



OTTO-VON-GUERICKE-UNIVERSITÄT MAGDEBURG

FAKULTÄT FÜR MATHEMATIK

INSTITUT FÜR ANALYSIS UND NUMERIK

Studienarbeit

**Numerische Simulation
flüssigkeitsbedüster Gas-Feststoff-Wirbelschichten**

eingereicht im: Mai 2000

von: Jan Blumschein

geboren am 1. Oktober 1970

in Magdeburg

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	4
1.1	Hintergrund	4
1.2	Bestandsaufnahme	4
1.3	Überblick	5
2	Physikalische Beschreibung der flüssigkeitsbedünten Wirbelschicht	6
2.1	Zugrundeliegende ingenieurphysikalische Zusammenhänge	6
2.1.1	Phasengemisch	6
2.1.2	Thermodynamik	7
2.1.3	Strömungsmechanik	10
2.1.4	Flüssigkeitseintrag	12
2.2	Modellannahmen; Getroffene Vereinfachungen	13
2.2.1	Geometrie	13
2.2.2	Phasengemisch	13
2.2.3	Strömungsmechanik der Wirbelschicht	13
2.2.4	Düsenstrahl	14
3	Modellgleichungen	15
3.1	Ableitung der Modellgleichungen aus Bilanzen	15
3.1.1	Bilanzierung im Inneren des Gebietes	15
3.1.2	Bilanzierung am Rand	15
3.2	Modellierung des Trocknungsvorganges	16
3.2.1	Bilanzgrößen	16
3.2.2	Bilanzen im Innern der Wirbelschicht	16
3.2.3	Bilanzen am Rand	17
3.2.4	Zustandsgleichungen	19
3.2.5	Reaktionsterme	20
3.2.6	Koeffizienten	21
3.2.7	Arbeitsbereich des Systems	21
3.3	Modellierung des Flüssigkeitseintrags	21
3.3.1	Modellannahmen	22
3.3.2	Tropfenbilanz	23
3.4	Mathematische Diskussion der Modellgleichungen	24
3.4.1	Modellannahmen	24
3.4.2	Modellgleichungen	24
3.4.3	Diskussion	26
4	Numerische Lösung	27
4.1	Diskretisierung	27
4.1.1	Möglichkeiten der Diskretisierung	27
4.1.2	Räumliche Diskretisierung: Differenzenverfahren	28
4.1.3	Zeitliche Diskretisierung: Euler-Vorwärts-Verfahren	31
4.2	Beispielrechnung	31
4.2.1	Verwendete Diskretisierung	31
4.2.2	Parameter	33

Literatur	34
A Nomenklatur	35
A.1 Koordinaten	35
A.2 Differentialoperatoren	35
A.3 Indizes	35
A.4 Flächen- und Volumenbezug	35
A.5 Größen und Einheiten	36
A.6 Dimensionslose Kennzahlen	37
B Anhang zur Physik	38
B.1 Stoffwerte	38
B.1.1 Eigenschaften der Gase	38
B.1.2 Sättigungsdampfdruck des Wassers	39
B.1.3 Bettmaterial	40
B.2 Empirische Formeln	40
B.2.1 Strömungsmechanik	40
B.3 Berechnung der thermodynamischen Koeffizienten	40
B.3.1 Stoffübergangszahl	40
B.3.2 Wärmeübergangskoeffizienten	41
B.3.3 Dispersion	44
C Simulationsergebnisse	45
C.1 Quellstrom	45
C.2 Koeffizienten	46
C.3 Übersichtsdarstellung	46
C.4 Ausgewählte Verläufe	50

1 Einführung

1.1 Hintergrund

Wirbelschichtreaktor Der *Wirbelschichtreaktor* ist ein Behälter, in dem sich als *Bettmaterial* Feststoffpartikel einer geeigneten Körnung befinden. Über einen *Anströmboden* wird von unten Luft zugeführt.

Wird eine für das Bettmaterial charakteristische Strömungsgeschwindigkeit eingestellt, so bildet sich im Reaktor eine *Wirbelschicht* aus: das Bettmaterial verhält sich wie ein Fluid.

Wirbelschichtverfahren In den letzten Jahrzehnten haben Wirbelschichten Einzug in viele Anwendungsgebiete der Verfahrenstechnik gehalten. Wirbelschichtverfahren werden heute unter anderem angewendet für

- Verbrennung
- Trocknung und Granulation
- Rösten von Kaffee
- Fermentation

Anwendung zur Agglomeration/Granulation/Trocknung Mittels einer *Düse* wird eine *Suspension* in die Wirbelschicht eingebracht. Die Tropfen haften zunächst auf den Feststoffpartikeln; der Wasseranteil verdunstet, während der Feststoffanteil zur Vergrößerung der Partikel beiträgt.

Versuchsanlage DN 400 Am Institut für Apparate- und Umwelttechnik der Universität „Otto von Guericke“ Magdeburg steht eine Wirbelschichtanlage vom Nenndurchmesser 400 mm zur Verfügung.

In dieser Anlage wurden und werden Laborversuche zur Wirbelschichttrocknung und -granulation unter Verwendung verschiedener Bettmaterialien (Glaskugeln, Senfkörner, . . .) durchgeführt, bei denen unter anderem die dreidimensionale Temperaturverteilung im Reaktor meßtechnisch aufgezeichnet wurde.

Damit ist die Möglichkeit gegeben, die Ergebnisse der numerischen Simulation mit Meßwerten zu vergleichen.

1.2 Bestandsaufnahme

Verschiedene Modellrechnungen zur Trocknung in der Wirbelschichtanlage DN 400 wurden von Sascha Thomas [15] vorgenommen.

Instationäre Rechnung Für die instationäre Simulation (Lösung eines Anfangs-Randwertproblems) wurde eine *unendlich* große Dispersion des Feststoffes angenommen, Dampf-Diffusion und Wärmeleitung der Luft wurden vernachlässigt (die Luft wird als *Pfropfenströmung* modelliert). Damit reduziert sich das Problem auf eine Raumdimension.

Das diskretisierte Problem wurde mittels eines semiimpliziten Runge-Kutta-Verfahrens 3. Ordnung gelöst.

Stationäre Rechnung: Bei der stationären Simulation wurde die endliche Feststoffdispersion im Reaktor berücksichtigt. Die Ausnutzung der Radialsymmetrie des Reaktors ergibt ein räumlich zweidimensionales Problem.

Durch numerische Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems, das sich durch Nullsetzen aller zeitlichen Ableitungen ergibt, wird *ein* stationärer Punkt für das Reaktormodell gefunden.

Zur Diskretisierung benutzt S. Thomas ein Differenzenverfahren. Das Problem wird zunächst auf eine Raumdimension reduziert, mit dem *Newton-Raphson-Verfahren* wird ein stationärer Punkt für das reduzierte Problem gefunden. Die eindimensionale Lösung dient als Startwert für die zweidimensionale Iteration mittels *Sukzessiver Überrelaxation*.

Das in der vorliegenden Arbeit verwendete Modell baut auf den Arbeiten von S. Heinrich [6] und S. Thomas [15] auf. Die dort vorgestellten Modelle wurden um präzise formulierte Randbedingungen ergänzt. Als Bilanzgrößen wurden Enthalpien anstelle der Temperaturen verwendet, wodurch Nichtlinearitäten aus den Gleichungen eliminiert werden. Die Ableitungen wurden durch koordinatenunabhängige Differentialoperatoren ausgedrückt. Damit wird eine Simulation in drei Raumdimensionen ermöglicht.

1.3 Überblick

In Kapitel 2 werden die physikalischen Zusammenhänge vorgestellt, auf denen das beschriebene Modell der Wirbelschichttrocknung beruht.

Die Modellgleichungen werden in Kapitel 3 aus der Bilanzierung ausgewählter physikalischer Größen abgeleitet und in knapper Form mathematisch diskutiert.

In Kapitel 4 werden Möglichkeiten zur Diskretisierung der Modellgleichungen aufgezeigt, daran schließt sich die Vorstellung einer Beispielrechnung an.

2 Physikalische Beschreibung der flüssigkeitsbedünten Wirbelschicht

2.1 Zugrundeliegende ingenieurphysikalische Zusammenhänge

2.1.1 Phasengemisch

Der Raum der Wirbelschicht wird von einem Gemisch mehrerer Phasen ausgefüllt:

Feststoff Der Feststoffanteil liegt in Form relativ grobkörniger Partikel vor.

Flüssigkeit Die in die Wirbelschicht eingedünte Flüssigkeit haftet als Tropfen auf der Oberfläche der Partikel.

Gas Der Raum zwischen den benetzten Partikeln wird von einem Gemisch aus Luft und Wasserdampf eingenommen.

Relatives Lückenvolumen Der Anteil der Gasphase am Gesamtvolumen wird durch das *relative Lückenvolumen* ε bezeichnet. Es hängt von strömungsmechanischen Größen ab.

Partikeloberfläche Für die Verdunstung ist die Größe der zur Verfügung stehenden Phasengrenzfläche ein entscheidender Parameter. Zu ihrer Beschreibung wird die *volumenbezogene Partikeloberfläche*

$$A^* = \frac{dA}{dV}$$

(Gutsoberfläche bezogen auf Gutsvolumen) eingeführt.

Für monodisperses Bettmaterial (d. i. einheitliche Körnung) mit dem Partikeldurchmesser d_P gilt

$$A^* = \frac{dA}{dV} = \frac{\pi d_P^2}{\frac{1}{6}\pi d_P^3} = \frac{6}{d_P}.$$

Dichte und Konzentration Die Dichte ρ_i gibt an, welche Masse der Komponente i ein gegebenes Volumen unter den herrschenden Bedingungen (Druck, Temperatur) *allein* ausfüllen würde.

Die Konzentration κ_i bezeichnet die im Stoffgemisch tatsächlich vorliegende Masse der Komponente i pro Volumeneinheit:

$$\kappa_i = \frac{dm_i}{dV}$$

Ideale Vermischung Die Definitionen von ε und κ_i sind physikalisch sinnvoll nur für Bereiche, die wesentlich größer sind als die einzelnen Feststoffpartikel.

Für das mathematische Modell wird vereinfachend eine ideale Vermischung der Phasen angenommen: in einem beliebig kleinen Volumen sind Anteile aller drei Phasen anzutreffen. Die Grobkörnigkeit der Feststoffpartikel wird damit ignoriert.

Benetzte Partikel Die eingedüστε Flüssigkeit haftet in Form von Tropfen auf den Feststoffpartikeln der Wirbelschicht. Aufgrund der Oberflächenspannung breitet sich der Tropfen auf der Partikeloberfläche aus, wenn eine bestimmte Dicke erreicht ist. Daher kann vereinfachend eine konstante Filmdicke d_F (z.B. $1\mu m$) der Flüssigkeit angenommen werden. Bei vollständiger Benetzung der Partikel mit einem Flüssigkeitsfilm der angenommenen Dicke d_F ergibt sich die *maximale Flüssigkeitskonzentration*

$$\kappa_{F,max} = A^* \varepsilon^* d_F \rho_F$$

Der *Benetzungsgrad*

$$\varphi = \frac{A_{benetzt}}{A_{benetzt} + A_{unbenetzt}} = \frac{\kappa_F}{\kappa_{F,max}}$$

bezeichnet (unter obiger Annahme) das Verhältnis von benetzter Partikeloberfläche zur Gesamtoberfläche.

2.1.2 Thermodynamik

Konstanter Druck Die Druckdifferenzen in der Wirbelschicht sind derart gering, daß für die Thermodynamik der Druck überall gleich dem Atmosphärendruck gesetzt werden kann. (Für die strömungsmechanische Betrachtung der Wirbelschicht ist der Druckabfall über der Wirbelschicht von entscheidender Bedeutung.)

Alle Zustandsänderungen von Luft und Dampf finden somit bei konstantem Druck p statt; die Prozesse werden durch die Bilanzierung von *Enthalpien* beschrieben.

Ideale Gase Im Betriebszustand des Wirbelschichtreaktors ist die Beschreibung der Luft als ideales Gas hinreichend genau.

Eine genauere Berücksichtigung der Stoffeigenschaften ist für das verdunstende Wasser (Abhängigkeit des Sättigungsdampfdruckes von der Temperatur) erforderlich.

Partialdrücke Die Aufteilung der Gasphase unter den einzelnen Komponenten (Luft und Wasserdampf) wird durch Partialdrücke p_i beschrieben. Der (konstante) Systemdruck p ergibt sich nach dem DALTONSchen Gesetz als Summe der einzelnen Partialdrücke.

Für jede einzelne Komponente der Gasphase gilt:

$$p_i = \frac{\kappa_i}{\varepsilon} R_i T$$

mit der speziellen Gaskonstanten $R_i = R/M_i$, und damit für zwei Komponenten i, j

$$\frac{\kappa_i}{\kappa_j} = \frac{R_j p_i}{R_i p_j}.$$

Mittlere Gaskonstante Betrachtet wird ein Gemisch idealer Gase mit

- den Massen m_i
- den Partialdrücken p_i
- den Gaskonstanten R_i

der einzelnen Komponenten i , das bei einer (gemeinsamen) Temperatur T das Volumen V ausfüllt.

Für jede Komponente gilt

$$p_i V = m_i R_i T.$$

Gesamtmasse m und Gesamtdruck p ergeben sich als die Summe der entsprechenden Werte der einzelnen Komponenten:

$$m = \sum_i m_i, \quad p = \sum_i p_i.$$

Soll auch für das Gasgemisch die Beziehung $pV = mRT$ gelten, so bestimmt sich die *mittlere* Gaskonstante \bar{R} des Gasgemisches zu

$$\bar{R} = \frac{\sum_i m_i R_i}{\sum_i m_i} = \frac{\sum_i p_i}{\sum_i p_i / R_i}.$$

Luftfeuchte Die *feuchte Luft* ist ein Gemisch aus Luft und Wasserdampf. Die *Luftfeuchte* (oder der *Feuchtigkeitsgehalt*) Y_L ist definiert als

$$Y_L = \frac{\kappa_D}{\kappa_L};$$

bei der Betrachtung idealer Gase gilt offensichtlich

$$Y_L = \frac{M_D}{M_L} \frac{p_D}{p - p_D}.$$

Dichte der Luft Die *Dichte* der *trockenen Luft* beim Druck p und der Temperatur T ergibt sich mit der (mittleren) Gaskonstanten der Luft R_L zu

$$\rho_L = \frac{p}{R_L T},$$

die Konzentration ist gegeben durch

$$\kappa_L = \frac{\varepsilon p_L}{R_L T} = \varepsilon \frac{p_L}{p} \rho_L.$$

Für Luft mit dem *Feuchtigkeitsgehalt* Y ergibt sich die Dichte zu

$$\rho_Y = \frac{p}{R_Y T}$$

mit der Gaskonstanten der feuchten Luft

$$R_Y = \frac{R_L + Y R_D}{1 + Y}.$$

Enthalpieinhalt der feuchten Luft Die Enthalpie der feuchten Luft setzt sich aus der Enthalpie beider Komponenten zusammen.

Der Nullpunkt der Enthalpieskalen wird (*hier*) bei Atmosphärendruck und 0°C für trockene Luft bzw. flüssiges Wasser gesetzt. Die *volumenbezogene Enthalpie* h_L der feuchten Luft ist damit

$$h_L = \kappa_L c_{pL} \vartheta_L + \kappa_D c_{pD} \vartheta_L + \kappa_D \Delta h_{V0}.$$

c_{pL} und c_{pD} sind *spezifische Wärmekapazitäten bei konstantem Druck*, Δh_{V0} ist die *spezifische Verdampfungsenthalpie* des Wassers bei 0°C .

Verdunstungsstrom In der Wirbelschicht findet eine adiabate Sättigung von Luft mit Wasserdampf statt.

Der Massenstrom \dot{m}_V des Wassers, der an der Phasengrenzfläche A zwischen feuchter Luft und Wasser verdunstet (bzw. kondensiert für $\dot{m}_V < 0$), hängt nach [3] vom aktuellen Dampfdruck p_D und dem Sättigungsdampfdruck $p_{D,\infty}$ ab:

$$\dot{m}_V = \beta A \frac{p M_D}{RT} \ln \frac{p - p_D}{p - p_{D,\infty}} \quad (1)$$

Der *Sättigungsdampfdruck* $p_{D,\infty}$ des Wassers ist eine Funktion der Temperatur, die sich im relevanten Temperaturbereich ausreichend genau durch einen Ansatz der Form

$$p_{D,\infty}(\vartheta) = C_1 \exp \frac{C_2}{\vartheta + C_3}$$

(„Antoine-Gleichung“) approximieren läßt, siehe Anhang B.1.2.

Der Systemdruck p wird als konstant angenommen (Atmosphärendruck).

Die *Stoffübergangszahl* β beschreibt den Einfluß der Partikelumströmung auf den Transport des Wasserdampfes. Zu ihrer Berechnung wird eine Approximationsformel für die Sherwood-Zahl

$$Sh = \frac{\beta d_P}{D_L}$$

verwendet; Sh hängt von Re und ϑ_L ab.

Für kleine Dampf-Partialdrücke $p_D \ll p$, d. h. bei Temperaturen weit unter der Siedetemperatur des Wassers, läßt sich (1) durch die Näherung $\ln(1+x) \approx x$ vereinfachen zu

$$\dot{m}_V \approx \beta A \frac{p M_D}{RT} \frac{p_{D,\infty} - p_D}{p - p_{D,\infty}} \quad (2)$$

Die *adiabate Sättigungsfeuchte*

$$Y_G = \frac{M_D}{M_L} \frac{p_{D,\infty}}{p - p_{D,\infty}}$$

($M_D/M_L = 0,621$) ist die Feuchte, bei der sich Flüssigkeitsfilm und feuchte Luft im Gleichgewicht befinden. Sie hängt über den Sättigungsdampfdruck $p_{D,\infty}$ von der Flüssigkeitsfilmtemperatur ϑ_F ab.

Mit der Näherung $\frac{p-p_D}{p-p_{D,\infty}} \approx 1$ wird (2) zu

$$\dot{m}_V \approx \beta A \frac{p M_L}{RT} (Y_G - Y_L) = \beta A \rho_L (Y_G - Y_L). \quad (3)$$

Die auf das Volumenelement bezogene benetzte Oberfläche ist $A^* \varepsilon^* \varphi$, also folgt

$$\dot{\kappa}_V \approx \beta \rho_L A^* \varepsilon^* \varphi (Y_G - Y_L)$$

für den Verdunstungsstrom (verdunstenden Massenstrom) je Volumeneinheit.

