

UNIVERSITÄT DORTMUND



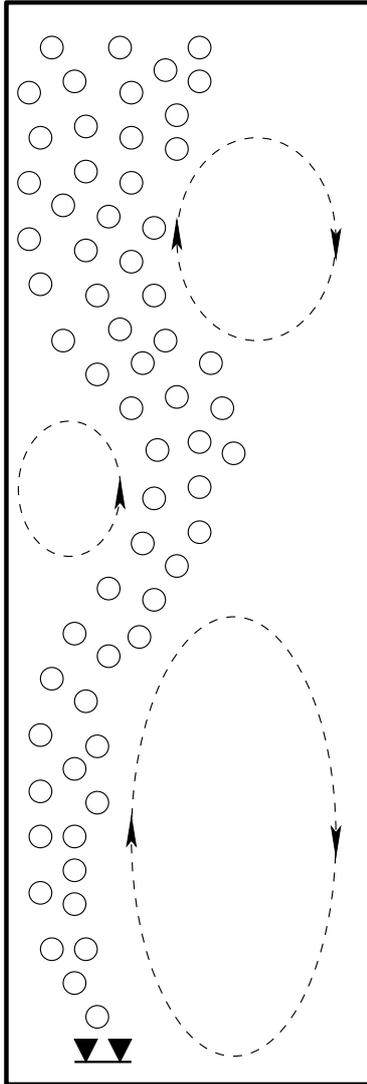
Modellbildung und Simulation von Mehrphasenströmungen in Gas-Flüssig-Reaktoren

D. Kuzmin

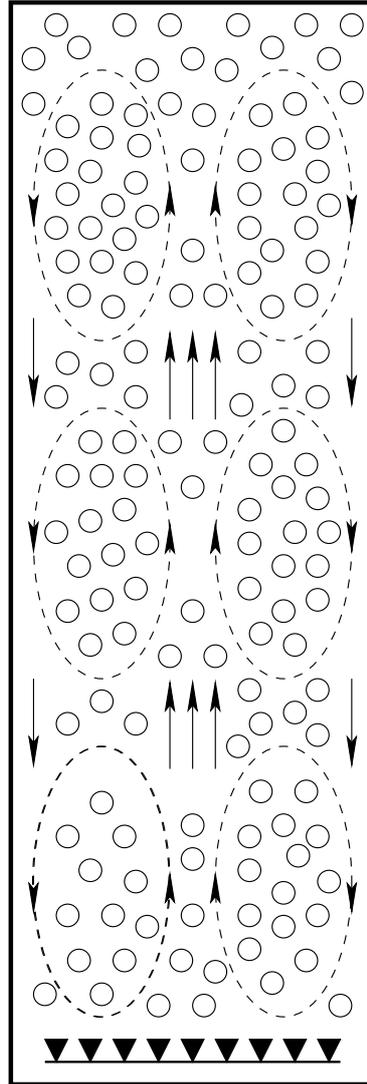
Lehrstuhl Mathematik III, Universität Dortmund



