

ϵ_m	$[m^2/s^3]$	mittlere Dissipationsdichte $= P/(\rho V)$
ν	$[m^2/s]$	kinematische Viskosität der kontinuierlichen Phase
$\Pi_\rho \equiv \rho_d/\rho$	$[-]$	Massendichte-Verhältnis
ρ	$[kg/m^3]$	Massendichte in der kontinuierlichen Phase
ρ_d	$[kg/m^3]$	Massendichte in der dispersen Phase
σ	$[kg/s^2]$	Grenzflächenspannung
$\tau \equiv m_{krit} K_{disp} t$	$[-]$	modellspezifisch formulierte Zeit
φ	$[-]$	Volumenanteil der dispersen Phase
$\Phi \equiv m_{krit} H(m, t)$	$[-]$	modellspezifisch formulierte differentielle Verteilung
$\theta \equiv \frac{(\sigma/\rho)^2 t}{\nu^3}$	$[-]$	modellunabhängig formulierte Zeit
$\mu \equiv \frac{m}{\rho} \left(\frac{\sigma/\rho}{\nu^2}\right)^3$	$[-]$	modellunabhängig formulierte Tröpfchenmasse
$\Pi_{disp} \equiv \frac{\rho K_{disp} \nu^9}{(\sigma/\rho)^5} = (CD)^{-1}$	$[-]$	modellspezifische Konstante
$\Pi_{eff} \equiv \frac{\epsilon_{eff}}{\epsilon_m} = (\pi/6 \Pi_\rho)^{4/3}$ $A^4 \text{ Diss}^{-1} C^{-4/3}$	$[-]$	modellspezifische Konstante
$\Pi_{koal} \equiv \frac{K_{koal} \nu^3}{(\sigma/\rho)^2} = BD^{-1}$	$[-]$	modellspezifische Konstante
$\Pi_{krit} \equiv \frac{m_{krit}}{\rho} \left(\frac{\sigma/\rho}{\nu^2}\right)^3 = C$	$[-]$	modellspezifische Konstante
$\psi \equiv \frac{d}{(\nu^3/\epsilon_{eff})^{1/4}}$	$[-]$	Tröpfchendurchmesser
$\psi_{krit} \equiv \frac{d_{krit}}{(\nu^3/\epsilon_{eff})^{1/4}} = A$	$[-]$	kritischer Tröpfchendurchmesser
$\Psi \equiv \frac{H \rho \nu^6}{(\sigma/\rho)^3}$	$[-]$	modellunabhängig formulierte differentielle Verteilung

Literatur

- [1] CHEN, H. T.; MIDDLEMAN, S. AICHE J. 13 (1667) 5, S. 989.
- [2] CHEN, Z. Ein math. Modell z. Beschreibung der Tropfenverteilung in dispersen Systemen, Reihe 3 Verfahrenstechnik, Nr. 404, VDI Verlag, Düsseldorf 1995.
- [3] KOLMOGOROFF, A. N. Dokl. Akad. Nauk SSSR 66 (1949) S. 825.
- [4] NARSIMHAN, G.; RAMKRISHNA, D.; GUPTA, J. P. AICHE J. 26 (1980) 6, S. 991.
- [5] JUDAT, H. VDI-Berichte Nr. 232, VDI-Verlag, Düsseldorf 1975.
- [6] BROWN, D. E.; PITT, K. Chem. Eng. Sci. 27 (1972) S. 577.

Dreidimensionale numerische Simulation von aufsteigenden Einzelblasen und Blasenschwärmen mit einer Volume-of-Fluid-Methode*

WINFRIED SABISCH, MARTIN WÖRNER,
GÜNTHER GRÖTZBACH UND DAN GABRIEL CACUCI * *

1 Problemstellung

Die numerische Strömungssimulation (Computational Fluid Dynamics: CFD) etabliert sich zunehmend als ein Werkzeug zur Analyse und Auslegung verfahrenstechnischer Prozesse [1]. Aktuell findet u. a. die numerische Modellierung von Blasensäulen und Schlaufenreaktoren besonderes Interesse. Ein wichtiges Phänomen in Blasensäulen, das in CFD-Berechnungen durch geeignete Modelle zu berücksichtigen ist, ist die Blasen-induzierte Turbulenz. Sie entsteht in der Flüssigkeit durch die Verdrängungswirkung der aufsteigenden Gasblasen und die Wirbelbildung im Blasenachlauf.

SOKOLICHIN [2] hat verschiedene physikalische Modelle aus der Literatur für die Blasen-induzierte Turbulenz in umfangreichen CFD-Rechnungen systematisch untersucht. Er folgert, dass zum Erzielen einer guten Übereinstimmung mit experimentellen Vergleichsdaten die Berücksichtigung der Blasen-induzierten Turbulenz sehr wichtig ist, bisher aber noch kein zuverlässiges und für weite Parameterbereiche gültiges Modell verfügbar ist.