Enthalpiestrom des verdunstenden Wassers Es wird angenommen, daß die zur Verdunstung notwendige Wärme dem Flüssigkeitsfilm entnommen wird; die zur Erwärmung von ϑ_F auf ϑ_L erforderliche Wärme hingegen der Luft entstammt.

Unter dieser Voraussetzung führt der verdunstende Wasserstrom $\dot{\kappa}_V$ den (volumenbezogenen) Enthalpiestrom

$$\dot{q}_V = \dot{\kappa}_V (\Delta h_{V0} + c_{pD} \vartheta_F)$$

beim Übergang vom Flüssigkeitsfilm in die Gasphase mit sich.

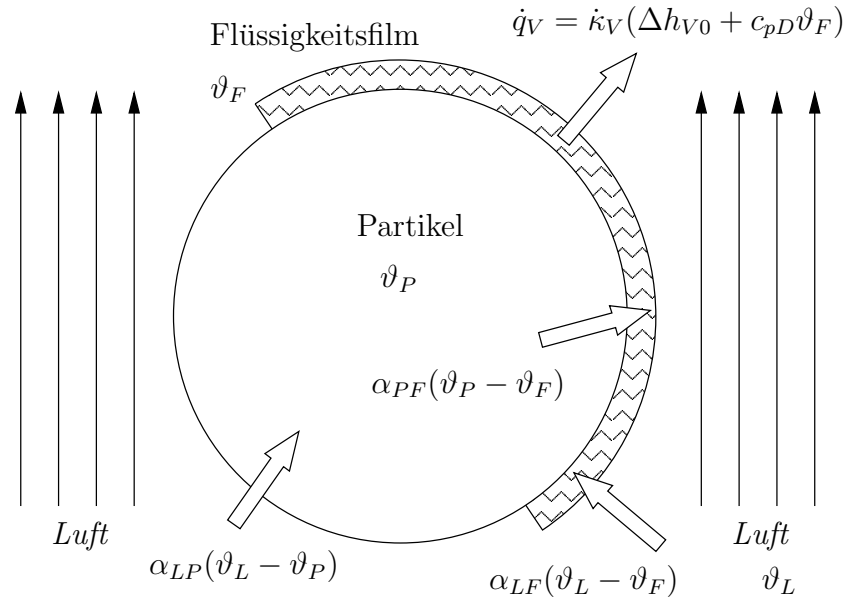


Abbildung 1: Wärmeübergang am Flüssigkeitsfilm

Wärmeübergang an den Grenzflächen Über die Grenzflächen der einzelnen Phasen

PL	Partikel – Luft	PW	Partikel – Wand
PF	Partikel – Flüssigkeitsfilm	LW	Luft – Wand
FL	Flüssigkeitsfilm – Luft	WU	Wand – Umgebung

wird durch das Zusammenwirken verschiedener Mechanismen (Wärmeleitung, Konvektion, Strahlung) Wärme transportiert. Der (*flächenbezogene*) *Wärmestrom*

$$\dot{q}_{ij}^{\square} = \frac{d\dot{Q}_{ij}}{dA}$$

über die Phasengrenzfläche A_{ij} (von i nach j) wird durch den *Wärmeübergangskoeffizienten* α_{ij} beschrieben:

$$\dot{q}_{ij}^{\square} = \alpha_{ij}(\vartheta_i - \vartheta_j)$$

Zur Berechnung der Wärmeübergangskoeffizienten α werden empirische Formeln für die Nusselt-Zahl

$$Nu = \frac{\alpha d}{\lambda}$$

verwendet. Die Werte von α sind im allgemeinen temperaturabhängig.

2.1.3 Strömungsmechanik

Wirbelschicht Das körnige Bettmaterial wird von unten nach oben von Luft durchströmt. Liegt die Strömungsgeschwindigkeit der Luft zwischen dem *Wirbelpunkt* und dem *Austragspunkt*, so bildet sich eine Wirbelschicht aus.

Das relative Lückenvolumen und damit die Höhe der Wirbelschicht steigen mit der Strömungsgeschwindigkeit an, während der Druckverlust über der Wirbelschicht konstant bleibt. Charakteristische Größe ist die Minimalfluidisierungsgeschwindigkeit (Strömungsgeschwindigkeit im Wirbelpunkt) w_{mf} . Zu beachten ist, daß w_{mf} von Korngröße und -dichte abhängt, also für verschiedene Partikel unterschiedlich ist.

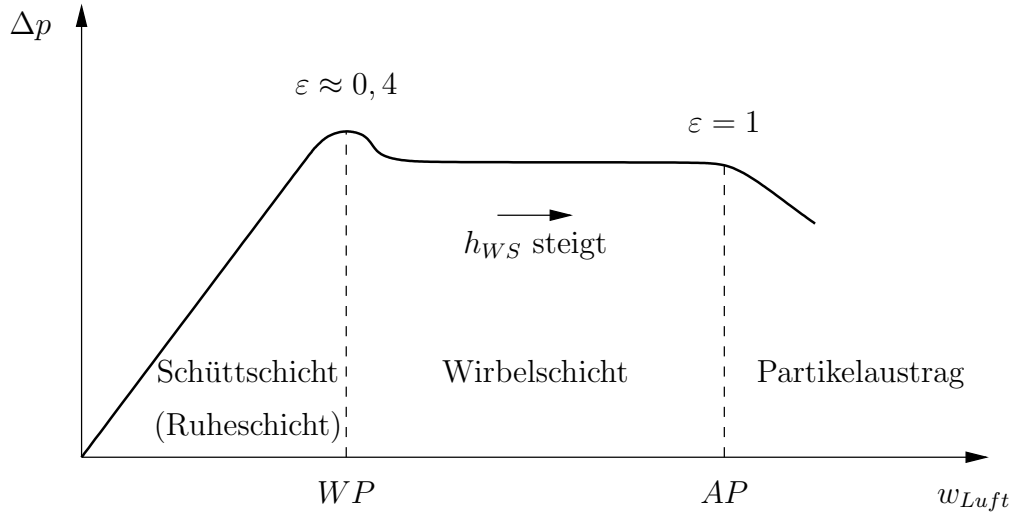


Abbildung 2: Druckverlust Δp über dem durchströmten Medium

Relatives Lückenvolumen Das *relative Lückenvolumen* (oder die *Porosität*) ε ist das Verhältnis von Lufträumen in der Wirbelschicht zum Gesamtvolumen. Sein Komplement ist der *Feststoffanteil* $\varepsilon^* = 1 - \varepsilon$.

Das relative Lückenvolumen ε wird als Funktion

$$\varepsilon = \varepsilon(Re_0)$$

der Leerrohr-Reynolds-Zahl Re_0 berechnet, siehe B.2.1.

Strömungsgeschwindigkeit Die Strömungsgeschwindigkeit w_L der Luft wird als räumlich konstant angenommen und aus Integralmittelwerten der Zustandsgrößen berechnet.

Aus dem zugeführten Luftmassenstrom \dot{m}_L und der Querschnittsfläche des Wirbelschichtreaktors A_{App} ergibt sich die *Leerrohr-Gasgeschwindigkeit*

$$w_0 = \frac{1 + \overline{Y}_L}{1 + Y_{L, \text{ein}}} \frac{\dot{m}_{L, \text{ein}}}{\overline{\rho}_L A_{App}}$$

$\overline{\rho}_L$ und \overline{Y}_L sind Mittelwerte der Größen $\rho_L(\underline{x})$ und $Y_L(\underline{x})$.

In der Wirbelschicht steht der Luft ein um den Faktor ε kleineres Volumen zur Verfügung. Die tatsächliche *Strömungsgeschwindigkeit* ergibt sich zu

$$w_L \equiv w_\varepsilon = \frac{w_0}{\varepsilon}.$$

Für ein Partikel der Korngröße d_P sind dementsprechend die beiden *Reynolds-Zahlen*

$$Re_0 = \frac{w_0 d_P}{\nu_L}$$

$$Re_\varepsilon = \frac{w_\varepsilon d_P}{\nu_L}$$

(Leerrohr)

(unter Berücksichtigung der Porosität)

definiert (dabei ist ν_L die *kinematische Viskosität* der Luft).

Wirbelpunkt und Austragspunkt Die Leerrohr-Reynolds-Zahlen im Wirbelpunkt Re_{WP} und im Austragspunkt Re_{AP} sind Funktionen der Archimedes-Zahl Ar :

$$Re_{WP} = Re_{WP}(Ar) \qquad Re_{AP} = Re_{AP}(Ar)$$

Von verschiedenen Autoren werden empirische Formeln angegeben, siehe B.2.1.

Die *Minimalfluidisierungsgeschwindigkeit* (Leerrohrgasgeschwindigkeit im Wirbelpunkt) ergibt sich als

$$w_{mf} = \frac{Re_{WP} \nu_L}{d_P}.$$

Dispersion Durch den Transport in der turbulenten Luftströmung erfolgt eine Durchmischung (Dispersion) des Bettmaterials. Dabei dominiert der Partikeltransport in vertikaler Richtung.

Die Intensität der Feststoffdurchmischung hängt von der *Schlupfgeschwindigkeit* (oder *Überschußgeschwindigkeit*) $w_{Schlupf}$ ab, die sich als Differenz zwischen der vorliegenden Leerrohr-Strömungsgeschwindigkeit w_0 und der Minimalfluidisierungsgeschwindigkeit w_{mf} ergibt:

$$w_{Schlupf} = w_0 - w_{mf}$$

Die richtungsabhängige Intensität der Feststoffdispersion wird durch die *Dispersionsmatrix*

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_x & 0 & 0 \\ 0 & D_y & 0 \\ 0 & 0 & D_z \end{pmatrix}$$

beschrieben. Der Dispersionskoeffizient in vertikaler Richtung D_z wird aus einer Approximationsformel für die Peclet-Zahl

$$Pe = \frac{w_{Schlupf} \cdot d_{App}}{D_z}$$

errechnet, der Dispersionskoeffizient in horizontaler Richtung $D_x = D_y$ wird zu

$$D_x = D_y = 0,1 D_z$$

geschätzt.

2.1.4 Flüssigkeitseintrag

Die zugeführte Flüssigkeit verläßt die Düse in Form von Tropfen. Vereinfachend wird angenommen, daß jeder einzelne Tropfen sich so lange auf einer geradlinigen Bahn fortbewegt, bis er auf einem Korn der Wirbelschicht haften bleibt.

Die Wahrscheinlichkeit der Flüssigkeitsabscheidung beim Zusammentreffen mit einem Feststoffpartikel wird durch den Abscheidegrad η_A modelliert. Mit der Porosität ε ergibt sich daraus eine mittlere Tropfenweglänge s_{Tr} .

Die Kenntnis der mittleren Tropfenweglänge ermöglicht eine Berechnung der räumlichen Verteilung des eingedüsten Flüssigkeits-Massenstroms \dot{m}_Q und damit des (volumenbezogenen) *Flüssigkeitsquellstroms* $\dot{\kappa}_Q(\underline{x})$.

2.2 Modellannahmen; Getroffene Vereinfachungen

2.2.1 Geometrie

Behälter Der Wirbelschichtreaktor hat einen über die Höhe konstanten (d. h. prismatischen) Querschnitt; damit kann die Gasströmung als homogen vertikal angenommen werden.

2.2.2 Phasengemisch

Bettpartikel Die Feststoffpartikel in der Wirbelschicht werden als homogene Kugeln vom Durchmesser (*Korngröße*) d_P modelliert. (Reale Partikel werden von der Kugelgestalt abweichen, dies wird hier ignoriert.)

Für eine einfache Berechnung wird weiterhin angenommen, daß alle Partikel den gleichen Durchmesser d_P besitzen.

Eine bessere Modellierung wird erreicht, wenn mit einer Verteilung der Partikeldurchmesser gerechnet wird. Dies ist insbesondere zur Beschreibung der kontinuierlichen Granulation (Zufuhr kleiner, Austrag großer Partikel) erforderlich.

Flüssigkeitsvolumen Das Volumen der flüssigen Phase (Düsenstrahl und Flüssigkeitsfilm) wird bei der Volumenbilanzierung vernachlässigt. Es wird angenommen, daß von einem beliebigen Volumen V

- der Anteil εV von der Gasphase eingenommen wird,
- das verbleibende Volumen $(1 - \varepsilon)V$ vom Bettmaterial ausgefüllt ist.

2.2.3 Strömungsmechanik der Wirbelschicht

Eine Wirbelschicht ist bei Betrachtung der Gesamtheit aller Partikelbahnen ein äußerst komplexes dynamisches System. Aus makroskopischer Sicht, die das Bettmaterial als Kontinuum auffaßt, sind folgende Beobachtungen charakteristisch:

- Bedingt durch die Reibung an der Reaktorwand ist die Gasgeschwindigkeit in Wandnähe kleiner als in der Kernzone des Reaktors. Dies bewirkt eine Zirkulation des Bettmaterials im Reaktor: In der Kernzone wird Material nach oben transportiert, welches in Wandnähe wieder nach unten fällt.
- Die (mittlere) Porosität ist in der Kernzone größer als im Randbereich.
- In der Wirbelschicht können sich Gasblasen bilden. Deren Wanderungsgeschwindigkeit fällt nicht mit den Strömungsgeschwindigkeiten von Gas oder Partikeln zusammen.

In der vorliegenden Arbeit liegt der Schwerpunkt der Betrachtung auf Wärmetransport und Verdunstung. Um das Modell nicht unnötig kompliziert zu machen, wird die Strömungsmechanik der Wirbelschicht unter weitgehenden Vereinfachungen betrachtet: Sämtliche die Strömungsmechanik charakterisierenden Größen (Strömungsgeschwindigkeit, Porosität und alle mit diesen unmittelbar zusammenhängenden Größen) werden als ortsunabhängig betrachtet, d. h. es wird nur mit Mittelwerten gerechnet.

Pfropfenströmung (plug flow): Die Fluidisierungsluft strömt mit einer räumlich und zeitlich konstanten Geschwindigkeit in vertikaler Richtung durch die Wirbelschicht. Eine Diffusion der Luft durch Verwirbelung findet nicht statt.

Homogene Wirbelschicht: Die Porosität der Wirbelschicht ist räumlich und zeitlich konstant.

Partikeldiffusion: Der Partikelaustausch durch Verwirbelung wird durch einen richtungsabhängigen, aber bezüglich Ort und Zeit konstanten Diffusionskoeffizienten beschrieben.

Bei der Berechnung des Wärmeübergangs an der Wand wird mit einem gegenüber dem Mittel höheren Feststoffanteil gerechnet.

2.2.4 Düsenstrahl

In Ermangelung geeigneter Modelle wird die Wechselwirkung zwischen dem Strom der Trägerluft und dem aus der Düse austretenden Flüssigkeitsstrahl vernachlässigt. Das heißt im einzelnen:

- Luftstrom und Düsenstrahl lenken einander nicht ab.
- Zwischen Luftstrom und Düsenstrahl erfolgt kein Wärmeaustausch.
- Die im Düsenstrahl transportierten Tröpfchen verdunsten nicht.

3 Modellgleichungen

3.1 Ableitung der Modellgleichungen aus Bilanzen

Im folgenden werden durch Bilanzierung ausgewählter Größen *Bilanzgleichungen* aufgestellt, die die Grundlage des mathematischen Modells der Wirbelschichttrocknung bilden.

Die Bilanzierung im Inneren des Gebietes G (der Wirbelschichtzone) liefert ein System partieller Differentialgleichungen, die Bilanzierung an der Randfläche ∂G liefert die zugehörigen Randbedingungen.

Für die nachfolgenden Betrachtungen werden Euler-Koordinaten (ortsfeste Koordinaten) zugrundegelegt.

3.1.1 Bilanzierung im Inneren des Gebietes

Für eine Bilanzgröße $u(\underline{x})$, die eine Erhaltungseigenschaft besitzt, gilt im Inneren des betrachteten Gebietes G eine Bilanz der Form¹

$$\underbrace{\frac{\partial u}{\partial t}}_{\substack{\text{zeitliche} \\ \text{Änderung der} \\ \text{Konzentration} \\ \text{von } u}} = - \underbrace{\nabla \cdot \underline{s}(u)}_{\substack{\text{Divergenz} \\ \text{des Stromes} \\ \text{von } u}} + \underbrace{u_Q}_{\substack{\text{pro Volumen} \\ \text{erzeugte} \\ \text{Menge von } u}}$$

Der vektorwertige *Strom* $\underline{s}(u)$ der Größe u (Transportterm) kann durch verschiedene Mechanismen angetrieben werden:

Advektion mit dem Geschwindigkeits-Vektorfeld \underline{w} :

$$\underline{s}_a(u) = u\underline{w}$$

Wärmeleitung mit dem Wärmeleitkoeffizienten λ :

$$\underline{s}_l(u) = -\lambda \nabla u$$

(FOURIERSches Gesetz)

Dispersion im allg. richtungsabhängig, mit der Dispersionsmatrix \mathbf{D} :

$$\underline{s}_d(u) = -\mathbf{D} \nabla u$$

3.1.2 Bilanzierung am Rand

Der auf G definierte Strom $\underline{s}(u)$ soll ein auf \overline{G} stetig differenzierbares Vektorfeld sein, d. h. $\underline{s}(u)$ ist auf dem Rand ∂G definiert und dort gleich der stetigen Fortsetzung des Stromes im Innern.

Der in Normalenrichtung zum Rand ∂G (\underline{n} bezeichnet den äußeren Normaleneinheitsvektor) fließende Anteil des Stromes $\underline{s}(u)$ wird durch an der Wand wirkende Mechanismen bestimmt:

¹Die Bilanzen werden hier unmittelbar in ihrer Differentialform aufgestellt, auf eine Herleitung über die Bilanzierung am Volumenelement wird verzichtet. – Es sei vorausgesetzt, daß alle vorkommenden Ableitungen existieren.

Undurchlässige Wände Der Strom über den Gebietsrand ist Null:

$$\underline{n} \cdot \underline{s}(u)|_{\partial G} = 0$$

Zufluß Das über den Rand strömende Quantum von u wird von außen vorgegeben:

$$\underline{n} \cdot \underline{s}(u)|_{\partial G} = \underline{n} \cdot \underline{w}u|_{\partial G}$$

Wärmeübergang Der Temperaturverlauf an der Wand wird durch einen Sprung von ϑ_i (im Innern) auf ϑ_a (auf der Wand) angenähert. Der Wärmestrom wird durch den Wärmeübergangskoeffizienten α bestimmt:

$$\underline{n} \cdot \underline{s}(h)|_{\partial G} = \alpha(\vartheta_i - \vartheta_a)|_{\partial G}$$

Die Randbedingungen zu den partiellen Differentialgleichungen auf G ergeben sich aus jeweils einer der obigen Gleichungen.