Blasensäulenreaktoren

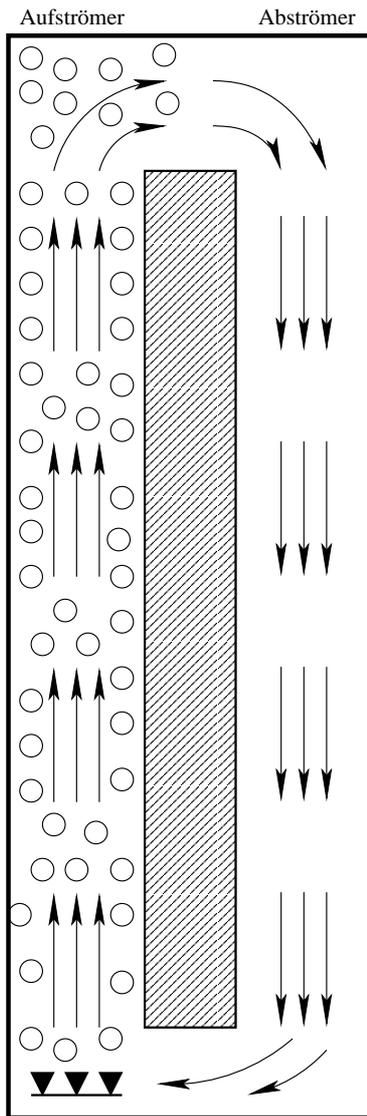


lokale Begasung

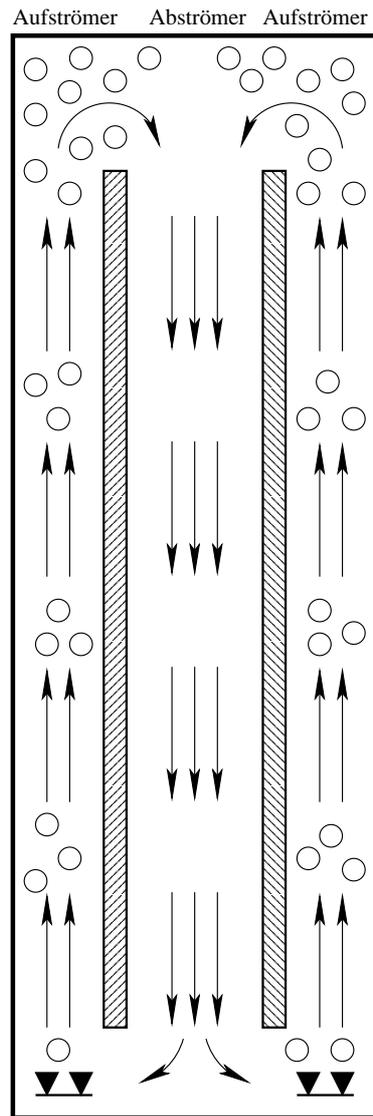


gleichmäßige Begasung

Airlift-Schlaufenreaktoren

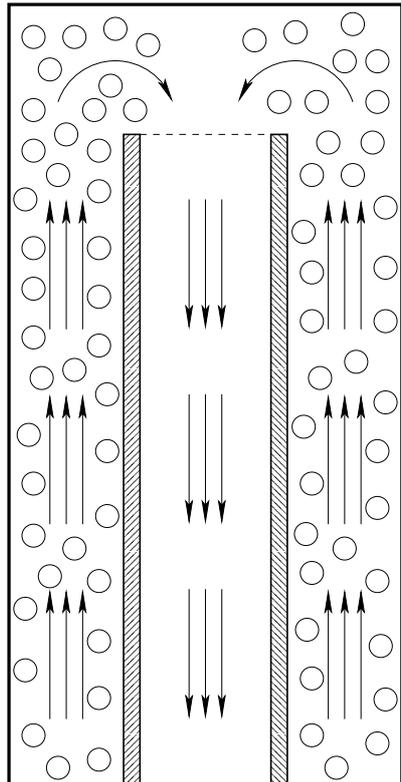


mit externer Schlaufe

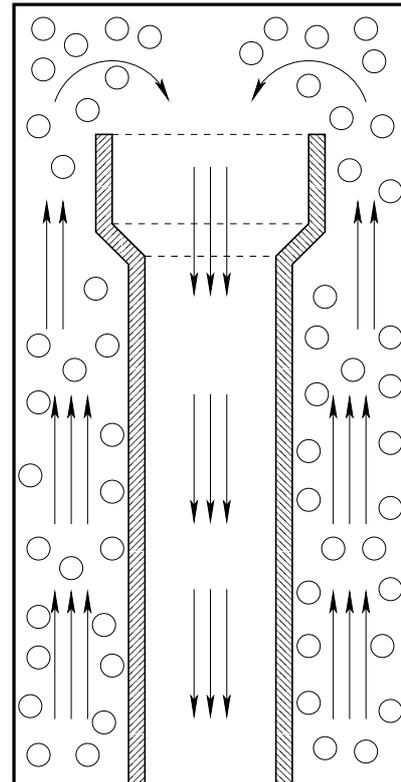


mit interner Schlaufe

Optimierung der Einbauteile in Schlaufenreaktoren



Rohreinbauten mit
konstantem Querschnitt



Rohreinbauten mit
variablem Querschnitt



in Kooperation mit

BASF

Fluiddynamische Modellierung von Gas-Liquid-Dispersionen

Euler-Euler-Ansatz

Euler-Lagrange-Ansatz

Direkte Numerische Simulation

Drift-Flux-Modell

Navier-Stokes/Boussinesq-Gleichungen

$$\frac{\partial \mathbf{u}_L}{\partial t} + (\mathbf{u}_L \cdot \nabla) \mathbf{u}_L = -\nabla p_* + \nu \Delta \mathbf{u}_L - \epsilon \mathbf{g}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_L = 0, \quad \mathbf{u}_G = \mathbf{u}_L + \mathbf{u}_{\text{slip}}$$

Kontinuitätsgleichung für die Gasphase

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_G}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho}_G \mathbf{u}_G) = -\eta a_S N$$