Die Entwicklung verbesserter Modelle erfordert neben einem vertieften Verständnis von Blasen-induzierter Turbulenz und Blasen-Blasen-Wechselwirkung vor allem zeitlich und räumlich hochaufgelöste Daten des dreidimensionalen Geschwindigkeitsfeldes. Trotz fortgeschrittener Messtechniken wie z. B. der Particle-Image-Velocimetry [3] sind derartige Daten experimentell noch nicht zugänglich. Als Alternative können hier direkte numerische Simulationen (DNS) einen Beitrag leisten, bei denen die Strömung und die Phasengrenzfläche detailliert beschrieben werden. In der Literatur finden sich numerische Arbeiten mit 3D-Simulationen von 58 Blasen [4] oder mehr. Die Blasen sind sphärisch oder ellipsoid, besitzen einen geschlossenen Nachlauf und Blasen-Reynolds-Zahlen im Bereich $Re_{Bl} = O(10) - O(100)$. In Blasensäulen treten allerdings oft stark deformierte, forminstabile Blasen mit offenem turbulentem Nachlauf und mit $Re_{Bl} = O(1000)$ auf.

In diesem Beitrag wird eine weiterentwickelte Volume-of-Fluid-Methode zur DNS von Einzelblasen und Bla-

* Vortrag von M. WÖRNER anlässlich der GVC-Fachausschusssitzung "Computational Fluid Dynamics", 1. März 2000 in Bamberg.

** Dr.-Ing. W. SABISCH, Dr.-Ing. M. WÖRNER, Dr.-Ing. G. GRÖTZBACH, Prof. Dr. Dr. h.c. mult. D. G. CACUCI, Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Reaktorsicherheit, Postfach 3640, D-76021 Karlsruhe.

senschwärmen vorgestellt, die speziell für Detailanalysen entwickelt wurde. Zur Verifikation werden Einzelblasen unterschiedlicher Form und Steigverhaltens untersucht. Es werden u. a. erste Ergebnisse für eine Einzelblase mit $Re_{Bl} \approx 1000$ und für einen Schwarm von fünf Blasen mit $Re_{Bl} \approx 60$ vorgestellt.

2 Gleichungen und numerische Methode

Die Simulationen erfolgen mit dem Programm TURBIT-VOF, das auf einem Finite-Volumen-Verfahren und einem versetzten Gitter basiert. Die Beschreibung der zeitlichen Entwicklung der Phasengrenzfläche erfolgt mit der Volume-of-Fluid-Methode (VOF) [5]. Dabei wird die Phasenverteilung im Rechengebiet durch den Volumenanteil der Flüssigkeit in einer Gitterzelle beschrieben. Für diese Volumenfraktion gilt $0 \leq f \leq 1$, wobei in reinen Gaszellen $f=0$, in reinen Flüssigkeitszellen $f=1$ und in zweiphasigen Zellen $0 < f < 1$ ist. Basierend auf der lokalen Volumenfraktion werden die Mischungsdichte, Mischungsviskosität und Schwerpunktschwindigkeit definiert¹⁾:

$$\rho^* = f\rho_1^* + (1-f)\rho_2^* \tag{1}$$

$$\mu^* = f\mu_1^* + (1-f)\mu_2^* \tag{2}$$

$$\vec{u}^* = \frac{f\rho_1^*\vec{u}_1^* + (1-f)\rho_2^*\vec{u}_2^*}{\rho^*} \tag{3}$$

Die Indices 1 und 2 kennzeichnen die flüssige und gasförmige Phase und * eine dimensionsbehaftete Größe. Die volumengemittelte Kontinuitäts- und Navier-Stokes-Gleichung für das Zweiphasengemisch ergeben sich in dimensionsloser Form wie folgt:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \tag{4}$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla p + \frac{1}{Re_{ref}} \nabla[\mu(\nabla \otimes \vec{u} + (\nabla \otimes \vec{u})^T)] - (1-f) \frac{Eö_{ref} \vec{g}^*}{We_{ref} g^*} + \frac{a_{int} \kappa \vec{n}}{We_{ref}} \tag{5}$$

Der dritte Term auf der rechten Seite von Gl. (5) repräsentiert die Auftriebskraft, der vierte die Oberflächenspannungskraft, welche hier als Volumenkraft behandelt wird. Die Variablen wurden wie folgt normiert:

$$\vec{x} = (x, y, z)^T = \vec{x}^*/L_{ref}^*, \quad \vec{u} = \vec{u}^*/U_{ref}^*, \quad t = t^*U_{ref}^*/L_{ref}^*, \\ \rho = \rho^*/\rho_1^*, \quad \mu = \mu^*/\mu_1^*, \quad p = (p^* + \rho_1^* \vec{g}^* \cdot \vec{x}^*)/(\rho_1^* U_{ref}^{*2})$$

Die Definition der (Referenz-) Reynolds-, Eötvös- und Weber-Zahl ist:

$$Re_{ref} = \frac{\rho_1^* L_{ref}^* U_{ref}^*}{\mu_1^*}, \quad Eö_{ref} = \frac{(\rho_1^* - \rho_2^*) g^* L_{ref}^{*2}}{\sigma^*}, \\ We_{ref} = \frac{\rho_1^* L_{ref}^* U_{ref}^{*2}}{\sigma^*} \tag{6}$$

