

Untersuchung der Dynamik fluider Partikel auf Basis der Volume of Fluid Methode

Martin Schmidtke

Januar 2009



Wissenschaftlich-Technische Berichte
FZD-502
Januar 2009

Martin Schmidtke

**Untersuchung der Dynamik fluider Partikel
auf Basis der Volume of Fluid Methode**

Untersuchung der Dynamik fluider Partikel auf Basis der Volume of Fluid Methode

Von der Fakultät für Naturwissenschaften

- Department Chemie -
der Universität Paderborn

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Naturwissenschaften

- Dr. rer. nat. -

genehmigte

Dissertation

von

Martin Schmidtke

aus Paderborn

Paderborn, Januar 2008

Abstract

Two phase flows occur in many natural and technological processes. An example of a two phase flow is the free rise of fluid particles (bubbles and droplets) in a liquid. In bubble columns and extraction devices many fluid particles move simultaneously. For the simulation of their movement in such devices, models for the momentum transfer between the particles and the surrounding fluid are needed. Such models can be obtained either from experimental observations or by simulations of single fluid particles.

The simulations presented in this thesis were performed with the CFD code *FS3D* which is based on the Volume of Fluid (VoF) method. The code is validated using analytical solutions for creeping flows and a good agreement is observed between simulation and analytical solution.

In the first part of the thesis, the free rise of oil drops in water is simulated and compared with experimental observations. The results show that the rising velocities and the drag coefficients are similar in both cases, but the simulated drops are flatter (more oblate). This difference may be caused by impurities of the particle surface (surfactants) in the experiments. The simulations show that the transition from rectilinear to periodic trajectories is caused by instabilities in the wake, which lead to a periodic vortex shedding.

In the second part of the thesis, the rise of bubbles in linear shear flows is investigated. If bubbles rise in a vertical shear flow, a lateral migration can be observed. This migration is caused by the so called lift force. Sign and magnitude of the lift force depend on the size of the bubble and the material properties of the liquid. The simulation results show that the sign of the lift force on spherical bubbles can be explained by the Bernoulli effect. However, the lift force on more distorted bubbles acts in the opposite direction. This phenomenon can also be observed in the simulation. In this work several hypotheses for the reason of this phenomenon are checked.

Furthermore, most common correlation for the lift force (developed by Tomiyama et al. in 2002) is validated for fluids of known material and model fluids with arbitrary material data. The correlation is valid in a wider range of fluid material properties than proved experimentally up to now.

Zusammenfassung

In vielen natürlichen und verfahrenstechnischen Prozessen treten zweiphasige Strömungen auf. Ein Beispiel einer zweiphasigen Strömung ist der freie Aufstieg von fluiden Partikeln (Blasen oder Tropfen) in einer Flüssigkeit, etwa in Blasensäulen oder Extraktionsanlagen. Für Simulationen derartiger Apparaturen, in denen sich eine Vielzahl von fluiden Partikeln bewegt, werden Modelle für den Impulsaustausch zwischen den Partikeln und der umgebenden Flüssigkeit benötigt. Diese können durch experimentelle Beobachtung oder durch die Simulation einzelner fluider Partikel gewonnen werden.

Die in dieser Arbeit vorgestellten Simulationen aufsteigender fluider Partikel wurden mit dem CFD-Programm *FS3D* durchgeführt, welches auf der Volume-of-Fluid (VoF) Methode basiert. Die Validierung des Codes erfolgt durch Vergleich der numerischen Lösungen für schleichende Strömungen mit analytischen Lösungen, wobei eine gute Übereinstimmung festgestellt wird.

Im ersten Teil der Dissertation werden Simulationen für den freien Aufstieg von Öltropfen in Wasser mit experimentellen Beobachtungen hinsichtlich der Aufstiegsgeschwindigkeit, der Tropfenform und der Bewegungsbahn verglichen. Die Aufstiegsgeschwindigkeiten und Widerstandsbeiwerte sind vergleichbar, die simulierten Tropfen sind jedoch deutlich flacher. Dieser Unterschied kann durch Verunreinigungen der Grenzfläche im Experiment verursacht sein. Der Übergang von einem gradlinigen Aufstieg zu zickzack-förmigen Aufstiegsbahnen kann mit Hilfe der Simulationen auf Instabilitäten im Nachlauf der Blasen zurückgeführt werden, die zu einer periodischen Wirbelablösung führen.

Im zweiten Teil der Dissertation wird der Aufstieg von Blasen in linearen Scherströmungen untersucht. Steigen die Blasen in einer vertikalen Scherströmung auf, so beobachtet man eine seitliche Migration. Diese seitliche Migration der Blasen wird durch die sogenannte Liftkraft verursacht, deren Vorzeichen und Betrag von der Blasengröße und den Stoffeigenschaften der Flüssigkeit abhängt. Die Simulationen zeigen, daß das Vorzeichen der Liftkraft für eher sphärische Blasen durch den Bernoulli-Effekt erklärt werden kann. An stark deformierten Blasen hingegen wirkt die Liftkraft in umgekehrter Richtung. Dieses Phänomen tritt auch in den Simulationen auf. Verschiedene Hypothesen für die Ursache dieses Phänomens werden überprüft.

Die bekannteste experimentelle Korrelation für die Liftkraft von Tomiyama u.a. (2002) wird durch Simulation von realen Flüssigkeiten mit bekannten Stoffeigenschaften wie auch von Modellfluiden mit willkürlichen Stoffeigenschaften validiert und weitgehend bestätigt. Die Lift-Korrelation hat demnach hinsichtlich der Stoffeigenschaften der Flüssigkeit einen größeren Geltungsbereich, als bisher experimentell überprüft wurde.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Hydrodynamik fester und fluider Partikel	5
2.1. Der Strömungswiderstand fester Kugeln	5
2.2. Das Diagramm von Clift, Grace und Weber	7
3. Kontinuumsmechanische Modellierung	11
3.1. Bilanzierung von Zweiphasenströmungen	11
3.1.1. Integrale Bilanzen	11
3.1.2. Differenzielle Bilanzen	15
3.1.3. Sprungbedingungen	16
3.1.4. Randbedingungen	17
4. Numerische Verfahren	19
4.1. Die VoF-Methode	19
4.2. Implementierung der Grenzflächenkraft	21
5. Dimensionsanalyse der Navier-Stokes-Gleichungen	23
5.1. Die einphasigen Navier-Stokes-Gleichungen in dimensionsloser Form .	23
5.2. Die mehrphasigen Navier-Stokes-Gleichungen in dimensionsloser Form	26
6. Validierung des Codes FS3D	29
6.1. Die Hadamard-Rybczynski-Lösung	29
6.2. Numerische Lösungen für langsame, sphärische fluide Partikel	31
I. Bewegung von Öltropfen in Wasser	39

7. Simulation von Maisöltropfen	43
7.1. Konfiguration des Rechengebietes	43
7.2. Einfluß des Wandabstandes auf die Aufstiegs- geschwindigkeit	43
7.3. Geschwindigkeiten innerhalb des Tropfens	44
7.4. Trajektorien	49
7.5. Aufstiegs- geschwindigkeiten und Tropfenformen	53
7.6. Einfluß der trägen Masse fluid- er Partikel auf das Aufstiegs- verhalten	54
8. Rizinusöl	57
8.1. Aufstiegs- geschwindigkeiten und Tropfen- formen	57
9. Widerstandsbeiwerte für Öltropfen	59
10. Zusammenfassung des ersten Teils	61
II. Blasen- aufstieg in linearen Scher- strömungen	63
11. Stand des Wissens	65
11.1. Blasen in vertikalen Rohren	65
11.2. Theoretische Untersuchungen zu kugelförmigen Blasen in linearen Scherströmungen	68
11.3. Das Experiment von Tomiyama	69
12. Simulation von Blasen in Glycerinlösungen	71
12.1. Randbedingungen	71
12.2. Blasenformen und Aufstiegs- geschwindigkeiten	72
12.3. Aufstiegsbahnen	75
12.4. Die Bestimmung des Liftkoeffizienten C_L aus Blasen- trajektorien	78
12.5. Die Abhängigkeit des Liftkoeffizienten von der Scherrate	80
12.6. C_L in Abhängigkeit vom Blasen- durchmesser	81
12.7. Abhängigkeit der simulierten Lift- koeffizienten von der Auflösung	82
12.8. Variation der Oberflächenspannung	85
12.9. Variation der Gravitation	89
12.10. Luftblasen in Wasser	90

13. Untersuchung der Geschwindigkeits- und Druckfelder an der Phasengrenze	95
13.1. Zweidimensionale Blasen	95
13.1.1. Zirkulation um zweidimensionale Blasen	96
13.1.2. Dynamischer Druck um zweidimensionale Blasen	97
13.2. Dreidimensionale Blasen	100
13.2.1. Zirkulation um dreidimensionale Blasen	100
13.2.2. Dynamischer Druck und Scherkraft an der Phasengrenze . . .	103
13.2.3. Validierung des Verfahrens zur Berechnung der Kräfte an der Phasengrenze	104
14. Horizontalgeschwindigkeiten im Blasennachlauf	109
15. Zusammenfassung des zweiten Teils	115
A. Anhang	117
A.1. Symbolverzeichnis	117
A.2. Das Druckfeld in einem Hill'schen Wirbel	119
A.3. Konstruktion einer einhüllenden Fläche parallel zur Phasengrenze . .	122
A.4. Geschwindigkeitsfeld um einen oszillierenden Öltropfen	124
Literaturverzeichnis	127

1. Einleitung

In vielen natürlichen oder verfahrenstechnischen Prozessen treten Strömungen auf, in denen zwei Fluide gemeinsam transportiert werden. Ist die gegenseitige Löslichkeit gering, so bildet sich zwischen den beiden Fluiden eine Grenzschicht, die sogenannte Phasengrenze. In diesem Falle spricht man von einer zweiphasigen Strömung. Die Fluide werden auch Phasen genannt. Zweiphasige Strömungen mit einer beweglichen Phasengrenze bestehen entweder aus zwei flüssigen Phasen (etwa Wasser und Öl) oder einer flüssigen und einer gasförmigen Phase (z.B. Wasser und Luft). Zwei Gase hingegen können sich auf molekularer Ebene vermischen. Hier tritt keine lokalisierbare Phasengrenze auf, weshalb sie einphasige Systeme bilden. Ein anderer Typus von Zweiphasenströmungen ist der Transport fester Partikel in einem Fluid, beispielsweise von Sand in Wasser oder in Luft. Dabei wird die Gesamtheit der Partikel als eine (feste) Phase bezeichnet. Die Oberfläche der einzelnen Partikel stellt in diesem Fall eine starre Phasengrenze dar.

