch hier zeigen die Ergebnisse eine Netzunabhängigkeit bei der Auflösung in Gitter 2, da keine Diskrepanz zwischen der Lösung mit Gitter 2 und Gitter 3 erkennbar ist. Jedoch könnte die weitere Verfeinerung des zweiten Netzes (Gitter 2) im oberen Bereich des Kessels zur Netzunabhängigkeit der Lösung in diesem Bereich führen. Dies zeigt der Verlauf der TKE in Abbildung (4.8-d). Aufbauend auf diesen Ergebnissen wird im Folgenden das zweite Netz (Gitter 2) für die Simulation der ein- und zweiphasigen Rührkesselströmung verwendet.

**4.1.4.1.3 Vergleich der einphasigen Simulationsergebnisse mit dem Experiment** Die einphasige Simulationen wird mit zwei Methoden durchgeführt: stationäre Rechnungen mit der MRF-Methode und instationäre mit der sliding mesh-Methode (bzw. clicking mesh-Methode). Drei Turbulenzmodelle werden dabei eingesetzt: das Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Modell, das  $k$ - $\omega$ -Modell und das *shear stress transport*-Modell (SST) [49]. Wie bereits erwähnt wurde das Rechnetnetz mit 600000 Rechenzellen (Gitter 2) für die einphasigen Simulationen benutzt. Bei



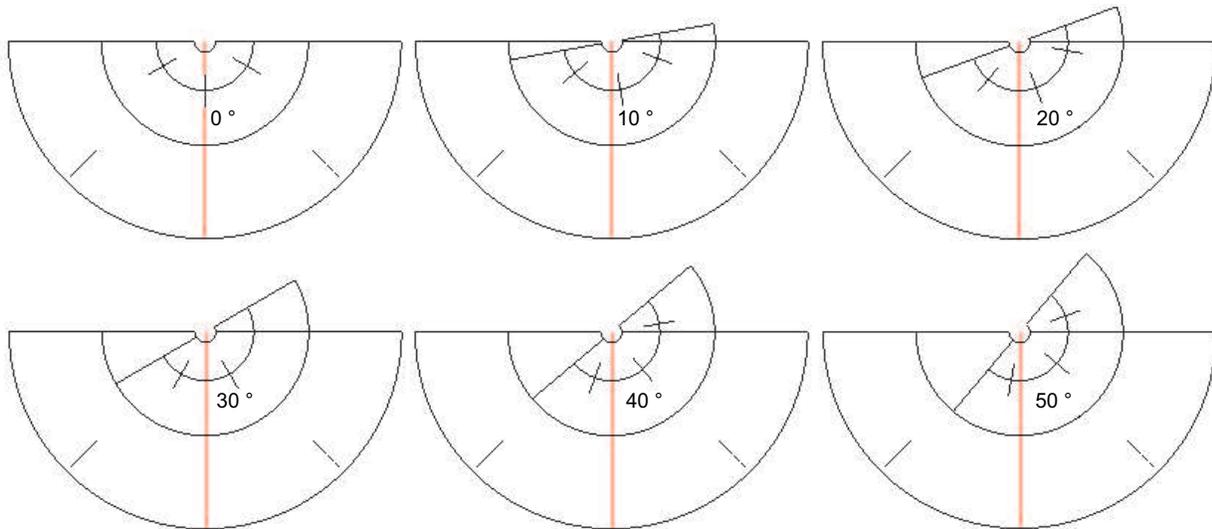
**Abbildung 4.7:** Einphasige Simulation: Axial- und Umfangsgeschwindigkeit in Abhängigkeit der Gitterauflösung

der MRF-Methode wird die numerische Rechnung für 6 unterschiedliche Positionen des Rührers durchgeführt. Die 6 resultierenden Lösungen werden gemittelt um eine mit dem Experiment vergleichbare Lösung zu erhalten. Abbildung (4.9) zeigt die 6 Stellungen der Rührerdomäne relativ zum feststehenden Rechenblock. Bei der SM Simulationen wurde zuerst eine stationäre Simulation durchgeführt, deren Lösung als Initialisierung der SM Rechnung dienen kann. Die instationäre sliding mesh-Simulation hat nach 20 simulierten Rührerumdrehungen eine periodische, quasi-stationäre Lösung erreicht. Der Verlauf der Geschwindigkeitsberechnung über die Zeitschritte in einem Punkt der Rührerebene bis zum Erreichen der periodischen Lösung zeigt die Abbildung (4.10).



**Abbildung 4.8:** Einphasige Simulation: Turbulente kinetische Energie in Abhängigkeit der Gitterauflösung

Der Vergleich mit den LDA-Messungen zeigt, dass alle Turbulenzmodelle mit den beiden Techniken MRF und SM die turbulenten kinetischen Energien unterschätzen. Abbildung (4.11) zeigt den Vergleich der einphasigen CFD-Lösungen mit den Messungen in der Rührerebene. Das  $k-\varepsilon$ -Modell unterschätzt die turbulente kinetische Energie enorm. Von einer Unterschätzung der turbulenten kinetischen Energie in Rührkesselströmungssimulationen wird oft in der Literatur berichtet [10]. Meistens kommt in solchen Berichten aber nur das  $k-\varepsilon$ -Modell zu Einsatz. Das beste Ergebnis liefert hier das  $k-\omega$ -Modell, besonders im Rührernahbereich, wo sich die größten Gradienten der Strömungsgrößen befinden. Im Allgemeinen kann eine vergleichbare

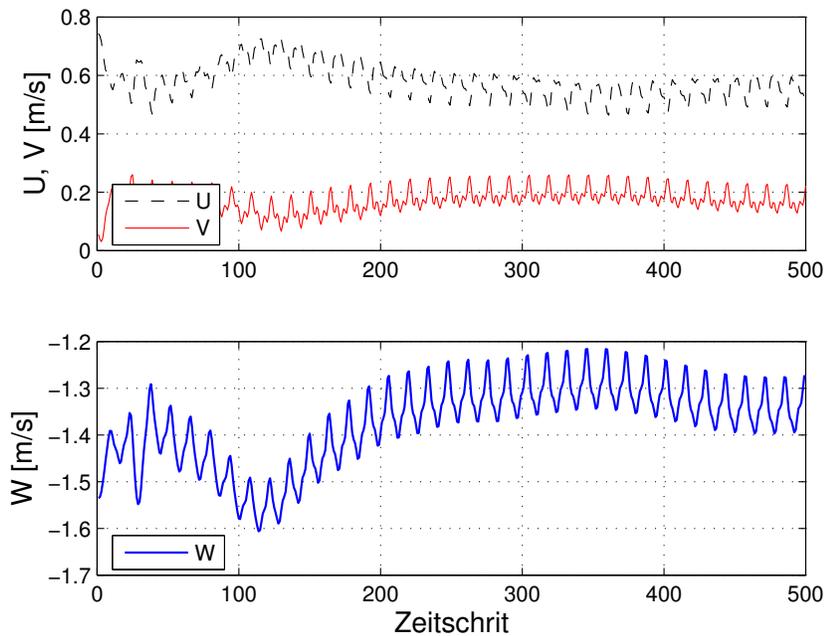


**Abbildung 4.9:** Stellungen der Rührerdomäne relative zum feststehenden Rechenblock in der MRF Rechnungen

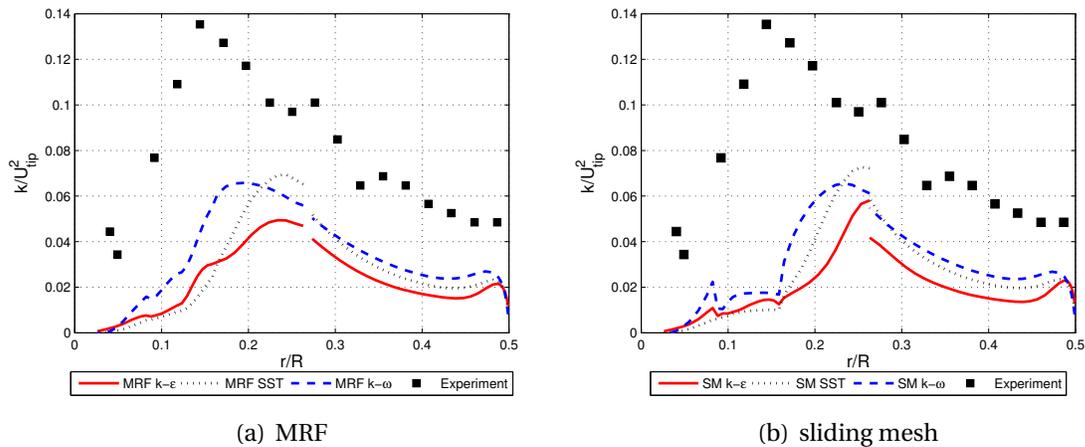
kinetische turbulente Energie der stationären MRF-Lösung mit der instationären sliding mesh-Lösung im Rührerfernbereich für alle Modelle festgestellt werden. Im Rührernahbereich sind die Ergebnisse der MRF besser als die Ergebnisse der SM-Methode. Dies gilt besonders für die Lösung mit dem  $k-\omega$ -Modell. Aufgrund der Existenz von zwei sehr unterschiedlichen Strömungsstrukturen im Rührreaktor, eine groß-skaige langsame Strömung in den Zirkulationszonen unterhalb und überhalb der Rührerebene (vgl. Abschnitte 4.1.2) und eine ander klein-skalige schnelle Strömung in der Nähe des Rührorgans kann man nicht von isotropen turbulenten Strömungsverhältnissen im Rührkessel ausgehen. Eine isotrope Turbulenz stellt die Voraussetzung der verwendeten Turbulenzmodelle dar. Auf dieser Annahme der Turbulenzmodelle können die Diskrepanzen zwischen der gemessenen und errechneten kinetischen turbulenten Energie zurückgeführt werden.

Ebenso zeigen die stationären MRF-Lösungen besonders eine bessere Übereinstimmung der Geschwindigkeiten als die Lösung mit der SM Methode besonders in der Rührernähe. Dies ist in den Abbildungen (4.12 und 4.13) anhand der Radial- und Umfangsgeschwindigkeit auf der Rührerebene (L2) zu sehen.

