

## **1. Allgemeine Angaben (Deckblatt)**

### 1.1 DFG-Geschäftszeichen

SO 204/28-1 und 2

### 1.2 Antragsteller

Prof. Dr.-Ing. M. Sommerfeld

### 1.3 Institut/Lehrstuhl

Professur für Mechanische Verfahrenstechnik, Zentrum für Ingenieurwissenschaften,  
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 06099 Halle (Saale)

### 1.4 Aus DFG-Mitteln bezahlte wissenschaftliche Mitarbeiter mit Angabe des Beschäftigungszeitraums

Thomas Reichardt(11/2004 – 06/2009)

### 1.5 Thema des Projekts

Entwicklung eines Euler/Lagrange-Verfahrens mit räumlich verteilter Kopplung

### 1.6 Berichtszeitraum, Förderungszeitraum insgesamt

11/2004 – 8/2010

### 1.7 Fachgebiet, Arbeitsrichtung

Verfahrenstechnik, Strömungsmechanik, Mehrphasenströmungen, numerische Strömungsberechnung

### 1.8 Verwertungsfelder

Verfahrenstechnik, chemische Industrie, Biotechnologie

### 1.9 Am Projekt beteiligte Kooperationspartner (Name, Ort)

Prof. G. Tryggvason in den USA am WPI in Worcester (Massachusetts)

## **2. Zusammenfassung**

Das klassische Euler/Lagrange-Verfahren zur Berechnung disperser Mehrphasenströmungen basiert auf der Annahme, dass die Partikel deutlich kleiner sind, als die für die Strömungsberechnung verwendeten Kontrollvolumina. Damit kann nur eine punktuelle Kopplung zwischen den Phasen realisiert werden (Punktpartikel-Approximation). Diese Voraussetzung kann aber nicht eingehalten werden, wenn große Partikel vorliegen und das numerische Gitter zur Auflösung der Strömung vergleichsweise fein aufgelöst werden muss. Die Partikelgröße kann dann durchaus in der Größenordnung der Gitterabmessung bzw. Kontrollvolumina liegen oder sogar größer sein. Technische Anwendung finden sich z.B. in Blasensäulenreaktoren bei denen sich Blasen mit Äquivalentdurchmessern von mehreren Zentimetern bilden können oder in feststoffbeladenen Strömungen in Rohren und Kanälen, wo das numerische Gitter vor allem in Wandnähe fein sein muss, um die Strömung und Turbulenz hinreichend aufzulösen.

Damit derartige mehrphasige Prozesse dennoch effizient berechnet werden können, wurde das Euler/Lagrange-Verfahren um einen innovativen Ansatz erweitert, damit die endlichen Abmessungen von großen Partikeln bei der Kopplung der Phasen näherungsweise berücksichtigt werden können. Die auf das Partikel wirkende Fluidgeschwindigkeit wird dabei nicht für die Schwerpunktslage berechnet, sondern aus den in Bewegungsrichtung liegenden Kontrollvolumina bestimmt. Die Rückwirkung der Partikel auf die Strömung wird durch räumlich verteilte Quellterme realisiert, mit denen eine räumlich verteilte Geschwindigkeitsstörung nachgebildet wird.

Zur Validierung und Verbesserung der Modellierung des Euler/Lagrange-Verfahrens sowie zur Erweiterung des phänomenologischen Wissens wurden Einzelblasenuntersuchungen in einer Gitterturbulenz und Experimente zur Untersuchung der Wechselwirkung von Blasen und Partikeln (dreiphasige Strömungen) durchgeführt. Die Auswertung der Experimente basierte auf den Methoden der Particle-Tracking und Particle-Image-Velocimetry (PTV und PIV).

Neben der experimentellen Arbeit wurden zur Validierung direkte numerische Simulationen (DNS) eingesetzt. In diesem Zusammenhang wurde das Lattice-Boltzmann-Verfahren zur Simulation des instationären Sedimentationsverhaltens von Einzelpartikeln verwendet. Des Weiteren konnten im Rahmen eines Kooperationsprojektes DNS von aufsteigenden Blasen in Turbulenz mit dem Front-Tracking-Verfahren genutzt werden, um zum einen die durchgeführten Experimente zu verifizieren und zum anderen konnten die Experimente zur Validierung der DNS dienen. Zur Absicherung der Ergebnisse konnte somit eine gegenseitige Validierung von Experiment und Simulation vorgenommen werden. Außerdem bildeten die DNS eine Grundlage für die weitere Verbesserung der Modellierung des Euler/Lagrange-Verfahrens im Hinblick auf die Berücksichtigung der Blasenform.

Eine Kombination von kleinen Partikeln und Blasen wurde ebenfalls mit dem Euler/Lagrange-Verfahren mit räumlich verteilter Kopplung berechnet. Dafür wurde ein deterministisches Kollisionsmodell entwickelt mit dem die Partikel-Interaktion beim Vorliegen verschiedener Phasen berücksichtigt werden kann. Zur Validierung dienten Experimente von aufsteigenden Einzelblasen in einem sedimentierenden Partikelfeld.

## **3. Arbeits- und Ergebnisbericht**

### **3.1. Ausgangslage**

Ziel dieses Forschungsprojektes war die Entwicklung eines innovativen Ansatzes, um beim Euler/Lagrange-Verfahren die endlichen Partikelgrößen näherungsweise zu berücksichtigen. Dabei sollte die auf die Partikel wirkende Strömungsgeschwindigkeit als auch deren Rückwirkung auf die kontinuierliche Phase berücksichtigt werden. Es sollen Mehrphasensysteme betrachtet werden, bei denen die Abmessungen der Partikel oder Blasen im Bereich der für die Strömungsberechnung verwendeten Gitterweiten liegen bzw. sogar größer sind. Da die Partikelumströmung nur näherungsweise aufgelöst wird, erfolgt die Berechnung der Partikelbewegung, wie üblich, durch die Lösung der Bewegungsgleichung

unter Berücksichtigung der relevanten Kräfte. Dafür muss die charakteristische Fluidgeschwindigkeit aus den umliegenden Kontrollvolumen in geeigneter Weise ermittelt werden. Die Impulsquellen sollen entsprechend den Partikelabmessungen auf die relevanten Kontrollvolumina räumlich verteilt werden. Dazu soll die Projektion der am Partikel wirkenden strömungsmechanischen Kräfte bzw. Partikelquellterme auf die vom Partikel überdeckten Kontrollvolumina entsprechend dem Volumenanteil oder durch vorgegebene Verteilungsfunktionen erfolgen.

Dadurch dass die endliche Partikelgröße durch die genannten Kopplungsmethoden näherungsweise aufgelöst wird, kann die sogenannte Nachlaufturbulenz automatisch erfasst werden. Es sind damit keine zusätzlichen Modelle zur Beschreibung der Nachlaufturbulenz erforderlich. Numerisch gesehen ist ein derartiges Verfahren effizienter im Hinblick auf Rechenzeit und Speicherbedarf als direkte numerische Simulationen unter exakter Auflösung der Phasengrenzfläche und ließe sich auf praktisch relevante Mehrphasenströmungen wie z.B. Blasenströmungen oder dreiphasige Strömungen anwenden.

Zur Unterstützung der Validierung der Modellansätze für die Bestimmung der auf die Partikel wirkenden Fluidströmung und der vorgeschlagenen Kopplungsmodelle sollten direkte numerische Simulationen durchgeführt werden. Für Simulationen von Feststoffpartikeln sollte das an der Professur entwickelte Programm basierend auf dem Lattice-Boltzmann-Verfahren Anwendung finden. Zur Validierung der Simulation von Blasen sollte das Front-Tracking-Verfahren eingesetzt werden.