Wenn eine Phase auf getrennte Gebiete verteilt ist, die von der zweiten zusammenhängenden Phase vollständig umschlossen sind, so wird die zusammenhängende Phase *kontinuierliche Phase* genannt. Die andere Phase wird als *disperse Phase* bezeichnet (siehe Abbildung 1.1 auf Seite 3). Die Gebiete mit disperser Phase bilden feste oder fluide Partikel. Fluide Partikel sind je nach Aggregatzustand der dispersen Phase entweder Tropfen oder Blasen. In der vorliegenden Arbeit wird das Bewegungsverhalten einzelner fluider Partikel mittels numerischer Simulation untersucht. In Teil 1 wird der Aufstieg von Öltropfen in Wasser behandelt. In Teil 2 geht es um die Bewegung von Luftblasen in Wasser oder wässrigen Lösungen. Die Motivation für diese Untersuchungen und die entsprechenden verfahrenstechnischen Anwendungen sind zu Beginn der jeweiligen Teile skizziert.

Mittels der in dieser Arbeit verwendeten Volume-of-Fluid (VoF) Methode ist es möglich, die Bewegung der Phasengrenze und damit die Formänderungen eines fluiden Partikels zu erfassen. Der numerische Aufwand ist recht hoch, weshalb bei der

heute zur Verfügung stehenden Rechnerleistung mit dieser Methode eine gemeinsame Bewegung für höchstens einige wenige Partikel simuliert werden kann. In technisch relevanten Prozessen hingegen bewegen sich tausende Tropfen oder Blasen gleichzeitig. Will man derartige Prozesse unter Verwendung von Simulationen optimieren, werden daher vereinfachende Modelle verwendet, welche die individuelle veränderliche Form der einzelnen Partikel vernachlässigen. So werden beispielsweise in der Euler-Lagrange-Methode die Partikel als punktförmige Objekte betrachtet, an denen verschiedene Kräfte als sogenannte Punktkräfte ansetzen. Die Bahn der einzelnen Partikel wird berechnet, ebenso wie die Entwicklung der Strömung der kontinuierlichen Phase. Eine weitere Vergrößerung der Betrachtungsweise führt zur Euler-Euler-Methode. Hier wird die Gesamtheit der festen oder flüssigen Partikel als Fluid betrachtet, welche das Fluid der kontinuierlichen Phase vollständig durchdringt. Die Individualität der Partikel wird dabei vernachlässigt. Die Verteilung der Partikel wird nur noch in Form einer örtlichen Partikeldichte beschrieben, beispielsweise als Skalarfeld α_p , welches für jeden Ort den Volumenanteil der dispersen Phase angibt. Zur Schließung abgeleiteter Modelle ist die Beschreibung der Kräfte auf disperse Partikel in Abhängigkeit von lokalen Strömungseigenschaften sowie von Größe und Form der Partikel zwingend erforderlich.

Derartige Partikelkräfte sind beispielsweise die Auftriebskraft und die Widerstandskraft, welche der Bewegung des Partikels durch die kontinuierliche Phase entgegenwirkt. Der Impulsaustausch zwischen kontinuierlicher und disperser Phase läßt durch die Partikelkräfte beschreiben. Wird beispielsweise einerseits die Bewegung der Partikel durch die Widerstandskraft abgebremst, so wird andererseits (nach dem Prinzip „actio gleich reactio“) gleichzeitig das die Partikel umgebende kontinuierliche Fluid beschleunigt. Die Genauigkeit der für die Auslegung technischer Apparaturen benutzten Simulationsmethoden hängt entscheidend davon ab, wie akkurat die verwendeten Modelle für die an den fluiden Partikeln wirksamen Kräfte sind.

Die in dieser Arbeit vorgestellten Untersuchungen dienen einerseits dazu, mehr Verständnis über die Entstehung der an fluiden Partikeln wirkenden Kräfte zu gewinnen; andererseits dazu, Modelle für Punktkräfte zu verbessern oder zu bestätigen. Im Teil 1 geht es in erster Linie um die Widerstandskraft an in Wasser aufsteigenden Öltropfen und der sich daraus ergebenden Aufstiegsgeschwindigkeit. Teil 2 behandelt neben der Widerstandskraft an Blasen hauptsächlich die sogenannte *Liftkraft*, die in

Scherströmungen auftritt. Diesen beiden Hauptteilen sind jeweils einige einführende Kapitel vorangestellt, in denen die relevanten theoretischen Grundlagen, numerischen Methoden und empirischen Korrelationen beschrieben sind.

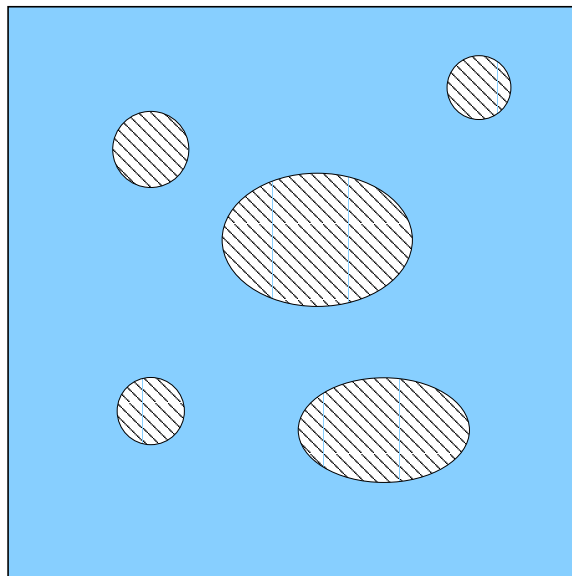


Abbildung 1.1.: Verteilung von kontinuierlicher und disperser Phase in einem Gebiet.
Blau: Kontinuierliche Phase. Weiß (schraffiert): Disperse Phase.

2. Hydrodynamik fester und fluider Partikel

2.1. Der Strömungswiderstand fester Kugeln

Weil die Kugel der einfachste geometrische Körper ist, beziehen sich die meisten Untersuchungen zu Partikelbewegungen in Flüssigkeiten auf Kugeln. Der Strömungswiderstand eines Körpers kann durch eine dimensionslose Kennzahl C_D charakterisiert werden. Diese Kennzahl C_D ist im Allgemeinen formspezifisch und wird Widerstandsbeiwert (engl.: *drag coefficient*) genannt. Sie ist definiert als Quotient aus der Widerstandskraft F_W und der Kraft des dynamischen Druckes auf der angeströmten Querschnittsfläche A des Körpers:

$$C_D = \frac{F_W}{\frac{1}{2}\rho w^2 A} . \quad (2.1)$$

Hier ist ρ die Dichte des Fluids und w die Strömungsgeschwindigkeit. Die angeströmte Querschnittsfläche A ist die Fläche der Projektion des Körpers in Strömungsrichtung. Für eine Kugel ist dies eine Kreisfläche. Weil A im Nenner von (2.1) auftritt, ist der Widerstandsbeiwert nicht von der Größe eines Körpers abhängig, sondern ausschließlich von der Form. Es besteht jedoch eine Abhängigkeit des Widerstandsbeiwertes von der Geschwindigkeit w , beziehungsweise von der zu w proportionalen Reynoldszahl. Die Reynoldszahl ist eine dimensionslose Kennzahl, die das Verhältnis von Trägheitskraft zu Zähigkeitskraft angibt,

$$\text{Re} = \frac{\rho L w}{\mu} . \quad (2.2)$$

Hier ist μ die dynamische Viskosität des Fluids und L eine charakteristische Länge des Körpers. Im Falle einer Kugel ist der Durchmesser die charakteristische Länge. Für sehr kleine Strömungsgeschwindigkeiten ($\text{Re} \ll 1$) kann der Widerstandsbeiwert von Kugeln analytisch hergeleitet werden (vgl. Abschnitt 6.1).

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}} \quad \text{für } \text{Re} \ll 1 . \quad (2.3)$$

Für größere Reynoldszahlen kann der Widerstandsbeiwert nur experimentell ermittelt werden. Eine besonders einfache Methode ist es, eine Kugel so lange im fluiden Medium aufsteigen oder fallen zu lassen, bis sie eine konstante Endgeschwindigkeit w_T erreicht hat. Dann sind Auftriebskraft und Widerstandskraft im Gleichgewicht:

$$C_D \frac{1}{2} \rho w_T^2 A = g \Delta \rho V . \quad (2.4)$$

Hier ist $\Delta \rho$ die Differenz zwischen Kugeldichte und der Dichte des fluiden Mediums. Setzt man für die Querschnittsfläche $A = \pi d^2 / 4$ und für das Volumen $V = \pi d^3 / 6$ der Kugel in (2.4) ein, so ergibt sich mit d als Kugeldurchmesser

$$C_D = \frac{4}{3} \frac{\Delta \rho}{\rho} \frac{gd}{w_T^2} . \quad (2.5)$$

Für den Widerstandsbeiwert C_D von Kugeln gibt es zahlreiche Korrelationen, die einen unterschiedlichen Geltungsbereich in Bezug auf die Reynoldszahlen haben. Einen sehr großen Geltungsbereich deckt die Korrelation von Turton und Levenspiel ab, die auf einer sehr breiten Datenbasis vieler verschiedener Experimentatoren beruht (Turton und Levenspiel, 1986). Danach ist

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}} (1 + 0,173 \text{Re}^{0,675}) + \frac{0,413}{1 + 16300 \text{Re}^{-1,09}} \quad \text{für } \text{Re} < 10^5 . \quad (2.6)$$

Im Intervall $10^3 < \text{Re} < 10^5$ ist der Widerstandsbeiwert nahezu konstant ($C_D \approx 0,47$, siehe Abbildung 7.2, S. 46). Dies wurde bereits von Newton beobachtet, weshalb man hier auch von dem Newton'schen Bereich spricht. Newton hatte hierzu Fallexperimente von der Kuppel der St.-Pauls-Kathedrale in London durchgeführt.