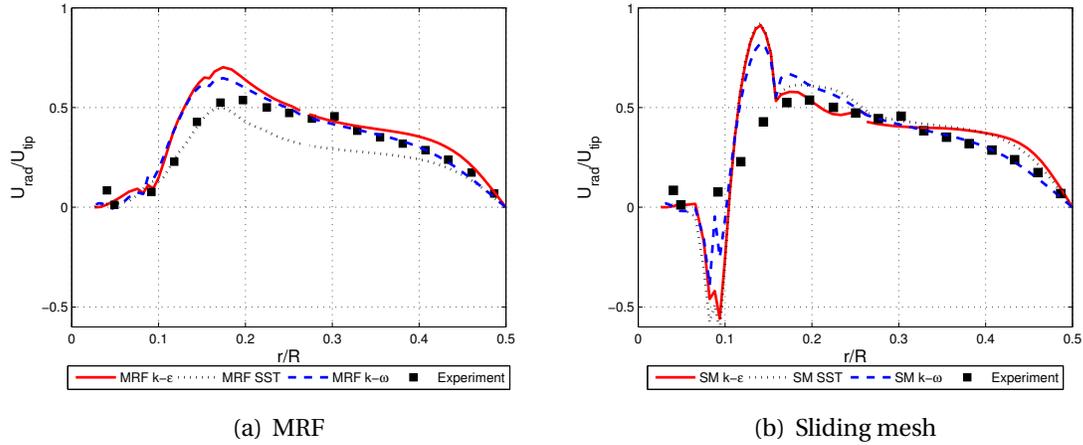
Abbildung (4.14) zeigt die Axialgeschwindigkeit unterhalb der rotierenden Re-



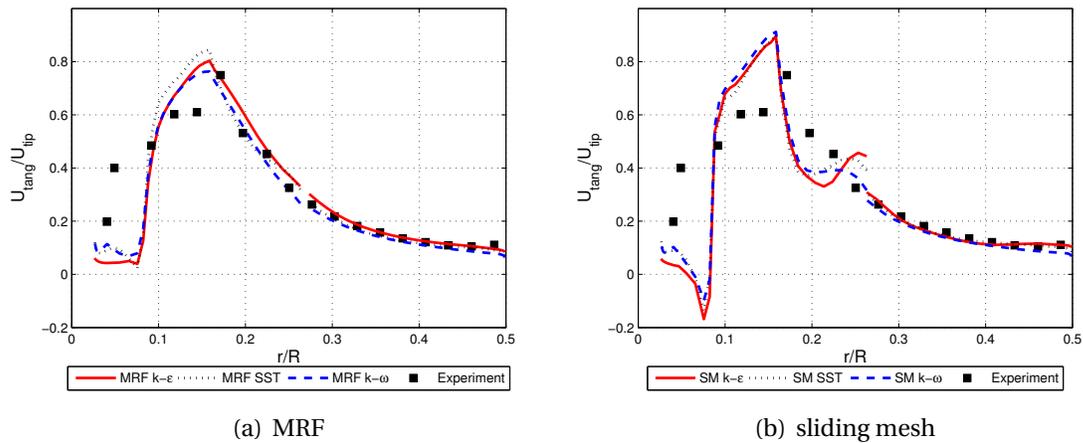
**Abbildung 4.10:** Einphasige Simulation: Sliding-Mesh Rechnung, Geschwindigkeitsfeld eines Punktes im stehenden Rechengebiet – in der Rührerebene auf L2. Die stationäre periodische Lösung stellt sich nach mehreren Umdrehungen des Rührers ein.



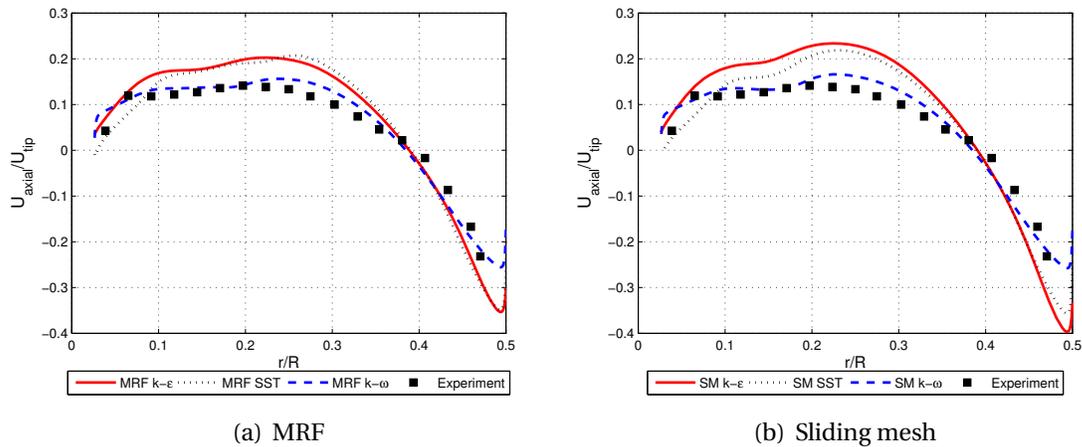
**Abbildung 4.11:** Einphasige Simulation: Vergleich der berechneten mit den gemessenen kinetischen turbulenten Energie  $k/U_{tip}^2$  – Rührerebene (L2)



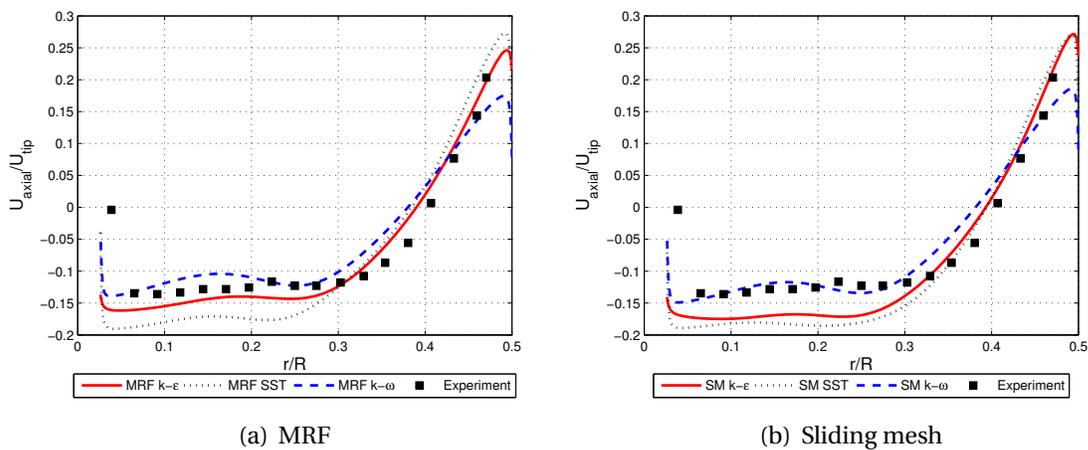
**Abbildung 4.12:** Vergleich der berechneten mit den gemessenen radialen Geschwindigkeit – Rührerebene (L2)



**Abbildung 4.13:** Vergleich der berechneten mit den gemessenen Umfangsgeschwindigkeit – Rührerebene (L2)

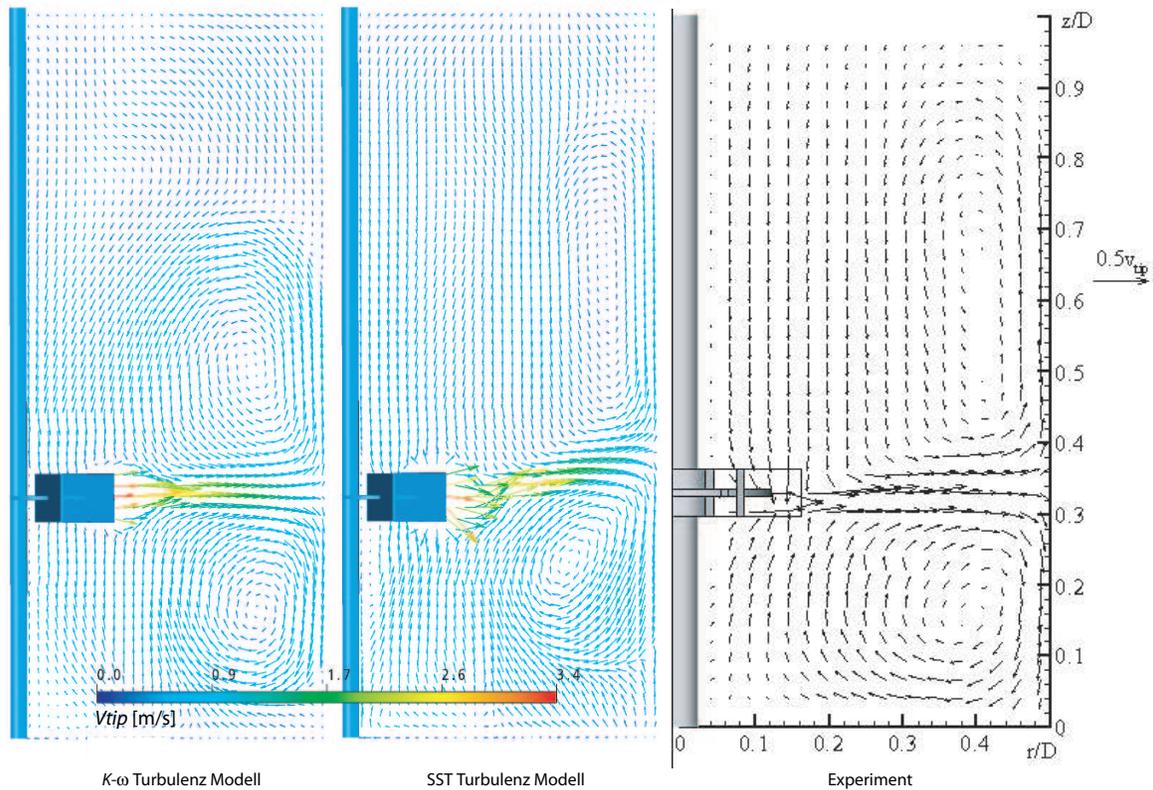


**Abbildung 4.14:** Vergleich der berechneten mit den gemessenen axialen Geschwindigkeit – unter dem Rührer (L1)



**Abbildung 4.15:** Vergleich der berechneten mit den gemessenen axialen Geschwindigkeit – über dem Rührer (L3)

chendomäne (auf L1), während Abbildung (4.15) die Axialgeschwindigkeit oberhalb dieser Domäne (auf L2) darstellt. Der Verlauf der Axialgeschwindigkeit der beiden Methoden MRF und SM in dem feststehenden Rechengebiet zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment insbesondere unter dem Rührer, siehe die Abbildung (4.14). Die Geschwindigkeitsverläufe der SM-Methode zeigen eine starke Diskontinuität der Lösung an der Schnittstelle



**Abbildung 4.16:** Geschwindigkeitsfeld der einphasigen Simulation mit  $k$ - $\omega$ - bzw. SST-Turbulenzmodell gegenüber dem Experiment

zwischen der rotierenden und feststehenden Rechendomänen.

Vergleicht man die Verläufe der berechneten mit den gemessenen Geschwindigkeiten bezüglich des Turbulenzmodells, stellt man fest, dass das  $k-\omega$ -Modell die Geschwindigkeitsfelder im Allgemeinen am besten wiedergibt. Dies ist aber nicht der Fall, wenn man den Verlauf der Axialgeschwindigkeiten oberhalb des Rühreres im kesselwandnahen Bereich in Abbildung (4.15) näher betrachtet. Hier lässt sich eine besser Übereinstimmung der mit dem SST-Modell durchgeführten Rechnung mit dem Experiment zeigen. Qualitativ betrachtet, zeigt das SST-Modell eine nähere Strömungsstruktur zum Experiment in der oberen Hälfte des Kessels. Der qualitative Vergleich ist in Abbildung (4.16) dargestellt, die das Geschwindigkeitsfeld der Lösung mit dem SST- und  $k-\omega$ -Modell gegenüber den LDA-Messungen in einer mittleren Ebene zwischen zwei Stromstörern zeigt.