Weiterhin sollten Literaturdaten und eigene experimentelle Untersuchungen zum Aufstieg von Blasen verschiedener Größe in ruhender Flüssigkeit der Validierung dienen.

In einem weiteren Projektteil sollte ein hybrides Modell entwickelt und validiert werden bei denen sowohl große als auch kleine Partikel vorliegen, wodurch ermöglicht wird Mehrphasenströmungen effizient zu berechnen. Dies sind z.B. heterogene Blasenströmungen oder dreiphasige Strömungen mit großen Blasen und kleinen Partikeln.

### **3.2. Beschreibung der durchgeführten Arbeiten**

Die vorgeschlagene Weiterentwicklung des Euler/Lagrange-Verfahrens erfolgte auf Basis vorhandener Berechnungsprogramme (FASTEST und LAG3D) welche in Kombination die Berechnung dreidimensionaler, zeitabhängiger Mehrphasenströmungen erlauben. Die für die Strömungsberechnung gewählte Maschenweite bestimmt dabei die räumliche Auflösung der Wirbelstrukturen und der gewählte Eulersche Zeitschritt deren zeitliche Auflösung. Die Bewegung von Partikeln oder Blasen wird durch die Lösung der Bewegungsgleichungen unter Berücksichtigung aller relevanten Kräfte berechnet. In diesem Zusammenhang soll betont werden, dass bei der vorgeschlagenen näherungsweisen Berücksichtigung der endlichen Partikelgröße eine Bestimmung der Partikelbewegung durch Integration des Druck- und Schubspannungsfeldes entlang der Phasengrenzfläche nicht möglich ist, da das Partikel aus Effizienzgründen nur grob aufgelöst wird. Die auf das Partikel wirkende Strömungsgeschwindigkeit kann bei dem neuen Ansatz nicht mehr aus der Lage des Partikelschwerpunktes und den direkten benachbarten Gitterpunkten bestimmt werden, so wie es bei der Betrachtung von Punktpartikeln der Fall ist, da diese Werte bereits durch die Präsenz des Partikels gestört sind. Daher wurde ein Modell entwickelt, bei dem die Strömungsgeschwindigkeit in Bewegungsrichtung vor bzw. seitlich vom Partikel bestimmt wird. Zur Ermittlung der charakteristischen Fluidrotation werden Kontrollvolumen berücksichtigt die nicht vom Partikel überdeckt werden und um das Partikel liegen.

Die Rückwirkung der Partikel auf die kontinuierliche Phase entsprechend der Partikelgröße wurde mittels einer Impulskopplung realisiert. Mit diesem Modellansatz werden die Randbedingungen an der Phasengrenzfläche nicht exakt erfüllt und die Partikelumströmung im Nahbereich wird nur näherungsweise beschrieben. Bei dieser Modellierungsstrategie ist auch der Bereich innerhalb des Partikels mit Fluid gefüllt. Die Impulsquellen basieren auf einer Änderung der Partikelgeschwindigkeit über ein bestimmtes Zeitintervall, womit durch Subtraktion der Feldkräfte automatisch alle strömungsmechanischen Kräfte berücksichtigt werden. Die räumliche Verteilung der Quellterme auf die vom Partikel überdeckten Kontrollvolumina wurde durch entsprechende Volumenanteile berechnet. Hierfür wurden

verschiedene Verteilungsfunktionen wie Gleichverteilung und Normalverteilung sowie eine Methode zur Berechnung des nahezu exakten Volumenanteils eines Partikels in einem Kontrollvolumen implementiert. Die letztere Methode basiert auf fünf Fallunterscheidungen ähnlich dem Volume of Fluid (VOF) Ansatz nach Young. Hierbei werden auf Grundlage geometrischer Betrachtungen Schnittpunkte der Partikelgeometrie mit den Kanten der Kontrollvolumen ermittelt, um dann das Volumen resultierender Pyramiden zu berechnen, mit denen der Volumenanteil des Partikels in dem betrachteten Kontrollvolumen ermittelt wird. Die Genauigkeit der Berechnung des Volumenanteils ist bei dieser Methode von der Partikelauflösung und dem Grad der Zerlegung von Teilpyramiden in dem Bereich der gekrümmten Partikelgeometrie abhängig. Die wesentlichen Vorteile dieser Methode gegenüber den Verteilungsfunktionen bestehen in der Berechnung des korrekten Volumenanteils sowie in der Flexibilität der berücksichtigten Partikelgeometrie (Abweichung von der Kugelform).

Die Rotation von Feststoffpartikeln wurde durch das vom Partikel zum Fluid übertragene Drehmoment bei der Bestimmung der Quellterme berücksichtigt. Zusätzlich war die Implementierung eines deterministischen Kollisionsmodells erforderlich, da zur Validierung nur kleine Rechengebiete mit geringen Massenströmen berechnet werden mussten und unter diesen Strömungsbedingungen der Einsatz des vorhandenen stochastischen Kollisionsmodells nicht sinnvoll war. Das implementierte Kollisionsmodell basiert auf einem sogenannten „Hard-Sphere“ Ansatz. Vorrangig beschränkten sich die simulierten Systeme auf große Partikel die durch das numerische Gitter hoch aufgelöst werden konnten. Dadurch war der Einsatz zusätzlicher Turbulenzmodellierungen nicht erforderlich.

Bei den durchgeführten zeitabhängigen Berechnungen war eine sequentielle Lösung des Eulerschen und des Lagrangeschen Programmteils notwendig. Die Steuerung der Kopplung erfolgte über Python-Scripte die für die instationären Berechnungen mit räumlich verteilter Kopplung angepasst werden mussten. Ein wesentliches Charakteristikum des Euler/Lagrange-Verfahrens besteht darin dass der gewählte Eulersche Zeitschritt ca. 1-2 Größenordnungen größer ist die für die Partikelbahnberechnung erforderlichen Zeitschritte. Diese Vorgehensweise resultiert in einer gewissenzeitlichen Mittelung der Partikelquellterme über eine bestimmte Anzahl von Lagrangeschen Zeitschritten. Damit ergibt sich eine erhebliche Einsparung von Rechenzeit gegenüber klassischer expliziter Verfahren, bei denen für Strömungs- und Partikelberechnung die gleichen Zeitschritte gewählt werden, welche durch die charakteristischen Zeitmaße der Partikelbewegung bestimmt werden und damit sehr klein sein können.