Wenn feste Kugeln in Flüssigkeiten frei aufsteigen oder sinken, kann durch eine periodische Wirbelablösung im Nachlauf eine zickzack-förmige Bewegung auftreten (Haljasmaa, 2006). Mit dem Einsetzen einer derartigen seitlichen Oszillation ist eine deutliche Absenkung der Vertikalgeschwindigkeit verbunden. Demzufolge liegt der Widerstandsbeiwert für oszillierende Kugeln deutlich höher als nach (2.6). Eine seitliche Oszillation der Kugel kann unterbunden werden, indem man sie in einem Strömungskanal fixiert. Gleichung (2.6) gilt für fixierte Kugeln sowie für geradlinig aufsteigende oder sinkende Kugeln.

2.2. Das Diagramm von Clift, Grace und Weber

Im Gegensatz zu festen Kugeln besitzen fluide Partikel eine bewegliche Phasengrenze. Dadurch sind Formveränderungen möglich. Die Partikelform kann grob durch das Durchmesser Verhältnis d_V/d_H charakterisiert werden, wobei d_V der vertikale und d_H der horizontale Durchmesser sind. Die Partikelgröße wird entweder durch sein Volumen V beschrieben oder durch den Äquivalenzdurchmesser d , der den Durchmesser einer Kugel gleichen Inhalts angibt:

$$d = (6V/\pi)^{1/3} . \quad (2.7)$$

Je nach Größe und Aufstiegsgeschwindigkeit werden für fluide Partikel vier verschiedene Formklassen unterschieden: Kugelförmig (sehr klein oder sehr langsam), ellipsoid, wobbelnd (d.h. amorph, formveränderlich) und kappenförmig. Die Kappenform wird nur bei sehr großen Blasen beobachtet. Die größten Tropfen sind wobbelnd. Tropfen in der Größe von Kappenblasen sind nicht stabil; sie zerfallen. Für kugelförmige fluide Partikel beobachtet man in Experimenten oft die gleiche Aufstiegsgeschwindigkeit bzw. Widerstandsbeiwerte wie bei festen Kugeln. Offenbar findet eine Bewegung der inneren Grenzschicht parallel zur Phasengrenze nicht statt. Diese Immobilisierung der Phasengrenze kann durch Anlagerung von oberflächenaktiven Molekülen (sogenannten „Surfactants“) verursacht werden. Derartige Stoffe (wie z.B. Tenside) sind in Flüssigkeiten stets enthalten, wenn sie nicht aufwendig gereinigt werden.

Die Formenvielfalt fluider Partikel macht es außerordentlich schwierig, universelle Korrelationen für ihr Aufstiegsverhalten zu finden. Daher sind Korrelationen für die Aufstiegsgeschwindigkeit oder die Partikelform im Allgemeinen auf einen engen Wertebereich bezüglich der Partikelgröße oder der Stoffeigenschaften beschränkt. Eine Ausnahme bildet hier das Diagramm von Clift, Grace und Weber, welches für einen außerordentlich großen Wertebereich eine Möglichkeit zur Abschätzung der Formklasse und der Aufstiegsgeschwindigkeit fluider Partikel bietet. Die Aufstiegsgeschwindigkeit wird in Form der Reynoldszahl $Re_c = \rho_c w_T d / \mu_c$ des Partikels (bezogen auf das umgebende kontinuierliche Fluid mit der Dichte ρ_c und der Viskosität μ_c) angegeben. Das Diagramm 2.1 gibt Re_c in Abhängigkeit von zwei weiteren dimensionslosen Kennzahlen an, die ihrerseits von der Partikelgröße und den Stoffeigenschaften der

Fluide abhängen. Diese sind die Eötvöszahl

$$\text{Eö} = \frac{g \Delta \rho d^2}{\sigma}, \quad (2.8)$$

welche die Auftriebskraft zur Oberflächenspannung ins Verhältnis setzt, und die Morton-Zahl

$$\text{Mo} = \frac{g \Delta \rho \mu_c^4}{\rho_c^2 \sigma^3}, \quad (2.9)$$

die die Stoffeigenschaften charakterisiert. Ausgenommen vom Geltungsbereich dieser Korrelation von Clift et al. (1978) sind Tropfen in Gas (etwa Regentropfen) d.h. Situationen, in denen Dichte und Viskosität des Partikels um mehr als eine Größenordnung höher ist als die des kontinuierlichen Fluids.

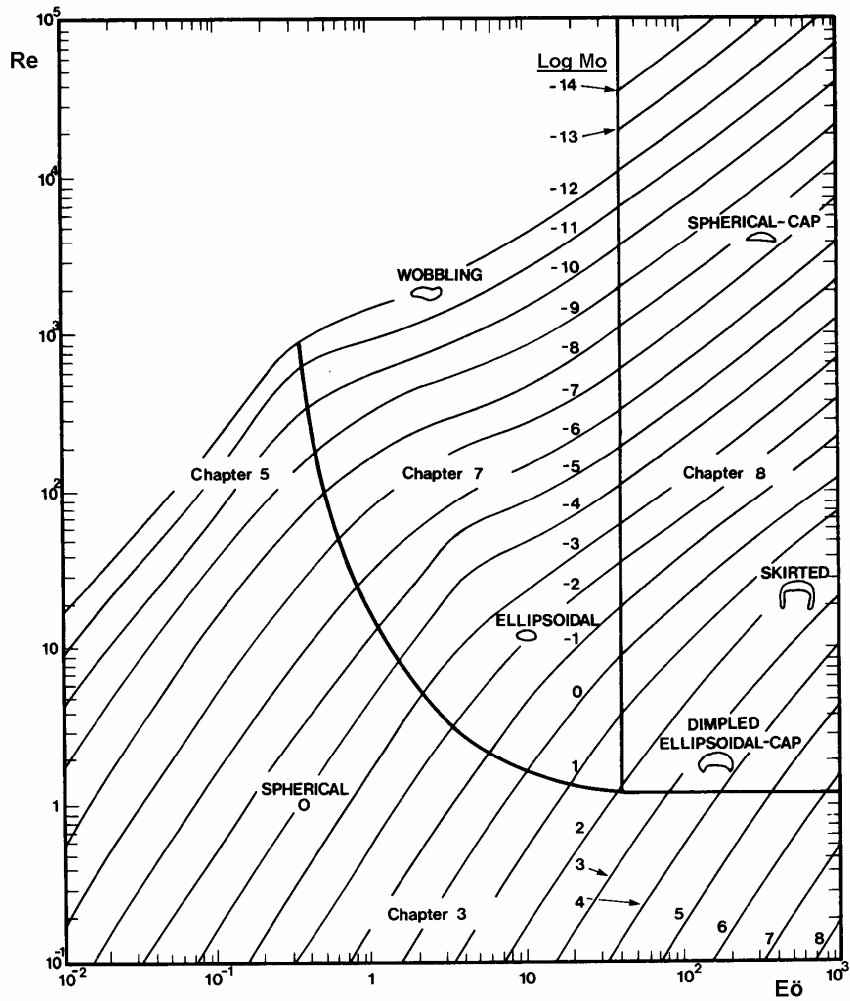


Abbildung 2.1.: Diagramm zur Abschätzung von Form und Geschwindigkeit fluidier Partikel von Clift et al. (1978).

3. Kontinuumsmechanische Modellierung

3.1. Bilanzierung von Zweiphasenströmungen

Die hier verwendete kontinuumsmechanische Modellierung setzt voraus, dass die betrachteten Volumenelemente eine große Anzahl von Molekülen enthalten, damit innerhalb jeder Phase die makroskopischen Größen (wie zum Beispiel die Dichte ρ) als stetige Funktionen beschrieben werden können. Die Phasengrenze Γ zeichnet sich dadurch aus, daß mindestens eine dieser Größen an Γ unstetig ist. Im Allgemeinen unterscheiden sich zwei Fluide sowohl in der Dichte als auch in der Viskosität, so daß beide Größen an der Phasengrenze unstetig sind. Die Phasengrenze selbst wird als masselose, stückweise glatte Fläche angenommen. Im Folgenden werden zunächst die integralen und dann die differentiellen Bilanzen für Zweiphasenströmungen aufgestellt.

3.1.1. Integrale Bilanzen

Aus der Bilanzierung der Größen Masse, Impuls und Energie über ein Kontrollvolumen, welches die Phasengrenze schneidet, ergeben sich die integralen Bilanzgleichungen für zweiphasige Strömungen.

Zwei auf molekularer Ebene nicht vermischbare (d.h. gegenseitig nicht lösbare) Fluide befinden sich jeweils in den Teilgebieten $\Omega^-(t)$ und $\Omega^+(t)$ im Gebiet $G \subset \mathbb{R}^3$. Die Phasengrenze $\Gamma(t)$ zwischen den Teilgebieten bewegt sich mit der Geschwindigkeit \mathbf{u}_Γ . Die Flächennormale \mathbf{n}_Γ zeigt in Richtung $\Omega^+(t)$. Das für die Bilanzierung verwendete Kontrollvolumen $V(t)$ schneidet die Phasengrenze $\Gamma(t)$ (siehe Abbildung 3.1).

Massenbilanz

Ein ortsfestes Volumen V enthält die Masse $\int_V \rho dV$. Wird ein Flächenelement dA mit der Normalen \mathbf{n} auf seinem Rand mit der Geschwindigkeit \mathbf{u} durchströmt, so fließt durch dA pro Zeiteinheit die Masse $\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA$. Aus der Massenerhaltung folgt: Die Massenänderung in V ist gleich der Masse, die über den Rand ∂V fließt. Also gilt

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = - \int_{\partial V} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA, \quad (3.1)$$

oder umgestellt

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \int_{\partial V} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA = 0 \quad \text{mit} \quad \mathbf{J} = \rho \mathbf{u}. \quad (3.2)$$

Die vektorielle Größe \mathbf{J} wird Massenstromdichte genannt. Für eine Fläche mit der Normalen \mathbf{n} gibt $\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}$ die Rate des Massenflusses pro Flächeneinheit an. Im Sonderfall, daß ρ innerhalb jeder Phase konstant ist, tritt eine Massenänderung im Kontrollvolumen V genau dann ein, wenn sich die Phasengrenze durch V bewegt. Die Dichte ρ an einem Punkt innerhalb von V hängt dann davon ab, auf welcher Seite der Phasengrenze sich der Punkt befindet.