Das bessere Abschneiden der MRF Methode gegenüber der SM Methode in der rotierenden Domäne kann auf das Interpolationsverfahren der Strömungsgrößen an der Schnittstelle in CFX geführt werden. Der Indikator dafür sind die Diskontinuitäten der SM-Lösung an der Schnittstelle zwischen dem rotierenden und feststehenden Rechengebietes.

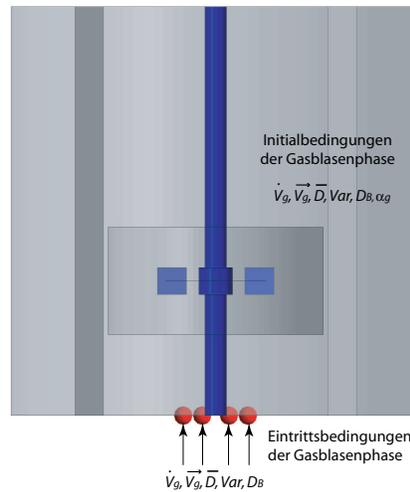
Anhand dieser Ergebnisse wird das stationäre MRF-Verfahren für die zweiphasigen Simulationen in dieser Arbeit angewendet, da der Rechenaufwand dieses Verfahrens geringer als der vom sliding mesh-Modell ist. Weiterhin wird das  $k-\omega$ -Modell-Modell verwendet.

#### 4.1.4.2 Zweiphasige Simulationen mit dem Momenten Modell

Die bereits für die einphasige Validierungsstudie verwendete Konfiguration des Rührkessels und das Rechnernetz (siehe Abbildung (4.4) bzw. Tabelle (4.1.3) wurden für die in diesem Kapitel durchgeführten zweiphasigen Validierungssimulationen eingesetzt. Schließlich führte Nassar sein zweiphasiges Experiment an derselben Rührkesselkonfiguration durch. Das disperse System im Experiment bestand aus Dimethylsulfoxid (DMSO) als Flüssigphase und Luft als disperse Phase. Dabei erfolgte die Messung der lokalen Luftblasengrößenverteilung, sowie der Blasengeschwindigkeiten in dem mit dem DMSO gefüllten Rührkessel mittels der PDA-Technik. Die Luft wurde mit 8 im Boden des Kessels integrierten Löchern injiziert, die an einem Kreis mit einem Radius von 13 mm verteilt sind. Nassar erreichte eine nahezu uniforme Verteilung der Luftblasen an dem Austritt der Düsen mit einem Durchmesserwert der Blasen von  $D_{Bin} = 1,18$  mm und einer Standardabweichung von 0,06. Die Blasengeschwindigkeiten am Austritt der Düse wurden ebenfalls gemessen und betragen 27,7 cm/s. Die Experimente wurden mit niedrigen Rührerumdrehgeschwindigkeiten von 550 und 650 1/min durchgeführt, um zu verhindern, dass die Flüssigkeit durch die Rotation des Rührers aus dem Kessel verdrängt wird. Dies entspricht einer Rührer-Reynolds-Zahl von  $Re_R=11780$  bzw.  $Re_R=13921$ . Der Gesamtvolumenstrom der 8 Löcher betrug 3,08 ml/min, somit ergab sich ein Volumenanteil der Luft von 0,031 für den Versuch mit der Rührerumdrehgeschwindigkeit von 550 1/min.

**4.1.4.2.1 Durchführung der zweiphasigen Simulation** Es wurden zwei zweiphasige Simulationen mit dem CFD CFX-Code Version 11.0 durchgeführt:

1. Zuerst erfolgte die zweiphasige Simulation mit dem im CFD-Code CFX integrierten Euler-Euler Zweifluid-Modell unter der Annahme eines einzigen konstanten Blasendurchmessers. Die Koaleszenz und der Zerfall der Blasen bleiben vernachlässigt. Der Eintrittsblasendurchmesser war identisch zum Blasendurchmesserwert am Düsenaustritt (von  $D_{Bin} = 1,18$  mm) im Experiment. Die Rührerumdrehgeschwindigkeit war 550 1/min. Ziel dieser Untersuchungen war die Überprüfung des



Eintrittsbedingungen		
Eintrittsblasengeschwindigkeit	$V_{Bin}$	= 27,7 cm/s
Voumenstrom des Gases pro Loch	$\dot{V}_{in}$	= 0,003875 ml/min
Mittelwert der Durchmesserverteilung	$\bar{D}_{in}$	= 1,18e-3 m
Varianz der Durchmesserverteilung	$Var_{in}$	= 2,5e-8 m <sup>2</sup>
Anfangsbedingungen		
Voumenanteil der Gasphase	$\alpha_{init}$	= 0,001
Mittelwert der Durchmesserverteilung	$\bar{D}_{init}$	= 3,5e-4 m
Varianz der Durchmesserverteilung	$Var_{init}$	= 4,4e-8 m <sup>2</sup>

**Abbildung 4.17:** Rand- und Anfangsbedingungen der zweiphasigen Simulation mit dem Momenten-Modell

CFD-Codes CFX bzw. des Euler-Euler Zweifluid-Modells, sowie das Erfassen der Strömungsparameter, die zur Generierung der Look-up Tabellen nötig sind. Später können die Simulationsergebnisse des Euler-Euler Zweifluid-Modells mit denen des entwickelten Momenten-Modells verglichen werden.

2. Für die zweite Simulation wurde das Momenten-Modell in CFX über das User-Schnittstelle implementiert. Weiterhin sind für die Momente der Blasengrößenverteilung (Mittelwert  $\bar{D}$  und Varianz  $Var$ ) zwei Transportgleichungen gelöst worden, in denen die Änderung der Partikelgrößen-

verteilung aufgrund von Dispersion und Koaleszenz als Quellterm erscheinen. Die maximalen und minimalen Werte der Strömungsparameter für die Generierung der Look-up Tabellen wurden mit Hilfe der Lösung der mit dem konstanten Blasendurchmesser durchgeführten Simulation festgelegt. Die Diskretisierung der Blasengrößenverteilung erfolgte mit einem maximalen Durchmesser, identisch dem im Experiment gemessenen Eintrittsblasendurchmesser ( $D_{Bmax} = 1,18 \text{ mm}$ ) und einem minimalen Durchmesser von  $D_{Bmin} = (0 + \Delta D)/2$ , wobei  $\Delta D$  die Blasenklassenbreite ist ( $\Delta D = (D_{max} - D_{min})/NC$ ). Die Zahl der Blasengrößenklassen ist mit  $NC = 100$  festgelegt worden. Die Rand- und Anfangsbedingungen der numerischen Simulation mit dem Momenten-Modell sind in Abbildung (4.17) dargestellt. Aufbauend auf die Ergebnisse aus Kapitel (3.2.4) wurde die funktionale  $\beta$ -Verteilung für die Blasenanzahldichte in der PBG angenommen, sowie das Zerfallsmodell von Grienberger und das Koaleszenzmodell von Prince et al. eingesetzt. Zwei Rechnungen mit dem Momenten-Modell wurden durchgeführt, die sich lediglich durch die Rührerumdrehgeschwindigkeiten ( $n_1 = 550 \text{ 1/min}$  bzw.  $n_2 = 650 \text{ 1/min}$ ) unterscheiden.

Für die zweiphasigen Simulationen wurde der einphasige CFD-Aufbau aus dem vorigen Abschnitt für die zweiphasige Gasblasen-Flüssigkeitsmodellierung modifiziert und verwendet. Hier kam auch die stationäre MRF-Methode zum Einsatz. Für die freie Oberfläche der Flüssigkeit wurde die Randbedingung *Entgasung* (Degassing) verwendet, die in dem CFX Programm als Option definierbar und mit Sinktermen versehen ist. Die Sinkterme sorgen für das Verschwinden des Gasphaseanteils, der die freie Oberfläche erreicht. Bei der Entgasungsrandbedingung sind reibungsfreie Strömungsbedingungen (*free-slip*) an der freien Oberfläche der Flüssigphase definiert.

Alle zweiphasigen Simulationen wurden mit dem Rechengitter aus 600000 Rechenzellen (Gitter 2) und mit dem  $k-\omega$ -Turbulenzmodell für die Flüssigphase bzw. mit dem „*dispers phase zero equation*“-Modell für die disperse Gasphase durchgeführt. Das „*dispers phase zero equation*“-Modell ist ein algebraischer Turbulenzansatz, der die kinematische Wirbelviskosität ( $\eta_{td}$ ) der

Gasphase mit der kinematischen Wirbelviskosität der kontinuierlichen Phase ( $\eta_{tk}$ ) durch die turbulente Prandtl-Zahl ( $\sigma_t$ ) in Beziehung setzt [2]:

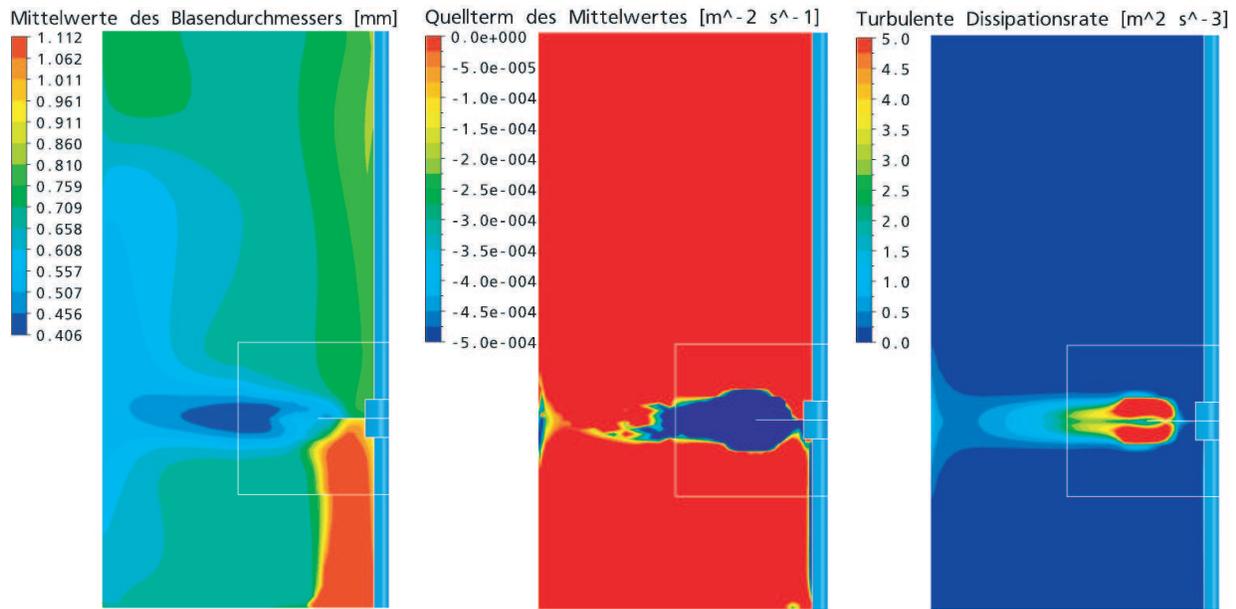
$$\eta_{td} = \frac{\eta_{tk}}{\sigma_t} \quad \text{bzw.} \quad \mu_{td} = \frac{\rho_d \mu_{tk}}{\rho_k \sigma_t}. \quad (4.10)$$

Die Berechnung der Blasenwiderstandskraft erfolgte mit der von Ishii und Zuber zur Bestimmung des Widerstandsbeiwerts ( $c_D$ ) vorgeschlagenen Korrelation. Das Ishii-Zuber Modell ist im Abschnitt (2.6) beschrieben.