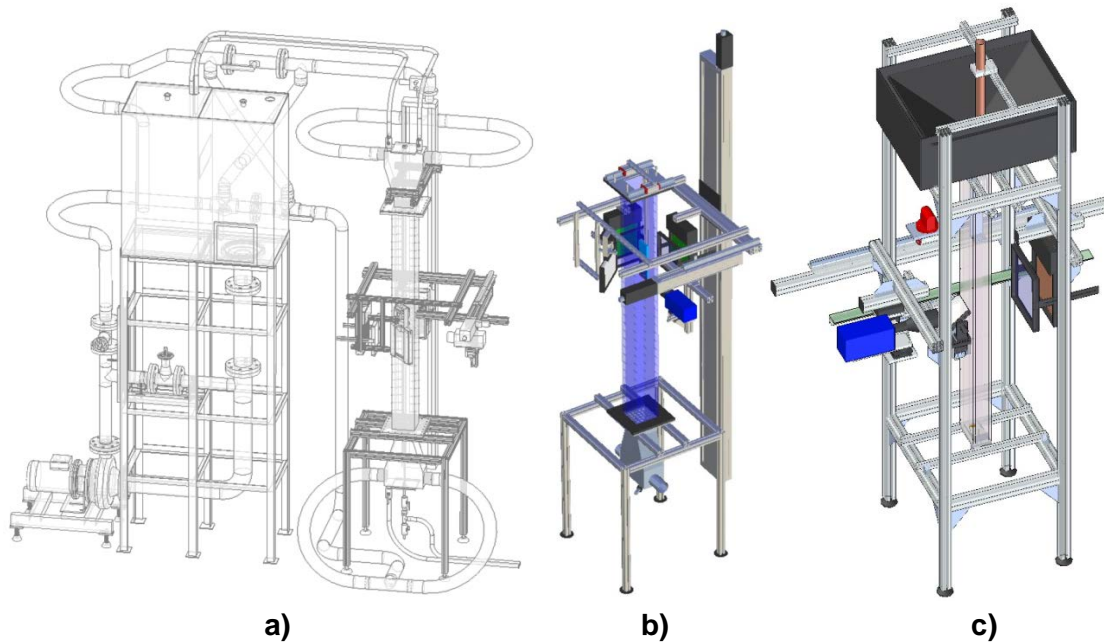
Die Validierung der Modellansätze für die räumlich verteilte Kopplung erfolgte anhand von theoretischen Lösungen für die Partikelsedimentation als auch eigenen direkten numerischen Simulation (DNS) und Experimenten. Die Simulationen von sedimentierenden Feststoffpartikeln wurden mit einem vorhanden Lattice-Boltzmann-Löser durchgeführt. Simulationen von Blasen konnten mit dem Front-Tracking-Verfahren, welches auf der expliziten Verfolgung der Phasengrenzfläche basiert, in einem separaten Kooperationsprojekt realisiert werden.

Zur weitergehenden Validierung wurden das Aufstiegsverhalten von Blasen und die Wechselwirkung von Blasen mit turbulenten Strukturen und mit partikelbeladenen Strömungen experimentell untersucht. Hierzu mussten zwei komplett neue Versuchsanlagen aufgebaut werden (siehe Abbildung 1).

Die Untersuchung der Blasenauftiegscharakteristik und Oszillation von Einzelblasen in ruhender Flüssigkeit und turbulenten Strömung in einem Plexiglaskanal wurde mit einem neu entwickelten Bildaufnahmesystem realisiert. Dazu wurden eine Hochgeschwindigkeitskamera, ein Spiegel zur Aufnahme einer 90°-Ansicht, zwei neuartig entwickelten Hochleistungs-LED-Arrays zur Hintergrundbeleuchtung und die entwickelte Bildauswertungssoftware eingesetzt (Reichardt & Sommerfeld 2008). Die Turbulenz wurde im Sinne einer homogen isotropen Strömung durch eine Pumpe und ein Turbulenzgitter generiert. Die Strömungsführung wurde so ausgelegt, dass mit einer nach oben gerichteten oder nach unten gerichteten Strömung gemessen werden konnte. Die Turbulenzparameter wurden mittels Laser-Doppler-Velocimetry bestimmt.

Eine zweite Versuchsanlage, die aus einem Schlaufenkanal besteht, diente der Untersuchung der Wechselwirkung von Partikeln und Blasen (dreiphasigen Strömungen) die auch als Grundlage zur Validierung von Simulationen mit dem Euler/Lagrange-Verfahrens

mit räumlich verteilter Kopplung genutzt werden konnten. Für die Objekterkennung wurde dazu eine vorhandene Software angepasst und unter anderem um eine neu entwickelte Methode der stationären Mittelung von Partikeleigenschaften erweitert, welche auf einem Particle-Tracking-Velocimetry Algorithmus basiert. Die zeitabhängige, durch die Blase induzierte Strömung konnte mittels Particle-Image-Velocimetry (PIV) ermittelt werden.



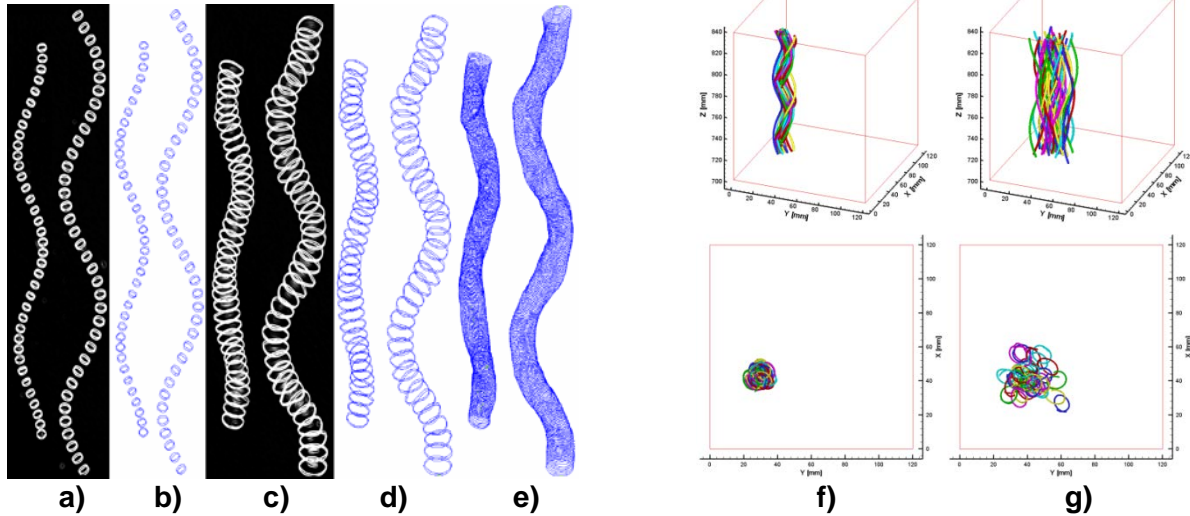
**Abbildung 1:** a) Versuchsanlage 1 zur Untersuchung des Aufstiegsverhaltens von Blasen in ruhender Strömung sowie in einer nach oben oder nach unten gerichteten turbulenten Strömung b) Versuchsanlage 1 mit Kalibriervorrichtung c) Versuchsanlage 2 zur Untersuchung der Wechselwirkung von Partikeln und Blasen.