Impulsbilanz

Es wird hier ein Volumen $V(t)$ betrachtet, welches mit der Strömung mitbewegt wird. Der Impuls dieses Volumens beträgt

$$\mathbf{I}(t) = \int_{V(t)} \rho \mathbf{u} dV. \quad (3.3)$$

Die Rate der Impulsänderung eines Körpers ist nach dem 2. Newton'schen Gesetz die Summe aller angreifenden Kräfte

$$\frac{d}{dt} \mathbf{I}(t) = \sum_i \mathbf{F}_i. \quad (3.4)$$

Es wird grundsätzlich zwischen zwei verschiedenen Krafttypen unterschieden:

Körperkräfte wirken auf alle Teilchen eines Volumens durch ein Kraftfeld. Es kann sich beispielsweise um ein elektrisches, magnetisches oder Gravitationsfeld handeln. Die massenspezifische Kraftdichte $\rho \mathbf{f}$ wirkt im gesamten Volumen. Daher werden sie auch *Volumenkräfte* genannt.

Kontaktkräfte wirken an der Oberfläche eines Volumens, weshalb sie auch *Oberflächenkräfte* genannt werden. Ihre flächenspezifische Dichte $\mathbf{S}_{\partial V(t)}$ hat die Einheit Kraft pro Fläche. Beispiele sind Druckkraft und Schubspannungen.

Für die Impulsänderung gilt demnach:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \mathbf{u} dV = \mathbf{S}_{\partial V(t)} + \int_{V(t)} \rho \mathbf{f} dV . \quad (3.5)$$

In idealen (d.h. reibungsfreien) einphasigen Fluiden treten keine Schubspannungen auf. Als Oberflächenkraft tritt dann nur der Druck p in Erscheinung. Auf ein Flächenelement dA mit der Normalen \mathbf{n} wirkt die Kraft $p\mathbf{n}dA$, d.h.

$$\mathbf{S}_{\partial V(t)} = - \int_{\partial V(t)} p \mathbf{n} dA . \quad (3.6)$$

In reibungsbehafteten Fluiden treten Spannungskräfte auf. In zweiphasigen Systemen kommen Grenzflächenkräfte hinzu. Dadurch erweitert sich die Impulsbilanz zu

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \mathbf{u} dV = \int_{V(t)} \rho \mathbf{f} dV + \int_{\partial V(t)} \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} dA + \mathbf{F}_{A(t)} . \quad (3.7)$$

Hierbei ist der Spannungstensor \mathbf{T} eine 3×3 -Matrix mit $\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \mathbf{S}$. Darin ist \mathbf{I} die Einheitsmatrix und \mathbf{S} der viskose Spannungstensor, welcher die durch innere Reibung verursachten Spannungskräfte beschreibt. Schneidet das Kontrollvolumen $V(t)$ die Grenzfläche $\Gamma(t)$, so liefert die Schnittfläche $A = \Gamma(t) \cap V(t)$ den Beitrag $\mathbf{F}_{A(t)}$ durch die Grenzflächenspannung. Um diesen Beitrag herzuleiten, betrachten wir den Rand von A , welcher die geschlossene Kurve C bildet (siehe Abbildung 3.1). Wenn

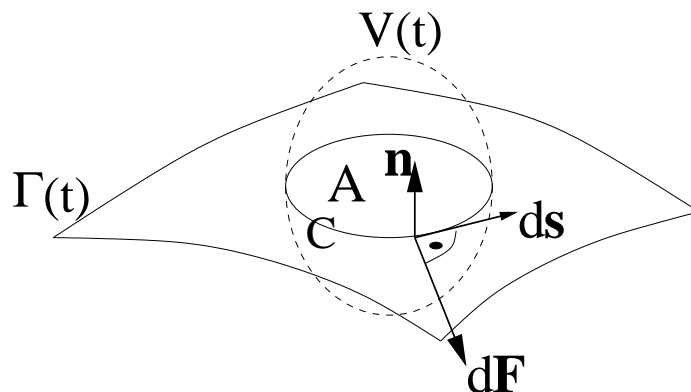


Abbildung 3.1.: Schnitt eines Kontrollvolumens $V(t)$ mit Phasengrenze $\Gamma(t)$.

ds ein Linienelement von C und die äußere Flächennormale an dieser Stelle \mathbf{n}_Γ ist, so wirkt durch die Oberflächenspannung σ auf dieses Element die Kraft $d\mathbf{F}_A = \sigma ds \times \mathbf{n}_\Gamma$ tangential zu Γ . Durch eine Integration über die Randkurve C ergibt sich als gesamte Kraft $F_{A(t)}$, welche auf die Schnittfläche $A(t)$ wirkt:

$$\mathbf{F}_A(t) = \oint_C \sigma (d\mathbf{s} \times \mathbf{n}_\Gamma) = \oint_C ds \times \sigma \mathbf{n}_\Gamma . \quad (3.8)$$

Unter Verwendung des Stokes'schen Satzes kann das Linienintegral um den Flächenrand C in ein Flächenintegral über A umgewandelt werden. Dies liefert

$$\mathbf{F}_A = \int_A (\mathbf{n}_\Gamma \times \nabla) \times \sigma \mathbf{n}_\Gamma dA . \quad (3.9)$$

Der Integrand beschreibt die Flächendichte der Grenzflächenspannung \mathbf{f}_Γ . Sie läßt sich umformen zu:

$$\mathbf{f}_\Gamma = \nabla \sigma - \mathbf{n}_\Gamma (\mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla \sigma) + \sigma \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla \mathbf{n}_\Gamma - \sigma \mathbf{n}_\Gamma (\nabla \cdot \mathbf{n}_\Gamma) . \quad (3.10)$$

Der zweite Term stellt den Normalanteil von $\nabla \sigma$ dar, so daß die beiden ersten Terme zusammen den Tangentialanteil von $\nabla \sigma$ ergeben. Dieser ist der Flächengradient $\nabla_\Gamma \sigma$. Der dritte Term ist gleich Null, und so ergibt sich:

$$\mathbf{f}_\Gamma = \nabla_\Gamma \sigma - \sigma \mathbf{n}_\Gamma (\nabla \cdot \mathbf{n}_\Gamma) . \quad (3.11)$$

Wenn die Oberflächenspannung σ konstant ist, entfällt auch der Term $\nabla_\Gamma \sigma$. Im Allgemeinen ist σ temperaturabhängig und abhängig von der Konzentration oberflächenaktiver Stoffe (*Surfactants*). Diese Stoffe senken zumeist die Oberflächenspannung. Treten räumliche Gradienten in der Temperatur oder in der Konzentration der Surfactants auf, so ist $\nabla_\Gamma \sigma$ ungleich Null. Die hierdurch bewirkten Phänomene werden als Marangoni-Effekte bezeichnet. Der Term $-\nabla \cdot \mathbf{n}_\Gamma$ ist eine skalare Größe und beschreibt die Krümmung κ_Γ der Fläche, die sich aus der Summe ihrer Hauptkrümmungen ergibt (vgl. Gleichung 3.23). Mit

$$\kappa_\Gamma = -\nabla \cdot \mathbf{n}_\Gamma \quad (3.12)$$

erhält man für die Kraft der Oberflächenspannung auf die Fläche A :

$$\mathbf{F}_\Gamma = \int_A \mathbf{f}_\Gamma dA \quad \text{mit} \quad \mathbf{f}_\Gamma = \nabla_\Gamma \sigma + \sigma \kappa_\Gamma \mathbf{n}_\Gamma . \quad (3.13)$$

Für ein ortsfestes Volumenelement V lautet somit die Impulsbilanz:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{u} dV + \int_{\partial V} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA = \int_V \rho \mathbf{f} dV + \int_{V \cap \Gamma(t)} \mathbf{f}_\Gamma dA \quad (3.14)$$

mit dem Fluß $\mathbf{J} = \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \mathbf{T}$ und \mathbf{n}_Γ aus (3.13).

3.1.2. Differenzielle Bilanzen

Die integralen Bilanzen beziehen sich auf ausgedehnte Volumenelemente. Durch den Grenzübergang $|V| \rightarrow 0$ können sie in differentielle Bilanzen überführt werden, die punktweise gelten. Wird als Bilanzvolumen beispielsweise die Kugel $V = B_r(\mathbf{x}_0)$ gewählt, so geschieht der Grenzübergang $|V| \rightarrow 0$ durch Verkleinern des Kugelradius r als Grenzwertbildung $r \rightarrow 0$. Es ergibt sich ein Grenzwert für den Quotienten aus dem Integral der bilanzierten Größe über das Volumen V und dem Volumeninhalt $|V|$.

Massenbilanz

Das Oberflächenintegral auf der rechten Seite der Gleichung (3.1) kann mittels des Divergenztheorems in ein Volumenintegral umgewandelt werden. Es ergibt sich die differentielle Form der Massenbilanz, die auch *Kontinuitätsgleichung* genannt wird:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (3.15)$$

Ist die Dichte ρ konstant, so vereinfacht sich die Kontinuitätsgleichung zu

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0. \quad (3.16)$$

Strömungen, für die dies gilt, nennt man *inkompressibel*. In diesem Fall ist (3.15) äquivalent zu

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = 0. \quad (3.17)$$

Dies reduziert sich für Fluide konstanter Dichte auf die Gleichung (3.16).