**4.1.4.2.2 Auswertung der Ergebnisse der zweiphasigen Simulation** Im Allgemeinen zeigten die Simulationen mit dem Momenten-Modell numerische Stabilitäten und erfüllten die erwarteten Funktionalitäten, d.h. die Anbindung der Lookup Tabellen und der entwickelten Modellroutinen an CFX bzw. die Wiedergabe der Zerfalls- und Koaleszenzprozesse der Blasen.

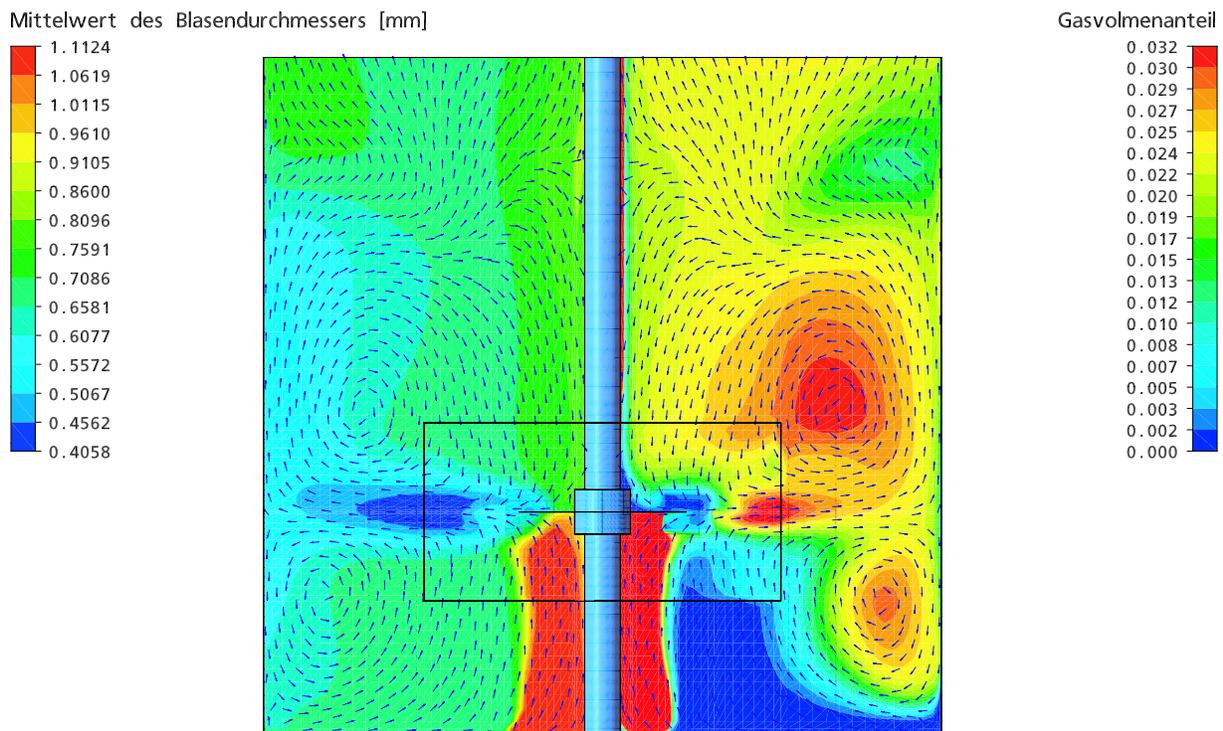
Die Rechenzeit war lediglich um 10% höher als die für die Modellierung mit dem Euler-Euler Zweifluid-Modell, in dem die Dispersionsprozesse nicht berücksichtigt und nur mit einer Blasendurchmesserklasse berechnet werden. Im folgenden werden die Ergebnisse der Rechnung mit dem Momenten-Modell diskutiert und mit dem Experiment verglichen. Zuerst wird auf die Momenten-Modell-Simulation mit der Rührerumdrehgeschwindigkeit  $n_1 = 550$  1/min und den Vergleich der Simulation mit dem Zwei-Fluid Modell eingegangen. Abschließend wird die Momenten-Modell-Simulation mit der Rührerumdrehgeschwindigkeit von  $n_2 = 650$  1/min diskutiert und dem Experiment gegenüber gestellt.

Die Abbildung (4.18) zeigt die Verteilung der turbulenten Dissipationsrate (rechts), die lokalen Quelltermwerte des Blasenmdurchmesserwertes (Mitte), sowie die Verteilung des Blasendurchmesserwertes (links) in einer vertikalen Ebene, die in der Mitte zwischen zwei Stromstörern liegt. Dabei wird die Relation der lokalen Werte des resultierenden Quellterms zur Verteilung der turbulenten Dissipationsrate wiedergegeben. Die turbulente kinetische Energie bzw. deren Dissipationsrate stellt eine entscheidende Strömungsgröße für den Zerfallsprozess der Gasblasen dar (vergleiche Abschnitt 2.4.1). Im Rührerbereich und in der Richtung der Behälterwand weist



**Abbildung 4.18:** Zweiphasige Simulation der Rührkesselströmung mit dem Momenten-Modell: die Mittelwertverteilung (links) und die lokalen Quelltermwerte des Mittelwertes (Mitte) gegenüber der turbulenten Dissipationsrate (rechts). Die Quellterm des Mittelwertes korrelieren mit der lokalen turbulenten Dissipationsrate und ergibt sich die entsprechende Verteilung der Blasendurchmesser

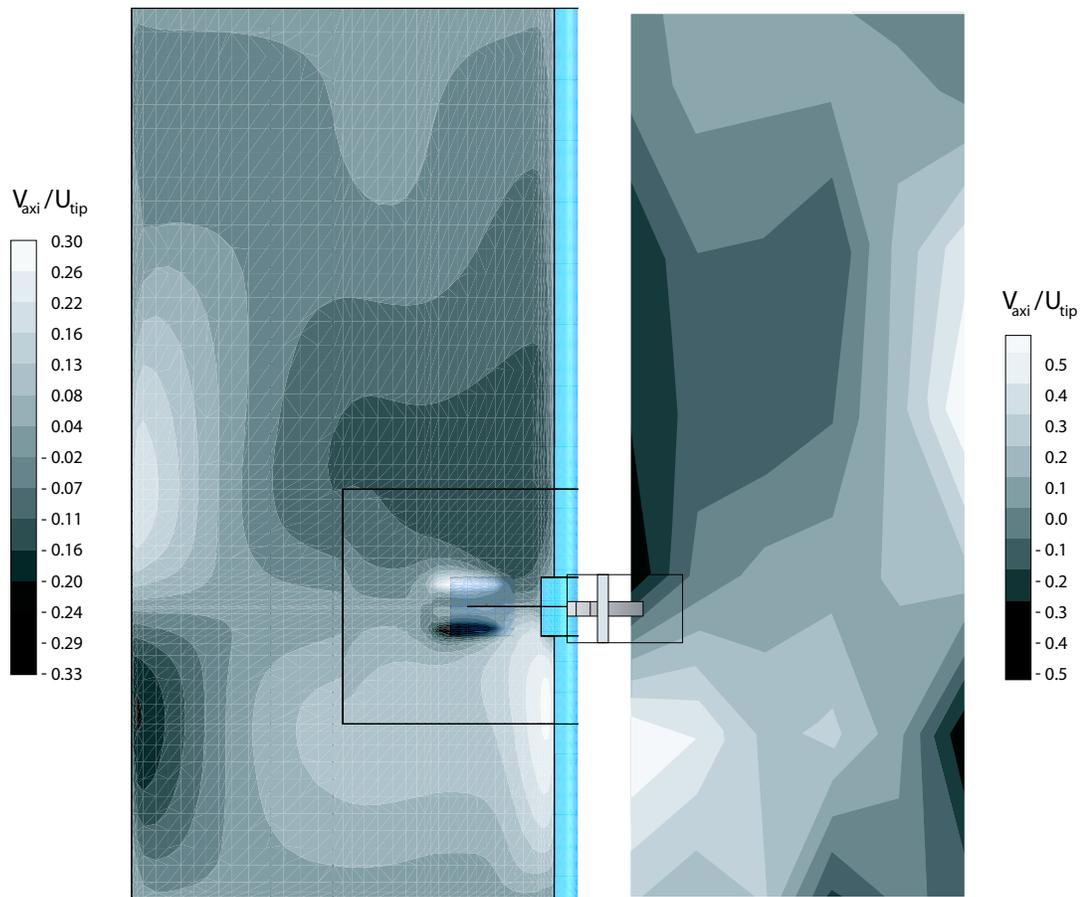
die Lösung die höchsten Werte der turbulenten Dissipationsrate auf und dort zeigt sich eine hohe Intensität des Mittelwertquellterms. Die negativen Vorzeichen des Quellterms deuten auf eine Senke des Mittelwertes der Blasendurchmesser, wo sich dann starke Dispersion von Blasen ergibt und damit kleine Werte des Blasendurchmesser resultieren. Es lässt sich erkennen, dass die Gasblasen im rührernahen Bereich am stärksten zerteilt werden, wo die Lösung die höchsten Werte der turbulenten Dissipationsrate aufweist. Ebenso korreliert die Mittelwertverteilung des Blasendurchmessers zu den lokalen Werten des Quellterms bzw. der Verteilung der turbulenten Dissipationsrate. Die Gasblasen treten in das Rechengebiet am Kesselboden mit dem Anfangswert des Mittelwerts von  $\bar{D} = 1,18$  mm ein und weisen dann im rührernahen Bereich einen minimalen Mittelwert von 0.42 mm infolge der



**Abbildung 4.19:** Die mit dem Momenten-Modell errechnete Verteilung des Blasendurchmessermittelwerts (links) und des Gasvolumenanteils (rechts)

starken Zerfallsrate auf. Der maximale und minimale Blasendurchmessermittelwert in dem Experiment beträgt 1,18 mm bzw. 0.30 mm. Diese Diskrepanz zwischen gemessenen und errechneten Größen der kleinsten Blasen kann auf die niedrige Zerfallsrate der Blasen zurückgeführt werden, die wiederum in Abhängigkeit mit der unterschätzten turbulenten kinetischen Energie bzw. turbulenten Dissipationsrate in Verbindung gesetzt werden kann. Dies hat bereits die einphasige Simulation gezeigt.