Der Gleichungssatz wird komplettiert durch die Volumenfraktionsgleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla(f\vec{u}) = 0 \tag{7}$$

die der Kontinuitätsgleichung der flüssigen Phase entspricht. Löst man Gl. (7) mit üblichen Differenzen-Verfahren, so bewirkt der diskontinuierliche Charakter von f eine Verschmierung der Grenzfläche aufgrund numerischer Diffusion. Um dies zu verhindern, werden in der klassischen Volume-of-Fluid-Methode die Flüsse über die Maschengrenzen auf andere Weise berechnet. Zunächst wird aus der räumlichen Verteilung der diskreten Werte der Volumenfraktion die Lage der Phasengrenzfläche in jeder Grenzflächen-Zelle rekonstruiert. In TURBIT-VOF wird hierfür der EPIRA-Algorithmus [6] eingesetzt, der von einer lokalen Approximation der Grenzfläche als Ebene ausgeht. Beliebige orientierte ebene Grenzflächen werden dabei stets exakt rekonstruiert. Die rekonstruierte Phasengrenzfläche wird in einem zweiten Schritt entsprechend der lokalen Geschwindigkeiten transportiert und die Flüsse über die Maschenseiten werden konsistent bestimmt.

Die Lösungsstrategie für die Kontinuitäts- und Impulsgleichung in TURBIT-VOF basiert auf einer Projektionsmethode, wobei die resultierende Druck-Poisson-Gleichung mit einem konjugierten-Gradienten-Verfahren gelöst wird. Die Zeitintegration erfolgt mit einem expliziten Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung. In der Impulsgleichung werden die diffusiven Terme mit zentralen Differenzen zweiter Ordnung diskretisiert, die konvektiven Terme wahlweise mit zentralen Differenzen zweiter Ordnung oder mit einem hochauflösenden W-ENO Schema dritter Ordnung. Das W-ENO Verfahren ist insbesondere für Rechnungen wichtig, bei denen beide Fluide stark unterschiedliche Dichte besitzen.

Zur Verifizierung des Codes wurden verschiedene Testprobleme berechnet, u. a. die Rayleigh-Taylor-Instabilität, Schwere- und Kapillarwellen. Für die beiden letztgenannten Testprobleme gibt es analytische Lösungen, mit denen jeweils eine sehr gute Übereinstimmung erzielt wurde. Für weitere Details hierzu und bezüglich des numerischen Verfahrens verweisen wir auf [6].

3 Physikalische und numerische Parameter der Simulationen

Aus einer Vielzahl experimenteller Untersuchungen von Einzelblasen, die in einer stagnierenden Flüssigkeit aufsteigen, haben CLIFT, GRACE und WEBER [7] das in Abb. 1 dargestellte Diagramm aufgestellt. In diesem ist die Reynolds-Zahl Re_{Bl} (gebildet mit der Steiggeschwindigkeit der Blase U_{Bl}^* und dem äquivalenten Blasendurchmesser d_{Bl}^*) über der Eötvös-Zahl $Eö_{Bl}$ in Abhängigkeit der Morton-Zahl M dargestellt. Die Morton-Zahl $M = (\rho_1^* - \rho_2^*) g^* \mu_1^{*4} / \rho_1^{*2} \sigma^{*3} = EöWe^2 / Re^4$ ist eine reine Stoffgröße. Für eine Luftblase in Wasser ist $\log_{10} M \approx -10$. Nach Abb. 1 hängen Form und Steiggeschwindigkeit der Blase stark von Eötvös- und Morton-Zahl ab. Die Zahlen ❶ bis ❹ kennzeichnen die Kombinationen von $Eö_{Bl}$ und M , für die Simulationen mit TURBIT-VOF durchgeführt wurden (s. Tab. 1).

1) Eine Zusammenstellung der Formelzeichen befindet sich am Schluss des Beitrags.

Abbildung 1.
Diagramm mit skizzierten Bereichen der Blasenform und Re_{Bl} in Abhängigkeit von Eötvös-Zahl $Eö_{Bl}$ und Morton-Zahl M (Linien) nach [7]. Die Zahlensymbole kennzeichnen die Parameter der Simulationen nach Tab 1.

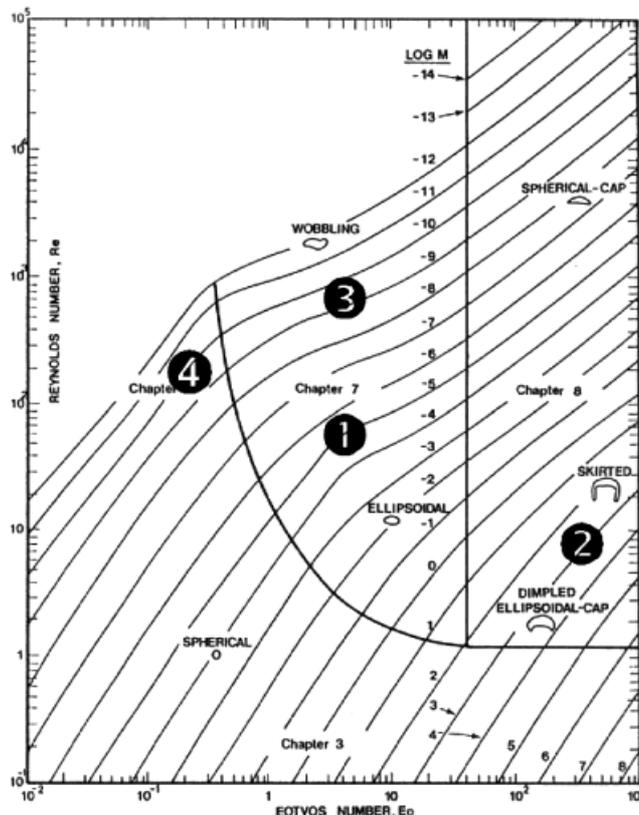


Tabelle 1.
Eötvös- und Morton-Zahlen der Simulationen.