Impulsbilanz

Die differentielle Form der Impulsbilanz ergibt sich, wenn das Divergenztheorem auf die Oberflächenintegrale in der integralen Impulsbilanz (3.14) angewandt wird. Wenn die Gravitation (in Richtung der negativen z-Achse) die einzige Volumenkraft ist, so gilt

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \mathbf{T}) = -\rho g \mathbf{e}_z, \quad (3.18)$$

mit dem Spannungstensor $\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \mathbf{S}$. Für Newton'sche Fluide läßt sich der Zähigkeitsspannungstensor \mathbf{S} durch folgende konstituierende Gleichung ausdrücken:

$$\mathbf{S} = \eta(\operatorname{div} \mathbf{u})\mathbf{I} + \mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T), \quad (3.19)$$

mit der Bulkviskosität η und der dynamischen Viskosität μ . Im Falle eines dichtebeständigen Fluids vereinfacht sich die Impulsbilanz zu:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \Delta \mathbf{u} . \quad (3.20)$$

Der Quotient $\mu/\rho = \nu$ wird als kinematische Viskosität bezeichnet. Die Gleichungen (3.20) und (3.15) bilden zusammen Navier-Stokes-Gleichungen. Für *ideale* Fluide, d.h. solche ohne innere Reibung und damit verbundener Energiedissipation, ergeben sich aus den Navier-Stokes-Gleichungen die Euler-Gleichungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) &= -\frac{1}{\rho} \nabla p & \text{und} \\ \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0 . \end{aligned}$$

3.1.3. Sprungbedingungen

Bei Zweiphasenströmungen sind im Allgemeinen sowohl die Dichte als auch die Viskosität an der Phasengrenze unstetig. Der Sprung einer Größe Ψ an der Phasengrenze $\Gamma(t)$ wird als $[\Psi] := \Psi^+ - \Psi^-$ beschrieben, wobei Ψ^+ und Ψ^- die Grenzwerte beiderseits der Phasengrenze bezeichnen. Wenn kein Phasenübergang (Verdampfung oder Kondensation) stattfindet, sind die Normalkomponenten der Geschwindigkeiten an der Grenzfläche identisch.

$$[u_n] = 0 \quad \text{auf } \Gamma(t) .$$

Für viskose Systeme wird Haftung an der Phasengrenze angenommen, d.h. die Tangentialkomponente u_τ ist an der Phasengrenze stetig:

$$[u_\tau] = 0 \quad \text{auf } \Gamma(t) .$$

Aus der Stetigkeit beider Geschwindigkeitskomponenten auf der Phasengrenze folgt die Stetigkeit der gesamten Geschwindigkeit an der Phasengrenze. Für die Massenbilanz lautet die Sprungbedingung demnach

$$[\mathbf{u}] = 0 \quad \text{auf } \Gamma(t) .$$

Für den Impuls gilt an der Phasengrenze

$$[\rho \mathbf{u} \otimes (\mathbf{u} - \mathbf{u}_\Gamma) - \mathbf{T}] \cdot \mathbf{n}_\Gamma = \nabla_\Gamma \sigma + \sigma \kappa_\Gamma \mathbf{n}_\Gamma . \quad (3.21)$$

Für eine räumlich konstante Grenzflächenspannung σ vereinfacht sich (3.21) zu:

$$(p^+ - p^-)\mathbf{n}_\Gamma - [\mathbf{S}] \cdot \mathbf{n}_\Gamma = \sigma \kappa_\Gamma \mathbf{n}_\Gamma . \quad (3.22)$$

In ruhenden Fluiden ist $\mathbf{u} = 0$ und somit auch $\mathbf{S} = \mathbf{0}$. Dann geht Gleichung (3.22) in die Young-Laplace-Gleichung über

$$(p^+ - p^-) = \sigma \kappa_\Gamma = \sigma \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) , \quad (3.23)$$

mit den Krümmungsradien r_1 und r_2 . Eine ausführliche Herleitung der Sprungbilanzen findet sich bei (Ishii, 1975; Slattery, 1999).

3.1.4. Randbedingungen

Um ein System von Differentialgleichungen eindeutig lösen zu können, ist die Kenntnis der Randbedingungen erforderlich. Wenn ein fester Wert für eine Größe auf dem Rand vorgegeben wird, spricht man von einer Dirichlet-Bedingung. Ist die Ableitung am Rand in normaler Richtung festgelegt, so liegt eine Neumann-Bedingung vor. In der Strömungssimulation müssen am Rand des Rechengebietes physikalisch möglichst sinnvolle Randbedingungen für die Geschwindigkeit eingesetzt werden. Im Folgenden werden die häufigsten Randbedingungen aufgeführt:

Haftbedingung: Das Strömungsgebiet ist durch eine feste Wand begrenzt. Sie ist für Fluide undurchdringlich, d.h. die Strömungsgeschwindigkeit hat an der Wand keine normale (zur Wand senkrechte) Komponente u_n . Durch Reibung haftet eine Grenzschicht an der Wand. Tangentiale (zur Wand parallele) Geschwindigkeiten u_τ treten demnach ebenfalls nicht auf:

$$u_n = 0 \quad \text{und} \quad u_\tau = 0 .$$

Schlupf-Randbedingung: Der Rand ist für das Fluid undurchdringlich. An der Wand gibt es keine Haftung und keine Scherspannungen. Dies bedeutet, daß die Ableitung der tangentialen Geschwindigkeit u_τ senkrecht zur Wand (d.h. in Richtung der Flächennormalen \mathbf{n}) verschwindet.

$$u_n = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial u_\tau}{\partial n} = 0 .$$

3. Kontinuumsmechanische Modellierung

Die Schlupf-Randbedingung wird auch für Symmetrieebenen angewendet. Im Falle einer Zweiphasenströmung kommt für die Symmetrieebenen noch die Bedingung hinzu, daß die Phasengrenze stets senkrecht auf eine Symmetrieebene auftrifft.

Einströmbedingung: Beide Geschwindigkeitskomponenten sind auf dem Rand fest vorgegeben:

$$u_n = u_n^0 \quad \text{und} \quad u_\tau = u_\tau^0 .$$

Ausströmbedingung: Beide Geschwindigkeitskomponenten ändern sich nicht in der Richtung senkrecht zum Rand:

$$\frac{\partial u_n}{\partial n} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial u_\tau}{\partial n} = 0 .$$

4. Numerische Verfahren

Will man bei der Simulation zweiphasiger Strömungen den Einfluß der Oberflächenspannung berücksichtigen, so muß zu jedem Zeitpunkt die Form der Phasengrenze bekannt sein, denn die Krümmung der Phasengrenze geht in die Impulsbilanz ein. Es gibt verschiedene numerische Methoden, die Bewegung der Phasengrenze im Rechengebiet zu beschreiben. Die Phasengrenze kann durch Punkte markiert werden, die mit dem Geschwindigkeitsfeld transportiert werden. Ist die Phasengrenze dicht genug mit Markierungspunkten belegt, so läßt sich aus der Position dieser Punkte stets die Grenzfläche rekonstruieren. Eine andere Methode besteht darin, ein mitbewegtes Gitter zu verwenden, welches die Phasengrenze repräsentiert. Im hier verwendeten Code *FS3D* wird die Volume-of-Fluid (VoF) Methode verwendet.

4.1. Die VoF-Methode

Das VoF-Modell wurde von Hirt und Nichols (1981) vorgestellt. Seither wurde es kontinuierlich verbessert (Rider und Kothe, 1998). Der VoF-Code *FS3D* wurde von Rieber (2004) am ITLR Stuttgart entwickelt und verwendet die weiter unten beschriebene PLIC-Methode zur Rekonstruktion der Phasengrenze.

Es wird von zwei inkompressiblen Fluiden ausgegangen, die sich auf molekularer Ebene nicht vermischen (lösen). Dann ist der von beiden Fluiden eingenommene Gesamt- Ω die disjunkte Vereinigung der Phasengrenze Γ mit den beiden Teilräumen Ω_+ und Ω_- , wobei Ω_+ den von der dispersen Phase und Ω_- den von der kontinuierlichen Phase eingenommenen Teilraum bezeichnet. Auf dem Gesamt- Ω kann nun eine sogenannte Phasenindikatorfunktion χ definiert werden als

$$\chi(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{für } \mathbf{x} \in \Omega_+ \\ 0 & \text{sonst .} \end{cases} \quad (4.1)$$

Um das Strömungsproblem numerisch lösen zu können, muß der Raum mittels eines Gitters diskretisiert werden. Dies geschieht auch im hier angewendeten *Finite-*

*Volumen-*Verfahren, in welchem die integralen Bilanzgleichungen für die Volumina der einzelnen Gitterzellen numerisch gelöst werden. Aus der Phasenindikatorfunktion kann auf dem Gitter in natürlicher Weise die sogenannte Volume-of-Fluid Variable f definiert werden, die für jede Zelle einen diskreten Wert annimmt. Die Verteilung der Phasen wird implizit durch die sogenannte Volume-of-Fluid Variable f beschrieben. Jeder Zelle wird ein Wert f zugeordnet, der als Phasenindikator fungiert:

- $f = 0$ die Zelle enthält nur die kontinuierliche Phase .
- $f = 1$ die Zelle enthält nur die disperse Phase.
- $0 < f < 1$ die Zelle enthält beide Phasen, mit dem Volumenanteil f an disperser Phase.

Eine Zelle mit beiden Phasen ($0 < f < 1$) enthält demnach einen Teil der Phasengrenze. Für jeden Zeitschritt wird neben den Bilanzgleichungen für Masse und Impuls der Transport der Volumenanteilsfunktion f berechnet. Die Transportgleichung für f lautet:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \mathbf{u}) = 0 . \quad (4.2)$$

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, aus einer gegebenen f -Verteilung die Phasengrenze zu rekonstruieren. Bei der “Piecewise Linear Interface Construction“ (PLIC) Methode nach Puckett und Saltzman (1992) wird innerhalb einer jeden Zelle ein ebenes Flächenstück als Näherung für die Phasengrenze bestimmt. Dieses Flächenstück ist so orientiert, daß die Flächennormale in Richtung ∇f zeigt. Zudem liegt das Flächenstück so innerhalb der Zelle, daß sie die Zelle entsprechend dem f -Wert in zwei Volumina für die disperse und die kontinuierliche Phase teilt. Die Flächenstücke benachbarter Zellen gehen nach dieser Vorgehensweise im Allgemeinen nicht stetig ineinander über (vgl. Abb. 4.1). Die Kenntnis der Lage und Orientierung der Flächenstücke ist für die Berechnung des konvektiven Transports der beiden Phasen erforderlich. Dies soll an der Zelle mit dem VoF-Wert $f = 0,15$ gezeigt werden. Wenn in einem Zeitschritt der Stoff um eine halbe Zellbreite nach oben transportiert wird, so gelangt aus dieser Zelle nur kontinuierliche Phase (weiß) in die obere Nachbarzelle. Findet der Stofftransport stattdessen um eine halbe Zellbreite nach unten statt, so werden aus der Zelle mit $f = 0,15$ Anteile beider Phasen in die untere Nachbarzelle transportiert.