Berechnung des lokalen Gasgehalts

$$\tilde{\rho}_G = \epsilon \rho_G, \quad p = \rho_G \frac{R}{\eta} T \quad \rightsquigarrow \quad \epsilon = \frac{\tilde{\rho}_G R T}{p \eta}$$



Berücksichtigung der Zweiphasenturbulenz einschließlich der blaseninduzierten

Ausblick: Zweiphasenturbulenz

Effektive Viskosität ($k - \varepsilon$ Modell)

mit
$$\nu_{\text{eff}} = \nu + \nu_T, \quad \nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

$$k = \frac{1}{2} \langle |\mathbf{u}'_L|^2 \rangle \quad \text{turbulente kinetische Energie}$$

$$\varepsilon = \frac{\nu}{2} \langle |\nabla \mathbf{u}'_L + (\nabla \mathbf{u}'_L)^T|^2 \rangle \quad \text{ihre Dissipationsrate}$$

Transportgleichungen für k und ε

$$\frac{\partial \tilde{k}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{k} \mathbf{u}_L) = \nabla \cdot \left(\frac{\tilde{\nu}_T}{\sigma_k} \nabla k \right) + \tilde{P}_k + \tilde{S}_k - \tilde{\varepsilon}$$

$$\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\varepsilon} \mathbf{u}_L) = \nabla \cdot \left(\frac{\tilde{\nu}_T}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_1 \tilde{P}_k + C_\varepsilon \tilde{S}_k - C_2 \tilde{\varepsilon})$$

Modellierung der Produktionsterme

$$P_k = \frac{\nu_T}{2} |\nabla \mathbf{u}_L + (\nabla \mathbf{u}_L)^T|^2 \quad \text{scherinduzierte Turbulenz}$$

$$S_k = -C_k \varepsilon \nabla p \cdot \mathbf{u}_{\text{slip}} \quad \text{blaseninduzierte Turbulenz}$$

Empirische Modellkonstanten

$$C_\mu = 0.09, \quad C_1 = 1.44, \quad C_2 = 1.92, \quad \sigma_k = 1.0, \quad \sigma_\varepsilon = 1.3$$

$$C_k \in [0.01, 1], \quad C_\varepsilon \in [1, 1.92] \quad (\text{problemabhängig})$$

Stoffaustausch und Reaktion

Erhaltung der Blasenanzahldichte

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n \mathbf{u}_G) = 0$$

Berechnung der Phasengrenzfläche

$$\epsilon = \frac{4}{3} \pi r^3 n, \quad a_S = 4 \pi r^2 n \quad \rightsquigarrow \quad a_S = (4 \pi n)^{1/3} (3 \epsilon)^{2/3}$$

Stoffübergang in die flüssige Phase

$$N = Ek_L^0 \left(\frac{p}{H} - c_A \right) \quad \text{Zweifilmmodell}$$

Transport/Reaktion ($A + \nu_B B \rightarrow \nu_P P$)

$$\frac{\partial \tilde{c}_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{c}_A \mathbf{u}_L) = \nabla \cdot (\tilde{d}_A \nabla c_A) - \tilde{k}_2 c_A c_B + a_S N$$

$$\frac{\partial \tilde{c}_B}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{c}_B \mathbf{u}_L) = \nabla \cdot (\tilde{d}_B \nabla c_B) - \nu_B \tilde{k}_2 c_A c_B$$

$$\frac{\partial \tilde{c}_P}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{c}_P \mathbf{u}_L) = \nabla \cdot (\tilde{d}_P \nabla c_P) + \nu_P \tilde{k}_2 c_A c_B$$



Modellierung von Koaleszenz und Zerfall,
Berechnung der Blasengrößenverteilung

Ausblick: Populationsbilanzen

Kontinuitätsgleichung für die Blasendichte

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \mathbf{u}_G) + \frac{\partial}{\partial m} (f \dot{m}) = Q - S$$

$$f = f(\mathbf{x}, m, t)$$

Blasengrößenverteilung

$$\mathbf{u}_G = \mathbf{u}_L + \mathbf{u}_{\text{slip}}(m)$$

Gasgeschwindigkeit

$$\dot{m} = Ek_L^0 \left(c_A - \frac{p}{H} \right) \eta a_B$$

Wachstumsgeschwindigkeit

$$Q - S$$

Koaleszenz- und Zerfallsrate

Phasengrenzfläche einer Einzelblase

$$m = \rho_G \frac{4}{3} \pi r^3, \quad p = \rho_G \frac{R}{\eta} T, \quad a_B = 4\pi r^2$$

$$r = \left(\frac{3m}{4\pi} \frac{RT}{p\eta} \right)^{1/3} \rightsquigarrow a_B = \pi^{1/3} \left(6m \frac{RT}{p\eta} \right)^{2/3}$$