3.2 Modellierung des Trocknungsvorganges

3.2.1 Bilanzgrößen

Die folgenden Größen werden als Funktionen des Ortes und der Zeit aufgefaßt und entsprechend bilanziert:

- Konzentration der benetzenden Flüssigkeit κ_F
- Konzentration des Wasserdampfes κ_D
- volumenbezogene Enthalpie der Luft h_L
- volumenbezogene Enthalpie des Flüssigkeitsfilms h_F
- volumenbezogene Enthalpie der Partikel h_P

Zur Vereinfachung wird die Wandtemperatur ϑ_W als konstant angenommen.

3.2.2 Bilanzen im Innern der Wirbelschicht

Die Bilanzierung im Inneren der Wirbelschichtzone liefert eine partielle Differentialgleichung für jede Bilanzgröße.

Flüssigkeitskonzentration Für die Bilanz der Flüssigkeitskonzentration κ_F sind zu berücksichtigen:

Quellen Konzentrationsstrom der Tropfenabscheidung $\dot{\kappa}_Q$ (von außen vorgegeben)

Senken Verdunstungsstrom $\dot{\kappa}_V$ (abhängig von κ_F und den Temperaturen, stark nichtlinear)

Transportterm bestimmt durch die Dispersion der Feststoffpartikeln, an deren Oberfläche sich die Flüssigkeit befindet: $\underline{s}(\kappa_F) = -\mathbf{D}\nabla\kappa_F$

Bilanz Die Bilanz der Flüssigkeitskonzentration ergibt sich zu

$$\frac{\partial \kappa_F}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla\kappa_F) + \dot{\kappa}_Q - \dot{\kappa}_V \quad (4)$$

Dampfkonzentration Für die Dampfkonzentration κ_D sind zu berücksichtigen:

Quellen Verdunstungsstrom $\dot{\kappa}_V$

Transport Advektion in der Pfropfenströmung: $\underline{s}_a(\kappa_D) = \kappa_D w_L \underline{e}_z$
 Dampf-Diffusion: $\underline{s}_d(\kappa_D) = -D_{DL} \nabla \kappa_D$

Bilanz

$$\frac{\partial \kappa_D}{\partial t} = -w_L \frac{\partial \kappa_D}{\partial z} + D_{DL} \Delta \kappa_D + \dot{\kappa}_V \quad (5)$$

Enthalpie der Luft Für die volumenbezogene Enthalpie der Luft h_L

Quellen und Senken Verdunstung: \dot{q}_V
 Wärmeübergang: $\dot{q}_{PL}, \dot{q}_{FL}$

Transport Advektion: $\underline{s}_a(h_L) = \underline{w}_L h_L$
 Wärmeleitung: $\underline{s}_l(h_L) = -\lambda_L \nabla \vartheta_L$ (sehr klein)

Bilanz

$$\frac{\partial h_L}{\partial t} = \lambda_L \Delta \vartheta_L - w_L \frac{\partial h_L}{\partial z} + \dot{q}_V + \dot{q}_{PL} + \dot{q}_{FL} \quad (6)$$

Enthalpie des Flüssigkeitsfilms

Transport Feststoffdispersion $\underline{s}(h_F) = -\mathbf{D} \nabla h_F$

Quellen Quellterm $\dot{q}_Q = \dot{\kappa}_Q c_{pF} \vartheta_Q$
 Reaktionsterm $-\dot{q}_V$
 Wärmeübergang $-\dot{q}_{FL}, \dot{q}_{PF}$

Bilanz

$$\frac{\partial h_F}{\partial t} = \nabla(\mathbf{D} \nabla h_F) + \dot{q}_Q - \dot{q}_V + \dot{q}_{PF} - \dot{q}_{FL} \quad (7)$$

Energie der Partikel

Transport Feststoffdispersion $\underline{s}(h_P) = -\mathbf{D} \nabla h_P$

Quellen/Senken Wärmeübergang $-\dot{q}_{PL}, -\dot{q}_{PF}$

Bilanz

$$\frac{\partial h_P}{\partial t} = \nabla(\mathbf{D} \nabla h_P) - \dot{q}_{PL} - \dot{q}_{PF} \quad (8)$$

3.2.3 Bilanzen am Rand

Die Bilanzierung am Rand ∂G liefert die zum System partieller Differentialgleichungen gehörenden Randbedingungen.

Flüssigkeitskonzentration Die Grenzen der Wirbelschichtzone sind für Partikel undurchlässig, damit gilt für den Flüssigkeits-Strom am Rand

$$\underline{n} \cdot \underline{s}(\kappa_F) = 0.$$

Die Randbedingung ergibt sich mit $\underline{s}(\kappa_F) = -\mathbf{D}\nabla\kappa_F$ zu

$$\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla\kappa_F = 0.$$

Dampfkonzentration

Seitliche Wände Die Seitenwände des Reaktors sind für Dampf undurchlässig:

$$\underline{n} \cdot \underline{s}(\kappa_D) = 0$$

Mit $\underline{s}(\kappa_D) = \kappa_D \underline{w}_L \underline{e}_z - D_{DL} \nabla \kappa_D$ und $\underline{n} \cdot \underline{e}_z = 0$ folgt als Randbedingung

$$\underline{n} \cdot \nabla \kappa_D = 0.$$

Unterer und oberer Rand Durch den Anströmboden und den oberen Rand der Wirbelschichtzone wird Dampf im Gasstrom transportiert. Die Bilanzierung der Ströme ergibt

$$\underline{n} \cdot \underline{s}(\kappa_D) = \underline{n} \cdot \underline{w}_L \kappa_D |_{\partial G}$$

Mit $\underline{s}(\kappa_D) = \kappa_D \underline{w}_L - D_{DL} \nabla \kappa_D$ und $\underline{n} \cdot \underline{w}_L = \pm w_L$ („-“ am unteren, „+“ am oberen Rand) folgt als Randbedingung unter Vernachlässigung der Dampfdiffusion

$$\kappa_D = \kappa_D |_{\partial G}$$

Enthalpie der Luft

Seitliche Wände An den Seitenwänden des Reaktors findet ein Wärmeübergang statt:

$$\underline{n} \cdot \underline{s}(h_L) = \alpha_{LW} (\vartheta_L - \vartheta_W) =: \dot{q}_{LW}^{\square}.$$

Die Randbedingung ergibt sich mit $\underline{s}(h_L) = \underline{w}_L h_L - \lambda_L \nabla \vartheta_L$ und $\underline{n} \cdot \underline{w}_L = 0$ zu

$$\underline{n} \cdot \lambda_L \nabla \vartheta_L = \alpha_{LW} (\vartheta_W - \vartheta_L) = -\dot{q}_{LW}^{\square}.$$

Oberer und unterer Rand Der Wärmeübergang am Anströmboden und am oberen Rand der Wirbelschichtzone werden vernachlässigt. Durch den Gasstrom wird Wärme transportiert:

$$\underline{n} \cdot \underline{s}(h_L) = \underline{n} \cdot \underline{w}_L h_L |_{\partial G}$$

Unter Vernachlässigung der Wärmeleitung in der Luft ist $\underline{s}(h_L) = \underline{w}_L h_L$, damit folgt

$$h_L = h_L |_{\partial G}$$

Enthalpie des Flüssigkeitsfilms

Seitliche Wände An den Seitenwänden findet ein Wärmeübergang statt:

$$\underline{n} \cdot \underline{s}(h_F) = \alpha_{FW}(\vartheta_F - \vartheta_W) =: \dot{q}_{FW}^{\square},$$

die Randbedingung ergibt sich mit $\underline{s}(h_F) = -\mathbf{D}\nabla h_F$ zu

$$\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla h_F = \alpha_{FW}(\vartheta_W - \vartheta_F) = -\dot{q}_{FW}^{\square}.$$

Oberer und unterer Rand Der Wärmeübergang am oberen und unteren Rand wird zu Null gesetzt, damit folgt als Randbedingung

$$\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla h_F = 0.$$

Energie der Partikel Analog zur Flüssigkeits-Enthalpie ergeben sich die Randbedingungen

$$\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla h_P = \alpha_{PW}(\vartheta_W - \vartheta_P) =: -\dot{q}_{PW}^{\square}.$$

für die seitlichen Wände,

$$\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla h_P = 0$$

für oberen und unteren Rand.

3.2.4 Zustandsgleichungen

Zustandsgleichungen stellen den Zusammenhang her zwischen

- den *Bilanzgrößen*: Enthalpien, Konzentrationen, und
- den *Zustandsgrößen*: Temperaturen, Benetzungsgrad.

Partikeltemperatur Die volumenbezogene Enthalpie der Partikel h_P ist definiert als

$$h_P = \kappa_P c_{pP} \vartheta_P$$

mit $\kappa_P = (1 - \varepsilon)\rho_P$, die Partikeltemperatur ϑ_P ergibt sich als

$$\vartheta_P = \frac{1}{(1 - \varepsilon)\rho_P c_{pP}} h_P.$$

Flüssigkeitsfilmtemperatur Die volumenbezogene Enthalpie des Flüssigkeitsfilms h_F ist definiert als

$$h_F = \kappa_F c_{pF} \vartheta_F,$$

die Flüssigkeitsfilmtemperatur ϑ_F ist damit gleich

$$\vartheta_F = \frac{1}{c_{pF} \kappa_F} h_F.$$

Lufttemperatur Die volumenbezogene Enthalpie der feuchten Luft h_L ist definiert durch

$$h_L = (\kappa_L c_{pL} + \kappa_D c_{pD}) \vartheta_L + \kappa_D \Delta h_{V0}. \quad (9)$$

Dabei hängt Die Konzentration der trockenen Luft κ_L über

$$\frac{\kappa_L}{\rho_L(\vartheta_L)} + \frac{\kappa_D}{\rho_D(\vartheta_L)} = \varepsilon$$

mit $\rho_i(\vartheta_L) = \frac{p}{R_i T_L}$ von der Lufttemperatur ϑ_L ab, ϑ_L ist also nur implizit gegeben.

Mit der Näherung

$$\frac{c_{pD}}{R_D} \approx \frac{c_{pL}}{R_L}$$

wird (9) zu

$$h_L = \varepsilon \rho_L(\vartheta_L) c_{pL} \vartheta_L + \kappa_D \Delta h_{V0}$$

Die Lufttemperatur ϑ_L ergibt sich als

$$\vartheta_L = \frac{h_L^* T_0}{h_L^\infty - h_L^*}$$

mit $h_L^* = h_L - \kappa_D \Delta h_{V0}$, $h_L^\infty = \frac{\varepsilon p c_{pL}}{R_L}$ und $T_0 = 273,15$.

Benetzungsgrad Der Benetzungsgrad φ ist definiert als

$$\varphi = \frac{\kappa_F}{\kappa_{F,max}},$$

das Modell ist gültig für $0 \leq \varphi \leq 1$.

3.2.5 Reaktionsterme

Verdunstung In die Berechnung des verdunstenden Dampf-Massenstromes

$$\dot{\kappa}_V = A^* \varepsilon^* \varphi \beta \rho_D \ln \frac{p - p_D}{p - p_{D,\infty}}$$

gehen ein:

- der Partialdruck des Dampfes $p_D = \kappa_D R_D T_L$
- der Sättigungsdampfdruck $p_{D,\infty} = p_{D,\infty}(\vartheta_F) \approx A e^{\frac{B}{C + \vartheta_F}}$ (siehe B.1.2)
- die Dampf-Dichte $\rho_D = \frac{p}{R_D T}$

Der verdunstende Dampf führt den Wärmestrom

$$\dot{q}_V = \dot{\kappa}_V (h_{V0} + c_{pD} \vartheta_F)$$

mit sich.

Wärmeübergang Die Wärmeströme \dot{q}_{ij} bzw. \dot{q}_{ij}^\square sind (für konstante α_{ij} , siehe 3.2.6) jeweils einer Temperaturdifferenz proportional:

Volumenbezogene Wärmeströme (auf G): Flächenbezogene Wärmeströme (auf ∂G):

$$\begin{aligned} \dot{q}_{PL} &= A^* \varepsilon^* (1 - \varphi) \alpha_{PL} (\vartheta_P - \vartheta_L) & \dot{q}_{LW}^\square &= \alpha_{LW} (\vartheta_L - \vartheta_W) \\ \dot{q}_{FL} &= A^* \varepsilon^* \varphi \alpha_{FL} (\vartheta_F - \vartheta_L) & \dot{q}_{FW}^\square &= \alpha_{FW} (\vartheta_F - \vartheta_W) \\ \dot{q}_{PF} &= A^* \varepsilon^* \varphi \alpha_{PF} (\vartheta_P - \vartheta_F) & \dot{q}_{PW}^\square &= \alpha_{PW} (\vartheta_P - \vartheta_W) \end{aligned}$$

3.2.6 Koeffizienten

Die nachfolgenden Koeffizienten werden vereinfachend als konstant angenommen:

Strömungsgeschwindigkeit Die Leerrohr-Strömungsgeschwindigkeit der Luft $w_{L,0}$ hängt bei konstantem Massenzustrom \dot{m}_L nur von der Dichte der feuchten Luft (siehe oben) ab. Für diese wird ein Mittelwert eingesetzt.

Die reale Strömungsgeschwindigkeit der Luft $w_L = \frac{1}{\varepsilon} w_{L,0}$ ergibt sich unter Berücksichtigung der Porosität.

Porosität Die Porosität ε ist eine Funktion der Leerrohr-Strömungsgeschwindigkeit w_0 .

Wärmeübergangskoeffizienten Die Wärmeübergangskoeffizienten α sind im allgemeinen nur geschätzt und werden im ersten Ansatz als konstant angenommen.

3.2.7 Arbeitsbereich des Systems

Die Gültigkeit des Modells ist nur innerhalb gewisser Schranken für die Zustandsgrößen gegeben.

Temperaturen Die Temperaturen im System müssen zwischen dem Erstarrungs- und dem Siedepunkt der eingebrachten Flüssigkeit beim Systemdruck liegen: Für reines Wasser muß gelten

$$0^\circ\text{C} \leq \vartheta_i \leq 100^\circ\text{C}.$$

Konzentrationen Die Konzentrationen der Stoffe müssen zwischen Null und den jeweiligen Dichten liegen, d. h.

$$0 \leq \kappa_i \leq \rho_i.$$

Für die Gültigkeit des Benetzungsmodells muß die Flüssigkeitskonzentration zusätzlich die Bedingung

$$\kappa_F \leq \kappa_{F,max}$$

erfüllen.

3.3 Modellierung des Flüssigkeitseintrags

Durch eine Düse werden Flüssigkeitstropfen in die Wirbelschicht eingebracht, die an den Bettpartikeln haften bleiben und dort verdunsten. Durch die mathematische Modellierung des Geschwindigkeitsfeldes und der Massenverteilung dieser Tropfen wird die räumliche Verteilung des Flüssigkeits-Quellenfeldes $\dot{\kappa}_Q$ berechnet. Das resultierende Gleichungssystem ist unter den gewählten Voraussetzungen geschlossen lösbar.

3.3.1 Modellannahmen

Der Düsenstrahl wird vereinfachend als homogener kegelförmiger Tropfenstrom betrachtet. Im folgenden wird ein auf die Düsenachse bezogenes Kugelkoordinatensystem mit den Koordinaten (r, ϕ, θ) verwendet:

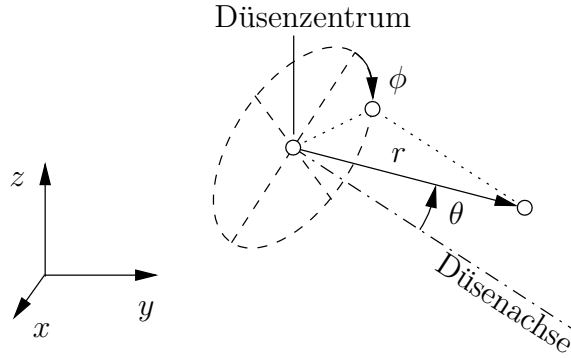


Abbildung 3: Lokales Koordinatensystem der Düse

Geradlinige Tropfenbahn Es wird angenommen, daß sich die in die Wirbelschicht eingebrachten Flüssigkeitstropfen vom Düsenzentrum ausgehend mit konstanter Geschwindigkeit auf einer geradlinigen Bahn bewegen, bis sie auf einem Korn des Bettmaterials haften bleiben. (Die Ablenkung der Tropfen durch den Gasstrom wird vernachlässigt.)

Das Geschwindigkeitsfeld der Tropfen \underline{u}_{Tr} ist somit radialsymmetrisch bezüglich des Düsenzentrums:

$$\underline{u}_{Tr} = u_{Tr} \underline{e}_r$$

(\underline{e}_r Einheitsvektor in radialer Richtung).

Radialsymmetrische Tropfenverteilung Für die Berechnung der räumlichen Verteilung der Tropfenkonzentration $\kappa_{Tr}(\underline{x})$ wird von folgenden vereinfachenden Voraussetzungen ausgegangen:

- Die eingebrachte Flüssigkeit wird innerhalb eines Kegels mit einem Öffnungswinkel $2\theta_D$ um die Düsenachse gleichmäßig verteilt, außerhalb dieses Kegels ist die Tropfenkonzentration Null.
- Die auf die Tropfenabscheidung wirkenden Einflußgrößen sind ortsunabhängig.