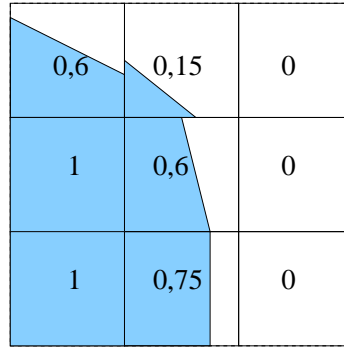


Abbildung 4.1.: Verteilung der VoF-Variablen in einem Gitter und Rekonstruktion der Phasengrenze nach dem PLIC-Verfahren

4.2. Implementierung der Grenzflächenkraft

In die Grenzflächenkraft \mathbf{f}_Γ geht die Krümmung κ_Γ ein. Im Falle konstanter Oberflächenspannung gilt

$$\mathbf{f}_\Gamma = \sigma \kappa_\Gamma \mathbf{n}_\Gamma \quad \text{mit} \quad \kappa_\Gamma = -\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{n}_\Gamma . \quad (4.3)$$

Die Normale der Phasengrenze kann aus der Verteilung der VoF-Variablen bestimmt werden:

$$\mathbf{n}_\Gamma = \frac{1}{|\nabla f|} \nabla f . \quad (4.4)$$

Die Grenzflächenkraft \mathbf{f}_Γ in (4.3) ist nur auf Γ definiert. Im hier verwendeten Code werden alle Bilanzgleichungen in integraler Form gelöst, wobei die betrachteten Volumina V , jeweils die Volumina der Zellen sind. Es bietet sich daher an, auch die Grenzflächenkraft \mathbf{f}_Γ in eine Volumenkraft $\mathbf{f}_{\Gamma,V}$ zu überführen, sodaß

$$\int_{V \cap \Gamma(t)} \mathbf{f}_\Gamma dA = \int_V \mathbf{f}_{\Gamma,V} dV \quad (4.5)$$

gilt. Man kann zeigen, daß im Falle konstanter Oberflächenspannung

$$\mathbf{f}_{\Gamma,V} = \sigma \kappa_\Gamma \nabla f \quad (4.6)$$

die Bedingung (4.5) erfüllt. Dies gilt, weil im Grenzfall unendlich kleiner Zellen ($V \rightarrow 0$) der Ausdruck $|\nabla f|$ in eine Dirac'sche Delta-Funktion übergeht, die nur an der Phasengrenze von Null verschieden ist. Die Berechnung der Grenzflächenkraft

in dieser Form hat jedoch den Nachteil, daß sie nicht konservativ ist. Das heißt, daß die Impulserhaltung im numerischen Verfahren nicht gewährleistet ist.

Für die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen wurde die Grenzflächenkraft in konservativer Form verwendet, d.h. sie ist als Divergenz eines Ausdrucks formuliert. Im Falle konstanter Grenzflächenspannung gilt

$$\nabla_{\Gamma} \cdot (\sigma \mathbf{I} - \sigma \mathbf{n}_{\Gamma} \otimes \mathbf{n}_{\Gamma}) = \sigma \kappa_{\Gamma} \mathbf{n}_{\Gamma} . \quad (4.7)$$

Durch die Verwendung der auf (4.7) basierenden konservativen Form wird gewährleistet, daß auch in der numerischen Umsetzung die Impulserhaltung gilt. Eine genauere Beschreibung dieser Methode findet sich bei (Lafaurie et al., 1994).

5. Dimensionsanalyse der Navier-Stokes-Gleichungen

Um die charakteristischen dimensionslosen Kennzahlen für ein strömungsmechanisches Problem zu ermitteln, können zwei unterschiedliche Methoden gewählt werden. Entweder man wendet das Π -Theorem an, oder man formt die beschreibenden Gleichungen (hier: die Navier-Stokes-Gleichungen) so um, daß sie nur noch dimensionslose Variablen enthalten. Im Folgenden soll der zweite Weg beschrritten werden. In einem ersten Schritt soll dieses Verfahren an den einphasigen Navier-Stokes-Gleichungen demonstriert werden, um es danach auf die zweiphasigen Navier-Stokes-Gleichungen auszudehnen.

5.1. Die einphasigen Navier-Stokes-Gleichungen in dimensionsloser Form

Zunächst sollen also die Navier-Stokes-Gleichungen für einphasige Strömungen untersucht werden. Diese lauten für inkompressible Medien

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla_x \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla_x p + \frac{\mu}{\rho} \Delta_x \mathbf{u} + \mathbf{g}, \quad \text{und} \quad (5.1)$$

$$\nabla_x \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (5.2)$$

Um besonders hervorzuheben, daß sich die räumlichen Ableitungen auf dimensionsbehaftete Ortskoordinaten beziehen, wird der Index 'x' eingeführt: Seien die Komponenten eines Ortsvektors $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$, so ist $\nabla_x := (\partial/\partial x_1, \partial/\partial x_2, \partial/\partial x_3)$. Alle Größen in (5.1) und (5.2) sind dimensionsbehaftet. Um die dimensionsbehafteten Navier-Stokes-Gleichungen in dimensionslose Form zu bringen, werden die dimensionsbehafteten Größen durch Normierung mit charakteristischen Größen in dimensionslose Form überführt. Beispielsweise kann die Geschwindigkeit \mathbf{u} unter Verwendung einer charakteristischen Geschwindigkeit U in eine dimensionslose Geschwindigkeit umgewandelt werden: $\mathbf{v} := \mathbf{u}/U$. Charakteristische Größen sind in der Praxis so zu wählen, daß ihre Größenordnung typisch für die betreffende Anordnung ist. In einem

Rohr beispielsweise bietet es sich an, als charakteristische Geschwindigkeit die mittlere Geschwindigkeit $U = \dot{V}/A$ zu wählen, wobei A der Rohrquerschnitt ist. Ebenso können durch Verwendung einer charakteristischen Zeit τ und einer charakteristischen Länge L jeweils eine dimensionslose Zeit- und eine dimensionslose Ortskoordinate eingeführt werden. Es ergeben sich folgende drei dimensionslose Größen:

$$\begin{aligned} \text{Zeit } s &:= t/\tau, \\ \text{Ortskoordinate } \mathbf{y} &:= \mathbf{x}/L, \\ \text{Geschwindigkeit } \mathbf{v} &:= \mathbf{u}/U. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Demnach bezeichnen hier \mathbf{v} und \mathbf{y} *nicht* die zweite Komponente der dimensionsbehafteten Geschwindigkeit oder Ortskoordinate. Nun sollen die Terme in den dimensionsbehafteten Navier-Stokes-Gleichungen sukzessive durch solche ersetzt werden, in denen nur die dimensionslosen Größen vorkommen. Betrachten wir die Zeitableitung der Geschwindigkeit:

$$\mathbf{v}(s, \mathbf{y}) = \frac{1}{U} \mathbf{u}(\tau s, L\mathbf{y}) \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial s} = \frac{\tau}{U} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{U}{\tau} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial s}. \quad (5.4)$$

Analog hierzu kann man die anderen Ableitungen behandeln. Beispielsweise ergibt sich für die Ortsableitungen des Druckes

$$\frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{1}{L} \frac{\partial p}{\partial y_i} \quad \Rightarrow \quad \nabla_x p = \frac{1}{L} \nabla_y p. \quad (5.5)$$

Insgesamt ergeben sich folgende Ersetzungen:

$$\partial_t \mathbf{u} = \frac{U}{\tau} \partial_s \mathbf{v}; \quad \nabla_x \mathbf{u} = \frac{U}{L} \nabla_y \mathbf{v}; \quad (5.6)$$

$$\nabla_x p = \frac{1}{L} \nabla_y p'; \quad \Delta_x \mathbf{u} = \frac{U}{L^2} \Delta_y \mathbf{v}. \quad (5.7)$$

Dabei gelte $p'(\mathbf{y}) := p(\mathbf{x}/L)$. Die Gleichungen (5.6) und (5.7) werden nun in die dimensionsbehafteten Navier-Stokes-Gleichungen (5.1) und (5.2) eingesetzt. Es folgt:

$$\frac{U}{\tau} \partial_s \mathbf{v} + \frac{U^2}{L} \mathbf{v} \cdot \nabla_y \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho L} \nabla_y p' + \frac{\mu}{\rho} \frac{U}{L^2} \Delta_y \mathbf{v} + \mathbf{g}; \quad (5.8)$$

$$\frac{U}{L} \nabla_y \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (5.9)$$

Durch Multiplikation mit L/U kann Gl. (5.9) weiter vereinfacht werden zu $\nabla_y \cdot \mathbf{u} = 0$. Es liegt nahe, auch die Vorfaktoren auf der linken Seite von Gl. (5.8) auf ähnliche Weise zu beseitigen. Dies wird möglich, wenn die charakteristische Zeit τ als Quotient aus charakteristischer Länge und Geschwindigkeit definiert wird: $\tau := L/U$. Eine solche Festlegung ist durchaus sinnvoll: Wenn beispielsweise L die Länge einer durchströmten Apparatur ist, und U eine mittlere Strömungsgeschwindigkeit, so ergibt sich aus L/U eine mittlere Aufenthaltszeit für fluide Elemente in der Apparatur. Mit dieser Festlegung kann auch die dimensionslose Impulsgleichung (5.8) vereinfacht werden. Somit erhält man für die dimensionslose Impulsgleichung

$$\partial_s \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla_y \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho U^2} \nabla_y p' + \frac{\mu}{\rho L U} \Delta_y \mathbf{v} + \frac{L}{U^2} \mathbf{g}. \quad (5.10)$$

Bis auf den Druck p' sind alle Unbekannten in dieser Gleichung dimensionslos. Mit der Einführung eines charakteristischen Druckes p_0 kann ein dimensionsloser Druck $\tilde{p} := p'/p_0$ eingeführt werden. Die Vorfaktoren der Terme auf der rechten Seite werden zu dimensionslosen Größen zusammengefaßt, die jeweils als Quotient aus zwei Kräften interpretiert werden können.

$$\begin{aligned} \text{Eulerzahl:} \quad \text{Eu} &= p_0 / \rho U^2 && \text{Druck/Trägheit,} \\ \text{Reynoldszahl:} \quad \text{Re} &= \rho U L / \mu && \text{Trägheit/Viskosität,} \\ \text{Froudezahl:} \quad \text{Fr} &= U^2 / g L && \text{Trägheit/Schwere.} \end{aligned}$$

Durch Einsetzen dieser Kennzahlen in die Impulsgleichung ergibt sich mit $\mathbf{e}_g := \mathbf{g}/|\mathbf{g}|$ folgende Form für die dimensionslose Navier-Stokes-Gleichungen:

$$\partial_s \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla_y \mathbf{v} = -\text{Eu} \nabla_y \tilde{p} + \frac{1}{\text{Re}} \Delta_y \mathbf{v} + \frac{1}{\text{Fr}} \mathbf{e}_g, \quad (5.11)$$

$$\nabla_y \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (5.12)$$

Bei gegebenen Anfangs- und Randbedingungen ist die Lösung der einphasigen Navier-Stokes-Gleichungen durch die drei Kennzahlen Re , Eu und Fr festgelegt. Mit anderen Worten: Sind zwei durchströmte Apparaturen geometrisch ähnlich (d.h. bis auf Maßstabsvergrößerung formgleich), und sind Re , Eu und Fr identisch, so entwickeln sich in ihnen auch ähnliche Strömungsfelder. Zwei Strömungsfelder sind ähnlich, wenn es lineare Transformationen nach Art der Gleichungen (5.3) gibt, mit denen das eine in das andere überführt werden kann. Dieser Zusammenhang wird benutzt, um Versuche an maßstabsgetreuen Modellen im Strömungskanal auf die Wirklichkeit zu übertragen.