Im Rahmen des Momenten-Modells können die lokalen Blasendurchmes-



**Abbildung 4.20:** Vergleich der mit dem Momenten-Modell errechneten Axialgeschwindigkeiten der Gasphase (links) mit dem Experiment (rechts [53])

serverteilungen mit Hilfe der berechneten lokalen Werte der Verteilungsmomente und des Volumenanteils der Gasphase rekonstruiert werden (siehe Abbildung (4.22)). Dies ermöglicht eine *polydisperse* Behandlung der vom Blasenvolumen abhängigen Zwischenphasenwechselwirkungen. So können die Austauschprozesse zwischen dispersen Blasen und der kontinuierlichen Flüssigphase durch die Integration der Partikelkräfte über die rekonstruierte Verteilungsfunktion in Abhängigkeit verschiedener Blasengrößen wiedergegeben werden (Abschnitt (3.2.2.2)). Vereinfachend kann auch im Rahmen

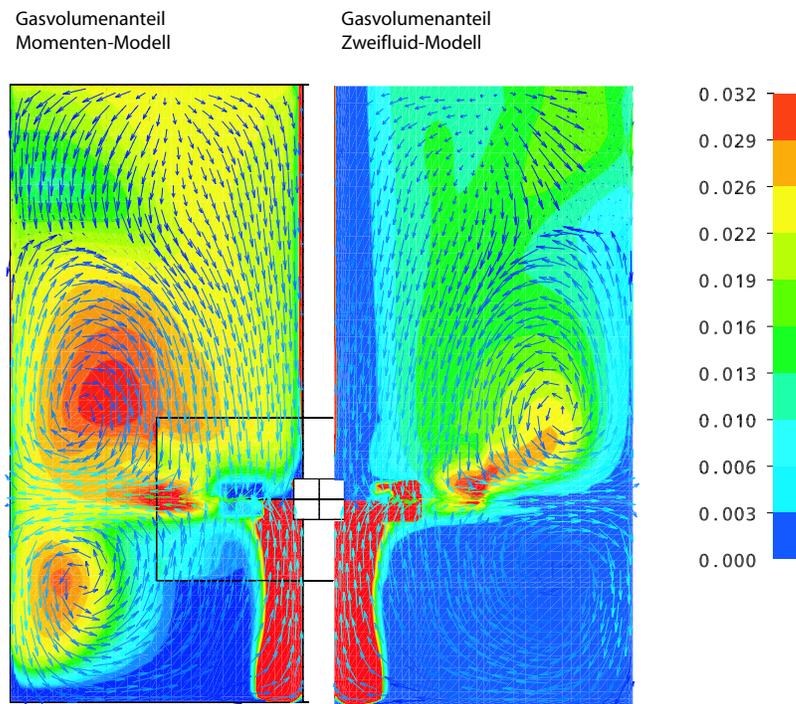
des Momenten-Modells mit dem berechneten lokalen Mittelwert des Blasendurchmessers als repräsentativen mittleren Durchmesser gearbeitet werden. Der lokale repräsentative mittlere Durchmesser ergibt sich hier unter der Berücksichtigung der Populationsdynamik der Blasen und mit einer für die Diskretisierungsunabhängigkeit der Populationsbilanzgleichung ausreichenden Anzahl der Blasengrößenklassen. Dabei stellt der geringe Rechenaufwand neben der korrekten Bestimmung des repräsentativen mittleren Durchmessers einen großen Vorteil des Momenten-Modells dar. In Abbildung (??) ist die Verteilung eines solchen repräsentativen mittleren Durchmessers der hier durchgeführten zweiphasigen Simulation dargestellt. Um diese Durchmesser-Verteilung mit dem Euler-Euler Zweifluid-Modell erreichen zu können, muss das Zwei-Fluid Modell ein gekoppeltes Gleichungssystem mit einer Anzahl Transportgleichungssätze lösen, die gleich den Blasendurchmesserklassen ist. Das Euler-Lagrange Verfahren muss eine Vielzahl der Partikelpakete berücksichtigen, um das gleiche Ergebnis zu erzielen. Die hohe Anzahl der Transportgleichung bzw. der Partikelpakete beider Verfahren erschwert die numerische Behandlung, führt zu numerischen Instabilitäten und ist mit hohem Rechenaufwand behaftet.

Abbildung (4.19) zeigt die Mittelwertsverteilung des Blasendurchmessers gegenüber der Verteilung des Gasvolumenanteils. In der Abbildung sind auch Geschwindigkeitsvektoren der dispersen Gasblasen dargestellt. Kleinere Blasen, deren Auftrieb nicht mehr die Zirkulationskraft der Flüssigphase in den Wirbeln oberhalb und unterhalb der Rührerscheibenebene überwinden können, zirkulieren weiter, verlängern damit ihre Verweilzeit und führen zu hohen Konzentrationen der Gasphase in den Zentren der Zirkulationszonen, vergleiche dazu die in Abbildung (4.19) dargestellten Geschwindigkeitsvektoren der dispersen Gasblasen.

Abbildung (4.20) stellt die errechnete (links) und die gemessene (rechts) Axialgeschwindigkeit der Gasblasen in der vertikalen Ebene zwischen zwei Stromstörern einander gegenüber. Die Werte der Geschwindigkeiten sind mit der Rührerblattgeschwindigkeit ( $U_{tip}$ ) normiert. Qualitativ betrachtet, ergibt die numerische Rechnung mit dem Momenten-Modell ein ähnliches Strömungsmuster wie das Experiment. Es zeigen sich die beiden Zirkulationszonen ober-

halb und unterhalb der Rührerebene. Jedoch weichen die lokalen maximalen und minimalen Werte der berechneten Geschwindigkeiten vom Experiment ab. Die Rechnung unterschätzt die Axialgeschwindigkeit der Blasen, was auf die Überschätzung der Blasengrößen zurückgeführt werden kann. Die großen Blasen haben im Verhältnis mehr Auftriebs- als Widerstandskräfte als die kleinen Blasen. Daraus kann im Experiment unterschiedliche Bewegungsrichtung beobachtet werden, je nachdem in welche Richtung die Flüssigphase strömt. Jedoch in dem Momenten-Modell in seinem hier implementierten Entwicklungszustand wird für die disperse Phase angenommen, dass die Bewegung aller Partikel (unabhängig von deren Größe) durch nur ein Geschwindigkeitsfeld beschrieben wird. Hier stößt der Mono-Dispersion Ansatz an seine Grenzen und kann aufsteigende Großblasen bei abwärts gespülten Kleinblasen nicht korrekt wiedergeben. Weiterhin können in der numerischen Rechnung zwei kleine Wirbel in dem von den Rührerblättern durchstreiften Gebiet beobachtet werden. Diese sind in dem Experiment nicht zu sehen. Ursache dafür ist die relativ grobe Auflösung des Messnetzes, das das von den Rührerblättern durchstreifte Gebiet nicht aufgelöst hat [53].

Der Vergleich der Lösung mit dem Momenten-Modell gegenüber der Lösung mit dem Zweifluid-Modell ist anhand der Gasvolumenanteile beider Rechnungen in Abbildung (4.21) dargestellt, in der auch die Geschwindigkeitsvektoren der Flüssigphase gezeigt sind. Mit dem Zweifluid-Modell (rechts) steigen die Blasen mit dem konstanten Blasendurchmesser ( $D_B = D_{BEint} = 1,18$  mm und keine Dispersion) direkt zur Rührerzone aufgrund ihrer Auftriebskraft. Dort werden sie von dem Rührer in die radiale Kesselwandrichtung geschleudert. Bevor sie die Kesselwand erreicht haben, steigen sie aufgrund der Auftriebskraft weiter. Jedoch schleppt der obere Wirbel der Flüssigphase aufgrund seiner höheren Zirkulationskraft (relativ zu der des unteren Wirbels) einen Anteil der Blasen mit, wobei die übrigen Blasen weiter an die Oberfläche steigen. Die Momenten-Modell-Lösung gibt unter Berücksichtigung der Populationsdynamik infolge der Zerfall- und Koaleszenzprozesse die physikalischen Verhältnisse in dem Rührreaktor wieder, wie im vorigen Absatz beschrieben. Es zeigen sich hier zwei Zonen, in denen hohe Konzentrationen der Gasphase sichtbar sind. In diesen Zonen zirkulieren kleine Gasblasen mit der Flüssigphase, da deren Auftriebskraft kleiner als die Zirkulationskraft der



**Abbildung 4.21:** Volumenanteil der Gasblasenphase gerechnet mit dem Momenten-Modell (links) verglichen mit dem von Zweifluid-Modell mit einem konstanten mittleren Blasendurchmesser (rechts)

Flüssigphase ist. Dies geschieht hauptsächlich infolge des blasengrößenabhängigen Impulsaustauschs.

In der Momenten-Modell-Rechnung sind hohe Gasvolumenanteile an dem oberen Teil der Rührerrotationsachse zu beobachten, nicht aber im Experiment. Dieses Verhalten kann mit der auf die Blasen in Wandnähe wirkenden Kraft erklärt werden, die durch die Oberflächenspannung und die asymmetrische Anströmung der Blase in Wandnähe durch Wandgrenzschichten verursacht wird. Normalerweise kann diese Kraft mit der Wandkraft (*wall lubrication force*) bilanziert werden [3]. Die Berücksichtigung der Wandkraft stellt hohe Ansprüche an die Rechenauflösung, insbesondere in Wandnähe, vergleiche Abschnitt 2.2.2.2.

In der Momenten-Modell-Simulation mit der Rührerumdrehgeschwindigkeit von  $n_1 = 550$  1/min ergab sich ein höherer Gasgehalt (von  $\alpha_{MM} = 0.045$ ) als der im Experiment (von  $\alpha_{exp} = 0.031$ ) erfasste. Diese Diskrepanz kann auf die hohen Konzentrationen des Gases an der Rührerrotationsachse zurückgeführt werden.

Es wurde eine weitere zweiphasige Simulation mit dem Momenten-Modell durchgeführt, in der die oben beschriebenen Bedingungen, mit Ausnahme der Rührerumdrehungszahl, gleich waren. Die Rührerumdrehungszahl betrug in dieser Simulation einen Wert von  $n_2 = 650$  1/min. Ziel dieses Rechenvorgangs war die Untersuchung des Einflusses der Rührerumdrehungszahl auf die Verteilung der Blasengrößen. Die Lösungsergebnisse dieser Simulation sind anhand der Verteilung des Mittelwerts und der Varianz der Blasendurchmesser in Abbildung (4.22-a) gezeigt. Die Geschwindigkeitsvektoren der Blasen (links) bzw. die der Flüssigphase (rechts) sind ebenfalls in der Abbildung dargestellt.