Aus Symmetriegründen hängt so die Tropfenkonzentration κ_{Tr} innerhalb des Strahlkegels nur von der Entfernung von der Düse ab:

$$\kappa_{Tr}(\underline{x}) = \begin{cases} \kappa_{Tr}(r) & (\frac{\pi}{2} - \theta_D \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}) \\ 0 & (\theta < \frac{\pi}{2} - \theta_D) \end{cases} .$$

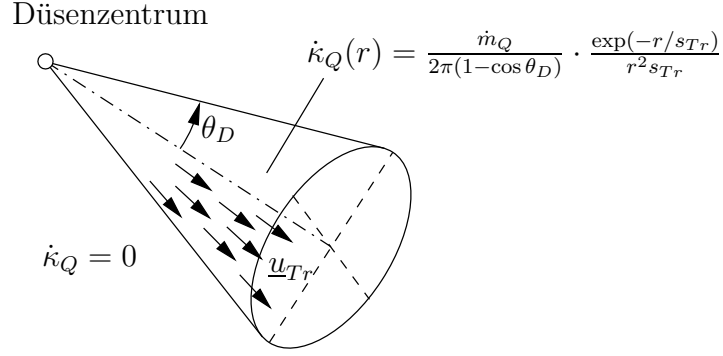


Abbildung 4: Düsenstrahl

3.3.2 Tropfenbilanz

Tropfenabscheidung Der im Düsenstrahl transportierte Flüssigkeitsstrom ist gleich dem Produkt aus der Tropfenkonzentration κ_{Tr} und der Bahngeschwindigkeit der Tropfen \underline{u}_{Tr} . Die Bilanzierung der Tropfenkonzentration liefert

$$\frac{\partial \kappa_{Tr}}{\partial t} = \nabla \cdot (\kappa_{Tr} \underline{u}_{Tr}) + \dot{\kappa}_Q$$

Im stationären Fall ($\frac{\partial \kappa_{Tr}}{\partial t} = 0$) tritt die pro Volumen abgeschiedene Flüssigkeitsmenge $\dot{\kappa}_Q$ als Divergenz des Tropfenstromes in Erscheinung:

$$\dot{\kappa}_Q = -\nabla \cdot (\kappa_{Tr} \underline{u}_{Tr}). \quad (10)$$

Mit $\kappa_{Tr}(\underline{x}) \underline{u}_{Tr}(\underline{x}) = u_{Tr} \kappa_{Tr}(r) \underline{e}_r$ folgt

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\kappa_{Tr} \underline{u}_{Tr}) &= \nabla \cdot (u_{Tr} \kappa_{Tr} \underline{e}_r) \\ &= u_{Tr} (\underline{e}_r \cdot \nabla \kappa_{Tr} + \kappa_{Tr} \nabla \cdot \underline{e}_r) \\ &= u_{Tr} \left(\frac{\partial \kappa_{Tr}}{\partial r} + \frac{2\kappa_{Tr}}{r} \right) \end{aligned}$$

Tropfenweglänge Setzt man voraus, daß

- die Flüssigkeitstropfen und die Bettpartikel gleichförmige Kugeln sind und
- die Wahrscheinlichkeit der Absorption für den Fall, daß die Bahn eines Tropfens ein Bettpartikel berührt, für alle Flüssigkeitstropfen gleich einer ortsunabhängigen Konstanten η_A ist,

so erhält man aus geometrischen Betrachtungen eine mittlere Tropfenweglänge

$$s_{Tr} = \frac{2}{3} \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon \eta_A} d_P$$

in dem Sinne, daß gilt²

$$\dot{\kappa}_Q = \frac{u_{Tr}}{s_{Tr}} \kappa_{Tr}. \quad (11)$$

²Zur Berechnung der Abscheidung in einer Schüttschicht wird bei Löffler [8] die Beziehung

$$-\frac{d\kappa}{ds} = \frac{3}{2} \frac{1 - \varepsilon \eta_A}{\varepsilon} \frac{d_P}{d_P} \kappa$$

verwendet; die Lösung wird dort aber für ein paralleles Geschwindigkeitsfeld angegeben.

Zusammen mit (10) folgt für den Quellstrom κ_Q die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\frac{d\kappa_{Tr}}{dr} + \left(\frac{1}{s_{Tr}} + \frac{2}{r} \right) \kappa_{Tr} = 0,$$

mit der durch $C \in \mathbb{R}$ parametrisierten Schar von Lösungen

$$\kappa_{Tr}(r) = C \frac{\exp(-r/s_{Tr})}{r^2}.$$

Massenbilanz der Eindüsung Die Konstante C wird nun aus der pro Zeiteinheit eingedüsten Flüssigkeitsmasse \dot{m}_Q bestimmt:

Durch eine Sphäre $B(r)$ um das Düsenzentrum tritt der Flüssigkeitsstrom

$$\begin{aligned} \dot{m}_{Tr}(r) &= \int_{B(r)} \kappa_{Tr}(\underline{x}) \underline{u}_{Tr}(\underline{x}) d\underline{n} \\ &= \int_{\frac{\pi}{2}-\theta_D}^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{2\pi} u_{Tr} \kappa_{Tr}(r) r^2 \sin \theta d\phi d\theta \\ &= 2\pi r^2 u_{Tr} \kappa_{Tr}(r) (1 - \cos \theta_D) \end{aligned}$$

Im Grenzwert $r \rightarrow 0$ muß dieser Flüssigkeitsstrom gleich der eingedüsten Flüssigkeitsmenge \dot{m}_Q sein:

$$\dot{m}_Q = \lim_{r \rightarrow 0} \dot{m}_{Tr}(r) = C u_{Tr} 2\pi (1 - \cos \theta_D) \lim_{r \rightarrow 0} \exp\left(-\frac{r}{s_{Tr}}\right) = C u_{Tr} 2\pi (1 - \cos \theta_D),$$

so daß folgt

$$C = \frac{\dot{m}_Q}{2\pi (1 - \cos \theta_D) u_{Tr}}$$

und mit (11)

$$\dot{\kappa}_Q(r) = \frac{u_{Tr}}{s_{Tr}} C \frac{\exp(-r/s_{Tr})}{r^2} = \frac{\dot{m}_Q}{2\pi (1 - \cos \theta_D)} \cdot \frac{\exp(-r/s_{Tr})}{r^2 s_{Tr}}.$$

3.4 Mathematische Diskussion der Modellgleichungen

3.4.1 Modellannahmen

Koeffizienten Die Größen

$$\mathbf{D} = \text{diag}(D_x, D_y, D_z) \quad D_{DL} \quad \lambda_L \quad \alpha_{ij} \quad c_{pi} \quad \varepsilon \quad w_L$$

werden für die analytische Betrachtung als konstant (und > 0) angenommen.

(In der numerischen Realisierung wird mit örtlichen Mittelwerten der auf physikalischer Grundlage berechneten Werte gearbeitet, die in bestimmten Zeitintervallen aktualisiert werden.)

3.4.2 Modellgleichungen

Gebiet Das System partieller Differentialgleichungen wird auf dem Reaktorinneren (der Wirbelschicht) \mathfrak{R} betrachtet. $\mathfrak{R} \in \mathbb{R}^3$ ist ein einfach zusammenhängendes konvexes Gebiet mit stückweise glattem Rand.

Zustandsgrößen Die Größen κ_F , κ_D , h_L , h_F , h_P werden auf \mathfrak{R} als Funktionen des Ortes und der Zeit betrachtet.

Im nachfolgenden Gleichungssystem, das aus der Bilanzierung dieser Größen abgeleitet ist, treten zweite Ableitungen aller dieser Größen nach den Ortsvariablen \underline{x} und erste Ableitungen nach der Zeit t auf. Daher ist von den entsprechenden Funktionen zu fordern, daß sie *in einem geeigneten Sinne* zweimal nach \underline{x} und einmal nach t differenzierbar sind.

Da es sich bei dem nachstehenden Gleichungssystem um ein parabolisches Anfangs-Randwertproblem handelt, ist zu erwarten, daß dessen Lösungen für $t > 0$ glatte Funktionen, d. h. Funktionen aus $C^\infty(\mathfrak{R})$ (wenn vorausgesetzt wird, daß Randfunktionen und Quellterme hinreichend regulär sind.)

Partielle Differentialgleichungen Auf dem Reaktorinneren \mathfrak{R} wird das Gleichungssystem

$$\frac{\partial \kappa_F}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla \kappa_F) - \dot{\kappa}_V + \dot{\kappa}_Q \quad (12)$$

$$\frac{\partial \kappa_D}{\partial t} = D_{DL}\Delta \kappa_D - w_L \frac{\partial \kappa_D}{\partial z} + \dot{\kappa}_V \quad (13)$$

$$\frac{\partial h_L}{\partial t} = \lambda_L \Delta \vartheta_L - w_L \frac{\partial h_L}{\partial z} + \dot{q}_V + \dot{q}_{PL} + \dot{q}_{FL} \quad (14)$$

$$\frac{\partial h_F}{\partial t} = \nabla(\mathbf{D}\nabla h_F) + \dot{q}_Q - \dot{q}_V + \dot{q}_{PF} - \dot{q}_{FL} \quad (15)$$

$$\frac{\partial h_P}{\partial t} = \nabla(\mathbf{D}\nabla h_P) - \dot{q}_{PL} - \dot{q}_{PF} \quad (16)$$

betrachtet.

Randbedingungen Der Rand der Wirbelschichtzone $\partial\mathfrak{R}$ zerfällt in drei Teilflächen, denen jeweils unterschiedliche Randbedingungen zugeordnet sind:

- die Bodenfläche (Anströmboden) \mathfrak{B}
- die Deckelfläche (freier Luftaustritt) \mathfrak{D}
- die Wandfläche (Stahlmantel) \mathfrak{M}

Auf \mathfrak{B} :

$$\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla \kappa_F = 0 \quad (17)$$

$$\kappa_D|_{\mathfrak{B}} = \kappa_{D,ein} \quad (18)$$

$$\vartheta_L|_{\mathfrak{B}} = \vartheta_{L,ein} \quad (19)$$

$$\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla h_F = 0 \quad (20)$$

$$\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla h_P = 0 \quad (21)$$

Auf \mathfrak{M} :

$$\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla \kappa_F = 0 \quad (22)$$

$$\underline{n} \cdot D_{DL}\nabla \kappa_D = 0 \quad (23)$$

$$\underline{n} \cdot \lambda_L \nabla \vartheta_L = \alpha_{LW}(\vartheta_W - \vartheta_L) \quad (24)$$

$$\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla h_F = \alpha_{FW}(\vartheta_W - \vartheta_F) \quad (25)$$

$$\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla h_P = \alpha_{PW}(\vartheta_W - \vartheta_P) \quad (26)$$

Auf \mathfrak{D} :

$$\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla \kappa_F = 0 \quad (27)$$

$$\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla h_F = 0 \quad (28)$$

$$\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla h_P = 0 \quad (29)$$

Zustandsgleichungen Die Zustandsgleichungen

$$\vartheta_P = C_1 h_P$$

$$\vartheta_F = C_2 \frac{h_F}{\kappa_F}$$

$$\begin{aligned}\vartheta_L &= \frac{C_4 h_L^*}{C_5 - h_L^*}, & h_L^* &= h_L - C_3 \kappa_D \\ \varphi &= C_6 \kappa_F\end{aligned}$$

sind stetig differenzierbare Funktionen ihrer Argumente (Ausnahme: ϑ_F nur für von 0 weg beschränktes κ_F).

Reaktionsterme Die nachfolgenden Reaktionsterme sind allesamt im Arbeitsbereich des Reaktors stetig differenzierbare Funktionen einer Anzahl von Zustandsgrößen.

$$\begin{aligned}\dot{\kappa}_V &= \dot{\kappa}_V(\kappa_F, \kappa_D, \vartheta_F, \vartheta_L) & \dot{q}_V &= \dot{q}_V(\kappa_F, \kappa_D, \vartheta_F, \vartheta_L) \\ \dot{q}_{PF} &= \dot{q}_{PF}(\kappa_F, \vartheta_P, \vartheta_F) & \dot{q}_{FL} &= \dot{q}_{FL}(\kappa_F, \vartheta_F, \vartheta_L) & \dot{q}_{PL} &= \dot{q}_{PL}(\kappa_F, \vartheta_P, \vartheta_L) \\ \dot{q}_{LW}^\square &= \dot{q}_{LW}(\vartheta_L, \vartheta_W) & \dot{q}_{FU}^\square &= \dot{q}_{FU}(\vartheta_F, \vartheta_W) & \dot{q}_{PW}^\square &= \dot{q}_{PW}(\vartheta_P, \vartheta_W)\end{aligned}$$

Quellterme Die von außen eingepprägten Quellterme $\dot{\kappa}_Q, \dot{q}_Q$ sind integrierbare Funktionen auf \mathfrak{R} :

$$\begin{aligned}\dot{\kappa}_Q &\in L^1(\mathfrak{R}) \quad \text{mit} \quad \|\dot{\kappa}_Q\|_{L^1} = \dot{m}_Q \\ \dot{q}_Q &\in L^1(\mathfrak{R}) \quad \text{mit} \quad \|\dot{q}_Q\|_{L^1} = \dot{m}_Q c_{pF} \vartheta_Q\end{aligned}$$

Aus physikalischen Gründen müssen $\dot{\kappa}_Q, \dot{q}_Q$ beschränkt sein ($\in L^\infty(\mathfrak{R})$). Die im Kapitel 3.3 berechneten Funktionen erfüllen diese Bedingung nicht.

Randterme Die am unteren Rand \mathfrak{B} eingepprägten Randfunktionen $\kappa_{D,ein}$ und $\vartheta_{L,ein}$ werden als ortsunabhängige beschränkte Funktionen der Zeit angenommen:

$$\begin{aligned}\kappa_{D,ein} &\in L^\infty([0, \infty)) \\ \vartheta_{L,ein} &\in L^\infty([0, \infty))\end{aligned}$$

3.4.3 Diskussion

Klassifizierung Die den Ableitungen zugeordneten Koeffizienten

$$\mathbf{D} = \text{diag}(D_X, D_Y, D_Z) \quad D_{DL} \quad \lambda_L \quad \alpha_{ij} \quad w_L$$

sind alle positive (bzw. positiv definite) Konstanten.

Das Gleichungssystem (12)–(16) enthält als Ableitungen höchster Ordnung zweite Ableitungen nach den räumlichen Koordinaten x, y, z mit positiven Koeffizienten, dagegen keine zweiten Ableitungen nach der Zeit t . Es treten keine gemischten Ableitungen auf.

Die den zweiten Ableitungen zugeordneten Koeffizientenmatrizen haben die Gestalt

$$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

mit $a, b, c > 0$.

Damit ist das System vom *parabolischen* Typ.

Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung Die mathematische Denkweise erfordert als erstes einen Beweis, daß das soeben gestellte Problem eine Lösung besitzt, und daß diese Lösung eindeutig ist.

Für den Ingenieur hingegen ist klar, daß für ein mit ausreichender Sorgfalt aufgestelltes Modell eine Lösung existiert, die sich im beobachtbaren Prozeßverhalten manifestiert.

Der scheinbare Widerspruch zwischen beiden Auffassungen löst sich in der Feststellung: Sollte das System der Modellgleichungen keine oder keine eindeutige Lösung haben, so ist das Problem nicht korrekt gestellt.

Ein Beweis für die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung kann im Rahmen dieser Arbeit nicht gegeben werden. Im folgenden wird unterstellt, daß eine solche Lösung existiert.

Funktionsräume Zu einem korrekt gestellten mathematischen Problem gehört eine Aussage darüber, in welchen Funktionsräumen Lösungen zu suchen sind. Von Ingenieuren werden Modellgleichungen üblicherweise unter der Voraussetzung aufgestellt, daß die betrachteten Funktionen hinreichend oft differenzierbar sind. Für gewisse Problemklassen (z. B. hyperbolische Gleichungen) existieren solche Lösungen nicht, obwohl die Modellgleichungen (bei entsprechender Interpretation) durchaus sinnvoll sind.

Das untersuchte Gleichungssystem ist vom parabolischen Typ, daher sind glatte (beliebig oft stetig differenzierbare) Lösungen zu erwarten.

4 Numerische Lösung

4.1 Diskretisierung

Der Ingenieur trennt nicht immer scharf zwischen einem kontinuierlichen Problem und seiner Diskretisierung. Häufig ist er sich der Möglichkeit verschiedener Diskretisierungen ein und desselben Problems – und deren Eigenschaften – wenig bewußt.

Daher soll zunächst ein kurzer Überblick über die zur Diskretisierung der Modellgleichungen zur Verfügung stehenden Verfahren gegeben werden.

4.1.1 Möglichkeiten der Diskretisierung

Raum-Zeit-Diskretisierung Horizontale oder Vertikale Linienmethode Zur numerischen Lösung (*genauer: zur endlichen Approximation*) eines parabolischen Anfangs-Randwertproblems ist eine Diskretisierung sowohl bezüglich der räumlichen als auch bezüglich der zeitlichen Koordinaten erforderlich.

Rothe-Methode oder Horizontale Linienmethode (HMOL): Das Problem wird zuerst bezüglich der Zeit diskretisiert, dies liefert eine Folge elliptischer Randwertaufgaben.

Linienmethode (MOL) oder Vertikale Linienmethode (VMOL): Es wird zunächst bezüglich der räumlichen Variablen diskretisiert, damit erhält man ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen.

Volldiskretisierung: Die Diskretisierung bezüglich räumlicher und zeitlicher Variablen erfolgt in einem Schritt.

Differenzenverfahren lassen sich als Volldiskretisierung ebenso deuten wie als Spezialfall von HMOL oder VMOL. Eine „echte“ Volldiskretisierung wird durch FEM mit speziellen Raum-Zeit-Elementen realisiert.

Räumliche Diskretisierung

Differenzenverfahren Die in der partiellen Differentialgleichung auftretenden Ableitungen werden durch finite Differenzen (Differenzenquotienten) approximiert.

Differenzenverfahren eignen sich für die Approximation von Ableitungen auf einem *kartesischen Gitter* mit konstanten Gitterweiten oder einem krummlinigen Gitter, das durch eine differenzierbare Transformation in ein kartesisches Gitter überführt werden kann.

Finite-Volumen-Verfahren Auf diskreten Volumina werden die Integrale der Größen bilanziert und Flüsse über die Grenzflächen dieser Volumina gegenübergestellt.

Dies entspricht einer unmittelbaren Umsetzung der im Ingenieurwesen üblichen Modellierung durch Bilanzierung am Volumenelement.

Finite Elemente Die gesuchten Lösungen werden durch eine endliche Menge von Basisfunktionen v_i approximiert, deren jede nur auf einer Teilmenge des Gebietes verschieden von Null ist.

Die Finite-Elemente-Diskretisierung besteht in der direkten Umsetzung der schwachen Formulierung

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle u, v \rangle = \langle \underline{w}u - \mathbf{D}\nabla u, \nabla v \rangle \quad \forall v \in V$$

des Problems im Raum V_h der diskreten Basisfunktionen.

Zeitliche Diskretisierung Die Diskretisierung bezüglich der Zeit soll nur für die (vertikale) Linienmethode betrachtet werden, die im Ergebnis der räumlichen Diskretisierung ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen (ODE) liefert.

Die Verfahren zur numerischen Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$\dot{u}(t) = f(u(t), t)$$

lassen sich grob in explizite und implizite Verfahren einteilen.