5.2. Die mehrphasigen Navier-Stokes-Gleichungen in dimensionsloser Form

Analog zur Vorgehensweise im vorangegangenen Kapitel beginnen wir mit den dimensionsbehafteten Navier-Stokes-Gleichungen.

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla_x \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla_x p + \frac{\mu}{\rho} \Delta_x \mathbf{u} + \mathbf{g}, \quad (5.13)$$

$$\nabla_x \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (5.14)$$

$$[\mathbf{u}] = 0, \quad (5.15)$$

$$[p\mathbf{I} - \mathbf{S}] \cdot \mathbf{n} = \sigma \kappa \mathbf{n}. \quad (5.16)$$

Gegenüber den einphasigen Navier-Stokes-Gleichungen sind die Sprungbedingungen (5.15) und (5.16) hinzugekommen. Durch (5.15) wird die Stetigkeit des Geschwindigkeitsfeldes über die Phasengrenze gefordert. Der Drucksprung an der Phasengrenze durch die Oberflächenspannung wird durch (5.16) beschrieben. Die Größen \mathbf{I} und \mathbf{S} sind 3×3 Tensoren, wobei \mathbf{I} eine Einheitsmatrix ist. \mathbf{S} ist der Spannungstensor:

$$\mathbf{S} = \mu(\nabla_x \mathbf{u} + \nabla_x \mathbf{u}^T). \quad (5.17)$$

Die Flächennormale der Phasengrenze \mathbf{n} ist eine Funktion des Ortes und der Zeit, was durch die Schreibweise $\mathbf{n}(t, \mathbf{x})$ ausgedrückt werden soll. Wird zu dimensionslosen Koordinaten $s := t/\tau$ und $\mathbf{y} := \mathbf{x}/L$ übergegangen, so ergibt sich eine neue Funktion für die Flächennormale:

$$\tilde{\mathbf{n}}(s, \mathbf{y}) := \mathbf{n}(\tau s, L\mathbf{y}). \quad (5.18)$$

Analog zum Druck in Gleichung (5.7) ergibt sich für die Krümmung:

$$\kappa = -\nabla_x \cdot \mathbf{n} = -\frac{1}{L} \nabla_y \cdot \tilde{\mathbf{n}}. \quad (5.19)$$

Die Normalenvektoren \mathbf{n} und $\tilde{\mathbf{n}}$ sind *per definitionem* dimensionslos. Die Krümmung κ entsteht durch eine Ortsableitung von \mathbf{n} und hat dadurch die Dimension $[1/\text{Länge}]$. Eine dimensionslose Krümmung kann also durch Multiplikation mit der charakteristischen Länge gewonnen werden:

$$\tilde{\kappa} := L \kappa = -\nabla_y \cdot \tilde{\mathbf{n}}.$$

Die rechte Seite von Gleichung (5.16) kann also durch den Term $\sigma \tilde{\kappa} \tilde{\mathbf{n}}/L$ ersetzt werden, der von den dimensionslosen Koordinaten \mathbf{y} und τ abhängt. Nun soll auch die linke Seite als Funktion von dimensionslosen Koordinaten ausgedrückt werden. Unter Verwendung von Gleichung (5.6) und $p' := p(\tau s, L\mathbf{y})$ erhält die Sprungbedingung folgende Form:

$$\left[p' \mathbf{I} - 2\mu \frac{U}{L} \tilde{\mathbf{D}} \right] \cdot \tilde{\mathbf{n}} = \frac{1}{L} \sigma \tilde{\kappa} \tilde{\mathbf{n}} \quad \text{mit} \quad \tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{2} (\nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{v} + \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{v}^T).$$

Dies ist eine Gleichung in dimensionslosen Variablen, jedoch sind die Terme beiderseits des Gleichheitszeichens noch dimensionsbehaftet. Durch Einführung eines charakteristischen Druckes p_0 kann ein dimensionsloser Druck $\tilde{p} := p'/p_0$ definiert werden. Die Wahl eines beliebigen positiven ρ_0 und die Division der Sprungbedingung durch $\rho_0 U^2$ ergibt eine dimensionslose Gleichung:

$$\left[\frac{p_0}{\rho_0 U^2} \tilde{p} \mathbf{I} - \frac{\mu}{\rho_0 U L} 2\tilde{\mathbf{D}} \right] \tilde{\mathbf{n}} = \frac{\Delta\rho}{\rho_0} \frac{\sigma}{\Delta\rho U^2 L} \tilde{\kappa} \tilde{\mathbf{n}} \quad \text{mit} \quad \Delta\rho = |\rho_c - \rho_d|.$$

Wird ein positives μ_0 gewählt, so definiert $\tilde{\mu} = \mu/\mu_0$ eine dimensionslose Viskosität und $\tilde{\mathbf{S}} = \tilde{\mu} \tilde{\mathbf{D}}$ einen dimensionslosen Spannungstensor. Hiermit läßt sich die dimensionslose Sprungbedingung umschreiben zu

$$\left[\text{Eu}_0 \tilde{p} \mathbf{I} - \frac{1}{\text{Re}_0} \tilde{\mathbf{S}} \right] \tilde{\mathbf{n}} = \frac{\Delta\rho}{\rho} \frac{1}{\text{Eö}} \tilde{\kappa} \tilde{\mathbf{n}}$$

mit

$$\text{Eu}_0 = \frac{p_0}{\rho_0 U^2}; \quad \text{Re}_0 = \frac{\rho_0 U L}{\mu_0}; \quad \text{Eö} = \frac{\Delta\rho U^2 L}{\sigma}.$$

Die dimensionslose Impulsgleichung (5.10) gilt auch im zweiphasigen Fall, jedoch sind hier die Stoffeigenschaften ρ und μ davon abhängig, welche Phase am jeweiligen Ort vorliegt. Durch Multiplikation von (5.10) mit ρ/ρ_0 ergibt sich:

$$\frac{\rho}{\rho_0} \partial_s \mathbf{v} + \frac{\rho}{\rho_0} \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho U^2} \nabla_{\mathbf{y}} p' + \frac{\mu}{\rho_0 L U} \Delta_{\mathbf{y}} \mathbf{v} + \frac{\rho}{\rho_0} \frac{L}{U^2} \mathbf{g}.$$

Mit $\tilde{\rho} = \rho/\rho_0$, $\tilde{p} = p/p_0$ und $\tilde{\mu} = \mu/\mu_0$ folgt:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho} \partial_s \mathbf{v} + \tilde{\rho} \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{v} &= -\frac{p_0}{\rho_0 U^2} \nabla_{\mathbf{y}} \tilde{p} + \tilde{\mu} \frac{\mu_0}{\rho_0 L U} \Delta_{\mathbf{y}} \mathbf{v} + \tilde{\rho} \frac{L}{U^2} \mathbf{g}; \\ \Rightarrow \tilde{\rho} \partial_s \mathbf{v} + \tilde{\rho} \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{v} &= -\text{Eu}_0 \nabla_{\mathbf{y}} \tilde{p} + \tilde{\mu} \frac{1}{\text{Re}_0} \Delta_{\mathbf{y}} \mathbf{v} + \tilde{\rho} \frac{1}{\text{Fr}} \mathbf{e}_g. \end{aligned}$$

Handelt es sich um eine Zweiphasenströmung mit einer kontinuierlichen und einer dispersen Phase, so werden in der Regel die Stoffeigenschaften der kontinuierlichen Phase ρ_c und μ_c als Bezugsgrößen verwendet: $\rho_0 := \rho_c$; $\mu_0 := \mu_c$. Im Folgenden werden mit Eu und Re die auf die kontinuierliche Phase bezogenen Kennzahlen bezeichnet. Damit ergeben sich die dimensionslosen zweiphasigen Navier-Stokes-Gleichungen:

$$\tilde{\rho} \partial_s \mathbf{v} + \tilde{\rho} \mathbf{v} \cdot \nabla_y \mathbf{v} = -\text{Eu} \nabla_y \tilde{p} + \tilde{\mu} \frac{1}{\text{Re}} \Delta_y \mathbf{v} + \tilde{\rho} \frac{1}{\text{Fr}} \mathbf{e}_g; \quad (5.20)$$

$$\nabla_y \mathbf{v} = 0; \quad (5.21)$$

$$[\mathbf{v}] = 0; \quad (5.22)$$

$$\left[\text{Eu} \tilde{p} \mathbf{I} - \frac{1}{\text{Re}} \tilde{\mathbf{S}} \right] \tilde{\mathbf{n}} = \frac{\Delta \rho}{\rho} \frac{1}{\text{Eö}} \tilde{\kappa} \tilde{\mathbf{n}}; \quad (5.23)$$

mit

$$\text{Eu} = \frac{p_0}{\rho_c U^2}; \quad \text{Re} = \frac{\rho_c U L}{\mu_0}; \quad \text{Eö} = \frac{\Delta \rho U^2 L}{\sigma}; \quad \text{Fr} = \frac{U^2}{g L}.$$

Diese vier Konstanten sind dimensionslos. Die Sprungbedingung enthält zusätzlich die beiden dimensionslosen Größen $\Delta \rho / \rho_c$ und das Viskositätenverhältnis μ_d / μ_c , welches als Faktor im Spannungstensor $\tilde{\mathbf{S}}$ enthalten ist. Durch die Wahl von $p_0 := \rho_c U^2$ wird Eu zu Eins. Durch die Wahl von $U = (g L)^{1/2}$ wird Fr zu Eins. Für Eö ergibt sich damit:

$$\text{Eö} = \frac{g \Delta \rho L^2}{\sigma}.$$

In dieser Gestalt heißt Eö auch „Eötvös-Zahl“ und kann als Quotient von Auftriebskraft und Oberflächenspannungskraft eines fluiden Partikels mit der charakteristischen Länge L interpretiert werden. Es verbleiben vier dimensionslose Kennzahlen zur Charakterisierung zweiphasiger Strömungen:

$$\frac{\Delta \rho}{\rho_c}; \quad \lambda = \frac{\mu_d}{\mu_c}; \quad \text{Re} = \frac{\rho_c U L}{\mu_0}; \quad \text{Eö} = \frac{g \Delta \rho L^2}{\sigma}. \quad (5.24)$$

Anstelle von $\Delta \rho / \rho_c$ wird oftmals die Morton-Zahl verwendet, welche die Stoffeigenschaften der beiden Phasen charakterisiert:

$$\text{Mo} = \frac{g \Delta \rho \mu_c^4}{\rho_c^2 \sigma^3}.$$

Wegen

$$\left(\frac{\Delta \rho}{\rho_c} \right)^2 = \frac{\text{Eö}^3}{\text{Mo Re}^4}$$

sind $\Delta \rho / \rho_c$ und Mo im Kennzahlensatz (5.24) austauschbar.