Berechnung des lokalen Gasgehalts

$$\epsilon(\mathbf{x}, t) = \frac{RT}{p\eta} \int_0^\infty m f(\mathbf{x}, m, t) dm$$

Berechnung des Stoffstroms $F = a_S N$

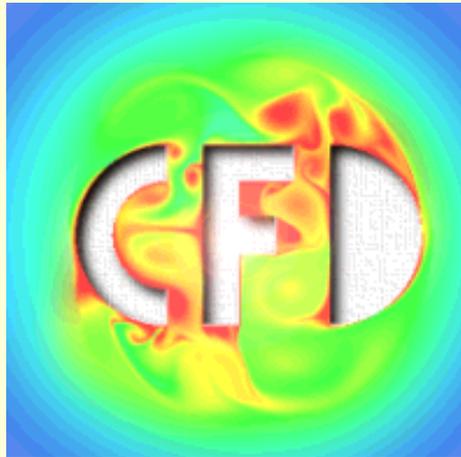
$$F(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\eta} \int_0^\infty \dot{m} f(\mathbf{x}, m, t) dm$$

Anforderungen an Simulations-Tools

- Gutes Stabilitätsverhalten
 - CFL-Bedingung
 - LBB-Bedingung
- Ausreichende Genauigkeit
 - Diskretisierungen hoher Ordnung
 - Fehlerkontrolle in Ort und Zeit
- Monotonie- und Positivitätserhaltung
 - Einsatz der künstlichen Diffusion
 - nichtlineare Diskretisierungsverfahren
- Hohe numerische Effizienz
 - implizite Zeitschrittverfahren
 - adaptive Schrittweitensteuerung
 - optimierte Mehrgitterlöser
- Zuverlässigkeit des Modells
 - Benchmark-Simulationen
 - Untersuchung der Gitterkonvergenz
 - Vergleich mit experimentellen Daten

Softwarepaket FEATURE

Finite
Element
Analysis
Tools for
Universal
Reactor
Engineering

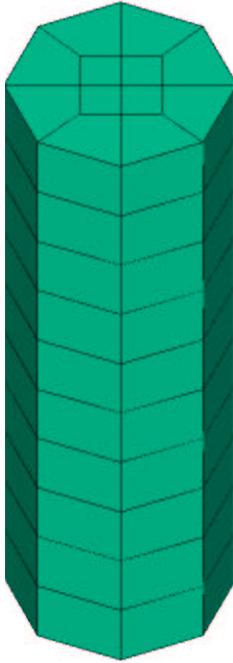


- Block-iterativer Algorithmus zur Behandlung von nichtlinearen gekoppelten Teilproblemen
- Druck-Geschwindigkeits-Kopplung mittels Pressure-Schur-Complement Techniken
- Hochauflösende FEM-FCT-Schemata für skalare Transportgleichungen
- Vollimplizite Zeitschrittverfahren mit adaptiver Schrittweitensteuerung
- Mehrgitterlöser für lineare Gleichungssysteme



Parallelisierung und hardware-spezifische Optimierung (FEAST-Projekt)

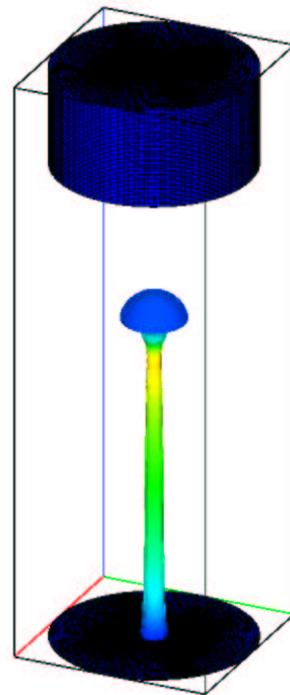
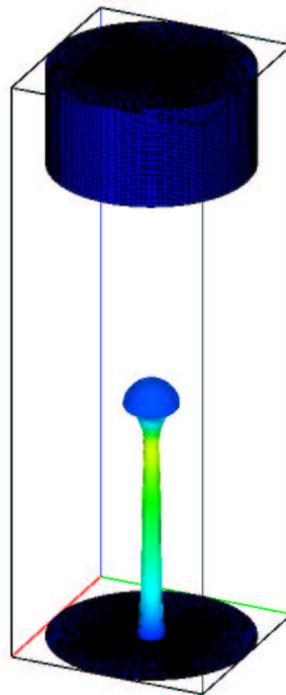
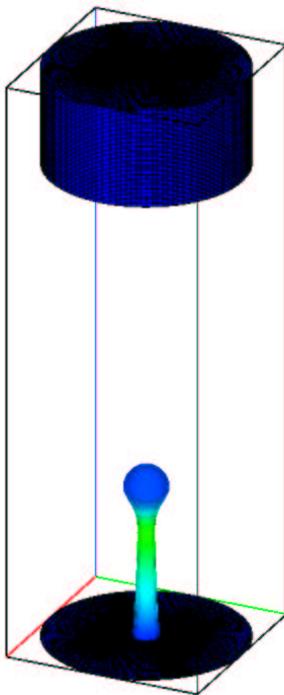
Local begaste Blasensäule