Fall	$Eö$	$\log_{10} M$
❶	3,07	-5,51
❷	243	2,42
❸	3,07	-9,6
❹	0,2	-10,6

Für Einzelblasen, die im Schwerfeld in einer Flüssigkeit frei aufsteigen, gibt es acht Einflussgrößen (ρ_1^* , ρ_2^* , μ_1^* , μ_2^* , σ^* , g^* , d_{Bl}^* , U_{Bl}^*) mit drei Basisdimensionen (kg, m, s). Nach dem II-Theorem von Buckingham gibt es somit $8 - 3 = 5$ unabhängige dimensionslose Kennzahlen, die das physikalische Problem beschreiben. Neben Re_{Bl} , $Eö_{Bl}$ und M sind dies das Dichteverhältnis $\Gamma_\rho = \rho_2^*/\rho_1^*$ und das Viskositätsverhältnis $\Gamma_\mu = \mu_2^*/\mu_1^*$.

Die Rechnungen erfolgen für einen Kanal zwischen zwei vertikalen parallelen Wänden mit dem Abstand L_z^* . Bei den hier vorgestellten Simulationen ist $L_x^* = L_y^* = L_z^* = L_{ref}^* = 4$ m und $U_{ref}^* = 1$ m/s. Das Rechengebiet ist in 64^3 würfelförmige Maschen unterteilt. Für Fall ❶ startet die Simulation mit einer kugelförmigen Blase in Kanalmitte. Flüssigkeit und Gas sind in Ruhe. Der Blasen-durchmesser d_{Bl}^* ist ein Viertel des Wandabstandes und da-

mit mit 16 Maschen aufgelöst. Der Gasgehalt im Rechengebiet ist etwa 0,8 %.

Um Rechenzeit zu sparen, wird bei den Fällen ❷, ❸ und ❹ die Lösung von Fall ❶ als Startwert vorgegeben. In Aufstiegs- (x) und Spannweitenrichtung (y) werden periodische Randbedingungen verwendet. Dadurch wird nicht eine Einzelblase, sondern ein regelmäßig angeordnetes Feld unendlich vieler Blasen abgebildet. Jede Blase steigt in ihrem eigenen Nachlauf auf. Damit ist i. Allg. ein Vergleich mit Experimenten für Einzelblasen nur qualitativ sinnvoll. Für eine Untersuchung des Einflusses von Maschenanzahl (128^3) und Größe des Rechengebietes verweisen wir auf [6].

Die Rechnungen wurden mit $\Gamma_\rho = 1/2$ und $\Gamma_\mu = 1$ durchgeführt. Durch schrittweise Verkleinerung von Γ_ρ gelingt es, ausgehend von der zuvor berechneten Lösung als neue Anfangsschätzung, eine Lösung auch für sehr kleine Dichteverhältnisse bis zu $\Gamma_\rho = 1/1000$ zu erreichen. Allerdings ist die (hier maßgebliche) dimensionslose Zeitschrittweite des Reibungsterms proportional zu $\text{Min}(1, \Gamma_\rho/\Gamma_\mu)$. Sehr kleine Dichteverhältnisse benötigen sehr kleine Zeitschrittweiten und bewirken damit sehr hohe Rechenzeiten. Die Rechnungen wurden auf einem Prozessor eines Fujitsu VPP 300 Hochleistungsrechners durchgeführt. Eine Simulation umfasst typischerweise einige Tausend bis 10 000 Zeitschritte. Die Rechenzeit liegt je nach Fall bei bis zu einigen Hundert CPU-Stunden.

4 Ergebnisse und Diskussion

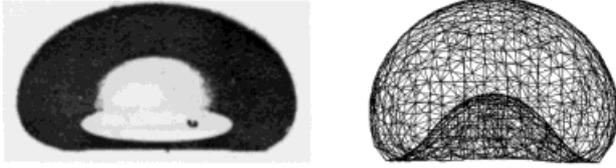
Zum Vergleich der Simulationsergebnisse mit Experimenten dienen Form und Nachlauftyp der Blase sowie Re_{Bl} als die dimensionslose Steiggeschwindigkeit. Es ist zu beachten, dass die Ähnlichkeit von $Eö_{Bl}$ und M gegeben ist, nicht jedoch die von Γ_ρ und Γ_μ . Für Fall ❶ stellt sich eine ellipsoidförmige Blase mit geschlossenem Nachlauf ein. Der Vergleich des Verhältnisses der Halbachsen E mit der von WELLEK et al. [8] experimentell ermittelten Korrelation $E = 1/(1 + 1,63Eö_{Bl}^{0,757})$, gültig für $Eö_{Bl} < 40$ und $\log_{10} M \leq -6$, zeigt eine gute Übereinstimmung (s. Tab. 2). Auch Re_{Bl} liegt in dem in Experimenten beobachteten Bereich. Offensichtlich sind die Ähnlichkeitsparameter Γ_ρ und Γ_μ hier nur von untergeordneter Bedeutung.

