

Modellierung und Simulation von Blasensäulen: Forschungsbedarf aus akademischer Sicht

Dr.-Ing. Martin Wörner

INSTITUT FÜR KERN- UND ENERGIETECHNIK

Impulsvortrag

Workshop Campus Blasensäulen

DECHEMA-Haus, Frankfurt am Main

1. Dezember 2010

■ Vorbemerkung

- Ein Überblick zum Forschungsbedarf ist nie vollständig und im Allgemeinen subjektiv geprägt

■ Fokus dieses Impulsvortrages

- Euler-Euler Modell (Zwei-Fluid-Modell) für disperse Strömungen
- Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen
- Methoden finden aktuell weite Anwendung und sind in kommerziellen Codes verfügbar
- Wird auch auf mittlere Sicht das effizienteste Simulationswerkzeug für anwendungsorientierte technische Fragestellungen bleiben

■ Weitergehender Forschungsbedarf

- Euler-Lagrange-Modellierung
- Grobstruktursimulation
- „Direkte“ Numerische Simulation
- Diskussion im Rahmen der Gruppenarbeit

Standard Euler-Euler Modell

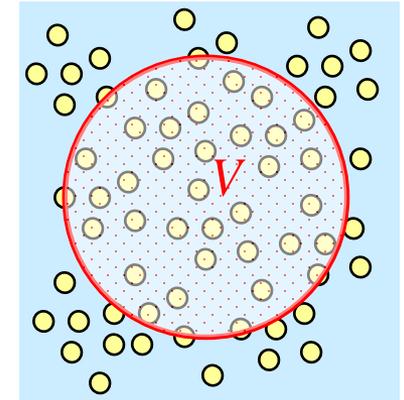
- Mittelung (Zeit, Volumen, Ensemble) führt auf Erhaltungsgleichungen sich durchdringender Phasen („interpenetrating continua“)

$$\frac{\partial \alpha_L \rho_L}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_L \rho_L \overline{\mathbf{v}_L} = 0 \quad \frac{\partial \alpha_G \rho_G}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_G \rho_G \overline{\mathbf{v}_G} = 0$$

$$\frac{\partial \alpha_L \rho_L \overline{\mathbf{v}_L}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_L \rho_L \overline{\mathbf{v}_L \mathbf{v}_L}) = -\alpha_L \nabla \overline{p_L} + \alpha_L \rho_L \mathbf{g} + \nabla \cdot \alpha_L \mu_L \left(\nabla \overline{\mathbf{v}_L} + \left(\nabla \overline{\mathbf{v}_L} \right)^T \right) + \mathbf{M}_L$$

$$\frac{\partial \alpha_G \rho_G \overline{\mathbf{v}_G}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_G \rho_G \overline{\mathbf{v}_G \mathbf{v}_G}) = -\alpha_G \nabla \overline{p_G} + \alpha_G \rho_G \mathbf{g} + \nabla \cdot \alpha_G \mu_G \left(\nabla \overline{\mathbf{v}_G} + \left(\nabla \overline{\mathbf{v}_G} \right)^T \right) + \mathbf{M}_G$$

- Schließungsterme und Modellierungsbedarf
 - Impulsaustausch über die Phasengrenzfläche
 - Turbulenzmodellierung (Flüssigphase)



Impulsaustausch über die Phasengrenze

- Druck- und Schubspannungsverteilung an der Phasengrenzfläche

$$\mathbf{M}_L = -\frac{1}{V} \iint_{S_i \cap V} \left[-p_{L,dyn} \mathbb{I} + \mu_L \left(\nabla \mathbf{v}_L + (\nabla \mathbf{v}_L)^T \right) \right] \cdot \hat{\mathbf{n}}_L ds$$

$$\mathbf{M}_G = -\mathbf{M}_L$$

$$\mathbf{M}_L \approx -\frac{1}{V} \sum_{j=1}^{N_B} \mathbf{F}_{hydr}^j \approx -\frac{N_B}{V} \mathbf{F}_{hydr} = -n_B \mathbf{F}_{hydr}$$

$$n_B = \frac{N_B \mathcal{V}_B}{V} \frac{1}{\mathcal{V}_B} = \frac{\alpha_G}{\mathcal{V}_B} = \frac{6\alpha_G}{\pi d_{eq}^3}$$