Explizite Verfahren verwenden für die Schätzung von $f(u)$ zu einem Zeitpunkt t_n ausschließlich Funktionswerte vergangener Zeitpunkte t_m ($m \leq n$). Sie sind daher einfach auszuführen, besitzen aber schlechte Stabilitätseigenschaften.

Implizite Verfahren erfordern die Lösung eines algebraischen Gleichungssystems in jedem Zeitschritt. Für nichtlineare Probleme (wie das vorliegende) ist dieses Gleichungssystem ebenfalls nichtlinear und somit nur näherungsweise zu lösen.

4.1.2 Räumliche Diskretisierung: Differenzenverfahren

Für die räumliche Diskretisierung der Modellgleichungen wurde eine Differenzen-Diskretisierung gewählt. Diese erfordert einen besonders geringen Aufwand bei der Implementierung.

Gitter und Gitterfunktionen Die partielle Differentialgleichung wird auf einem *kartesischen Gitter* mit den konstanten Gitterweiten $\underline{h} = (h_1, h_2, h_3)$ diskretisiert. Zu $(i, j, k) \in \{0, \dots, m_1\} \times \{0, \dots, m_2\} \times \{0, \dots, m_3\}$ werden Gitterpunkte \underline{x}_{ijk} als

$$\underline{x}_{ijk} = (ih_1, jh_2, kh_3)$$

definiert. Jedem Gitterpunkt \underline{x}_{ijk} wird mittels einer geeigneten Vorschrift ein Funktionswert U_{ijk} zugeordnet.

Diskrete Differenzenoperatoren Die Ableitungen nach den Raumkoordinaten ($\frac{\partial}{\partial z}$, Δ usw.) werden durch diskrete Differenzenoperatoren ($\mathcal{H}_{\underline{h}}^{\partial z}$, $\mathcal{H}_{\underline{h}}^{\Delta}$, ...) ersetzt. Diese Operatoren ergeben sich

- im Innern des Gitters H aus finiten Differenzen (Differenzenquotienten),
- für Randpunkte von H aus finiten Differenzen *und* den Randbedingungen.

Erste Ableitungen Zur Approximation der ersten Ableitungen stehen verschiedene diskrete Operatoren zur Verfügung:

Vorwärtsdifferenz

Rückwärtsdifferenz

$$u_x \approx \frac{U_{i+1,j,k} - U_{i,j,k}}{h_1} =: \mathcal{H}_{\underline{h}^+}^{\partial x} U_{i,j,k}$$

$$u_x \approx \frac{U_{i,j,k} - U_{i-1,j,k}}{h_1} =: \mathcal{H}_{\underline{h}^-}^{\partial x} U_{i,j,k}$$

Das zu diskretisierende Gleichungssystem enthält erste (Orts-)Ableitungen ausschließlich in Konvektionstermen der Form

$$\underline{w}(\underline{x}) \cdot \nabla u$$

mit konstantem Geschwindigkeitsvektor $\underline{w}(\underline{x}) = w_L \underline{e}_z$ ($w_L > 0$), also

$$w_L \frac{\partial u}{\partial z}.$$

Es ist bekannt, daß für das Advektionsproblem

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -w \frac{\partial u}{\partial z}$$

die *Upwind-Diskretisierung* stabile, die *Downwind-Diskretisierung* instabile Zeitschrittverfahren liefert. Daher wird für die Diskretisierung der ersten Ableitungen in z -Richtung die Upwind-Diskretisierung

$$w_L u_z \approx \mathcal{H}_{\underline{h}}^{w_L \partial z} U_{i,j,k} := w_L \mathcal{H}_{\underline{h}^-}^{\partial z} U_{i,j,k} \quad (w_L > 0)$$

verwendet.

Zweite Ableitungen Die zweiten Ableitungen werden durch

$$u_{xx} \approx \frac{U_{i-1,j,k} - 2U_{i,j,k} + U_{i+1,j,k}}{h_1^2} =: \mathcal{H}_{\underline{h}}^{\partial xx} U_{i,j,k}$$

approximiert, damit wird der Laplace-Operator zu

$$\begin{aligned} \Delta u &\approx \mathcal{H}_{\underline{h}}^{\Delta} U_{i,j,k} := \left(\mathcal{H}_{\underline{h}}^{\partial xx} + \mathcal{H}_{\underline{h}}^{\partial yy} + \mathcal{H}_{\underline{h}}^{\partial zz} \right) U_{i,j,k} \\ &= \frac{U_{i-1,j,k} - 2U_{i,j,k} + U_{i+1,j,k}}{h_1^2} + \frac{U_{i,j,k-1} - 2U_{i,j,k} + U_{i,j,k+1}}{h_2^2} + \frac{U_{i,j,k-1} - 2U_{i,j,k} + U_{i,j,k+1}}{h_3^2}. \end{aligned}$$

und mit einer Diffusionsmatrix *in Diagonalgestalt*

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_1 & 0 & 0 \\ 0 & D_2 & 0 \\ 0 & 0 & D_3 \end{pmatrix}$$

zu

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla u) &\approx \mathcal{H}_{\underline{h}}^{\nabla\mathbf{D}\nabla} U_{i,j,k} := \left(D_1 \mathcal{H}_{\underline{h}}^{\partial xx} + D_2 \mathcal{H}_{\underline{h}}^{\partial yy} + D_3 \mathcal{H}_{\underline{h}}^{\partial zz} \right) U_{i,j,k} \\ &= D_1 \frac{U_{i-1,j,k} - 2U_{i,j,k} + U_{i+1,j,k}}{h_1^2} + D_2 \frac{U_{i,j-1,k} - 2U_{i,j,k} + U_{i,j+1,k}}{h_2^2} + D_3 \frac{U_{i,j,k-1} - 2U_{i,j,k} + U_{i,j,k+1}}{h_3^2}. \end{aligned}$$

Diskretisierung der Randbedingungen Ohne Einschränkung der Allgemeinheit werden die diskreten Randbedingungen nur für den unteren Rand bezüglich der ersten Raumdimension (also bei $x_{0,j,k}$) betrachtet.

Dirichletsche Randbedingung $u|_{\partial G} = u_R$: Zum Gitter wird eine Zelle $\underline{x}_{-1,j,k}$ hinzugefügt, die den Wert $U_{-1,j,k} = u_R$ annimmt.

Daraus ergeben sich die diskreten Differenzenoperatoren

$$\mathcal{H}_{\underline{h}}^{w\partial x} U_{0,j,k} = \begin{cases} w \frac{U_{1,j,k} - U_{0,j,k}}{h_1} & (w < 0 : \text{outflow}) \\ 0 & (w = 0) \\ w \frac{U_{0,j,k} - U_R}{h_1} & (w > 0 : \text{inflow}) \end{cases}$$

und

$$\mathcal{H}_{\underline{h}}^{\partial xx} U_{0,j,k} = \frac{U_R - 2U_{0,j,k} + U_{1,j,k}}{h_1^2}$$

für $0 \leq j \leq m_2, 0 \leq k \leq m_3$.

von Neumann-Randbedingung $\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla u = f$: Die auswärts gerichtete Differenz $\mathcal{H}_{\underline{h}}^{\partial x} U_{0,j,k}$ wird durch die Randbedingung f bestimmt. Daraus ergeben sich

$$\mathcal{H}_{\underline{h}}^{w\partial x} U_{0,j,k} = \begin{cases} w \frac{U_{1,j,k} - U_{0,j,k}}{h_1} & (w < 0 : \text{outflow}) \\ 0 & (w = 0) \\ wf & (w > 0 : \text{inflow}) \end{cases}$$

und

$$\mathcal{H}_{\underline{h}}^{\partial xx} U_{0,j,k} = \frac{U_{1,j,k} - U_{0,j,k} - h_1 f}{h_1^2}.$$

Cauchy-Randbedingung $\underline{n} \cdot \mathbf{D}\nabla u = \alpha(u_R - u|_{\partial G})$: Wie oben wird die auswärts gerichtete Differenz $\mathcal{H}_{\underline{h}}^{\partial x} U_{0,j,k}$ durch $\alpha(u_R - u|_{\partial G})$ bestimmt, d. h.

$$\mathcal{H}_{\underline{h}}^{\partial x} U_{0,j,k} = \frac{\alpha}{D_1} (U_{0,j,k} - u_R).$$

Daraus ergeben sich

$$\mathcal{H}_{\underline{h}}^{w\partial x} U_{0,j,k} = \begin{cases} w \frac{U_{1,j,k} - U_{0,j,k}}{h_1} & (w < 0 : \text{outflow}) \\ 0 & (w = 0) \\ w \frac{\alpha}{D_1} (U_{0,j,k} - u_R) & (w > 0 : \text{inflow}) \end{cases}$$

und

$$\mathcal{H}_{\underline{h}}^{\partial xx} U_{0,j,k} = \frac{U_{1,j,k} - U_{0,j,k} - \frac{h_1 \alpha}{D_1} (U_{0,j,k} - u_R)}{h_1^2}.$$

4.1.3 Zeitliche Diskretisierung: Euler-Vorwärts-Verfahren

Das aus der räumlichen Diskretisierung gewonnene System gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$\dot{\mathbf{U}} = \mathbf{f}(\mathbf{U}) \quad \text{mit } \mathbf{U} : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{m_1 \times m_2 \times m_3 \times 5}$$

kann mit einem der bekannten Verfahren (Euler, Runge-Kutta usw.) numerisch gelöst werden.

In der vorliegenden Arbeit wurde als einfachste Variante das *explizite* Euler-Verfahren (Euler-Vorwärts-Verfahren) gewählt. Angesichts der umfangreichen Modellgleichungen fiel vor allem seine *übersichtliche* Implementierung ins Gewicht.

Euler-Vorwärts-Verfahren Die kontinuierliche Funktion \mathbf{U} wird auf einer Folge von Zeitpunkten $\{t_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ ($t_{i+1} > t_i$) diskretisiert: jedem t_i wird ein $U_i \in \mathbb{R}^{m_1 \times m_2 \times m_3 \times 5}$ Das Euler-Vorwärts-Verfahren wird nun durch

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + (t_{n+1} - t_n)\mathbf{f}(\mathbf{U}^n)$$

definiert.

Nachteilig ist die dem expliziten Verfahren innewohnende Beschränkung der Zeitschrittweite von $\Delta t \sim (\Delta x)^2$. Diese kann durch Verwendung eines impliziten Löser überwunden werden; dem Gewinn an Zeitschrittweite steht aber der recht große Aufwand gegenüber.

4.2 Beispielrechnung

Das System der Bilanzgleichungen wird in der vorliegenden Form (d. h. instationär und in drei Raumdimensionen) numerisch gelöst. (In den Arbeiten von S. Heinrich [6] und S. Thomas [15] wurde die Numerik nur für Spezialfälle ausgeführt: Reduktion auf eine Raumdimension bzw. stationäre Lösung in zwei Raumdimensionen.)

Für die räumliche Diskretisierung wird ein Differenzenverfahren auf einem kartesischen Gitter verwendet, der Einfachheit halber wird mit einem quadratischen (anstatt kreisförmigen) Reaktorquerschnitt gerechnet. Die Diskretisierung bezüglich der Zeit wird durch das Euler-Vorwärts-Verfahren vorgenommen.

4.2.1 Verwendete Diskretisierung

Gitter Für die Ortskoordinaten wird ein kartesisches Gitter mit $20 \times 20 \times 15$ Punkten verwendet.

Zuordnung zwischen kontinuierlichen und diskreten Werten Eine auf dem Gebiet $G \subset \mathbb{R}^3$ (dem Inneren des Wirbelschichtreaktors) gegebene kontinuierliche (L^1 -) Funktion

$$\begin{aligned} u : G &\rightarrow \mathbb{R} \\ \underline{x} &\mapsto u(\underline{x}) \end{aligned}$$

wird durch die Bildung von Zellenmittelwerten in eine diskrete Funktion

$$\begin{aligned} U : H &\rightarrow \mathbb{R} \\ (i, j, k) &\mapsto U(i, j, k) \end{aligned}$$

auf den Gitterpunkten $H = \{1, \dots, \mathbf{m}_1\} \times \{1, \dots, \mathbf{m}_2\} \times \{1, \dots, \mathbf{m}_3\}$ überführt. (Dies betrifft das von der Düse erzeugte Quellenfeld; die Anfangsbedingungen werden konstant gesetzt, sodaß sich die Ausrechnung der diskreten Funktionswerte erübrigt.)

Die umgekehrte Zuordnung einer kontinuierlichen Funktion u zu diskreten Gitterwerten U

- erfolgt bei der grafischen Darstellung (durch MATLAB) durch bilineare Interpolation (*bilinear*, da nur Werte auf einer Schnittfläche dargestellt werden)
- wird bei der Berechnung von Integralmittelwerten formal durch Treppenfunktionen vorgenommen (d. h. Integralmittelwerte werden durch einfache Summation berechnet)
- wird sonst nicht benötigt.

Approximation der Ableitungen Die räumlichen Ableitungen werden durch die im Abschnitt 4.1.2 eingeführten Differenzenoperatoren diskretisiert.

Für die *räumlich diskretisierten* Funktionen

$$K_F, K_D, H_L, H_F, H_P : \mathbb{R}^{\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2 \times \mathbf{m}_3} \rightarrow [0, \infty)$$

ergibt sich aus (12)–(16) und (17)–(29) das System gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t} K_F = \mathcal{H}_h^{\nabla \mathbf{D} \nabla} K_F - \dot{K}_V + \dot{K}_Q \quad (30)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} K_D = D_{DL} \mathcal{H}_h^{\Delta} K_D - \mathcal{H}_h^{w_L \partial z} K_D + \dot{K}_V \quad (31)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H_L = \lambda_L \mathcal{H}_h^{\Delta} H_L - \mathcal{H}_h^{w_L \partial z} H_L + \dot{Q}_V + \dot{Q}_{PL} + \dot{Q}_{FL} \quad (32)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H_F = \mathcal{H}_h^{\nabla \mathbf{D} \nabla} H_F + \dot{Q}_Q - \dot{Q}_V + \dot{Q}_{PF} - \dot{Q}_{FL} \quad (33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H_P = \mathcal{H}_h^{\nabla \mathbf{D} \nabla} H_P - \dot{Q}_{PL} - \dot{Q}_{FL}. \quad (34)$$

Dieses Gleichungssystem wird mit dem Euler-Vorwärts-Verfahren gelöst.

Zeitschrittweite Für das vorliegende Problem ist (mir) kein Stabilitätskriterium bezüglich der Zeitschrittweite bekannt.

Für den Advektionsterm $-w \frac{\partial h}{\partial z}$: Für die Upwind-Diskretisierung der Advektionsgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -w \frac{\partial u}{\partial z}$$

gilt als Stabilitätskriterium die Bedingung

$$\left| w \frac{\Delta t}{\Delta z} \right| \leq 1. \quad (35)$$

Für den Diffusionsterm $\nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla h)$: Für eine explizite Diskretisierung angewendet auf die Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \Delta u$$

gilt die Schrittweitenbeschränkung

$$\left| \frac{\lambda \Delta t}{(\Delta x)^2} \right| \leq 1. \quad (36)$$

Da die obigen Gleichungen Spezialfälle des untersuchten Problems (für den Fall, daß gewisse Parameter verschwinden) darstellen, ist es sinnvoll, die Bedingungen (35) und (36) bei der numerischen Rechnung zur Schrittweitenbeschränkung zu verwenden.

4.2.2 Parameter

Geometrische Abmessungen des Apparates

Länge und Breite	l_{App}	$0,3545m$
Querschnittsfläche	A_{App}	$0,1257m^2$
Höhe der Wirbelschicht	h_{WS}	$0,3m$

Bettmaterial Glaskugeln

Gesamtmasse	m_P	$18kg$
Partikeldurchmesser	d_P	$1,16mm$
Dichte	ρ_P	$2471 \frac{kg}{m^3}$
spezifische Wärmekapazität	c_{pP}	$750 \frac{J}{kgK}$
Wärmeleitwert	λ_P	$0,8 \frac{W}{mK}$

Trägerluft

Luftmassenstrom	$\dot{m}_{L,ein}$	$0,3 \frac{kg}{s}$
Temperatur	$\vartheta_{L,ein}$	$80^\circ C$
Anfangsfeuchte	$Y_{L,ein}$	$0,008 \frac{kg}{kg}$

Düse

Position	\underline{x}_D	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}l_{App} \\ \frac{1}{2}l_{App} \\ \frac{1}{5}h_{WS} \end{pmatrix}$
Strahlrichtung	\underline{n}_D	$(0,0,1)^T$ (d. h. nach oben)
Halber Öffnungswinkel des Strahles	θ_D	30°

Eingedüste Flüssigkeit

Quellstrom (reines Wasser)	\dot{m}_Q	$4,17 \cdot 10^{-3} \frac{kg}{s}$
Temperatur	ϑ_Q	$20^\circ C$

Weitere Parameter

Wandtemperatur	ϑ_W	$75^\circ C$
Flüssigkeitsfilmdicke	d_F	$100\mu m$
Abscheidegrad	η_A	$0,08$
Koeffizient	f_α	10

Anfangswerte für die Simulation

Flüssigkeitskonzentration	κ_F	$0 \frac{kg}{m^3}$
Dampfkonzentration	κ_D	$0 \frac{kg}{m^3}$
Lufttemperatur	ϑ_L	$20^\circ C$
Flüssigkeitsfilmtemperatur	ϑ_F	$20^\circ C$
Partikeltemperatur	ϑ_P	$20^\circ C$

Simulationsergebnisse

Grafische Darstellungen ausgewählter Simulationsergebnisse finden sich im Anhang C.