Die Eötvös- und Morton-Zahl von Fall ❷ entsprechen den Werten in einem Experiment von BHAGA und WEBER [9] für eine Luftblase in wässriger Zuckerlösung ($\Gamma_\rho \approx 1/1000$). Abb. 2 zeigt die stationäre Blasenform in Experiment und Rechnung. Es handelt sich um eine abgeflachte ellipsoidförmige Kappenblase („oblate ellipsoidal cap“). Typisch ist die Einbuchtung am Unterteil der Blase.

Tabelle 2.
Vergleich experimenteller und berechneter Werte von Halbachsenverhältnis E und Reynolds-Zahl Re_{Bl} für die ellipsoide Blase (Fall ❶).

	Experiment	Simulation
E	0,72	0,71
Re_{Bl}	50...70	61,5

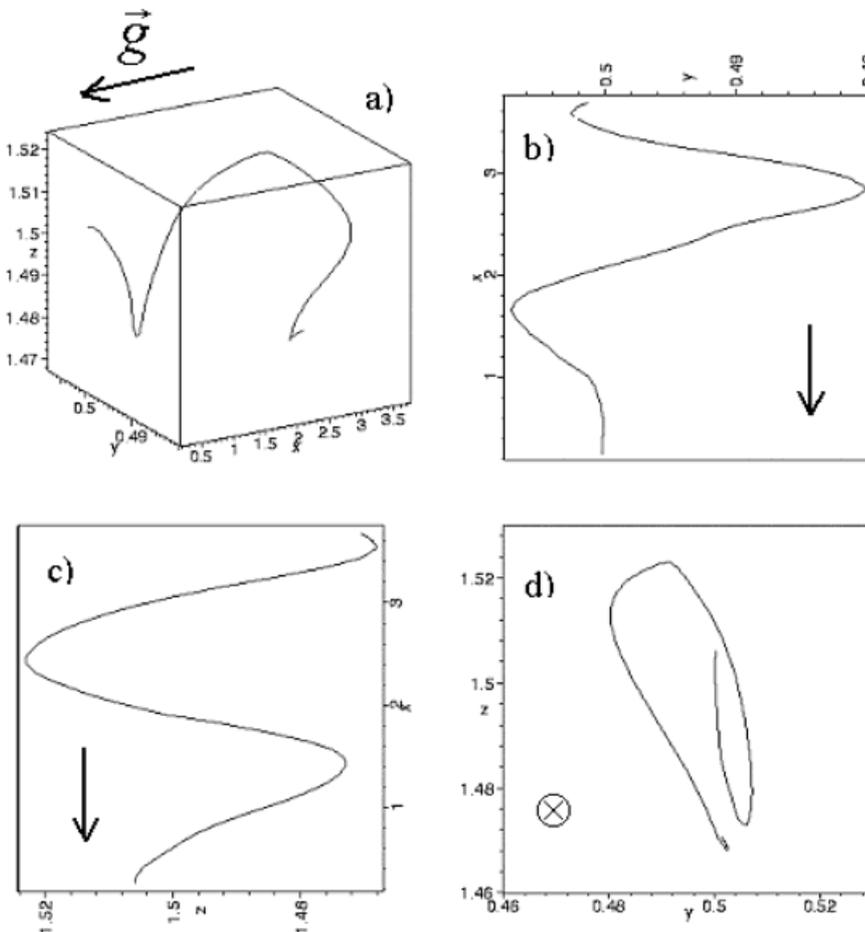
Abbildung 2. Stationäre Form der ellipsoiden Kappenblase (Fall ②) in Experiment [9] (links) und Simulation (rechts).



Die Abflachung der Blase ist im Experiment stärker als in der Rechnung. Dies liegt vermutlich an den periodischen Randbedingungen der Simulation, aufgrund derer die Blase im Nachlauf der vorlaufenden Blase einen geringeren Widerstand erfährt. Möglicherweise spielt hier aber auch das unterschiedliche Dichte- und Viskositätsverhältnis in Experiment und Rechnung eine Rolle.

Für Fall ④, dessen Morton-Zahl der von Luft-Blasen in Wasser entspricht, stellt sich in Übereinstimmung mit Experimenten eine nahezu sphärische Blase ein. Die Tatsache, dass sich in den dreidimensionalen Simulationen auf einem kartesischen Gitter in den Fällen ①, ② und ④ rotationsymmetrische Blasen einstellen, spricht für die Genauigkeit des numerischen Verfahrens und der Modellierung der Oberflächenspannung.

Abbildung 3. Bahnkurve des Blaseschwerpunktes der forminstabilen Blase (Fall ③) in perspektivischer Ansicht (a) und als Projektion in die x-y- (b), x-z- (c) und y-z-Ebene (d).