### 3.3. Darstellung der erzielten Ergebnisse

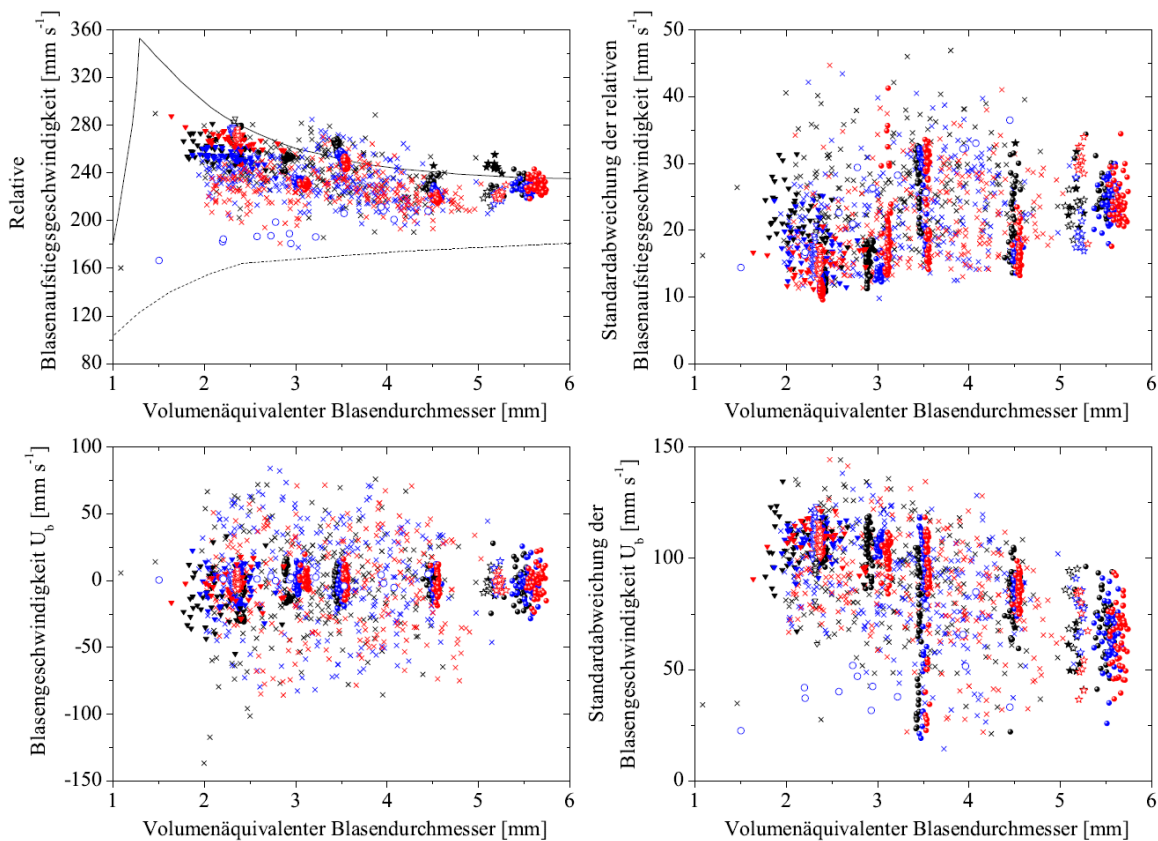
Mit Anwendung einer stereoskopischen Particle-Tracking-Velocimetry (PTV) konnten die Blasengeschwindigkeiten und Trajektorien rekonstruiert werden (siehe Abbildung 2). Besonders deutlich wird hier, dass die Blasen in einer turbulenten Grundströmung deutlich stärker dispergieren als in ruhendem Fluid. Allerdings ist die spiralförmige Bewegung in beiden Fällen nahezu identisch.

Es wurden mehr als 300.000 Bilder von über 1600 Blasen trajektorien für die Bestimmung der Blaseigenschaften in ruhender Flüssigkeit und in einer Gitterturbulenz mit der neu entwickelten Objekterkennungssoftware teilautomatisiert ausgewertet. Beispielhaft sind in Abbildung 3 Blasengeschwindigkeiten über dem Blasendurchmesser aufgeführt. Die vertikale Schlupfgeschwindigkeit liegt etwas unterhalb der Korrelation von Clift et al. (1978) für reines Wasser. Dies zeigt, dass der Reinheitsgrad des verwendeten de-ionisierten Wassers relativ hoch war. In der turbulenten Strömung ist die Schwankungsbewegung der Blasen, besonders in horizontale Richtung, deutlich ausgeprägter als in ruhendem Wasser. Für die Standardabweichung in horizontale Richtung zeigt sich zusätzlich eine starke Abnahme mit steigender Blasengröße für die turbulente Strömung aber auch für ruhendes Wasser.

Das Oszillationsverhalten und die Taumelbewegung der Blasen in ruhendem Fluid und in turbulenter Strömung wird noch weiter analysiert und ausgewertet um daraus Modelle abzuleiten, die es erlauben diese Effekte in Abhängigkeit der Blasengröße zu beschreiben. Die Ergebnisse sollen dann in eine Lagrangesche Modellierung einfließen.



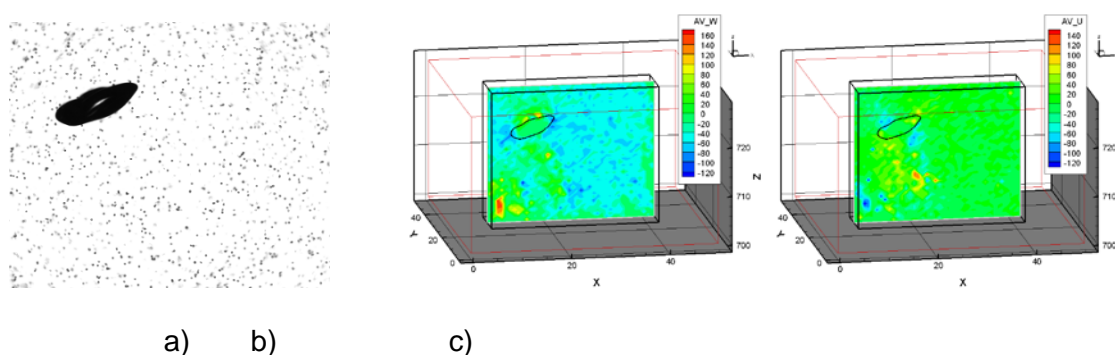
**Abbildung 2:** Trajektorien von Blasen mit einem Kugeläquivalentdurchmesser von a),b),f) und g) 2,3 mm sowie c),d) und e) 5,2 mm; a) – f) aufsteigend in ruhendem Wasser und g) in einer homogenen isotropen turbulenten Strömung; a) – e) Doppelbilder der detektierten Blasen in der Spiegelansicht (links) und direkten Ansicht (rechts) nach Anwendung des Sobelfilters a) und c) sowie rekonstruierte Blasenkonturen b),d) und e); Superposition von 40 Blasen trajektorien f) und g).



**Abbildung 3:** Vertikale Schlupf-Geschwindigkeit (oben) und eine horizontale Geschwindigkeitskomponente (unten); (—) Clift et al. 1978, reines Wasser; (-----) Clift et al. 1978, kontaminiertes Wasser; (×) Messreihe 4, Turbulenz, 300 mm; (×) Messreihe 4, Turbulenz, 700 mm; (×) Messreihe 4, Turbulenz, 1100 mm; (●) Messreihe 4, 300 mm; (●) Messreihe 4, 700 mm; (●) Messreihe 4, 1100 mm; (★) Messreihe 3, 300 mm; (☆) Messreihe 2, 300 mm; (☆) Messreihe 2, 700 mm; (☆) Messreihe 2, 1100 mm; (▼) Messreihe 1, Turbulenz, 300 mm; (▼) Messreihe 1, Turbulenz, 700 mm; (▼) Messreihe 1, Turbulenz, 1100 mm; (▽) Messreihe 1, 1100 mm; (▽) Messreihe 1, 1100 mm; (▽) Messreihe 1, 1100 mm; (○) Gegenstrom, 700 mm;

Eine zweite Versuchsanlage, die nach dem Prinzip eines Schlaufen- und Jet-Loop-Reaktors ausgelegt wurde, diente der Untersuchung des Einflusses von Partikeln auf die Blasenbewegung und des Einflusses der Blase auf die Partikelbewegung. Ergebnisse nach Anwendung der stationären Mittelung der Partikelgeschwindigkeiten mit der Blase als Koordinatenursprung sind in Abbildung 4 dargestellt. Diese Ergebnisse dienen der Visualisierung des Transports von Partikeln durch den Nachlauf von Blasen.