Literatur

- [1] Rolf-Dieter Becher. *Untersuchung der Agglomeration von Partikeln bei der Wirbelschicht-Sprühgranulation*. Dissertation, Universität Karlsruhe, 1997. VDI Fortschrittsberichte Reihe 3 Nr. 500.
- [2] Ernst Doering und Herbert Schedwill. *Grundlagen der technischen Thermodynamik*. B. G. Teubner, Stuttgart, 4. Auflage, 1994.
- [3] Gnielinski et. al. *Verdampfung, Kristallisation, Trocknung*. Vieweg-Verlag, 1993.
- [4] B. Glück. *Zustands- und Stoffwerte – Wasser, Dampf, Luft – Verbrennungsrechnung*. VEB Verlag für Bauwesen, Berlin, 1986.
- [5] W.D. Goroško, R.B. Rozenbaum und O.M. Todes. *Neft i Gaz*, 1, 125, 1958.
- [6] Stefan Heinrich. Fluidized bed spray granulation — a new model for the description of particle wetting and of temperature and concentration distribution. *Chemical Engineering and Processing*, 38, 635–663, 1999.
- [7] Y. Kawase und M. Moo-Young. Gas-bubble hold-up and axial dispersion coefficient of emulsion phases in fluidised beds. *Can. Chem. Eng.*, 65(3), 505–507, 1987.
- [8] Friedrich Löffler. *Staubabscheiden*. Georg Thieme Verlag, Stuttgart – New York, 1988.
- [9] H. Martin. Heat transfer between gas-fluidized beds of solid particles and the surfaces of immersed heat exchanger elements i. *Chem. Engng. Progr.*, 18, 157–169, 1984.
- [10] Dieter Reppmann. *Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Eindüsung von Flüssigkeiten in eine Wirbelschicht*. Dissertation, TU Magdeburg, 1990.
- [11] P. N. Rowe, K. T. Claxton und J. B. Lewis. Heat and mass transfer from a single sphere to fluid flowing through an array. *Transct. Instn. Chem. Engrs.*, 43, T 321–T 331, 1965.
- [12] R. Schirmer. *Die Diffusionszahl von Wasserdampf-Luftgemischen und die Verdampfungsgeschwindigkeit*, Band 170 von *Z. VDI Beiheft Verfahrenstechnik*. 1938.
- [13] E. U. Schlünder und E. Tsotsas. *Wärmeübertragung in Festbetten, durchmischten Schüttgütern und Wirbelschichten*. Georg Thieme Verlag, Stuttgart – New York, 1988.
- [14] D. Shi. *Fluiddynamik und Wärmeübergang in einer zirkulierenden Wirbelschicht*. Dissertation, ETH Zürich, 1996.
- [15] Sascha Thomas. Theoretische und experimentelle Untersuchung der Temperatur- und Konzentrationsverteilung in flüssigkeitsbedüsten Gas/Feststoff-Wirbelschichten. Diplomarbeit, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Institut für Apparate- und Umwelttechnik, 1998.

Anhang

A Nomenklatur

A.1 Koordinaten

Kartesische Raumkoordinaten x, y, z [m]

Kugelkoordinaten r [m], ϕ, θ [rad]

$$\xi = r \cos \phi \cos \theta$$

$$\eta = r \sin \phi \cos \theta$$

$$\zeta = r \sin \theta$$

Zeit t [s]

A.2 Differentialoperatoren

Nabla *In kartesischen Koordinaten*

$$\nabla u = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Laplace *In kartesischen Koordinaten*

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

A.3 Indizes

AP	Austragspunkt	G	Flüssigkeitsfilm	Tr	Tropfen
App	Apparat	L	(trockene) Luft	U	Umgebung
D	Dampf; Düse	max	maximal	W	Wand(-fläche)
ein	Zustrom (Trägerluft)	mf	Minimalfluidisierung	WP	Wirbelpunkt
eff	effektiv	P	Partikel	WS	Wirbelschicht
ε	Porosität	Q	Quellstrom	0	Leerrohr
F	Flüssigkeit	S	Feststoff (=Partikel)	∞	Sättigung

A.4 Flächen- und Volumenbezug

Für eine Größe $U : \mathbb{R}^3 \ni G \rightarrow R$ werden die folgenden abgeleiteten Größen eingeführt:
volumenbezogene Größe

$$u := \frac{\partial U}{\partial V}$$

flächenbezogene Größe

$$u^\square := \frac{\partial U}{\partial A}$$

A.5 Größen und Einheiten

A	Fläche	$[m^2]$
A^*	spezifische Oberfläche	$[m^{-1}] = \left[\frac{m^2}{m^3} \right]$
α	Wärmeübergangskoeffizient	$\left[\frac{W}{m^2 K} \right]$
β	Stoffübergangszahl	$\left[\frac{m}{s} \right]$
c_p	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	$\left[\frac{J}{kg K} \right]$
d	Durchmesser	$[m]$
d_F	Filmdicke	$[m]$
D, \mathbf{D}	Diffusions-, Dispersionskoeffizient, Dispersionsmatrix	$\left[\frac{m^2}{s} \right]$
ε	relatives Lückenvolumen	$[1] = \left[\frac{m^3}{m^3} \right]$
ε^*	Feststoffanteil	$[1] = \left[\frac{m^3}{m^3} \right]$
f_α	$= \alpha/\alpha$	$[1]$
g	Erdbeschleunigung	$9,81 \frac{m}{s^2}$
h	volumenbezogene Enthalpie	$\left[\frac{J}{m^3} \right]$
h	Höhe	$[m]$
Δh_V	spezifische Verdampfungswärme	$\left[\frac{J}{kg} \right]$
κ	Konzentration	$\left[\frac{kg}{m^3} \right]$
$\dot{\kappa}$	Konzentrationsstrom	$\left[\frac{kg}{m^3 s} \right]$
λ	Wärmeleitkoeffizient	$\left[\frac{W}{m K} \right]$
m	Masse	$[kg]$
\dot{m}	Massenstrom	$\left[\frac{kg}{s} \right]$
M	molare Masse	$\left[\frac{kg}{mol} \right]$
ν	kinematische Viskosität	$\left[\frac{m^2}{s} \right]$
p	Druck	$[Pa] = \left[\frac{N}{m^2} \right]$
φ	Benetzungsgrad	$[1] = \left[\frac{m^2}{m^2} \right]$
q	volumenbezogene Wärme	$\left[\frac{J}{m^3} \right]$
\dot{q}^\square	flächenbezogener Wärmestrom	$\left[\frac{W}{m^2} \right]$
\dot{q}	volumenbezogener Wärmestrom	$\left[\frac{m^2 s}{m^3 s} \right]$
R	allgemeine Gaskonstante	$\left[\frac{J}{mol \cdot K} \right]$
R_i	spezielle Gaskonstante	$\left[\frac{J}{kg \cdot K} \right]$
ρ	Dichte	$\left[\frac{kg}{m^3} \right]$
T	Temperatur	$[K]$
ϑ	Temperatur	$[^\circ C]$
V	Volumen	$[m^3]$
w	Geschwindigkeit	$\left[\frac{m}{s} \right]$
Y	Feuchte	$[1] = \left[\frac{kg}{kg} \right]$

A.6 Dimensionslose Kennzahlen

Archimedes

$$Ar = \frac{gd^3(\rho_S - \rho_L)}{\nu_L^2 \rho_L}$$

Fourier

$$Fo = \frac{\lambda t}{\rho c_p d^2}$$

Grashof

$$Gr = \frac{gh^3}{\nu_L^2} \beta_T \Delta T$$

Knudsen

$$Kn = \frac{\delta_L}{d_P}$$

Lewis

$$Le = \frac{\beta \rho c_p}{\alpha}$$

Nusselt

$$Nu = \frac{\alpha d}{\lambda}$$

Peclet

$$Pe = \frac{wd}{D} = Re \cdot Sc$$

Prandtl

$$Pr = \frac{c_p \nu \rho}{\lambda}$$

Rayleigh

$$Ra = Gr \cdot Pr$$

Reynolds

$$Re = \frac{wd}{\nu}$$

Schmidt

$$Sc = \frac{\nu}{D}$$

Sherwood

$$Sh = \frac{\beta d}{D}$$

B Anhang zur Physik

B.1 Stoffwerte

Stoffwerte als Funktion der Temperatur ϑ [$^{\circ}C$]

B.1.1 Eigenschaften der Gase

Gaskonstanten

Allgemeine Gaskonstante

$$R = 8,314510 \frac{J}{mol K}$$

Molare Massen und spezielle Gaskonstanten

$$\begin{array}{lll} M_W = 0,0180 \frac{kg}{mol} & \frac{M_W}{M_L} = 0,6215 & R_D = 461,9 \frac{J}{kg K} \\ M_L = 0,02896 \frac{kg}{mol} & & R_L = 287,1 \frac{J}{kg K} \end{array}$$

Approximationsformeln nach [4] Fehler unter 0,6% bei $-20^{\circ}C \leq \vartheta \leq 200^{\circ}C$ und $p = 0,1 MPa$.

Spezifische Wärmekapazität, trockene Luft $\left[\frac{kJ}{kgK} \right]$

$$c_{pL} = 1,006256 + 2,120536 \cdot 10^{-5}\vartheta + 4,180195 \cdot 10^{-7}\vartheta^2 - 1,521916 \cdot 10^{-10}\vartheta^3$$

Spezifische Wärmekapazität, Dampf $\left[\frac{kJ}{kgK} \right]$

$$c_{pD} = 1,858449 + 1,004405 \cdot 10^{-3}\vartheta - 6,275304 \cdot 10^{-6}\vartheta^2 + 1,340852 \cdot 10^{-7}\vartheta^3$$

Spezifische Wärmekapazität, Wasser $\left[\frac{kJ}{kgK} \right]$

$$c_{pF} = 4,174785 + 1,785308 \cdot 10^{-5}\vartheta - 5,097403 \cdot 10^{-7}\vartheta^2 + 4,216721 \cdot 10^{-8}\vartheta^3$$

Wärmeleitkoeffizient für Luft $\left[\frac{W}{mK} \right]$

$$\lambda_L = 24,5211 \cdot 10^{-3} + 7,501414 \cdot 10^{-5}\vartheta - 2,593344 \cdot 10^{-8}\vartheta^2 + 5,292884 \cdot 10^{-11}\vartheta^3$$

Kinematische Viskosität für Luft $\left[\frac{m^2}{s} \right]$

$$\nu_L = 1,337125 \cdot 10^{-5} + 8,454018 \cdot 10^{-8}\vartheta + 1,232143 \cdot 10^{-10}\vartheta^2 - 3,348214 \cdot 10^{-14}\vartheta^3$$

Prandtl-Zahl für Luft [1]

$$Pr_L = 0,702 - 2,629487 \cdot 10^{-4}\vartheta + 1,055288 \cdot 10^{-6}\vartheta^2 - 1,522436 \cdot 10^{-9}\vartheta^3$$

Diffusionskoeffizient von Wasserdampf in Luft $\left[\frac{m^2}{s}\right]$
 Nach [12]: [13, (2.52)]

$$D_L = 26 \cdot 10^{-6} \left(\frac{\vartheta + 273,15}{273,15}\right)^{1,81} \quad D_L = \frac{2,252}{p/Pa} \left(\frac{T}{273}\right)^{1,81}$$

Spezifische Verdampfungsenthalpie des Wassers [13, (2.54)]

$$\begin{aligned} \Delta h_{V0} &= 2,5016 \cdot 10^6 \frac{J}{kg} \\ \Delta h_{V\vartheta} &= \Delta h_{V0} + (c_{pD} - c_{pW})\vartheta \\ &= (2,5016 \cdot 10^6 - 2,34 \cdot 10^3\vartheta) \frac{J}{kg} \end{aligned}$$

B.1.2 Sättigungsdampfdruck des Wassers

„**Exakte**“ **Formel** Die Stoffwerte der *Internationalen Wasserdampf tabel* [2] werden durch die Formel

$$\beta(\Theta) = \exp\left(\frac{1}{\Theta} \frac{\sum_{\nu=1}^5 k_{\nu}(1-\Theta)^{\nu}}{1 + k_6(1-\Theta) + k_7(1-\Theta)^2} - \frac{1-\Theta}{k_8(1-\Theta)^2 + k_9}\right)$$

beschrieben, mit der Normierung

$$\beta = \frac{p}{p_k}, \quad \Theta = \frac{T}{T_k}$$

auf den kritischen Punkt

$$p_k = 221,2 \text{ bar}, \quad T_k = 647,3 \text{ K}$$

und den Konstanten

$$\begin{aligned} k_1 &= -7,691234564 & k_4 &= 6,423285504 \cdot 10^1 & k_7 &= 2,097506760 \cdot 10^1 \\ k_2 &= -2,608023696 \cdot 10^1 & k_5 &= -1,189646225 \cdot 10^2 & k_8 &= 10^9 \\ k_3 &= -1,681706546 \cdot 10^2 & k_6 &= 4,167117320 & k_9 &= 6. \end{aligned}$$

Näherungsformeln. In der Literatur finden sich häufig Näherungsformeln der Form $p_{D,\infty} = A \exp \frac{B}{\vartheta+C}$, die im relevanten Temperaturbereich zwischen 0 und 100°C (273,15 K $\leq T \leq 373,16$ K) von ausreichender Genauigkeit sind:

Druck in Pa [13]:

$$\frac{p_{D,\infty}}{Pa} = \exp\left(23,462 - \frac{3978,205}{\vartheta + 233,349}\right)$$

Druck in Torr:

Druck in atm:

$$\frac{p_{D,\infty}}{133,32Pa} = \exp\left(18,5848 - \frac{3984,92268}{\vartheta + 233,426}\right) \quad \frac{p_{D,\infty}}{101300Pa} = \exp\left(12,031 - \frac{4026,42}{\vartheta + 235}\right)$$

In [15] wurde die folgende Näherung verwendet [13, (2.53)]:

$$p_{D,\infty} = \left(\frac{T}{T_V}\right)^{5,471} \exp\left(-5143,32 \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_V}\right] + 0,01656(T_V(p) - T)\right)$$

mit $T_V = T_V(p) = 373,16$ K (Verdampfungstemperatur beim Systemdruck).

B.1.3 Bettmaterial

Bettmaterial: Glaskugeln

Durchmesser $1,16\text{mm}$

Dichte $\rho = 2471 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$

Spezifische Wärmekapazität $c_p = 750 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}$

Wärmeleitwert $\lambda = 0,8 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$

B.2 Empirische Formeln

B.2.1 Strömungsmechanik

Reynolds-Zahl im Wirbelpunkt $Re_{WP}(Ar)$ (Minimalfluidisation mf)

nach [5]

[1], nach [9]:

$$Re_{WP} = \frac{Ar}{1400 + 5,22\sqrt{Ar}} \quad Re_{mf} = 42,9(1 - \varepsilon_{mf}) \left(\sqrt{1 + \frac{\varepsilon_{mf}^3}{(1 - \varepsilon_{mf})^2} \frac{Ar}{3214}} - 1 \right)$$

mit $\varepsilon_{mf} = 0,385$

Reynolds-Zahl im Austragspunkt $Re_{AP}(Ar)$

nach [5]

in [1]

$$Re_{AP} = \frac{Ar}{18 + 0,61\sqrt{Ar}} \quad Re_{AP} = \sqrt{\frac{4}{3}Ar}$$

Relatives Lückenvolumen Die Abhängigkeit des relativen Lückenvolumens ε von der Leerrohrgeschwindigkeit der Luft wird durch

nach [5]

in [1]

$$\varepsilon = \left[\frac{18Re + 0,36Re^2}{Ar} \right]^{0,21} \quad \varepsilon = \left(\frac{w_{Leer}}{w_{AP}} \right)^{1/n}$$
$$n = \frac{\ln \frac{Re_{mf}}{Re_{AP}}}{\ln \varepsilon_{mf}}$$

beschrieben.

B.3 Berechnung der thermodynamischen Koeffizienten

B.3.1 Stoffübergangszahl

Die Stoffübergangszahl β wird aus einer Approximationsformel für die Sherwood-Zahl

$$Sh = \frac{\beta d_P}{D_L}$$

berechnet: Nach [11] gilt

$$Sh = 2 + 0,72\sqrt{Re}\sqrt[3]{Sc}$$

mit der (temperaturabhängigen) Schmidt-Zahl

$$Sc = \frac{\nu_L}{D_L}$$

B.3.2 Wärmeübergangskoeffizienten

Zur Berechnung der Wärmeübergangskoeffizienten α für die verschiedenen Grenzflächen werden empirische Formeln für die Nusselt-Zahl $Nu = \frac{\alpha d}{\lambda}$ verwendet.

Die charakteristische Länge d ist im allgemeinen der Partikeldurchmesser d_P ; der Wärmeleitkoeffizient λ der Luft (bzw. der Flüssigkeit) hängt lediglich von der Temperatur ab (siehe Stoffwerte).

Luft–Flüssigkeitsfilm α_{FL} , **Luft–Partikel** α_{PL} (Nach [13]) Beide Koeffizienten werden als gleich angenommen, da die gleichen Strömungsbedingungen vorliegen. (Der Wärmetransport durch Verdunstung an der Flüssigkeitsoberfläche wird gesondert berücksichtigt.)

Für die Nusselt-Zahl

$$Nu = \frac{\alpha_{PL} d_P}{\lambda_L}$$

wird mit der Näherung

$$\begin{aligned} Nu &= (1 + 1,5\epsilon^*) Nu_{Einzelkugel} \\ Nu_{Einzelkugel} &= 2 + \sqrt{Nu_{lam}^2 + Nu_{turb}^2} \\ Nu_{lam} &= 0,664 Pr^{1/3} Re_\epsilon^{1/2} \\ Nu_{turb} &= 0,037 \frac{Re_\epsilon^{0,8} Pr}{1 + 2,443 Re_\epsilon^{-0,1} (Pr^{2/3} - 1)} \end{aligned}$$

gerechnet.

Partikel–Flüssigkeitsfilm α_{PF} Der Wärmeübergangskoeffizient α_{PF} für den Übergang Partikel–Flüssigkeitsfilm wird lediglich durch den von Reppmann [10] eingeführten Faktor

$$f_\alpha = \frac{\alpha_{PF}}{\alpha_{FL}}$$

geschätzt.

Partikel–Wand Dem Wärmeübergang vom Bettmaterial an die Wand liegt eine Reihe von Mechanismen zugrunde [13, 14], dementsprechend setzt sich die Wärmeübergangszahl α_{PW} für diesen Wärmeübergang aus verschiedenen Größen zusammen.

Wirbelschicht in Wandnähe Der Feststoffanteil in der Wirbelschicht $\varphi = 1 - \varepsilon$ ist in Wandnähe größer als im Kernbereich. Die Ortsabhängigkeit der Porosität soll bei der Betrachtung des Wärmeübergangs an der Wand berücksichtigt werden (während sie ansonsten vernachlässigt wird). Die Mittelwerte von ε und φ sollen im folgenden mit $\bar{\varepsilon}$, $\bar{\varphi}$ bezeichnet werden. Der Feststoffanteil in Wandnähe φ_W läßt sich nach [14] durch

$$\frac{\varphi_W}{\bar{\varphi}} = \frac{\bar{\varepsilon}^4 + 6\varphi_{mf}}{\bar{\varepsilon}^4 + 6\bar{\varphi}} \approx 1,1$$

berechnen.