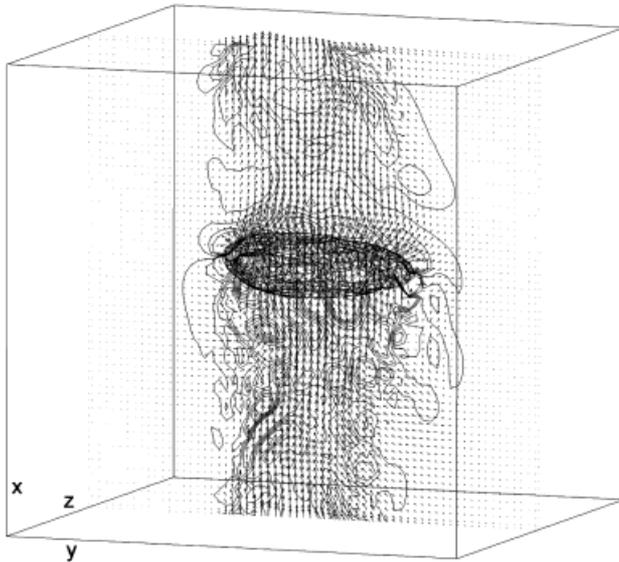
Von besonderem Interesse ist Fall ③, für den eine forminstabile oszillierende Blase erwartet werden kann. Tatsächlich wird in der Simulation die als Anfangslösung vorgegebene geradlinige Aufstiegsbahn der Blase von Fall ① instabil, wie die Bahnkurve in Abb. 3 zeigt. Man erkennt in den Projektionen, dass die Blase in der x-y-Ebene zunächst noch geradlinig aufsteigt (s. Abb. 3 b), während sie in der x-z-Ebene unmittelbar eine seitliche Schwingung ausführt (s. Abb. 3 c). Kurz darauf setzt auch in der x-y-Ebene eine Pendelbewegung ein. In der Projektion von oben (y-z-Ebene) ergibt dies eine (unregelmäßige) Spiralbahn (s. Abb. 3 d). Derartige auf einer Schraubenbahn aufsteigende Einzelblasen mit $Re_{Bl} = O(1000)$ wurden z. B. von BRÜCKER [3] experimentell untersucht. Abb. 4 zeigt Momentanergebnisse der Simulation für die Blasenform, das Geschwindigkeitsfeld in einer wandparallelen x-y-Schnittebene und die Wirbelstärkekomponente normal zu dieser Schnittebene. Die Abbildung verdeutlicht den turbulenten Charakter der Strömung. Der Nachlauf ist offen, und es treten Wirbel auf, die deutlich kleiner sind als der Blasendurchmesser.

Als eine erste Anwendung zur Untersuchung der Wechselwirkung von mehreren Blasen wurde eine Simulation mit fünf zufällig verteilten Blasen durchgeführt. Eö und M entsprechen Fall ①. Der Gasgehalt ist etwa 4 %. Bei diesen Parametern treten in Experimenten und auch in der Simulation weder Koaleszenz noch Aufbrechen von Blasen auf. Die

zu Beginn der Rechnung kugelförmigen Blasen verformen sich beim Aufstieg sehr schnell zu Ellipsoiden. Aufgrund der Wechselwirkung der Blasen stellen sich kein stationäres Aufstiegsverhalten und keine feste räumliche Verteilung der Blasen zueinander ein. Im Verlauf der Simulation wird eine Wanderung der Blasen in Richtung zur Wand beobachtet. Dies ist wie folgt zu erklären. Die Verdrängungswirkung der Blasen in Zusammenwirkung mit viskosen Kräften induziert in der Flüssigkeit eine mittlere Aufwärtsströmung. Aufgrund der Wandhaftung bildet sich ein parabolähnliches mittleres Geschwindigkeitsfeld aus. Die relativ zu diesem Scherfeld aufsteigenden Blasen erfahren aufgrund der ungleichmäßigen Umströmung eine Netto-Druckkraft, die in Wandrichtung wirkt. Diese sogenannte Lift-Kraft wird auch experimentell beobachtet [10]. Während sich die Lift-Kraft in der DNS als Folge der detailliert berechneten Geschwindigkeits- und Druckverteilung um die Blase automatisch ergibt, muss sie in gängigen CFD-Programmen modelliert werden.

Die vorgestellten Simulationen wurden aus Gründen der Numerik und Effizienz mit dem Dichteverhältnis $\Gamma_\rho = 1/2$ und dem Viskositätsverhältnis $\Gamma_\mu = 1$ durchgeführt. Bezüglich dieser

Abbildung 4.
Visualisierung der momentanen Phasengrenzfläche, der Geschwindigkeit in einer Schnittebene (Vektoren) und der entsprechenden Wirbelstärkekomponente (Höhenlinien) für die forminstabile Blase (Fall 9).



Parameter ist eine Ähnlichkeit mit technisch relevanten Stoffpaarungen nicht gegeben. Es ist durch zukünftige Simulationen, bei denen Γ_μ und Γ_ρ variiert werden, daher zu klären, inwieweit Ergebnisse mit $\Gamma_\rho = O(0,1)$ z. B. auf das Luft/Wasser-System übertragbar sind.