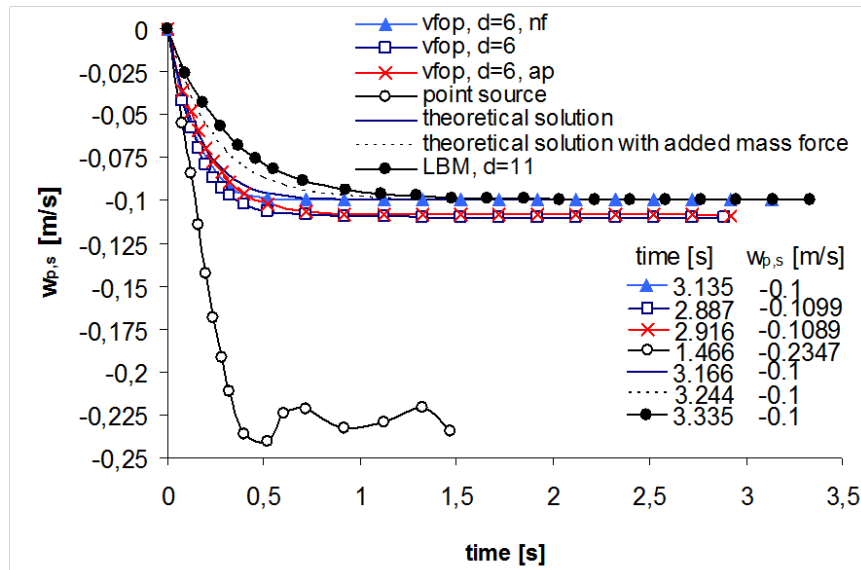
Durch den Einsatz von speziell entwickelten PTV-Algorithmen und die Anwendung der Partikel-Imaging-Velocimetry (PIV) konnten quantitativ und qualitativ wertvolle Daten erfasst werden. Zur Veranschaulichung sind in Abbildung 3 und 4 experimentelle Ergebnisse dargestellt. Die aufgebauten Versuchsanlagen liefern einen tieferen Einblick in lokale Effekte mehrphasiger Strömungen, bilden die Grundlage für die Entwicklung neuer Modelle und konnten für Validierungszwecke eingesetzt werden.



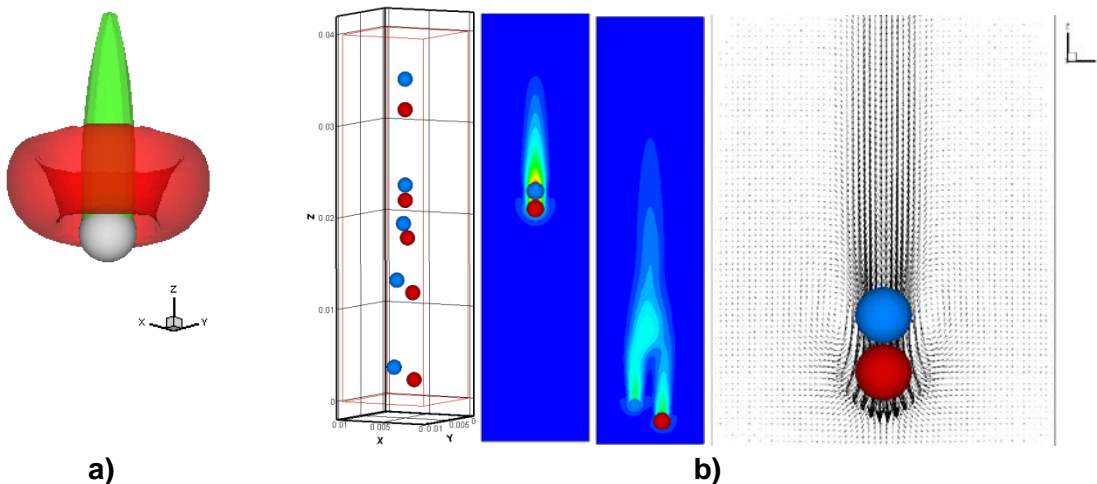
**Abbildung 4:** Beispiel zu dreiphasigen Strömungen. a) Originale Hochgeschwindigkeitsaufnahmen einer Blase mit einem Kugeläquivalentdurchmesser von ca. 5,2 mm aufsteigend in einer Suspension aus 200  $\mu\text{m}$  Glasperlen in Wasser, und dazugehörige rekonstruierte Informationen der betrachteten Messebene mit Kontur der Blase, erfasst durch eine Particle-Tracking-Velocimetry-Technik b) das Konturbild der stationär gemittelten vertikalen Partikelgeschwindigkeiten und c) horizontalen Partikelgeschwindigkeiten.

Durch die Validierung der mit der räumlich verteilten Kopplung simulierten Partikelsedimentation mittels direkten numerischen Simulationen über das Lattice-Boltzmann Verfahren konnte festgestellt werden, dass selbst bei verschiedenen hohen Partikelauflösungen die Partikelsinkgeschwindigkeiten in guter Übereinstimmung berechnet wurden, während die Punktpartikel-Approximation von großen Partikeln zu nicht physikalischen Ergebnissen führte (Reichardt & Sommerfeld 2007). Diese Tatsache ist in Abb. 5 veranschaulicht, wo der zeitliche Verlauf der Sinkgeschwindigkeit eines Partikels in einer Flüssigkeit dargestellt ist. Die Ergebnisse der LBM sollten die höchste Genauigkeit haben und liegen deswegen auch nahe der Theorie. Mit dem klassischen Lagrangeschen Punktpartikelansatz erhält man absolut falsche Ergebnisse und eine deutlich zu hohe stationäre Sinkgeschwindigkeit. Eine räumlich verteilte Kopplung in einem Lagrangeschen Ansatz kann dieses Problem relativ gut lösen. Das Partikel wird zwar noch etwas zu schnell beschleunigt und die erreichte Sinkgeschwindigkeit ist etwas zu hoch, aber die Ergebnisse liegen schon relativ nahe an der Theorie. Der Einfluss von virtueller Masse und Druckterm scheint allerdings bei diesen Rechnungen im Vergleich zur Theorie viel zu gering zu sein.

In Abbildung 6 ist beispielhaft die Sedimentation eines großen über sechs Fluidzellen aufgelösten Feststoffpartikels und die Kollision von zwei Partikeln visualisiert. Das bekannte Drafting-Kissing-Tumbling wird sehr gut durch den neuen Euler/Lagrange Ansatz mit verteilter Kopplung wiedergegeben.



**Abbildung 5:** Zeitabhängige Sinkgeschwindigkeit eines Partikels in ruhender Flüssigkeit, Vergleich von LBM Simulationen mit theoretischen Ergebnissen und Lagrangeschen Berechnungen mit Punktkopplung als auch mit räumlich verteilter Kopplung (vofp), wobei die Rechnung unter Berücksichtigung der virtuellen Masse und des Druckterms mit ap gekennzeichnet ist. Bei der räumlichen Kopplung wurde das Partikel von 6 Zellen überdeckt. Mit nf ist eine Rechnung ohne Beeinflussung des Fluid gekennzeichnet.