Verfeinerung



NLEV=4



Entwicklung der Gasgehaltsverteilung

Gleichmäßig begaste Blasensäule

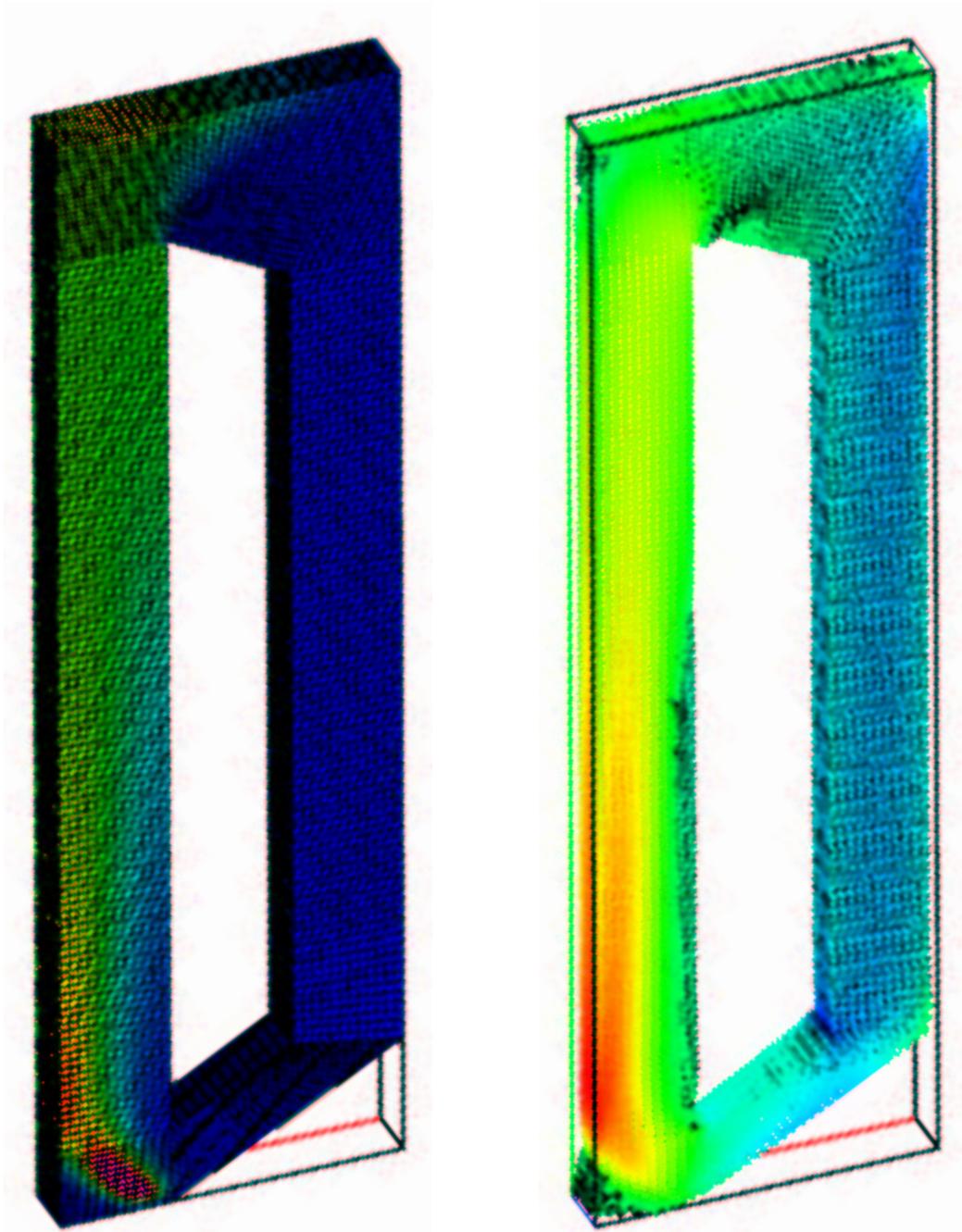


Gasgehalt



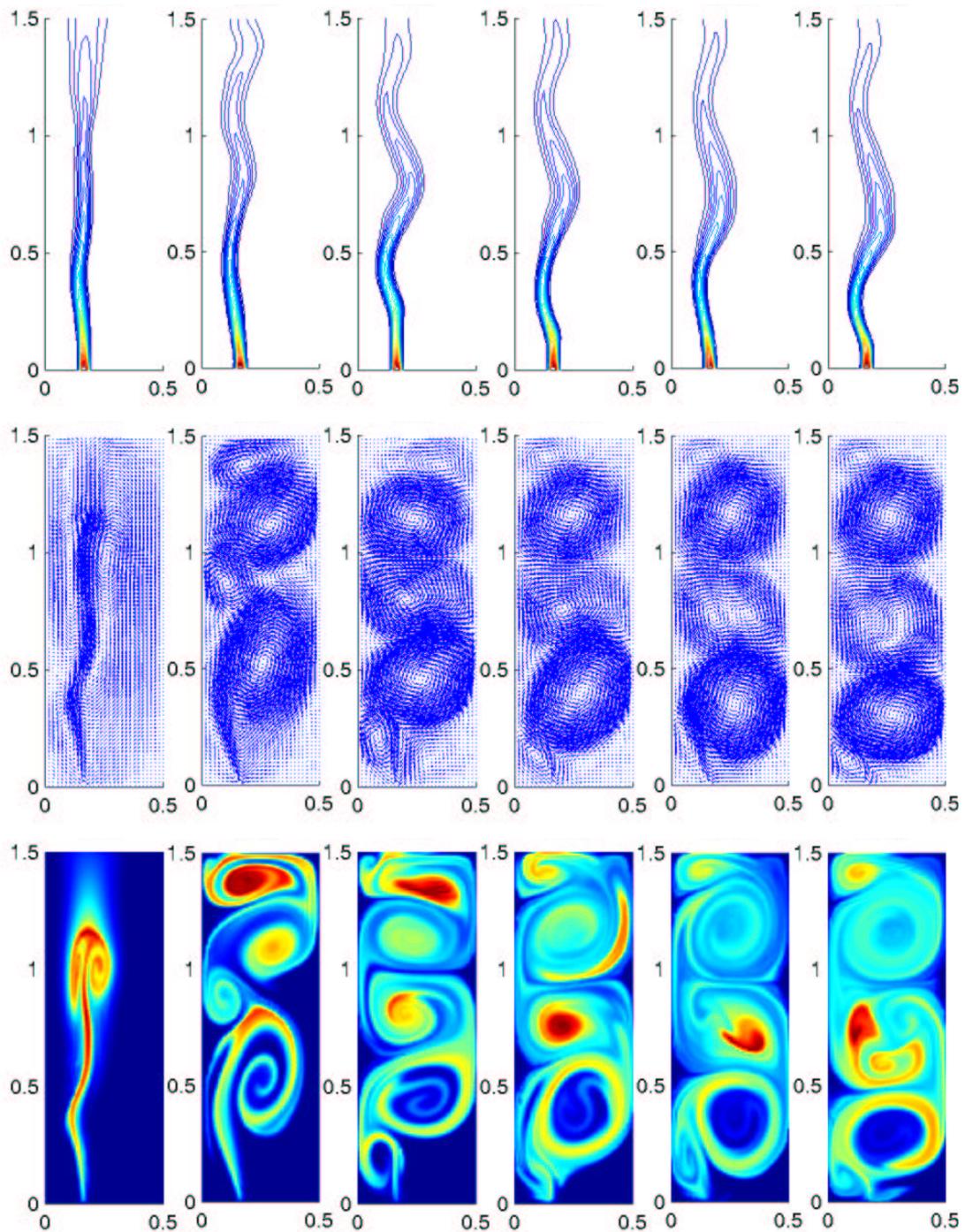
Geschwindigkeit

Airlift-Schlaufenreaktor



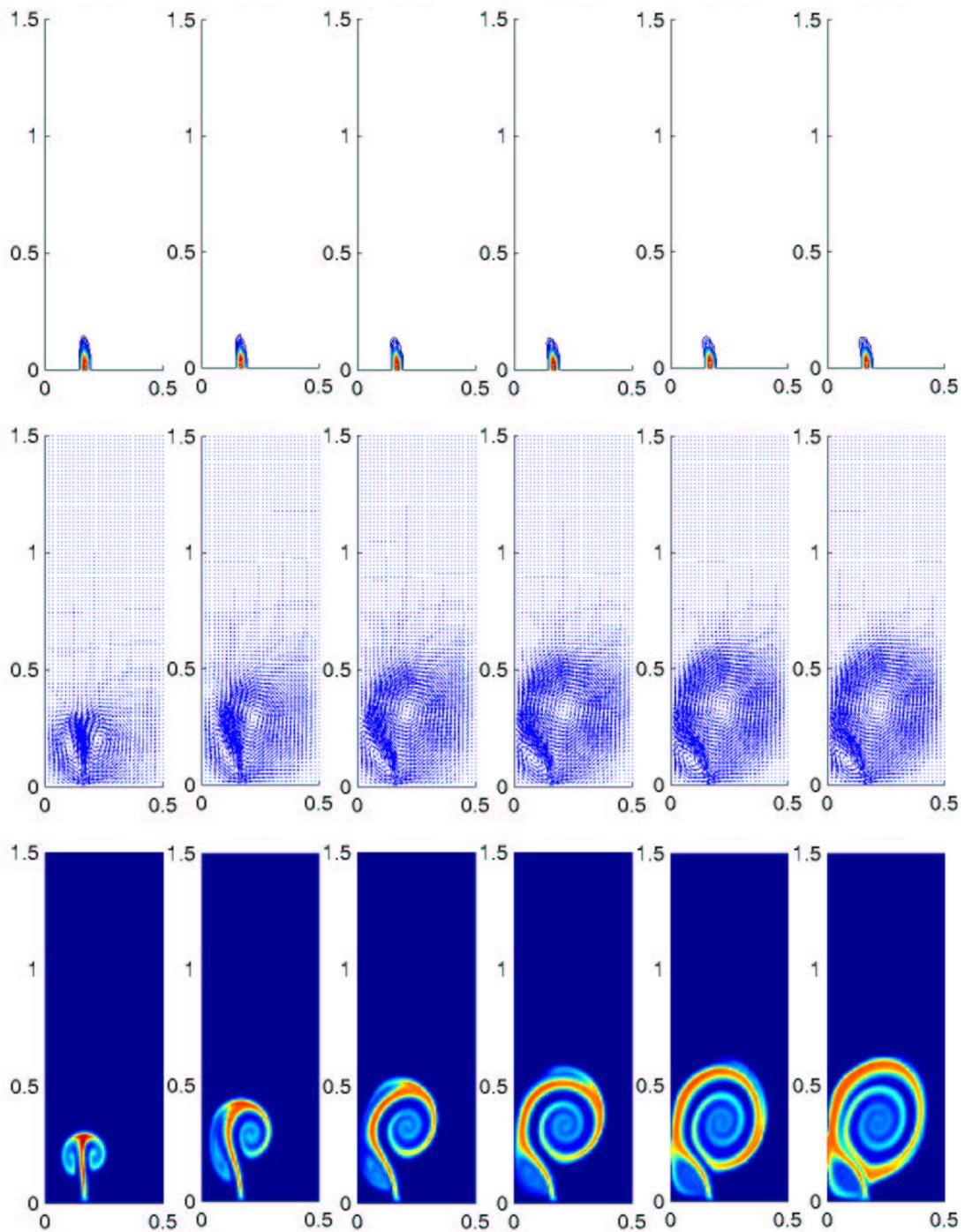
Stationäres Strömungsmuster

Lokal begaste flache Blasensäule



Physikalische Absorption von CO₂

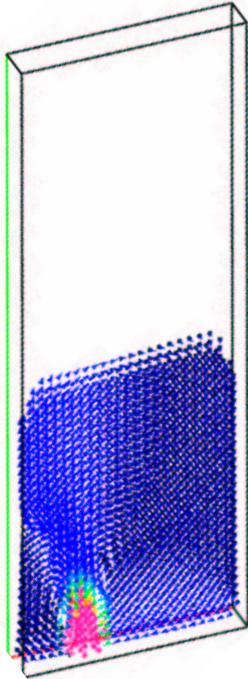
Lokal begaste flache Blasensäule



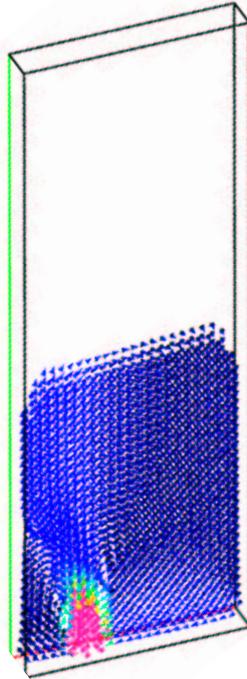
Schnelle Reaktion von CO_2 mit NaOH

Lokal begaste flache Blasensäule