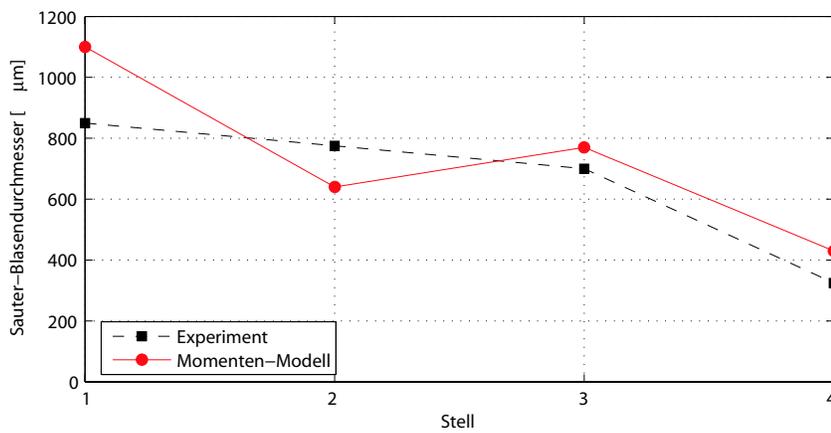
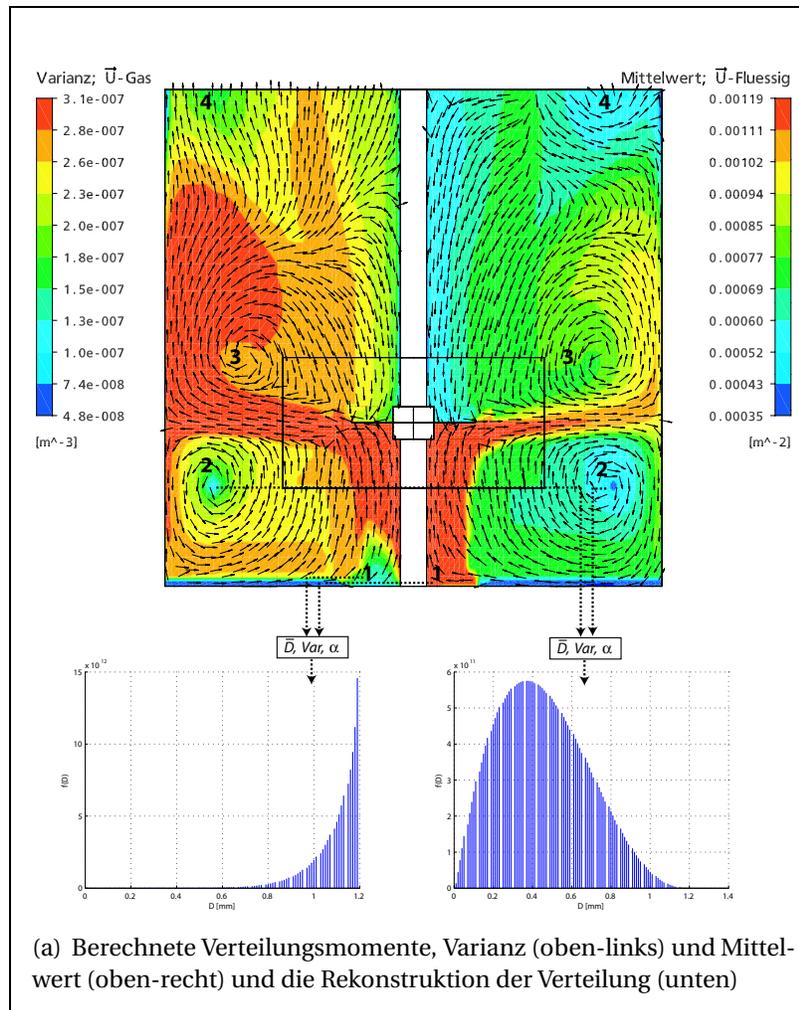
Aus der Erhöhung der Rührerumdrehungszahl um 100 1/min folgt ein niedrigerer Blasendurchmesserwert ( $\bar{D}_{min} = 0,35\text{mm}$ ), da die turbulente kinetische Energie bzw. deren Dissipationsrate mit der Erhöhung der Umdrehungszahl des Rühreres steigt, was zur Intensivierung der Dispersion der Blasen führt. Die Lösung zeigt zwei Zonen der Kleinblasenkonzentrationen oberhalb und unterhalb der Rührerebene. In der Abbildung sind die mit Hilfe von

Verteilungsmomenten und Gasvolumenanteil rekonstruierten Blasendurchmesserverteilungen exemplarisch (an zwei Stellen in dem Rührreaktor: 1 bzw. 2) dargestellt.

Wenn man die Geschwindigkeitsvektoren beider Phasen gleichzeitig betrachtet, kann man die Bewegung von kleinen und großen Blasen nachvollziehen. Es zeigt sich, dass (große) Blasen ihren Weg zur freien Oberfläche der Flüssigphase finden, während (kleine) Blasen mit der Flüssigkeit weiter zirkulieren. Dass kleine Blasen mit der Flüssigphase zirkuliert werden, zeigen die identischen Muster der Geschwindigkeitsvektoren in Gebieten der kleinen Blasen. Die Abbildung (4.22-b) zeigt den errechneten Sauter-Blasendurchmesser im Vergleich zu den gemessenen Werten an verschiedenen Stellen des Rechengebietes. Qualitativ betrachtet, weist die numerische Lösung mit dem Momenten Modell ähnliche Dispersionsraten auf, wie das Experiment an den untersuchten Stellen. Jedoch zeigte sich eine Diskrepanz in der unteren Zirkulationszone. Nassar begründete die Existenz von relativ großen Blasen in dieser Zone mit dem, aus dem Rührerbereich in die radiale Richtung ausgestoßenen Strahl, der die großen Blasen unter sich daran hindert, aufgrund ihrer Auftriebkraft nach oben zu steigen. Die Intensität des errechneten radialen Strahls erreicht offensichtlich nicht die des Experiments. In der einphasigen Simulation ergaben sich in den rührernahen Bereichen niedrigere Radialgeschwindigkeiten als im Experiment, vergleiche Abbildung (4.12) .

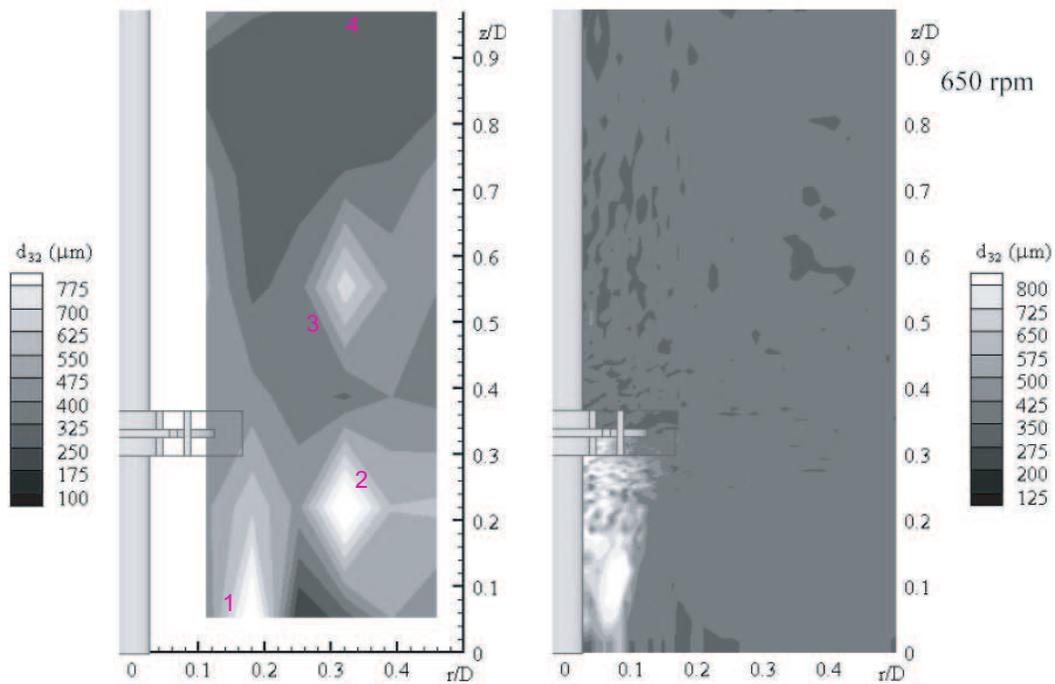
Nassar führte zweiphasige Simulation mit dem am Institut für Fluidmechanik der Universität Erlangen entwickelten Code LAG3D durch [53]. Der Code basiert auf dem Euler-Lagrange Verfahren und berücksichtigt die Dispersionsprozesse der Blasen. Detaillierte Beschreibung des Codes LAG3D findet man in [4]. Der Vergleich des von Nassar errechneten und gemessenen Sauter-Blasendurchmessers ist in Abbildung (4.23 ) gezeigt. Die LAG3D-Rechnung zeigt eine Reduzierung der Blasengrößen. Jedoch zeigt sich eine nahe zu uniforme Verteilung der Blasendurchmesser im Gesamtrechengebiet. Lediglich sind Blasen mit dem Eintrittsdurchmesser zwischen den Injektionsdüsen und dem Rührer zu beobachten. Die errechnete Verteilung des Durchmessers soll der globalen gemessenen Verteilung entsprechen [53]. Ein direkter Vergleich der mit dem entwickelten Momenten-Modell erzielten Simulationsergebnisse mit denen des LAG3D-Codes kann nicht gemacht werden, da das

Momenten-Modell auf den Euler-Euler Ansatz basiert, während LAG3D das Euler-Lagrange Verfahren zur Beschreibung der Partikelbewegung verwendet. Außerdem sind in beiden Verfahren unterschiedliche Zerfalls- und Koaleszenzmodelle implementiert, die auf verschiedenen physikalischen Basen bauen. Jedoch zeigen die Momenten-Modell Simulationen besser Übereinstimmung zum Experiment bezüglich der Blasengrößenverteilung.



(b) Sauter-Blasendurchmesser: Rechnung und Messung

**Abbildung 4.22:** Die Momente der Blasengrößenverteilung, die Rekonstruktion lokaler Blasendurchmesserverteilung und die daraus berechneten Sauter-Blasendurchmesser gegenüber dem Experiment



**Abbildung 4.23:** Vergleich der mit dem LAG3D Code errechneten Verteilung des Sauter-Durchmessers mit dem Experiment [53]

# Literaturverzeichnis

- [1] R. Angst and M. Kraume. Grid and model dependency of the solid/liquid two phase flow CFD simulations of stirred vessels. 11th European Conference on Mixing, Bamberg, Germany, 2003.
- [2] ANSYS Inc. *Users Manual ANSYS CFX-11*, July 2007.
- [3] S. Antal, R. Lahey, and J. Flaherty. Analysis of phase distribution in fully-developed laminar bubbly two phase flow. *Int. J. Multiphase Flow*, 1991.
- [4] C. Bartels, M. Breuer, K. Wechsler, and F. Durst. Computational fluid dynamics applications on parallel-vector computers: Computations of stirred vessel flows. *Computers and Fluids*, 31:69–97, 2002.
- [5] G.K. Batchelor. The stability of a large gas bubble rising through liquid. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 15:399, 1983.
- [6] Harald Benk: *Zum Turbulenzeinfluss auf die Phasenwechselwirkungen im Ausbildungsbereich vertikaler Gas/Flüssigkeits-Zweiphasenströmung*. PhD thesis, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt, 2001.
- [7] K. BOSCH. *Taschenbuch der Statistik*. Oldenbourg Verlag, München, 3 edition, 1998.
- [8] S. Bove. *Computational Fluid Dynamics of Gas-Liquid Flows Including Bubble Population Balances*. PhD thesis, Aalborg University, Denmark, Aalborg, October 12, 2005.
- [9] A. Brucato, M. Ciofalo, F. Grisafi, and G. Micale. Complete numerical simulation of flow fields in based stirred vessels: the inner-outer approach. *ICHEME Symp.*, 136:155–162, 1994.