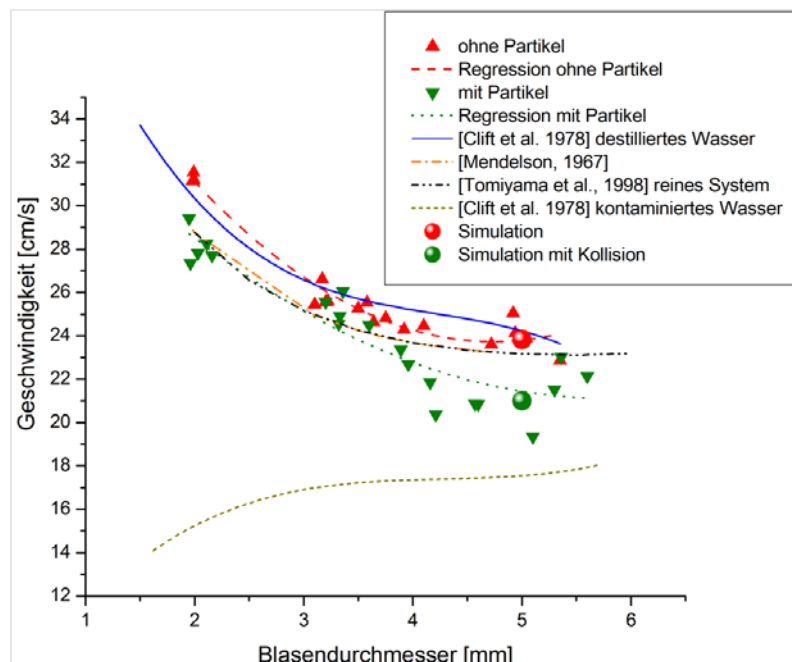
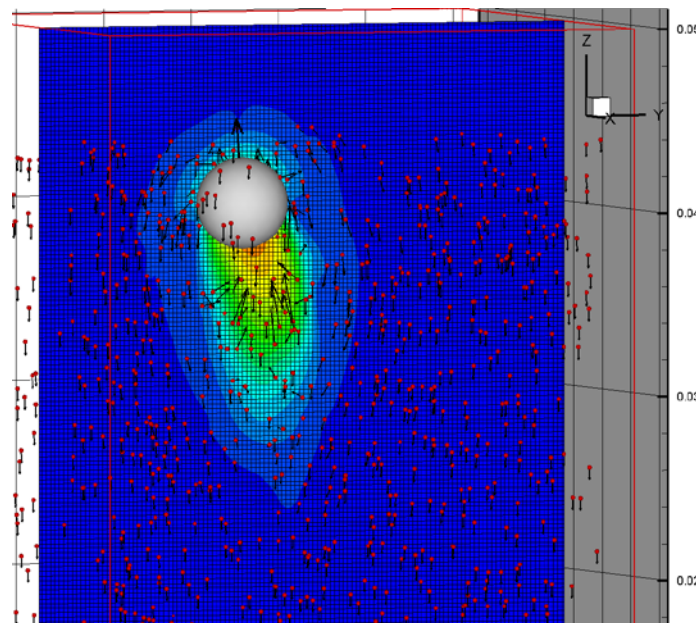


**Abbildung 6:** Berechnungen mit dem innovativem Euler/Lagrange-Ansatz zur Simulation großer Partikel; a) Sedimentation eines großen Feststoffpartikels ( $Re_p=50$ , Lage des Partikels  $z=120$  mm), Schnittbene durch die Partikelmitte mit Isoflächen der Fluidgeschwindigkeit in z-Richtung; b) Simulation der Kollision zweier Partikel (Drafting-Kissing-Tumbling). Dargestellt sind verschiedene momentane Partikelpositionen (links) und die Schnittbene durch die Partikelmitte mit der absoluten Fluidgeschwindigkeit zum Zeitpunkt der ersten Kollision (mittig) sowie das Geschwindigkeitsvektorfeld (rechts).

Schließlich wurden noch Berechnungen mit einem hybriden Ansatz für die untersuchte dreiphasige Strömung durchgeführt. Die einzelnen aufsteigenden Blasen wurden mit der räumlich verteilten Kopplung näherungsweise aufgelöst und die feinen Feststoffpartikel mit der klassischen Lagrangeschen Punktpartikel-Approximation behandelt (siehe Abb. 4). Ein typisches Ergebnis dieses hybriden Ansatzes ist für eine nahezu sphärische Blase in Abb. 7 a) dargestellt. Deutlich ist das durch die Blase induzierte Strömungsfeld erkennbar. Die Bewegung der Feststoffpartikel, welche durch die Blasenbewegung nach oben gezogen werden, ist anhand der roten Geschwindigkeitsvektoren visualisiert. Die gemessenen und gerechneten Blasenauftiegs-geschwindigkeiten im Vergleich zu einigen Korrelationen sind in



Abb. 7 b) gegenübergestellt. Aus den Messungen kann gefolgert werden, dass die Blasen in der Suspension deutlich langsamer aufsteigen als in reinem Wasser, was an der Behinderung des Blasenaufstiegs durch den Feststoff liegt. Warum Blasen mit einer Größe von ca. 3,2 mm kaum behindert werden ist noch zu klären, könnte aber an der Blasenoszillation liegen. Die hybriden Euler/Lagrange Berechnungen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messungen. Bei den untersuchten relativ geringen Feststoffkonzentrationen spielt die fluiddynamische Wechselwirkung zwischen Blasen und Feststoff kaum eine Rolle, so dass die berechnete Aufstiegs geschwindigkeit im Bereich der Ergebnisse für reine Flüssigkeiten liegt. Erst wenn in den Simulationen Kollisionen zwischen Blasen und Partikeln berücksichtigt werden, kann diese durch den Impulsaustausch nicht mehr so schnell aufsteigen und die berechnete Blasengeschwindigkeit deckt sich sehr gut mit den Messungen.



**Abbildung 7:** Blasen aufstieg in einer Suspension, a) Berechnungen mit dem hybriden Euler/Lagrange-Ansatz, b) Vergleich von gemessener und berechneter Blasen aufstiegs geschwindigkeit

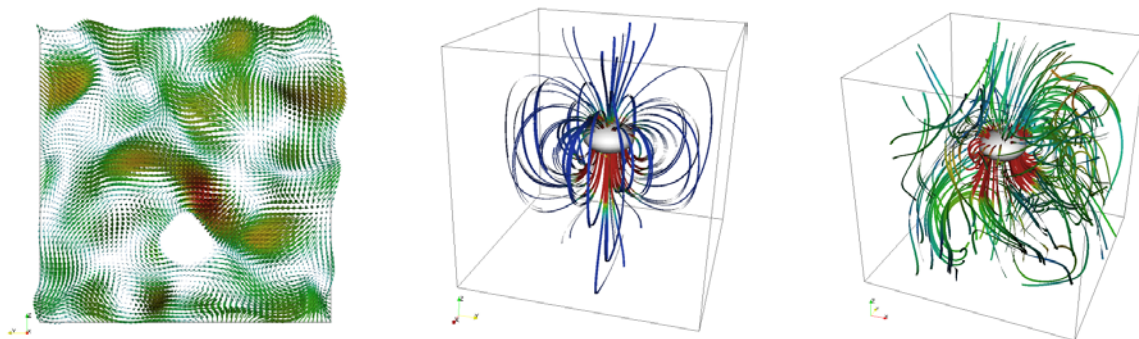
### 3.4. Ausblick auf zukünftige Arbeiten

Durch die Parallelisierung des Euler/Lagrange-Verfahrens mit räumlich verteilter Kopplung könnten auch Anwendungen auf größere Systeme erschlossen werden. Anwendung auf Fragestellungen im Labor- bzw. Industriemaßstab mit Berücksichtigung der Partikelgeometrie und Form- sowie Bahn-Oszillation bei Blasen sind somit möglich. Im Zusammenhang mit der Berücksichtigung der Bahn-Oszillation ist auch eine Transformation der Lage des Partikels nötig um z.B. bei Blasen die Änderung des Lagewinkels abbilden zu können. Dadurch könnte erstmals mit einem Lagrangesches Verfahren auch der Einfluss der Blasenoszillation und Taumelbewegung auf Strömungen in Blasenreaktoren realistisch wiedergegeben werden. Hierfür sind allerdings entsprechende experimentelle Informationen über Verteilungen der Blasenorientierung und deren Oszillationsfrequenzen erforderlich.