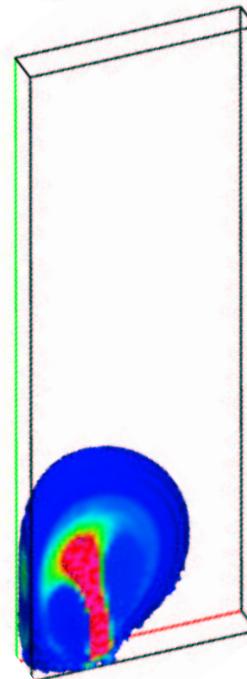
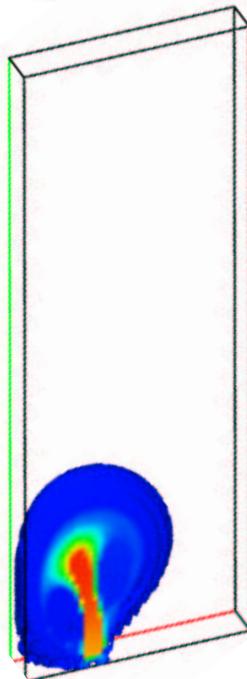
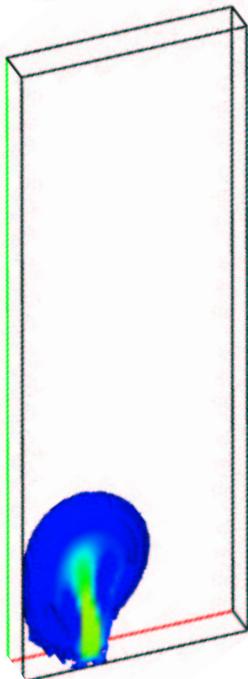
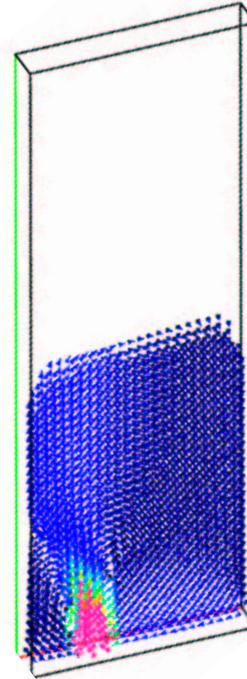
$t = 20$



$t = 40$



$t = 60$



Schnelle Reaktion von CO_2 mit NaOH

Zusammenfassung

- Gas-Flüssig-Reaktoren sind durch vielfältige Wechselwirkungen beider Phasen gekennzeichnet.
- CFD-Simulationen ergänzen Experimente und stellen ein wertvolles Werkzeug für die Auslegung und Scale-Up von industriellen Anlagen dar.
- Die Hydrodynamik von Blasenströmungen kann nach dem Drift-Flux-Konzept modelliert werden.