Hydrodynamische Kraft auf eine Einzelblase mit Durchmesser d_{eq}

$$\mathbf{F}_{hydr} = \mathbf{F}_{drag} + \mathbf{F}_{vm} + \mathbf{F}_{lift} + \mathbf{F}_{hist} + \dots$$

- Beträchtliche Fortschritte hinsichtlich der Modellierung des Impulsaustausches zwischen den Phasen für isolierte Einzelblasen
 - Widerstandskraft, Virtuelle Massenkraft, Lift-Kraft, Historie-Kraft, Turbulente Dispersionskraft, Wandkraft, ...
- Die Hydrodynamik von mono-dispersen Blasenströmungen mit geringem Gasgehalt kann relativ zuverlässig berechnet werden

- Die Strömung in Blasensäulen ist weder dünn noch mono-dispers
- Modellierung der Blasengrößenverteilung mittels Populationsbilanzen
 - Einteilung der Blasen in N_K Klassen mit Volumen $V_1 < V_2 < \dots < V_k \dots < V_{N_K}$
- Verschiedene Modellierungskonzepte (hier nicht detailliert)

$$\alpha_G = \sum_{k=1}^{N_K} \alpha_{G,k} = \sum_{k=1}^{N_K} n_{B,k} V_k$$

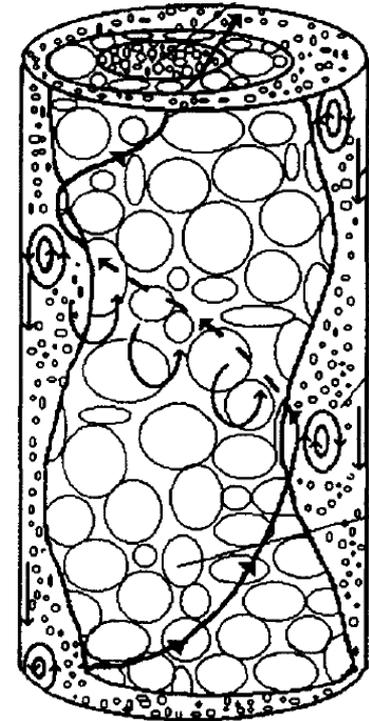
$$\frac{\partial n_{B,k}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}_{G,k} n_{B,k} = S_{\text{Koaleszenz}} + S_{\text{Fragmentierung}} + \dots$$