5 Schlussfolgerungen und Ausblick

Basierend auf der Volume-of-Fluid-Methode zur Verfolgung der verformbaren Phasengrenzfläche und unter Nutzung moderner numerischer Verfahren wurde ein Rechenprogramm zur direkten numerischen Simulation von Blasenströmungen entwickelt. Anhand exemplarischer Rechnungen für Blasen, bei denen unterschiedliche Kräfte dominieren, welche sich in unterschiedlicher Blasenform und unterschiedlichem Aufstiegsverhalten manifestieren, wurde gezeigt, dass alle wesentlichen physikalischen Phänomene in der Simulation erfasst sind. Das Programm ist in der Lage, auch forminstabile Blasen mit offenem turbulentem Nachlauf zu beschreiben, wie sie für viele technische Anwendungen in Apparaten der Energie- und Verfahrenstechnik typisch sind, sowie die Turbulenz adäquat zu beschreiben.

Die Simulationen haben gezeigt, dass die Eötvös-Zahl $E\ddot{o}$ und die Morton-Zahl M wesentliche Ähnlichkeitsparameter sind, die die Form und den Nachlauf der Blase bestimmen. Die in der Flüssigkeit durch die Blasen induzierte Turbulenz ist entscheidend mit der Blasenumströmung und der Wirbelbildung im Nachlauf verknüpft. Man kann daher davon ausgehen, dass auch für die Blasen-induzierte Turbulenz $E\ddot{o}$ und M maßgebliche Ähnlichkeitsparameter darstellen werden.

Die vorgestellten Ergebnisse belegen die Leistungsfähigkeit der Methode und ihr Potenzial zur Erweiterung des physikalischen Verständnisses. Der besondere Wert der DNS liegt in der Bereitstellung einer konsistenten Datenbasis mit hoher räumlich-zeitlicher Auflösung. Ziel zukünftiger Arbeiten ist es, durch weitere Simulationen auch für höhere Gasanteile und detaillierte quantitative Analysen der DNS-Datenbasis zur Entwicklung verbesserter Modelle für die Blasen-induzierte Turbulenz in technischen Rechenprogrammen beizutragen.

Aktuelle methodische Weiterentwicklungen von TURBIT-VOF betreffen die Berücksichtigung von Wärmeübergang und Topologieänderungen. Ein weiteres zukünftiges Anwendungsziel sind numerische Untersuchungen zu Strömungsformen in einzelnen Makro-, Mini- und Mikrokanälen.

Eingegangen am 9. November 2000 [K 2798]

Formelzeichen

a_{int}	[-]	mit L_{ref}^* normierte spezifische Phasengrenzfläche
d_{Bl}^*	[m]	äquivalenter Blasendurchmesser
E	[-]	Halbachsenverhältnis der ellipsoiden Blase
$E\ddot{o}$	[-]	Eötvös-Zahl
f	[-]	Volumenfraktion der Flüssigkeit
g^*	[m/s ²]	Erdbeschleunigung
L_{ref}^*	[m]	Referenzlänge: $L_{ref}^* = 4$ m
M	[-]	Morton-Zahl
\vec{n}	[-]	Normalenvektor zur Phasengrenzfläche
p	[-]	mit $\rho_1^* U_{ref}^{*2}$ normierter dynamischer Druck
Re	[-]	Reynolds-Zahl
t	[-]	mit L_{ref}^*/U_{ref}^* normierte Zeit
\vec{u}	[-]	mit U_{ref}^* normierte Geschwindigkeit
U_{Bl}^*	[m/s]	Steiggeschwindigkeit der Blase
U_{ref}^*	[m/s]	Referenzgeschwindigkeit: $U_{ref}^* = 1$ m/s
x, y, z	[-]	mit L_{ref}^* normierte Ortskoordinaten
Γ_μ	[-]	Viskositätsverhältnis
Γ_ρ	[-]	Dichteverhältnis
∇	[-]	mit L_{ref}^* normierter Nabla-Operator
κ	[-]	mit L_{ref}^* normierte Krümmung der Phasengrenzfläche
μ_1^*, μ_2^*	[Pa s]	dynamische Viskosität
ρ_1^*, ρ_2^*	[kg/m ³]	Dichte
σ^*	[N/m]	Oberflächenspannung