- Berücksichtigung der Zweiphasenturbulenz und der Blasenwechselwirkungen steht noch aus.
- Realistische 3D-Simulationen führen zu enormen Rechenzeiten. Daher kommt der Effizienz von CFD-Software eine entscheidende Rolle zu.
- Hochauflösende Diskretisierungsverfahren sowie schnelle Löser sind zum Teil schon vorhanden und in unserem Softwarepaket FEATURE realisiert.
- Hardware-spezifische Implementierung und Parallelisierung soll vorgenommen werden.

Ausblick

Schwierigkeiten für **industrielle** Anwendungen

- geometrische Komplexität der Apparatur
- komplexe physikalische und chemische Modelle
- Mehrskalproblem in Ort und Zeit

Voraussetzungen für **quantitative** Vorhersage

- 10 – 100 Millionen Gitterpunkte
- (L)GS mit bis zu 10^9 Unbekannten
- zu lösen über 10^3 – 10^6 Zeitschritte
- mehrfacher Aufwand bei Optimierung

Ausstattung des ‘**virtuellen Strömungslabors**’

- High-Performance-Computing Werkzeuge
- High-Performance-Computing Hardware
 - Parallelrechner mit 100 – 500 Prozessoren
 - Speicherbedarf 100 GByte - 1 TByte
 - Rechnerleistung im Bereich 1 TFLOP/s