Durch die im Rahmen des Forschungsprojektes durchgeführten Experimente zum Blasenauftstieg in einer Gitterturbulenz konnte ein Kooperationsprojekt mit Prof. Tryggvason in den USA am WPI in Worcester (Massachusetts) etabliert werden. Bei der durchgeführten Arbeit wurde zum ersten Mal das Aufstiegsverhalten von Blasen in turbulenten Strukturen numerisch simuliert bei denen die Turbulenz durch ein Pseudo-Spektralverfahren erzeugt wurde. Während des Auslandsaufenthaltes von Herrn Thomas Reichardt in der Zeit vom 15.10.2009 bis 15.04.2010 konnten die folgenden Arbeiten durchgeführt werden.

Begonnen wurde zunächst mit der Arbeit an einem 2D-Front-Tracking-Code, da dieser wesentlich einfacher zu bedienen ist als der 3D-Code. Die Lösung der Navier-Stokes Gleichungen erfolgte mittels einer gut validierten Finite-Differenzen/Front-Tracking Methode, wobei die Blasenoberfläche durch Markierungspunkte repräsentiert wird, die ein unstrukturiertes Gitter bilden. Die Entwicklung sowie Implementierung neuer Modelle durch die Reduzierung auf zweidimensionale Probleme lassen sich schneller realisieren. Hierbei ist zum einen der Umfang des zu überblickenden Programmcodes geringer und zum anderen sind die erforderliche Rechenleistung und der Speicherbedarf moderat. Die implementierte Turbulenzanfachung basiert auf einem Pseudo-Spektralverfahren bei dem eine Kraft im Fourier-Raum bei kleinen Wellenzahlen über das Rechengebiet verteilt (nicht innerhalb der Blase) und damit eine Geschwindigkeitsänderung in die Strömung eingebracht wird. Die Steuerung der Kraftverteilung erfolgt durch normalverteilte Zufallszahlen mit dem Mittelwert Null.

Nach erfolgreicher Testphase mit dem 2D-Code und Einarbeitungszeit in die 3D-Version konnte das neue Modell in einen 3D-Code implementiert werden. Es wurden Simulationen von leicht deformierbaren Einzelblasen (Eötvös-Zahl 4) und weniger deformierten Blasen (Eötvös-Zahl 1) in einer periodischen Box durchgeführt. Neben der Simulation der Blasen ohne Turbulenzanregung konnten Systeme mit verschiedenem Turbulenzlevel und –struktur simuliert werden. In Abbildung 8 sind beispielhaft ein Vektorfeld der räumlich verteilten Kraft und der Vergleich aufsteigender Blasen ohne und mit Turbulenzanregung dargestellt.



**Abbildung 8:** Vektorfeld der Kraft zur Generierung der Turbulenz (links), aufsteigende Blase mit Eötvös-Zahl 4 ohne Turbulenzanregung (mitte) und mit Turbulenzanregung (rechts), wobei die Turbulenzstruktur durch Bänder visualisiert ist, die durch Stromlinien im Wirbelfeld erzeugt wurden.

Die Rechenzeit für die Simulationen ohne Turbulenz, unter Verwendung von jeweils einem Prozessor, betrug ca. 3 Wochen für 20 s Simulationszeit, während die Rechenzeit mit

Turbulenz mehrere Monate betragen kann. Erste qualitative und quantitative Ergebnisse sind in einem Poster zusammengefasst. Eine umfassende Analyse der gewonnenen Daten werden in der Dissertation von Herrn Thomas Reichardt vorgestellt.

Die gewonnenen Daten können sehr gut zur Analyse des Verhaltens von Blasen in Turbulenz beitragen und können z.B. sehr gut für den Vergleich der von den Antragstellern durchgeführten Experimente genutzt werden. Somit bietet sich nun die Möglichkeit das Blasenauftiegsverhalten in turbulenten Strömungen besser zu verstehen, da wesentlich mehr Informationen zur Verfügung stehen, als durch bereits durchgeführte Experiment erhalten werden können. Dies wird zur Entwicklung einfacher physikalischer Modelle für die Simulation mit dem Euler-Lagrange-Verfahren beitragen.

Aufgrund der sehr hohen Anforderungen an die Rechenleistung ist die Simulation von Blasenschwärmen nur mit Hilfe des massiven Einsatzes einer parallelen Version des Front-Tracking-Programms möglich. Daher besteht der Bedarf der Entwicklung eines für paralleles Rechnen geeigneten Codes zur Simulation von Blasenschwärmen in turbulenten Strömungen.

Ein wichtiger Aspekt neben der Bestimmung der Hydrodynamik und der Blasenoszillation ist die Berücksichtigung des Stoffaustausches zwischen Blasen und der umgebenden Flüssigkeit. So wäre es z.B. interessant zu untersuchen, wie sich der Stoffaustausch in einem turbulenten System verhält. Die Modellierung des Stoffaustausches in ruhender Flüssigkeit ist bereits seit einigen Jahren Forschungsgegenstand von Prof. Tryggvason, so dass sich mit dem neu implementierten Modul der Turbulenzanregung ein weiteres Arbeitsfeld ergeben könnte.

Des Weiteren bietet sich eine Kooperation zur Simulation dreiphasiger Strömungen an, bei dem das Front-Tracking-Verfahren um die Möglichkeit des Lagrange'schen Punktpartikel-Trackings und mit der entwickelten Methode mit räumlich verteilter Kopplung erweitert wird. Dafür könnten die bereits vorhandenen Programmroutinen zur Partikelsimulation, die an der Professur des Antragstellers entwickelt wurden, genutzt werden.

### **3.5. Interdisziplinäre Weiterentwicklung**

Im Bereich des Chemieingenieurwesens und der Biotechnologie besteht Anwendungsbedarf für die entwickelte neue Methode der Phasenkopplung, wenn neben der Beschreibung der Blasen/Partikel-Bewegung und Hydrodynamik auch der Stofftransport und chemische Reaktionen von Bedeutung sind. Hierfür bildet die entwickelte räumlich verteilte Kopplung eine Grundlage zur verbesserten Beschreibung der Wechselwirkung der kontinuierlichen und dispersen Phase, besonders wenn Blasenoszillation und Taumelbewegung von Bedeutung sind.

Weiterhin spielen Blasenströmungen eine Rolle in vielen anderen industriellen Prozessen und technischen Bereichen unter anderem bei der Produktion von Biogas, bei der Abwasserreinigung oder bei der Bestimmung des Stoffaustausches von Gasen zwischen der Atmosphäre und den Ozeanen. Häufig sind diese Strömungsvorgänge turbulent. Blasenströmungen bzw. Mehrphasenströmungen für sich genommen gelten schon als sehr komplex. Der Komplexitätsgrad steigt dann noch wenn auch Turbulenz eine Rolle spielt. Das entwickelte Verfahren zur vereinfachten räumlichen Auflösung der Partikel könnte für die Vorhersage all dieser Prozesse effizient eingesetzt werden, eventuell mit entsprechenden Erweiterungen für Stoffaustausch.

### **3.6. Verwertungspotenzial**

Das entwickelte Euler/Lagrange Verfahren mit räumlich verteilter Kopplung könnte natürlich zunächst für weitere Projekte und Industriekooperationen im Bereich Verfahrenstechnik, chemische Technologie und Biotechnologie eingesetzt werden, z. B. „Campus Blasensäule“. Durch diesen Ansatz ließen sich Blasenströmungen (beim Vorliegen größerer Blasen) wesentlich exakter beschreiben und numerisch berechnen.

Ein weiteres mögliches Anwendungsgebiet wäre der Bereich von Gas-Feststoff-Strömungen, besonders wenn größere nicht-sphärische Partikel vorliegen. Hierbei könnte dann neben der

Form auch die Partikelrotation aufgelöst werden. Voraussetzung ist natürlich, dass die relevanten Strömungskräfte in Abhängigkeit der Partikelorientierung vorliegen.