Die Partikel bewegen sich in Wandnähe mit einer mittleren Partikelschwankungsgeschwindigkeit

$$c' = \sqrt{\frac{g \cdot d_P (\varphi_{mf} - \bar{\varphi})}{3(\varphi_W + 0,05)}}.$$

Innerer Wärmeübergangskoeffizient Die Nusselt-Zahl $Nu_{P,i}$ für den Wärmeübergang vom Partikelinnern an die Partikeloberfläche wird nach [9] durch

$$Nu_{P,i} = 4 \frac{\lambda_P}{\lambda_L} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{\pi Fo_P}} \right)$$

berechnet; darin ist

$$Fo_P = \frac{\lambda_P \tau_V}{\rho_P c_{pP} d_P^2}$$

die Fourier-Zahl der Partikel,

$$\tau_V = \frac{d_P}{c'} \sqrt[3]{\frac{36\pi}{\varphi_W}}$$

die mittlere Verweilzeit der Partikeln in Wandnähe.

Wärmeübergangskoeffizient des Gasfilms Die Nusselt-Zahl für den Wärmeübergang durch den die Partikeloberfläche bedeckenden Gasfilm berechnet sich zu

$$Nu_{WP,o} = 4 \left((2Kn + 1) \ln \left(\frac{1}{2Kn} + 1 \right) - 1 \right)$$

mit der *Knudsen-Zahl*

$$Kn = \frac{\delta_L}{d_P},$$

worin δ_L die *modifizierte freie Weglänge* der Gasmoleküle ist.

Die modifizierte freie Weglänge δ_L ergibt sich aus der *effektiven freien Weglänge*

$$\Lambda_L = \sqrt{2\pi R_L T} \frac{\lambda_L}{p(2c_{pL} - R_L)}$$

durch die Korrektur

$$\delta_L = 2 \left(\frac{2 - \gamma}{\gamma} \right) \Lambda_L$$

mit dem *Akkommodationskoeffizienten* γ (Luft bei Umgebungstemperatur: $\gamma_L \approx 0,9$), der durch

$$\log \left(\frac{1}{\gamma} - 1 \right) = 0,6 - \frac{1000K}{T} + 1 \quad \text{mit } C = 2,8 \text{ für Luft}$$

approximiert wird.

Wärmeübergang Partikel–Wand Der Leitwiderstand des Wärmeübergangs Partikel–Wand (für ruhende Partikel) setzt sich aus den Leitwiderständen des Partikelinnerns und des Gasfilms zusammen:

$$\frac{1}{\alpha_{PW,0}} = \frac{1}{\alpha_{PW,i}} + \frac{1}{\alpha_{PW,o}}$$

Wärmeübergang zwischen den Partikeln Der Koeffizient α_{PP} für den Wärmeübergang zwischen den Partikeln wird mit

$$\alpha_{PP} = \frac{1}{6} \varphi_W \cdot c' \cdot \rho_P \cdot c_{pP}$$

angegeben.

Wärmeübergang aus der Partikelkonvektion Der Wärmetransport vom Bettmaterial an die Wand erfolgt durch Partikelkonvektion, wobei die wirksame (bedeckte) Wandfläche von der Porosität in Wandnähe abhängt.

Unter Berücksichtigung des von Partikeln bedeckten Flächenanteils der Wand

$$f_P = \sqrt[3]{\frac{9\pi}{16} \varphi_W^2}$$

ergibt sich der Wärmeübergangskoeffizient für die Partikelkonvektion zu

$$\alpha_{PW,K} = \alpha_{PP} \left(1 - \exp\left(-\frac{\alpha_{PW,0}}{\alpha_{PP}} f_P B\right) \right)$$

($B = 0,28$ Anpassungsparameter).

Strahlung Der Strahlungsanteil des Wärmeübergangs von den Partikeln an die Wand wird durch die Wärmeübergangszahl

$$\alpha_{PW,S} = \varepsilon_S \sigma_S \frac{T_E^4 - T_W^4}{T_P - T_W}$$

beschrieben; darin sind

$$T_E = \frac{T_W + T_P}{2}$$

die mittlere Emissionstemperatur der Wandgrenzschicht, ε_S die Emissionszahl des Wandmaterials und $\sigma_S = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2K}$ die Stefan-Boltzmann-Konstante.

Partikel–Wand insgesamt Der aus Partikelkonvektion und Strahlung resultierende Wärmestrom wird durch die Wärmeübergangszahl

$$\alpha_{PW} = \alpha_{PW,K} + \alpha_{PW,S}$$

beschrieben.

Luft–Wand α_{LW}

Die Nusselt-Zahl

$$Nu_{LW} = \frac{\alpha_{LW} d_P}{\nu_L}$$

wird nach [14] berechnet durch

$$Nu_{LW} = (0,005 Re_t + 0,06 Re_t^{1/3}) Pr^{1/3}$$

mit der Sink-Reynoldszahl Re_t nach [9]

$$Re_t = \frac{50}{3} \left[\sqrt{1 + \frac{1}{10} \sqrt{\frac{4}{3} Ar}} - 1 \right]^2$$

mit Ar Archimedes-Zahl und Pr Prandtl-Zahl.

Wand-Umgebung α_{WU} Der Wärmeübergang von der Apparatewand an die Umgebungsluft findet auf dem Mantel eines senkrecht stehenden Zylinders mit der Höhe h_{WS} und dem Durchmesser d_{App} statt. Die Nusselt-Zahl

$$Nu = \frac{\alpha_{WU} h_{WS}}{\lambda_L}$$

wird angenähert durch

$$Nu = Nu_{Platte} + 0,97 \frac{h_{WS}}{d_{App}},$$

worin Nu_{Platte} die Nusselt-Zahl für die Umströmung einer senkrecht stehenden Platte ist. Für laminare Strömung ($Ra < 10^9$) gilt

$$Nu_{Platte} = 0,677 \left(\frac{Pr^2 Gr}{0,952 + Pr} \right)^{0,25},$$

im Falle turbulenter Strömung ($Ra > 10^9$) dagegen

$$Nu_{Platte} = 0,13 Ra^{0,33};$$

dabei sind

$$\begin{aligned} Pr &= \frac{c_{PL} \nu_L \rho_L}{\lambda_L} \quad (\text{Stoffwert für Luft}) \\ Gr &= \frac{g \cdot h_{WS}^3}{\nu_L^2} \beta_T |\vartheta_W - \vartheta_U| \\ Ra &= Gr \cdot Pr \end{aligned}$$

Die *Grashof-Zahl* Gr ist der Temperaturdifferenz proportional. β_T ist der isobare thermische Volumenausdehnungskoeffizient der Luft: für ideales Gas gilt $\beta_T = \frac{1}{T}$.

B.3.3 Dispersion

Der Dispersionskoeffizient in vertikaler Richtung D_z wird aus einer Approximationsformel für die Peclet-Zahl

$$Pe = \frac{w_{Schlupf} \cdot d_{App}}{D_z}$$

errechnet: Nach [7, Kawase & Moo-Young] gilt

$$Pe = 1,72 \left(\frac{w_{Schlupf}^2}{g \cdot d_{App}} \right)^{1/3}.$$

Der Dispersionskoeffizient in horizontaler Richtung $D_x = D_y$ wird zu

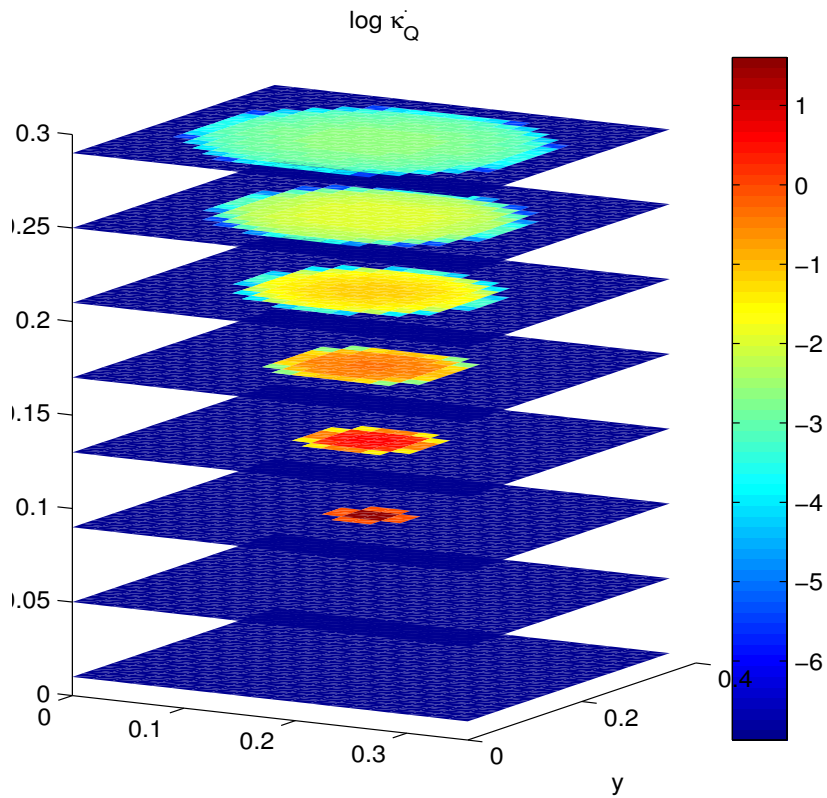
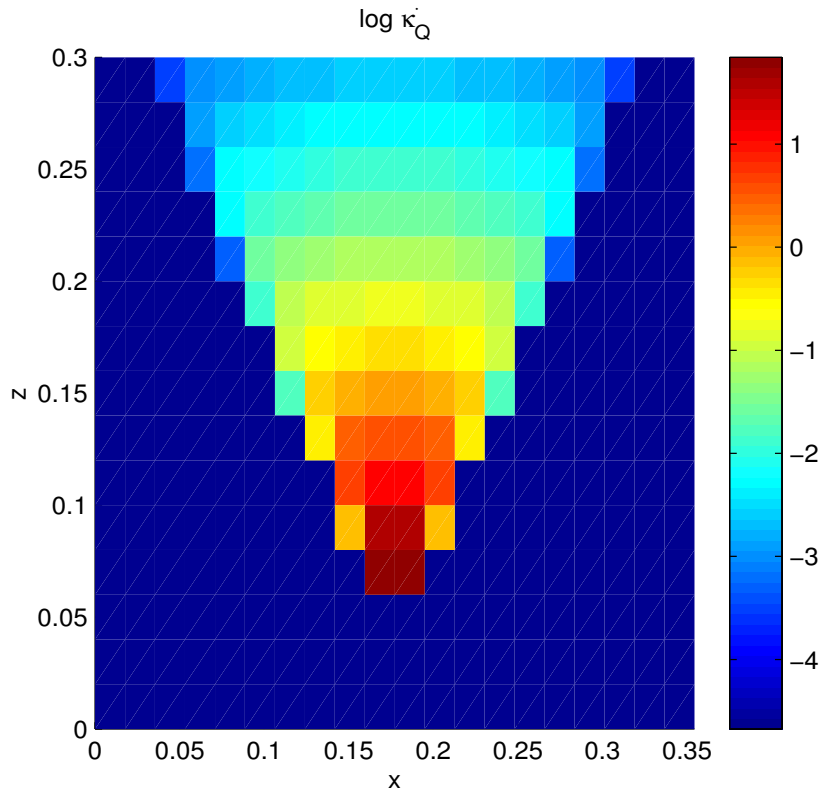
$$D_x = D_y = 0,1 D_z$$

geschätzt.

C Simulationsergebnisse

C.1 Quellstrom

Die folgenden Darstellungen zeigen den Massenstrom $\dot{\kappa}_Q$ der eingedüsten Flüssigkeit $\left[\frac{kg}{m^3s}\right]$.



C.2 Koeffizienten

Die strömungsmechanischen und thermodynamischen Koeffizienten werden nach jedem Zeitschritt aus dem Integralmittelwert der Lufttemperatur und -feuchte berechnet. Nachfolgend sind die wichtigsten dieser Koeffizienten für ausgewählte Zeitpunkte zusammengefaßt.

Koeffizienten ($t = 0$)

Archimedes-Zahl	$Ar = 7,19 \cdot 10^4$	Diffusionskoeffizient	$D_z = 0,359 \frac{m^2}{s}$
Porosität	$\varepsilon = 0,601$	Wärmeübergangs-	$\alpha_{PL} = 431 \frac{W}{m^2 s}$
Strömungsgeschwindigkeit	$w_L = 3,3 \frac{m}{s}$	koeffizienten	$\alpha_{LW} = 51,6 \frac{W}{m^2 s}$
Schlupfgeschwindigkeit	$w_{Schlupf} = 1,52 \frac{m}{s}$		$\alpha_{PW} = 155 \frac{W}{m^2 s}$

Koeffizienten ($t = 50ms$)

Archimedes-Zahl	$Ar = 7,22 \cdot 10^4$	Diffusionskoeffizient	$D_z = 0,360 \frac{m^2}{s}$
Porosität	$\varepsilon = 0,602$	Wärmeübergangs-	$\alpha_{PL} = 432 \frac{W}{m^2 s}$
Strömungsgeschwindigkeit	$w_L = 3,32 \frac{m}{s}$	koeffizienten	$\alpha_{LW} = 51,7 \frac{W}{m^2 s}$
Schlupfgeschwindigkeit	$w_{Schlupf} = 1,54 \frac{m}{s}$		$\alpha_{PW} = 155 \frac{W}{m^2 s}$

Koeffizienten ($t = 10s$)

Archimedes-Zahl	$Ar = 7,35 \cdot 10^4$	Diffusionskoeffizient	$D_z = 0,363 \frac{m^2}{s}$
Porosität	$\varepsilon = 0,604$	Wärmeübergangs-	$\alpha_{PL} = 434 \frac{W}{m^2 s}$
Strömungsgeschwindigkeit	$w_L = 3,39 \frac{m}{s}$	koeffizienten	$\alpha_{LW} = 52,2 \frac{W}{m^2 s}$
Schlupfgeschwindigkeit	$w_{Schlupf} = 1,58 \frac{m}{s}$		$\alpha_{PW} = 154 \frac{W}{m^2 s}$

Koeffizienten ($t = 120s$)

Archimedes-Zahl	$Ar = 7,63 \cdot 10^4$	Diffusionskoeffizient	$D_z = 0,369 \frac{m^2}{s}$
Porosität	$\varepsilon = 0,609$	Wärmeübergangs-	$\alpha_{PL} = 439 \frac{W}{m^2 s}$
Strömungsgeschwindigkeit	$w_L = 3,51 \frac{m}{s}$	koeffizienten	$\alpha_{LW} = 53,2 \frac{W}{m^2 s}$
Schlupfgeschwindigkeit	$w_{Schlupf} = 1,65 \frac{m}{s}$		$\alpha_{PW} = 153 \frac{W}{m^2 s}$

C.3 Übersichtsdarstellung

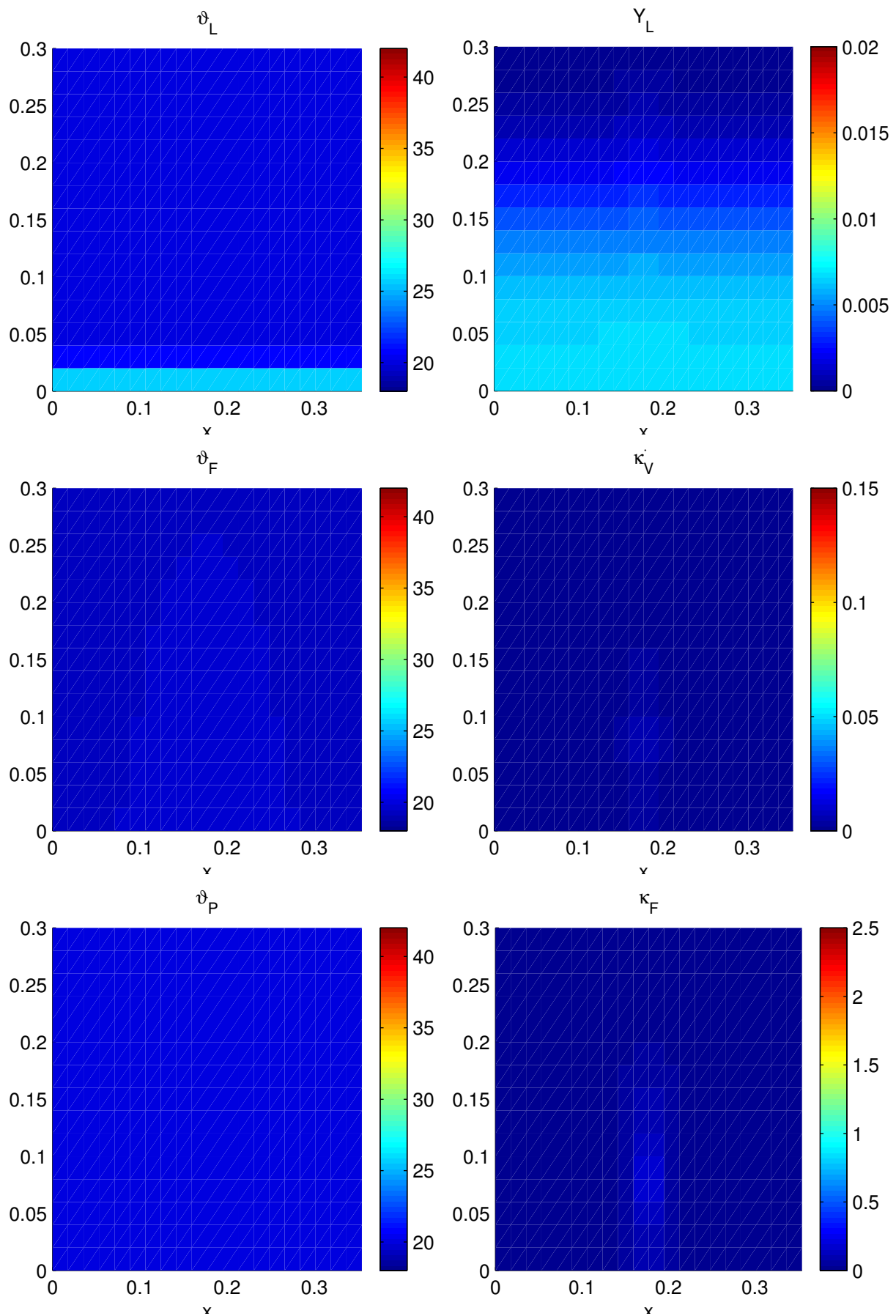
Auf den folgenden Seiten sind jeweils nebeneinander die berechneten Größen