- [10] A. Brucato, M. Ciofalo, F. Grisafi, and G. Micale. Numerical prediction of flow fields in baffled stirred vessels: A comparison of alternative modeling approaches. *Chem. Eng. Sci.*, 5:3653 — 3684, 1998.
- [11] A. D. Burns, T. Frank, I. Hamill, and J.M. Shi. The favre averaged drag model for turbulent dispersion in eulerian multi-phase flows. Yokohama, Japan, 30.05.-04.06 2004. 5th International Conference on Multiphase Flow – ICMF 04/JSME/ASME.
- [12] C. Colin, A. Kamp, and A. Chesters. Measurement and prediction of bubble coalescence in turbulent pipe flows. In *3rd International Conference on Multiphase Flows, ICMF98*, June 8-12 1998.
- [13] T.L. Cook and F.H. Harlow. Vortices in bubbly two-phase flow. *Int. J. Multiphase Flow*, 12:35–610, 1986.
- [14] C. Coualoglou and L. Tavlarides. Description of interaction process in agitated liquid-liquid dispersions. *Chem. Engng. Sci.*, 32:1289, 1977.
- [15] Lopez de Bertodano et al. Phase distribution in complex geometry conduits. Berkeley, CA, 5-11 July 1992. Preceeding of the Japan/US Seminar on Two-Phase Flow Dynamics.
- [16] S. Decker and M. Sommerfeld. State of the art and future trends in cfd simulation of stirred vessel hydrodynamics. *Chem. Eng. Technol.*, 27:215 — 224, 2004.
- [17] Stefan Decker. *Zur Berechnung von gerührten Suspensionen mit dem Euler-Lagrange-Verfahren*. PhD thesis, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 2005.
- [18] Niels Deen. *An experimental and computational study of fluid dynamics in gas-liquid chemical reactors*. PhD thesis, Aalborg University Esbjerg, 2001.
- [19] P. Dobrinski, G. Krakau, and A. Vogel. *Physik für Ingenieure*. Teubner Verlag, Stuttgart, 1988.
- [20] D.A. Drew. Mathematical modeling of two-phase flow. *J. Fluid Mech.*, 184:261–291, 1987.

- [21] D.A. Drew and S.L. Passman. *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer-Verlag, New York, 1999.
- [22] D. Lucas H.M. Prasser P.J. Zwart E. Krepper, Th. Frank.
- [23] H. Enwald, E. Peirano, and A. E. Almstedt. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *Int. J. Multiphase Flow*, 22(2):1–66, 1996.
- [24] Jun-Mei Shi et al. Implementation and validation of non-drag interfacial forces in cfx-5.6. *Int. Conf. on Multiphase Flow, ICMF'2004*, Yokohama, Japan:400, 2004.
- [25] Shi J.M. et al. Turbulence dispersion force - physics, model derivation and evaluation. 28.-30. June 2004.
- [26] Thomas Frank et al. Validation of eulerian multiphase flow models for nuclear safety applications. 22 – 24 September 2004.
- [27] C. Fleicher. *Detaillierte Modellierung von Gas-Fluessigkeits-Reaktoren*. PhD thesis, Institut für Chemische Verfahrenstechnik der universität Stuttgart, Stuttgart, April 2001.
- [28] Thomas Frank. Entwicklung von CFD-Software zur Simulation mehrdimensionaler Strömungen im Reaktorkühlsystem. Abschlussbericht; reaktorsicherheitsforschung-vorhaben-nr.: 150 1271, ANSYS Germany GmbH ,Staudenfeldweg 12 ,D-83624 Otterfing, Germany, Januar 2006.
- [29] Friberg and C. Paal. *Three-dimensional modelling of gas/liquid flow processes in bioreactors*. PhD thesis, University: Telemark College, Dept. of Technology, Porsgrunn, Norway, 1998.
- [30] E. Gharaibah, M. Brandt, and W. Polifke. A numerical model of dispersed two phase flows in areated stirred vessels based on presumed shape number density functions. Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe, Germany, August 2002. German-Japanese workshop on Multi-Phase-Flow.
- [31] M.E. Clift R. Grace, J.R. Weber. *Bubbles, Drops and Particles*. Academic Press, New York, U.S.A., 1978.

- [32] J. Grienberger. *Untersuchung und Modellierung von Blasensäulen*. PhD thesis, Universität Erlangen-Nürnberg, 1992.
- [33] R. P. Hesketh and T.W. Russell. Bubble size in horizontal pipelines. *AIChE*, 33(4):663–667, 1987.
- [34] R. P. Hesketh, Etchells A. W., and T.W. Russell. Bubble breakage in pipeline flow. *Chem. Eng. Sc.*, 46(1):1–9, 1991.
- [35] H. M. Hulburt and S. Katz. Some problems in particle technology: a statistical mechanical formulation. *American Potash and Chemical Corporation*, 19:555–574, 1964.
- [36] M. Ishii. Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow, eyrolles, paris. 1975.
- [37] M. Ishii and N. Zuber. Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows. *AIChE Journal*, 25(5):843-855, 1979.
- [38] M. Jenne and M. Reuss. A critical assessment of the use of k- turbulence models for simulation of the turbulent liquid flow induced by a rusthonturbine in based stirred-tank reactors. *Chem. Eng. Sci.*, 54:3921–3941, 1999.
- [39] W. Jones and B. E. Launder. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 15:301–314, 1972.
- [40] V. Kaufman, W. Polifke, and E. Gharaibah. CFD-Modellierung der Sprayausbreitung und -verdampfung mit einem Euler-Euler Ansatz und angenommener Tropfenanzahldichtefunktion. Bmw ag abschlussbericht, Lehrstuhl für Thermodynamik – Technische Universität München, November 2005.
- [41] R. Kirkpatrick and M. Lockett. Influence of approach velocity on bubble coalescence. *Chemical Engineering Science*, 29:2362–2373, 1976.
- [42] G. Kocamustafaogullari and M. Ishii. Foundation of the interfacial area transport equation and its closure relation. *Int. J. Heat Transfer*, 38(3):481–493, 1995.

- [43] P. E. Krests, S. M. und Wood. Prediction of 3-dimensional turbulent flow in stirred tanks. *AIChE.J.*, 3(37):448–460, 1991.
- [44] Lee. *A study of hydrodynamics an bubble phenomena in gas-liquid airlift systems*. PhD thesis, Kansas State University, 1987.
- [45] Simon Lo. Some recent developments and applications of cfd to multiphase flows in stirred reactors. Aussois, France, 12-14 January 2000. AMIF-ESF Workshop: Computing Methods for Two-Phase Flow.
- [46] J. Y. Luo, R. I. Issa, and A. D. Gosman. Prediction of impeller-induced flows in mixing vessels using multiple frames of reference. *ICChemE Symp.*, (136):549–556, 1994.
- [47] J.Y. Luo, A.D. Gosman, R.I. Issa, J.C. Middleton, and M.K. Fitzgerald. Full flow field computation of mixing in baffled stirred vessels. *Trans.I.Chem.E*, 71A:342 – 344, 1993.
- [48] F.R. Menter. Zonal two equation  $k-\omega$  turbulence models for aerodynamic flows. *AIAA-Journal*, page 2906, 1993.
- [49] F.R. Menter. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA-Journal*, 32(8):269 – 289, 1994.
- [50] M. Millies and D. Mewes. Phasengrenzflächen in blasenströmungen- teil 1: Blasensäulen. *Chem.-Ing. Tech.*, 68(6):660–669, 1996.
- [51] P. Moilanen, M. Laakkonen, and J. Aittamaa. Measurement of local bubble size distributions in stirred vessels using various techniques. November 2003.
- [52] K.E. Morud. *Turbulent Two-Phase Flow in Bubble Columns and Stirred Fermenters*. PhD thesis, Telemark Institute of Technology, 1994.
- [53] Ahmed Fayed Nassar. *Experimental Investigation of Single- and Two-Phase Flow in Stirred Vessels*. PhD thesis, Universität Erlangen-Nürnberg, 2005.
- [54] Anja Paschedag. *CFD in der Verfahrenstechnik*. Wiley-VCH, 1. edition edition, April 2004.

- [55] C.Y. Perng and J.Y. Murthy. A moving mesh technique for the simulation of flow in mixing tanks.
- [56] M. Prince and H. Blanch. Bubble coalescence and break-up in air-sparged bubble columns. *AIChE Journal*, 36:1485–1499, 1990.
- [57] D. Ramkrishna. *Population Balances. Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*. Academic Press, San Diego., 2000.
- [58] D. Ramkrishnas. The status of population balances. *Chem. Ing.*, (3):50–95, 1985.
- [59] V. V. Ranade and J. B. Joshi. Flow generated by a disc turbine. part ii. - mathematical modelling and comparison with experimental data. *Chem. Eng. Res. Des.*, 68A:34–50, 1990.
- [60] V.V. Ranade. An efficient computational model for simulating flow in stirred vessels: a case of rushton turbine. *Chemical Engineering Science*, 52:4473–4484, 1997.
- [61] V.V. Ranade. *Computational Flow Modeling for Chemical Reactor Engineering*. Academic Press, New York, 2002.
- [62] V.V. Ranade, Y. Tayalia, and H. Krishnan. Cfd predictions of flow near impeller blades in based stirred vessels: assessment of computational snapshot approach. *AIChE J.*, 2000.
- [63] A. Randolph. A population balance for countable entities. *J. Chem. Eng*, 42:437, 1964.
- [64] Jochen Schütze. *Die numerische Simulation von Strömungen und Stoffaustausch in gerührten, begasten Bioreaktoren*. PhD thesis, Technischen Universität Braunschweig, 2001.
- [65] D.B. Spalding and B. E. Launder. The numerical computation of turbulent flows. *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, 3:269–289, 1974.
- [66] M. Stamatoudis and L.L. Tavlarides. The analysis of interphase reaction and mass transfer in liquid-liquid dispersion. *Chemical Engineering Journal*, 11:199–273, 1981.