Die entwickelte Beleuchtungstechnik (LED-Arrays) trug im Wesentlichen auch zum Erfolg weiterer Forschungsprojekte bei, die vom Antragsteller betreut werden. Sie werden bei Projekten eingesetzt wo Partikelbewegungen mit Hilfe einer Hintergrundbeleuchtung (Schattenaufnahmen) visualisiert werden, z. B. Tropfenkollisionen oder Wandkollisionen von nicht-sphärischen Partikeln. In Verbindung mit einer Objekterkennung kann die Partikelform und Größe bestimmt werden. Durch ein PTV-Verfahren wird die Geschwindigkeit der Partikel ermittelt.

Durch die Entwicklungen im Bereich der Beleuchtungstechnik bei Hochgeschwindigkeitsaufnahmen und Entwicklungen im Bereich der Objekterkennung die im Rahmen des experimentellen Teils dieses Forschungsprojekts entstanden sind, konnte eine Industriekooperation mit der HKS-Prozesstechnik GmbH etabliert werden. Der Schwerpunkt des Forschungsvorhabens lag in der Entwicklung einer geeigneten Messtechnik zur Bestimmung der Schweißdraht- sowie Tropfengeschwindigkeit bei Schweißprozessen. Die Objekterkennung basiert auf Fehlstellen am Schweißdraht, die Reflektionen verursachen. Zur Bestimmung des optimalen Bildfilters bzw. Filterkombinationen wurde zunächst die an der Professur für Mechanische Verfahrenstechnik entwickelte Objekterkennungssoftware eingesetzt. Die Berechnung der Geschwindigkeiten der erkannten Objekte erfolgte mittels Particle-Tracking-Velocimetry, wobei die Zuordnung nach dem Prinzip „Nearest-Neighbour“ erfolgt. Durch die Mittelung der Geschwindigkeiten der erkannten Objekte kann die Schweißdrahtgeschwindigkeit angegeben werden.

Auf Grundlage der Voruntersuchungen zur Objekterkennung mit der vorhandenen Software wurde eine speziell für die Aufgabenstellung angepassten Software entwickelt, bei der sowohl die Draht als auch Tropfengeschwindigkeit bestimmt werden kann. Die Diskriminierung der erkannten Objekte zur korrekten Gruppierung der Tropfen und der Objekte die auf dem Draht erkannt werden, erfolgt anhand der Objektgröße oder durch Festlegung eines geeigneten Suchbereichs. Neben der Anwendung der Particle-Tracking-Velocimetry wurde auch die Particle-Image-Velocimetry eingesetzt um die Schweißdrahtgeschwindigkeit zu bestimmen. Dieses Projekt wurde ebenfalls von Herrn Thomas Reichardt bearbeitet (10/2009 – 04/2010).

### **3.7. Beteiligte Wissenschaftler**

Prof. Dr.-Ing. Martin Sommerfeld: Antragsteller und Projektleiter

Dipl. Wirt. Ing. Thomas Reichardt: Projektbearbeiter

- 1) Entwicklung der räumlich verteilten Kopplung; Entwicklung eines deterministischen Kollisionsmodells; Durchführung von Simulationen zur Validierung
- 2) Aufbau einer Versuchsanlage sowie Durchführung von Experimenten zur Untersuchung des Aufstiegsverhaltens von Blasen in Turbulenz; Entwicklung eines stereoskopischen Bildsystems; Entwicklung von zwei Hochleistungs-LED-Arrays. Entwicklung einer Software zur Auswertung und dreidimensionalen Rekonstruktion der Blasenbewegung
- 3) Aufbau einer Versuchsanlage zur experimentellen Untersuchung der Wechselwirkung von Blasen und Partikel; Durchführung der Experimente mittels PTV und PIV; Entwicklung einer Software zur Auswertung der Hochgeschwindigkeitsaufnahmen von dreiphasigen Strömungen; Entwicklung einer Technik zur stationären Mittelung der Partikelgeschwindigkeiten

### 3.8. Weiterqualifikationen

Reichardt, Th.

Numerische und experimentelle Untersuchungen zur Entwicklung eines Euler/Lagrange-Verfahrens mit räumlich verteilter Kopplung. Dissertation, Zentrum für Ingenieurwissenschaften, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale), voraussichtlich 2012

Pogoda, Ch.

Wechselwirkung von Blasen und Partikeln in dreiphasigen Strömungen. Studienarbeit, Zentrum für Ingenieurwissenschaften, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale), 2010

Heppner, R.

Experimentelle Untersuchungen der Strömungscharakteristika in einer Blasensäule mit Gitterturbulenz. Studienarbeit, Zentrum für Ingenieurwissenschaften, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale), 2009

### 4. Publikationen

*a) Arbeiten, die in Publikationsorganen mit einer wissenschaftlichen Qualitätssicherung*

*2 – 3 Publikationen sind nach der Fertigstellung der Dissertation von Herrn Reichardt vorgesehen und werden dann nachgereicht.*

*b) Andere Veröffentlichungen.*

Reichardt, Th. and Sommerfeld, M.

Experimental study of bubble oscillation and motion in turbulence. 7<sup>th</sup> International Conference on Multiphase Flow, ICMF 2010, Tampa, FL, USA, May 2010

Reichardt, Th. and Sommerfeld, M.

Experimental studies on bubble oscillation in turbulent flow. CD-Rom Proceedings 12<sup>th</sup> Workshop on Two-Phase Flow Predictions, Halle (Saale), Germany, March 2010

Sommerfeld, M. and Reichardt, Th. (Keynote Lecture)

Shadow imaging of bubble motion and oscillation. 5<sup>th</sup> International Berlin Workshop on Transport Phenomena with Moving Boundaries, Berlin, Germany, October 2009

Reichardt, Th. and Sommerfeld, M.

Experimental studies on bubble oscillation in turbulent flows. 5<sup>th</sup> European-Japanese Two-Phase Flow Group Meeting, Spoleto, Italy, September 2009

Reichardt, Th. and Sommerfeld, M.

Experimental study on bubble rise in a dilute suspension. ETPFGM 09 & EFCE Multi-Phase, Bled, Slovenia, June 2009

Reichardt, Th. und Sommerfeld, M.

Stereoskopische Aufnahmen zur Analyse der Blasenoszillation. ProcessNet Jahrestagung, Karlsruhe, Oktober 2008, Chemie Ingenieur Technik, Jahrg. 80, 1327-1328 (2008)

Reichardt, Th. and Sommerfeld, M.

Stereoscopic imaging for analysing bubble oscillation in turbulence. 14<sup>th</sup> International Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics, Lisbon, Portugal, July 2008

Reichardt, Th. und Sommerfeld, M.  
Euler/Lagrange-Verfahren mit räumlich verteilter Kopplung. ProcessNet Fachausschuss  
Computational Fluid Dynamics, Würzburg, Februar 2008

Reichardt, Th. and Sommerfeld, M.  
Euler-Lagrange approach with spatially distributed coupling. Proceedings of the 6<sup>th</sup>  
international conference on multiphase flow, ICMF2007, Leipzig, Germany, Paper  
No.S3\_Mon\_C\_7, July 2007

Reichardt, Th. und Sommerfeld, M.  
Euler/Lagrange-Verfahren mit räumlich verteilter Kopplung. GVC-Fachausschuss  
Computational Fluid Dynamics, Überlingen, Kurzfassung Nr. CFD-13, März 2006

*c) Patente, gegliedert in angemeldete und erteilte.*

- keine -