Verschiedene Mechanismen u.a. Turbulenz

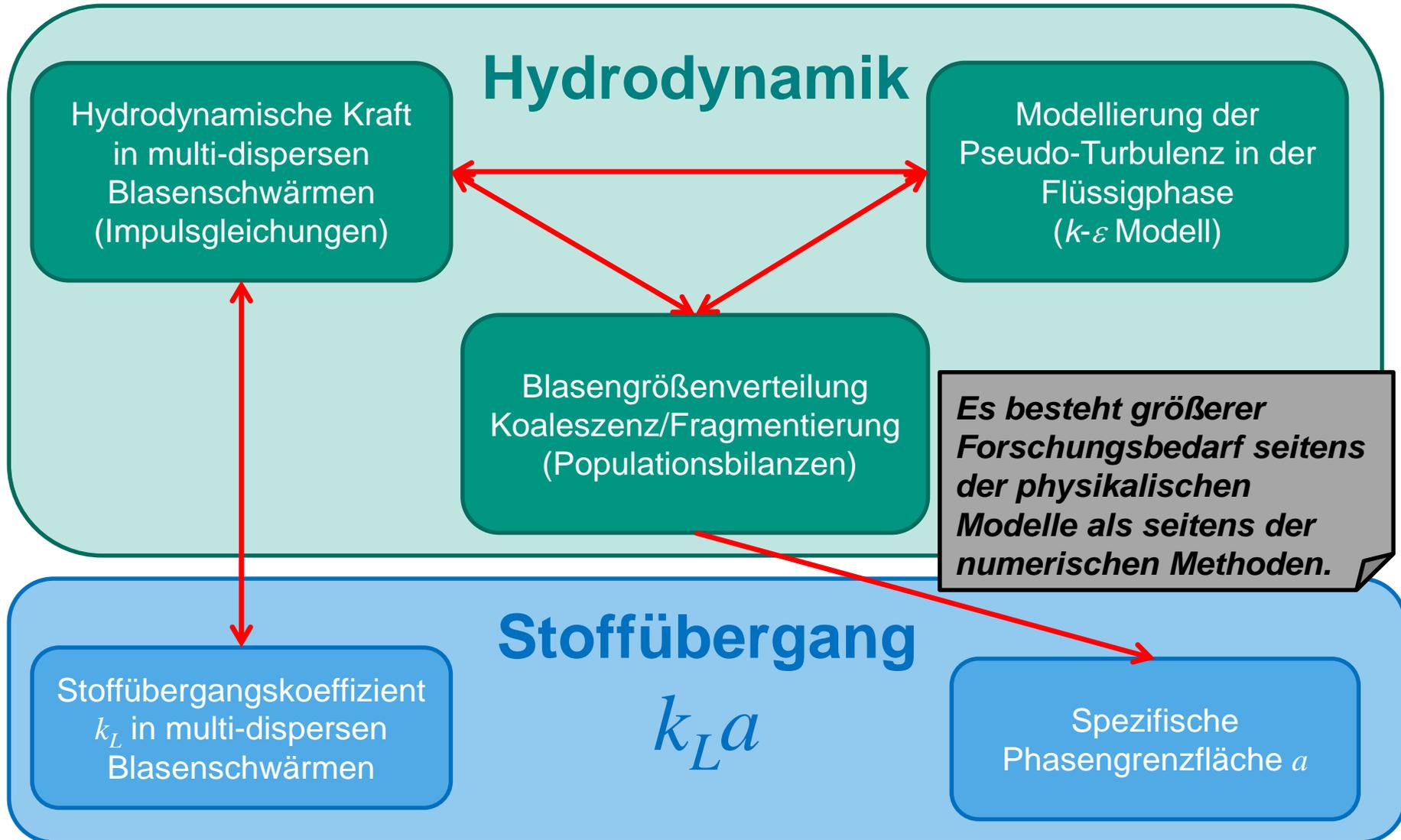
- Impulsaustausch mit der Flüssigphase

$$\mathbf{M}_L = - \sum_{k=1}^{N_K} n_{B,k} \mathbf{F}_{\text{hydr},k}$$

Lineare Überlagerung der hydrodynamischen Kraft isolierter Einzelblasen verschiedenen Volumens



- Aufsteigende Blasen treiben die Flüssigkeitsströmung an
 - Aufwärtsströmung in Mitte der Blasensäule, Abwärtsströmung und Rezirkulations-Bereiche nahe den Wänden
 - Lokale Geschwindigkeitsfluktuation (Blaseninduzierte Turbulenz bzw. Pseudo-Turbulenz)
- Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen (RANS)
 - Berechnung des zeitlich gemittelten Geschwindigkeitsfeldes
 - Wirkung der nicht aufgelösten Fluktuationen auf das zeitlich gemittelte Geschwindigkeitsfeld wird durch das Turbulenz-Modell eingebracht
- Status der Turbulenzmodellierung für Blasensäulen
 - Turbulenz in der Gasphase wird vernachlässigt
 - Turbulenz in der Flüssigphase wird mit Standard $k-\varepsilon$ Modell beschrieben
 - Das Standard $k-\varepsilon$ Modell wurde entwickelt für einphasige Strömung und Scher-induzierte Turbulenz, so dass seine Eignung für Blasensäulen mehr als fragwürdig ist



- Jakobsen HA, Lindborg H, Dorao CA.
Modeling of bubble column reactors: progress and limitations.
Ind. Eng. Chem. Res. **44** (2005) 5107
- Liao Y, Lucas D.
A literature review of theoretical models for drop and bubble breakup in
turbulent dispersions.
Chem. Eng. Sci. **64** (2009) 3389
- Tabib, MV, Swarnendu AR, Joshi JB.
CFD simulations of bubble column – analysis of interphase forces and
turbulence models.
Chem. Eng. J. **139** (2008) 589