- [67] Rahman Sudiyo. Bubble coalescence and breakup in gas-liquid stirred tank reactors.
- [68] A. Tomiyama. Struggle with computational bubble dynamics. June 1998.
- [69] M. von Smoluchowski. Drei Vorträge über Diffusion, Brownsche Molekularbewegung und Koagulation von Kolloidteilchen. *Physikalische Zeitschrift*, 17:585–599, 1916.
- [70] D. C. Wilcox. The numerical computation of turbulent flows. *AIAA 24th Aerospace Sciences Meeting*, 1986.
- [71] D.C. Wilcox. Re-assessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. *AIAA-Journal*, 26:1414–1421, 1988.
- [72] F. A. WILLIAMS. *Combustion Theory, The Fundamental Theory of Chemical Reaction Flow Systems*. Benjamin/Cummings, combustion, science, and engineering series, 2. edition edition, 1985.

Anhang

# A Momenten-Modell für disperse Strömungssysteme mit Massen- und Energieaustausch

In dispersen Strömungssystemen mit Massen- und Energieaustauschen, wie z.B. die Verdampfung von Spraytropfen in einer umgebenden heißen Gasphase, könne die Massenerhaltungsgleichungen des Momenten-Modells (2.1 und 2.2) folgendermassen geschrieben werden:

$$\frac{\partial(\alpha_p \rho_p)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_p \vec{u}_p) = -S_{Mp}. \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\partial(\alpha_l \rho_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{u}_l) = S_{Ml}. \quad (\text{A.2})$$

Der Term  $S_M$  stellt in den Kontinuitätsgleichung der Partikel- und Flüssigphase die von einer Phase zu der anderen übergehende Masse (infolge von Verdampfung, Kondensation, etc.) dar. Er wird aus der Differenz der Massenintegration über die Tropfenverteilung vor (zum Zeitschritt  $n$ ) und nach der Verdampfung (zum Zeitschritt  $n + 1$ ) bestimmt:

$$S_{Mp} = S_{Ml} = \frac{\rho_l \pi}{6\Delta t} \left( \int_{D_{min}}^{D_{max}} f(D) D^3 dD \right)^n - \left[ \int_{D_{min}}^{D_{max}} f(D) D^3 dD \right]^{(n+1)} \quad (\text{A.3})$$

Das Modell löst separate Enthalpie- und Temperaturfelder für jede Phase. Die Totalenergiegleichung der kompressiblen Gasphase ist:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_p \rho_p h_{p,tot}) - \alpha_p \frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_p \vec{u}_p h_{p,tot} - \alpha_p \lambda_p \nabla T_p) -$$

$$\nabla \cdot (\alpha_p \mu_p (\nabla \vec{u}_p + (\nabla \vec{u}_p)^T) - \frac{2}{3} \nabla \vec{u}_p \delta) \vec{u}_p = Q_{pl} + S_{p_{ext}} \quad (\text{A.4})$$

Die Energiegleichung der inkompressiblen Flüssigphase ist:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_l \rho_l h_l) + \nabla \cdot (\alpha_l (\rho_l \vec{u}_l h_l - \lambda_l \nabla T_l)) = -Q_{lp} + S_{l_{ext}} \quad (\text{A.5})$$

Die Terme  $Q_{lp}$  und  $Q_{pl}$  bilden den Zwischenphasenwärmeaustausch aufgrund des thermodynamischen Nichtgleichgewichts ab. Die Summe beider Terme ist gleich Null, d.h.  $Q_{lp} = -Q_{pl}$ . Diese werden im Pre-processing bestimmt und tabulliert. Die Terme  $S_{p_{ext}}$  und  $S_{l_{ext}}$  in den Enthalpiegleichungen stehen für die Verdampfungswärme und werden mit Hilfe des Quellterms der verdampften Masse und der spezifischen Dampf- und Flüssigkeitsenthalpie berechnet:

$$S_{p_{ext}} = -S_{l_{ext}} = m_v (h_{l_{vap}} - h_{l_{liq}}) \quad (\text{A.6})$$

## B Transportgleichungen für die Momente der Partikelgrößenverteilung

In diesem Abschnitt wird die allgemeine Darstellung der Populationsbilanzen durch die Momente der Partikelgrößenverteilung behandelt und die Transportgleichungen hergeleitet, die den Transport des Mittelwerts  $\bar{D}$  und der Varianz  $Var$  des Partikeldurchmessers in dem entwickelten Momenten-Modell beschreiben.

Die Populationsbilanzgleichung (2.25) unter alleiniger Berücksichtigung der Partikelkonvektion über die Grenzen eines Kontrollvolumens  $dV$  hinweg und unter Einbeziehung der Zerfall- bzw. Koaleszenzterme kann vereinfacht werden zu:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} f) = S_B - S_D. \quad (\text{B.1})$$

Wobei  $f$  die Partikelanzahldichte und  $\vec{u}$  die größenabhängige Partikelgeschwindigkeit sind, während  $S_B$  bzw.  $S_D$  die Quell und die Senke sind, die die Entstehung (B=Birth) bzw. das Verschwinden (D=Death) der Partikel in der betrachteten Partikelklasse beschreiben.

Die Multiplikation der Gleichung (B.1) mit  $D^k dD$  ergibt:

$$\frac{\partial f}{\partial t} D^k dD + \nabla \cdot (\vec{u} f) D^k dD = (S_B - S_D) D^k dD. \quad (\text{B.2})$$

Fügt man die Definition der Momente der Größenverteilung

$$M^{(k)} = \int_{D_{min}}^{D_{max}} D^k f dD \text{ bzw. } M^{(k)} = \sum_{i=1}^{N_c} D^k f_i \Delta D \quad (\text{B.3})$$

ein und integriert über den Partikeldurchmesser, ergibt sich die Transportgleichung für die Momente der Anzahldichtefunktion  $f$ :

$$\frac{\partial M^{(k)}}{\partial t} + \nabla \cdot \sum_{i=1}^{Nc} \vec{u}_i D_i^k f_i \Delta D = S_B^{M^{(k)}} - S_D^{M^{(k)}}. \quad (\text{B.4})$$

Mit der Momententransportgeschwindigkeit:

$$\vec{u}^{(k)} = \frac{1}{M^{(k)}} \sum_{i=1}^{Nc} \vec{u}_i D_i^k f_i \Delta D \quad (\text{B.5})$$

ergibt sich die allgemeine Transportgleichung der Momente:

$$\frac{\partial M^{(k)}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}^{(k)} M^{(k)}) = S_B^{M^{(k)}} - S_D^{M^{(k)}}. \quad (\text{B.6})$$

Die physikalische Bedeutung der Momente  $M^{(k)}$  kann mit dem Wert der Potenz  $k$  folgendermassen interpretiert werden:

- $M^{(0)}$  = Gesamtpartikelanzahl [Anzahl/m<sup>3</sup>]
- $M^{(1)}$  = Summe aller Partikeldurchmesser [m/m<sup>3</sup>]
- $M^{(2)} \pi$  = Summe aller Partikeloberflächen [m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>]
- $M^{(3)} \frac{\pi}{6}$  = Summe aller Partikelvolumena [m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>] bzw. Volumenanteil der dispersen Phase ( $\alpha_p$ ).

Wie im Abschnitt (2.3.1.2) beschrieben, ist eine Verteilungsfunktion durch die Angabe aller ihrer Momente bestimmt. Es wird eine Verteilung vorausgesetzt, die durch ihre ersten zwei Momente (den Mittelwert  $\mu$  und die Varianz  $\sigma^2$ ) festgelegt ist (z.B. die Normalverteilung). Die Momente sind dann definiert durch:

$$\mu = \int_{-\infty}^{\infty} D f dD \quad \text{und} \quad \sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (D - \mu)^2 f dD. \quad (\text{B.7})$$

Spannt man die Funktion nur zwischen einem minimalen Partikeldurchmesser  $D_{min}$  und einem maximalen  $D_{max}$  auf, erhält man eine abgeschnittene Funktionsform mit zwei Spitzenwerten an  $D_{min}$  und  $D_{max}$ . In Abbildung

(2.5) ist eine normierte gestutzte Gaußfunktion dargestellt und im Abschnitt (3.2.3.3) ist die ausführliche mathematische Formulierung dieser Funktion erläutert. Die abgeschnittenen Anteile der Gaußverteilung bzw. der Maxima lassen sich mit Hilfe der komplementären Fehler-Funktion berechnen. Die Momente der resultierenden gestutzten Funktion  $\bar{D}$  und  $Var$  weichen dann von den Parametern der Normalverteilung ( $\mu$  und  $\sigma^2$ ) ab. Mit der Vernachlässigung der Maxima können die Momente der abgeschnittenen Funktion wie folgt berechnet werden:

$$\bar{D} = \int_{D_{min}}^{D_{max}} D f dD, \quad (\text{B.8})$$

$$Var = \int_{D_{min}}^{D_{max}} (D - \bar{D})^2 f dD. \quad (\text{B.9})$$

Setzt man  $\bar{D}$  und  $Var$  aus Gleichung (B.8-B.9) in die Momenten-Transportgleichung (B.6) ein, ergeben sich die Transportgleichungen für Mittelwert und Varianz:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{D}) + \nabla \cdot (\vec{u}^{(1)} \bar{D}) = S_B^{M^{(1)}} - S_D^{M^{(1)}}, \quad (\text{B.10})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(Var) + \nabla \cdot (\vec{u}^{(2)} Var) = S_B^{M^{(2)}} - S_D^{M^{(2)}}. \quad (\text{B.11})$$

Die Momententransportgeschwindigkeiten  $\vec{u}^{(1)}$  und  $\vec{u}^{(2)}$  können analog zur Gleichung (B.5) aus der Geschwindigkeiten der Größenklassen  $\vec{u}_i$  bestimmt werden, die auch unbekannt sind und mittels algebraischen Beziehung mit der Geschwindigkeit der dispersen Phase des Zweifluid-Modells in Verbindung gesetzt werden. Die Terme auf der rechten Seite der Gleichungen (B.10–B.11) sind die Quellen und Senken zur Beschreibung der zeitlichen Änderung des Mittelwerts bzw. der Varianz des Partikeldurchmessers aufgrund der Dispersion und Koaleszenz. Sie werden mit den physikalischen Modellen des jeweiligen Prozesses ermittelt.

Die Implementierung der Transportgleichungen der Verteilungsfunktion in der Form wie Gleichungen (B.10–B.11) ist in den CFD-Code CFX nicht

möglich. Das Programm erlaubt die Lösung von zusätzlichen Skalar-Transportgleichungen nur in der selben Form wie die Zweifluidmodell-Transportgleichungen (Gleichung (3.2)). Das bedeutet, die Terme der Gleichungen der Phasen sind mit dem Volumenanteil der jeweiligen Phase gewichtet. Ein zur Lösung der Momenten-Modell Gleichungen geeignetes Programm zu entwickeln, ist nicht Inhalt dieser Arbeit. Daher werden die Transportgleichungen der Momente (B.10–B.11) so angenähert, dass sie den Gleichungsformen, die des Programms CFX verwendet, entsprechen. Dadurch kann der Lösungsalgorithmus von CFX benutzt werden. Dies beschränkt die Allgemeinheit der oben hergeleiteten Transportgleichungen nicht wesentlich. Im Rahmen einer numerischen Studie wird der Einfluss der Volumenanteilgewichtung untersucht.