Lufttemperatur	ϑ_L [°C]	Luftfeuchte	Y_L	$\frac{kg}{kg}$
Flüssigkeitsfilmtemperatur	ϑ_F [°C]	Verdunstungsstrom	$\dot{\kappa}_V$	$\frac{kg}{m^3 s}$
Partikeltemperatur	ϑ_L [°C]	Flüssigkeitskonzentration	κ_F	$\frac{kg}{m^3}$

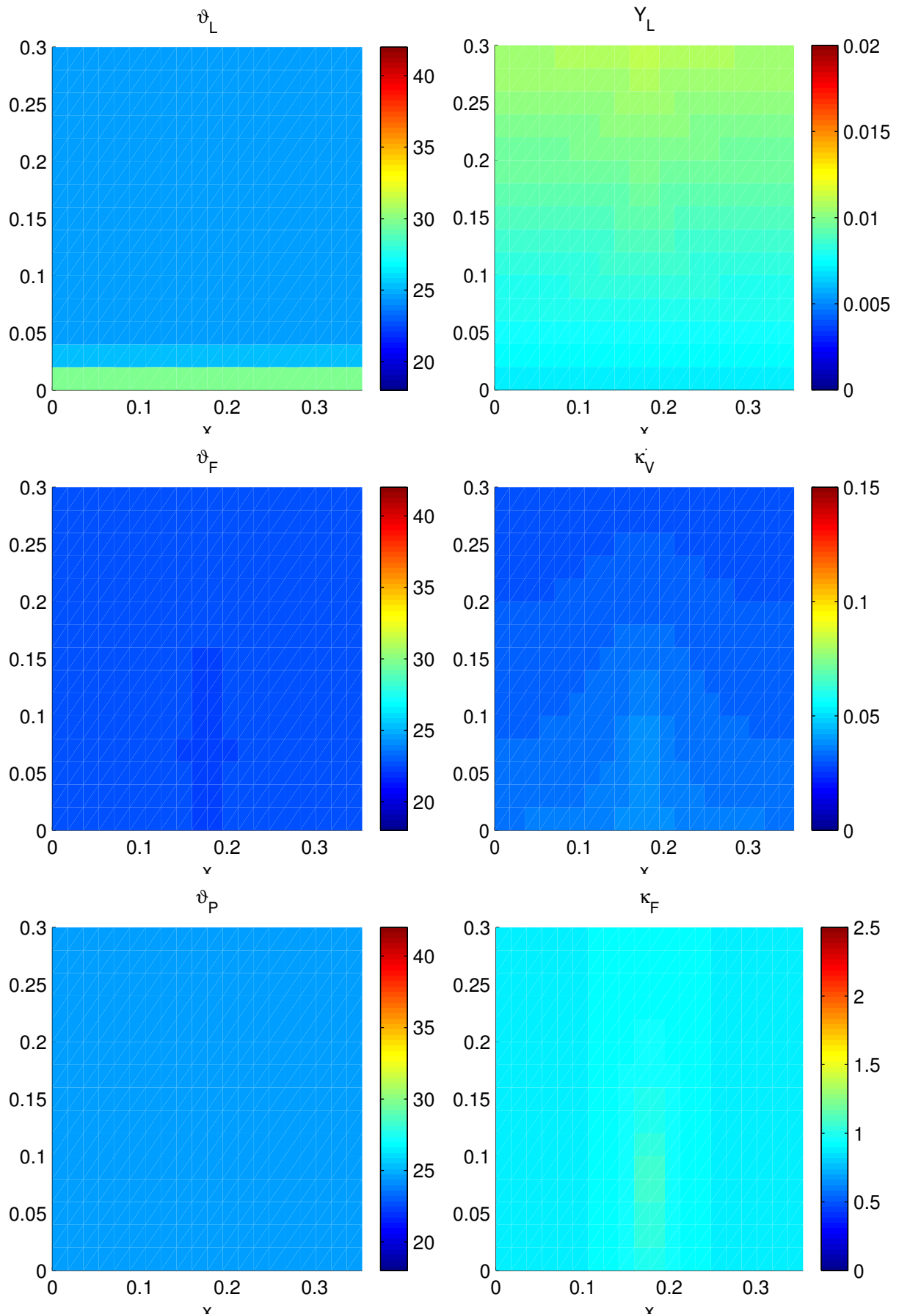
auf einem vertikalen Schnitt durch den Reaktor dargestellt.

Dabei wurde im Interesse der Vergleichbarkeit für alle Darstellungen eine einheitliche Farbskala verwendet.

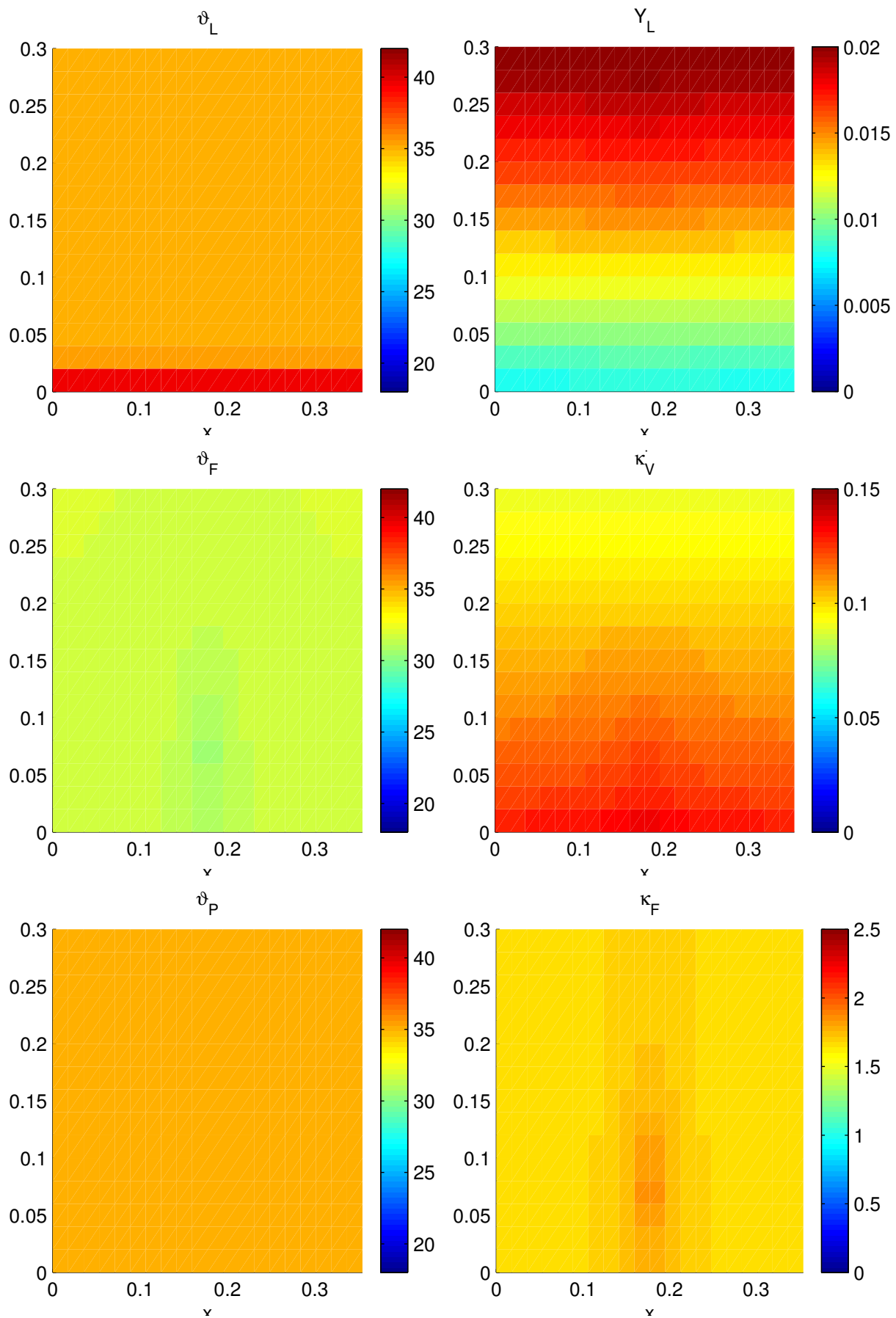
Berechnete Verläufe ($t = 50ms$)



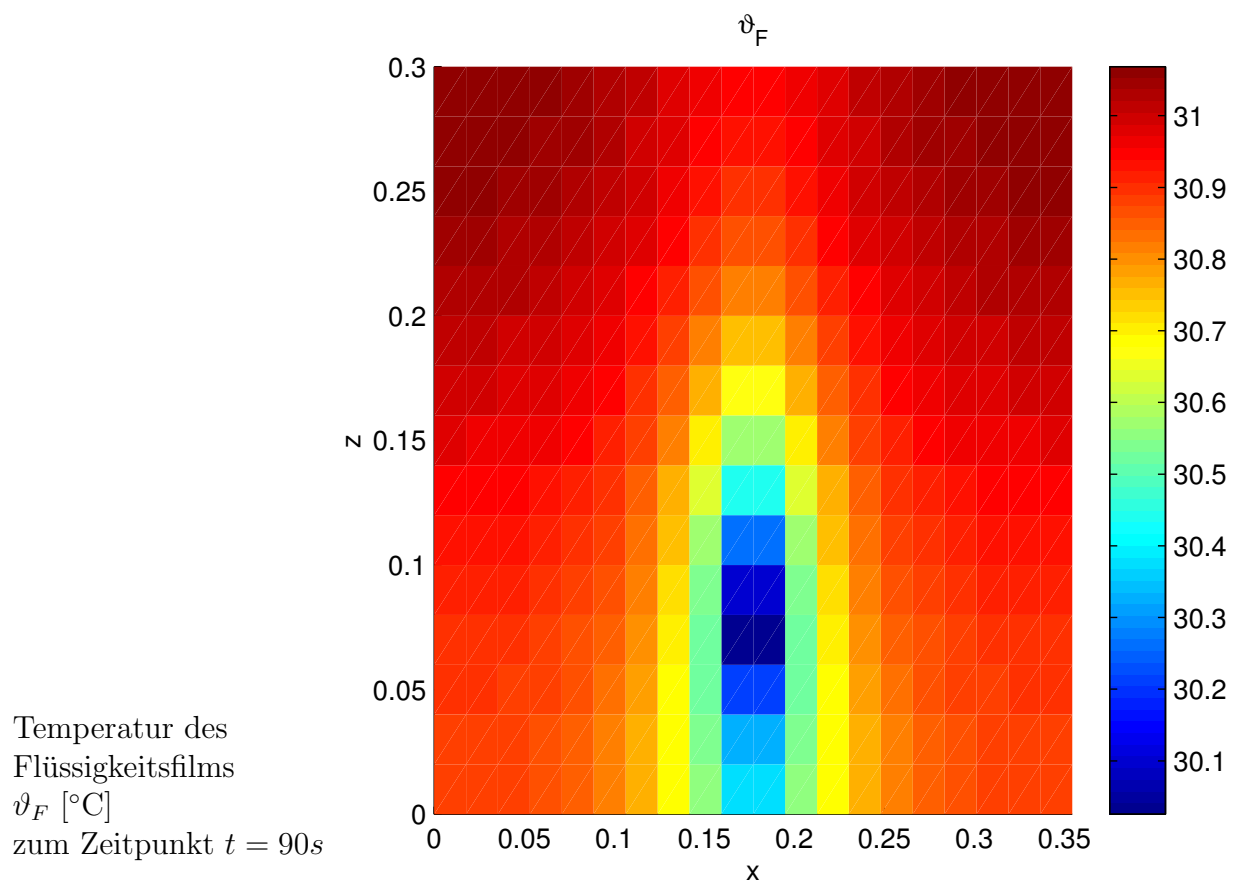
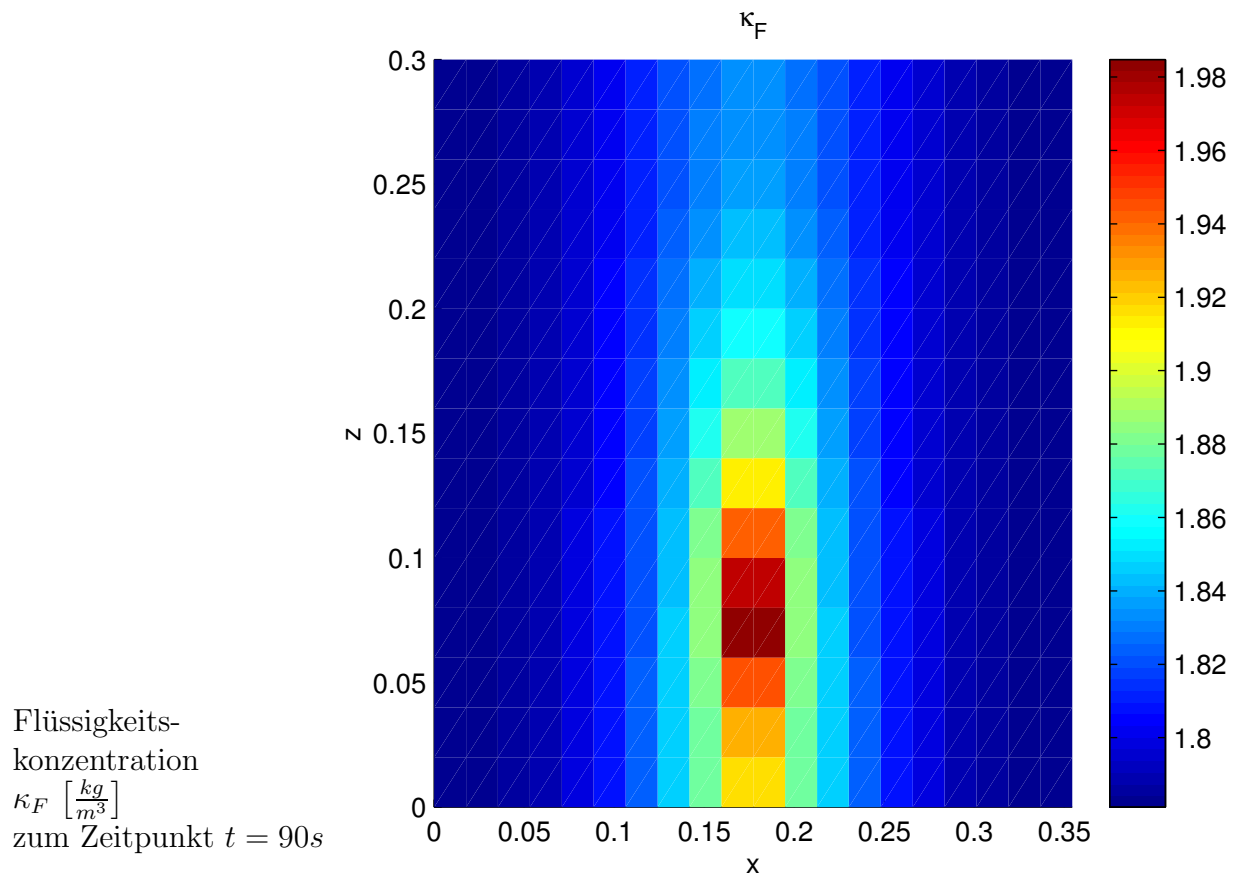
Berechnete Verläufe ($t = 10s$)



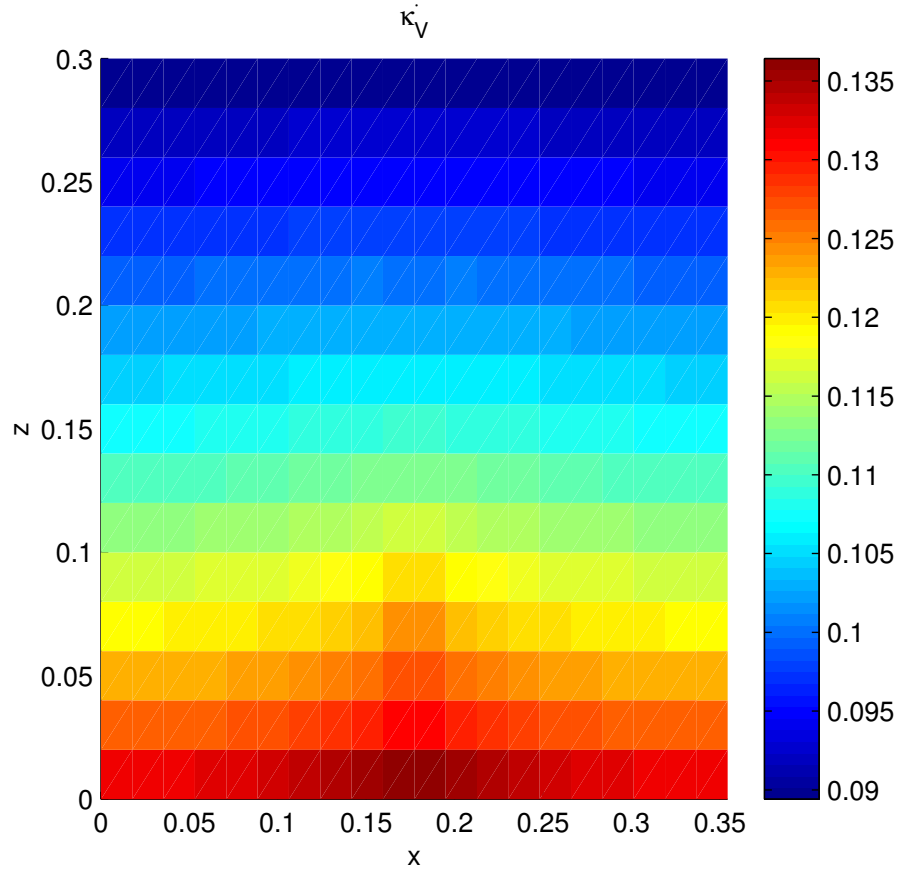
Berechnete Verläufe ($t = 120s$)



C.4 Ausgewählte Verläufe



Verdunstungsstrom
 $\dot{\kappa}_V \left[\frac{kg}{m^3s} \right]$
 zum Zeitpunkt $t = 90s$



Luftfeuchte
 $Y_L \left[\frac{kg}{kg} \right]$
 zum Zeitpunkt $t = 90s$