tiefgestellte Indices

1	Flüssigkeit
2	Gas
Bl	Blase
ref	Referenzwert

hochgestellte Indices

T	transponiert
*	dimensionsbehaftete Größe

Literatur

- [1] BIRTHIG, A.; LAUSCHKE, G.; SCHIERHOLZ, W. F.; BECK, D.; MAUL, C.; GILBERT, N.; WAGNER, H.-G.; WERNINGER, C.Y. CFD in der chemischen Verfahrenstechnik aus industrieller Sicht, Chem.-Ing.-Tech. 72 (2000) 3, S. 175.
- [2] SOKOLICHIN, A. Dynamische Simulation von Gas/Liquid-Blasenströmungen: Modellierung der Zweiphasenturbulenz, Plenarvortrag GVC-Fachauschusssitzung „Computational Fluid Dynamics“, 28.Feb./1. März 2000 in Bamberg.
- [3] BRÜCKER, CH. Structure and Dynamics of the Wake of Bubbles and Its Relevance for Bubble Interaction, Physics of Fluids 11 (1999) 7, S. 1781.
- [4] GÖZ, M.F.; BUNNER, B.; SOMMERFELD, M.; TRYGGVASON, G. Simulation of Bubbly Gas-Liquid Flows by a Parallel Finite-Difference/Front-Tracking Method, in: High Performance Computing in Science & Engineering 2000 (Hersg.: KRAUSE, E.; JÄGER, W.) Springer-Verlag, Heidelberg 2001 (in Vorbereitung).
- [5] HIRT, C. W.; NICHOLS, B. D. Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries, J. Comput. Phys. 39 (1981) S. 201.
- [6] SABISCH, W. Dreidimensionale numerische Simulation der Dynamik von aufsteigenden Einzelblasen und Blasenschwärmen mit einer Volume-of-Fluid-Methode, Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6478, Juni 2000, (s. a. http://www.fzk.de/hbk/literatur/FZKA_Berichte/FZKA6478.pdf).
- [7] CLIFT, R.; GRACE, J. R.; WEBER, M. E. Bubbles, Drops, and Particles, Academic Press, New York 1978.
- [8] WELLEK, R. M.; AGRAWAL, A. K.; SKELLAND A. H. P. Shape of Liquid Drops Moving in Liquid Media, AIChE J. 12 (1966) S. 854.
- [9] BHAGA, D.; WEBER, M. E. Bubbles in Viscous Liquids: Shapes, Wakes and Velocities, J. Fluid Mech. 105 (1981) S. 61.
- [10] SAMSTAG, M. Experimentelle Untersuchungen von Transportphänomenen in vertikalen turbulenten Luft-Wasser-Blasenströmungen, Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte FZKA 5662, Februar 1996.

Untersuchung katalytisch aktiver, molekular geprägter Polymere unter Aspekten der chemischen Reaktionstechnik*

OLIVER BRÜGGEMANN * *

1 Problemstellung

In der chemischen Reaktionstechnik werden meist besonders hohe Anforderungen an Katalysatoren gestellt. Gerade, wenn es sich um teure Materialien handelt, sollen diese

* Vortrag anlässlich der ACHEMA 2000, 23. Mai 2000 in Frankfurt/M.

** Dr. O. BRÜGGEMANN, Institut für Technische Chemie – TC 8, TU Berlin, Straße des 17. Juni 124, D-10623 Berlin.

ohne Effizienzverluste möglichst lang verwendbar sein und sich gleichzeitig robust gegenüber den verschiedensten Belastungen zeigen. Dies trifft allerdings nicht oder nur selten für die häufig eingesetzten Edelmetalle oder Enzyme zu. Edelmetalle werden meist schon z.B. durch Spuren von Schwefelwasserstoff deaktiviert, wohingegen Enzyme inhiert werden können oder bei hohen Temperaturen oder extremen pH-Werten häufig denaturieren.

Um diese Probleme umgehen zu können, werden seit einigen Jahren künstliche Katalysatoren erzeugt, die, ähnlich der Wechselwirkung eines Substrats mit einem geeigneten Enzym, basierend auf einem Schlüssel-Schloss-Prinzip konzipiert wurden. Dabei verwendet man die Technik des „Molekularen Imprinting“, bei dem funktionelle Monomere und Quervernetzer in Anwesenheit von Templat-Molekülen polymerisiert werden [1, 2], resultierend in spezifischen Abdrücken der Template im Polymernetzwerk (s. Abb. 1). Nach dem Eluieren des Templatmoleküls bleiben hochspezifische Abdrücke zurück. Derart geprägte Kunststoffe wurden in der Vergangenheit in erster Linie für den Einsatz in der Chromatographie [3–6] und Extraktion konzipiert, aber auch die Verwendbarkeit in Assays oder in der Sensortechnik [7] wurde bereits demonstriert. Darüber hinaus werden solche Polymere aber auch als Katalysatoren eingesetzt [8]. Die Abdrücke fungieren dabei als katalytisch aktive Zentren, wenn als Templat ein Übergangszustand-Analogon (TSA) einer definierten Reaktion verwendet worden ist. Der Abdruck stabilisiert den Übergangszustand dieser Reaktion, wenn das Polymer mit dem jeweiligen Edukt bzw. Substrat einen Komplex bildet und somit die Aktivierungsenergie der Reaktion reduziert, die Reaktion also katalysiert.

Die geprägten Polymere (MIP) zeigen deutlich höhere Langzeitstabilitäten als die erwähnten Biomaterialien, sie sind in verschiedenen organischen Lösungsmitteln verwendbar und zudem kostengünstig herstellbar. Bisher beschränkten sich die wenigen Publikationen auf dem Gebiet der molekular geprägten Polymer-Katalysatoren auf den qualitativen Beweis eines katalytischen Effekts. So werden beispielsweise Ester-Verseifungen beschrieben, bei denen allerdings der geprägte Katalysator die Reaktion im Ver-

Abbildung 1. Prinzip des molekularen Prägens.