6. Validierung des Codes FS3D

6.1. Die Hadamard-Rybczinski-Lösung

Eine analytische Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen für ein Zweiphasenproblem ist im Allgemeinen nicht möglich. Im Grenzfall $Re \rightarrow 0$ (d.h. bei kleinen Geschwindigkeiten \mathbf{u} , „Kriechströmung“) kann der nichtlineare Term $\mathbf{u}\nabla\mathbf{u}$ in der Impulsgleichung (5.13) vernachlässigt werden, weil hier \mathbf{u} quadratisch auftritt. Es ergibt sich eine vereinfachte Impulsgleichung für Kriechströmungen, die Stokes-Gleichung genannt wird:

$$\partial_t \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla_x p + \frac{\mu}{\rho} \Delta_x \mathbf{u} + \mathbf{g}. \quad (6.1)$$

Mit dieser Vereinfachung existiert eine analytische Lösung für fluide Kugeln, die von Hadamard und Rybczinski gefunden wurde. Für das Geschwindigkeitsfeld lautet die Lösung in Kugelkoordinaten außerhalb der fluiden Kugel:

$$u_r(r, \theta) = -w_T \left[1 - \frac{R}{r} \frac{3\lambda + 2\lambda}{2\lambda + 2} + \left(\frac{R}{r}\right)^2 \frac{\lambda}{2\lambda + 2} \right] \cos \theta; \quad (6.2)$$

$$u_\theta(r, \theta) = w_T \left[1 - \frac{R}{r} \frac{3\lambda + 2\lambda}{4\lambda + 4} - \left(\frac{R}{r}\right)^3 \frac{\lambda}{\lambda + 1} \right] \sin \theta; \quad (6.3)$$

und innerhalb der fluiden Kugel:

$$u_r = w_T \frac{1}{2\lambda + 2} \left[1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2 \right] \cos \theta; \quad (6.4)$$

$$u_\theta = -w_T \frac{1}{2\lambda + 2} \left[1 - 2 \left(\frac{r}{R}\right)^2 \right] \sin \theta \quad (6.5)$$

mit dem Kugelradius R und dem Viskositätenverhältnis λ . Dabei sind u_r und u_θ jeweils die radiale und die vertikale Relativgeschwindigkeit bezogen auf die Schwerpunktbewegung, die mit der Geschwindigkeit w_T in Richtung $\theta = 0$ erfolgt. Die Lösung ist axialsymmetrisch mit der Linie $\theta = 0$ bzw. $\theta = \pi$ als Symmetrieachse. Die Ebene $\theta = \pi/2$ - im Folgenden „Äquatorebene“ genannt - verläuft durch den Mittelpunkt und senkrecht zur Bewegungsrichtung des fluiden Partikels. Die Äquatorebene

ist dadurch ausgezeichnet, daß auf ihr die radiale Geschwindigkeitskomponente u_r sowohl innerhalb als auch außerhalb der fluiden Kugel verschwindet. Das Geschwindigkeitsfeld innerhalb der fluiden Kugel ist ein torusförmiger Wirbelring, der auch Hill'scher Wirbel genannt wird. Im Wirbelzentrum gilt $u_r = u_\theta = 0$. Diese Bedingung ist auf der Äquatorebene bei $r = R/\sqrt{2}$ erfüllt. Weitere ausgezeichnete Punkte auf der Äquatorebene sind das Kugelzentrum ($r = 0$) und der Äquator ($r = R$). Im Kugelzentrum ist die Geschwindigkeit u_c senkrecht zur Äquatorebene:

$$u_c = \frac{w_T}{2\lambda + 2}. \quad (6.6)$$

Auf dem Äquator ist die Geschwindigkeit senkrecht zur Äquatorebene $-u_c$. Insgesamt ist das Geschwindigkeitsprofil innerhalb der fluiden Kugel auf der Äquatorebene gemäß (6.5) parabolisch. Ist das Geschwindigkeitsfeld bekannt, kann das Druckfeld durch Einsetzen der Geschwindigkeit in die Navier-Stokes-Gleichungen ermittelt werden. Im Anhang A.2 wird dies am Beispiel des Hill'schen Wirbels gezeigt. Insgesamt ergibt sich für die fluide Kugel folgendes Druckfeld:

$$p = p_0 - \rho_c g r \cos \theta + \frac{w_T \mu_c}{R} \left(\frac{R}{r} \right)^2 \frac{3\lambda + 2}{2\lambda + 2} \cos \theta \quad \text{für } r > R; \quad (6.7)$$

$$p = p_0 - \rho_d g r \cos \theta - \frac{5 w_T \mu_c}{R} \frac{r}{R} \frac{\lambda}{\lambda + 1} \cos \theta + \frac{2\sigma}{R} \quad \text{für } r < R. \quad (6.8)$$

Durch Integration des durch (6.7) gegebenen Außendruckes entlang des Kugelrandes ($r = R$) erhält man den Druckbeitrag zum Widerstandsbeiwert

$$C_D = \frac{8}{3 \text{Re}} \left(\frac{2 + 3\lambda}{1 + \lambda} \right). \quad (6.9)$$

Durch Integration von $\mathbf{S} \cdot \mathbf{e}_r$ entlang des Kugelrandes ergibt sich der Beitrag viskoser Kräfte zum Widerstandsbeiwert

$$C_{D,S} = \frac{16}{3 \text{Re}} \left(\frac{2 + 3\lambda}{1 + \lambda} \right). \quad (6.10)$$

Die Summe dieser Beiträge ergibt den gesamten Widerstandsbeiwert auf eine fluide Kugel zu

$$C_{D,p} = \frac{8}{\text{Re}} \left(\frac{2 + 3\lambda}{1 + \lambda} \right). \quad (6.11)$$

Für eine Gasblase gilt $\lambda \approx 0$ somit $C_D = 16/Re$. Eine feste Kugel kann als eine fluide Kugel mit unendlich hoher Viskosität angesehen werden. Durch den Grenzübergang $\lambda \rightarrow \infty$ ergibt sich der Widerstandsbeiwert für feste Kugeln als $C_D = 24/Re$. Beide Beziehungen gelten gemäß Voraussetzung nur für $Re \ll 1$. Durch Gleichsetzen der Widerstandskraft mit der Auftriebskraft kann aus (12.4) die Aufstiegsgeschwindigkeit ermittelt werden. Diese lautet:

$$w_T = \frac{2}{3} \frac{gR^2(\rho_c - \rho_d)}{\mu_c} \frac{1 + \lambda}{2 + 3\lambda}. \quad (6.12)$$

6.2. Numerische Lösungen für langsame, sphärische fluide Partikel

Die Lösung von Hadamard-Rybczynski für langsam aufsteigende/sinkende fluide Partikel (d.h. $Re \ll 1$) kann zum Vergleich mit numerischen Lösungen herangezogen werden, um die Zuverlässigkeit des verwendeten Codes zu überprüfen. Man spricht in diesem Zusammenhang von der „Validierung“ eines Codes. Um den Code *FS3D* zu validieren, wird zunächst ein Modellsystem gewählt, welches die Simulation eines langsam aufsteigenden fluiden Partikels ermöglicht. Durch eine hohe Viskosität μ_c der kontinuierlichen Phase kann die Reynoldszahl klein gehalten werden. Für das Modellsystem wurden folgende Stoffdaten gewählt: $\mu_c = 0,2 \text{ Pa s}$, $\rho_c = 2000 \text{ kg/m}^3$, $\rho_d = 1000 \text{ kg/m}^3$ und $\sigma = 72 \text{ mN/m}$. Die Oberflächenspannung σ ist identisch mit der von Wasser an Luft. Für die disperse Phase werden verschiedene Viskositäten μ_d verwendet so daß das Viskositätenverhältnis $\lambda = \mu_d/\mu_c$ im Intervall $0,125 \leq \lambda \leq 2$ liegt. Für verschiedene λ wird die Endgeschwindigkeit eines Tropfens mit einem Durchmesser von $d=0,2 \text{ cm}$ berechnet. Das Rechengebiet ist quaderförmig mit vertikalen Wänden im Abstand von $8d$ bzw. $16d$, d.h. es wird der Aufstieg eines Tropfens in einem Rohr mit einem quadratischen Querschnitt simuliert. Die Kantenlänge des Rohrquerschnitts beträgt entweder $8d$ oder $16d$. Die Aufstiegsgeschwindigkeit sinkt mit wachsendem λ , d.h., mit der Erhöhung von μ_c (siehe Abbildung 6.1).

Grundsätzlich sind die numerisch ermittelten Aufstiegsgeschwindigkeiten kleiner als nach Gleichung (6.12). Diese Abweichung wird mit großer Wahrscheinlichkeit durch die Seitenwände verursacht, denn mit größerem Wandabstand d_W steigen die Endgeschwindigkeiten w_T . Im Grenzfall $d_W \rightarrow \infty$ ist das kontinuierliche Fluid unendlich

ausgedehnt, was Voraussetzung für die Lösung von Hadamard-Rybczinski ist. Aufstiegsgeschwindigkeiten von $1,0 < w_T < 1,4$ entsprechen $0,1 < Re < 0,14$, womit die zweite Voraussetzung $Re \ll 1$ erfüllt wird. Um das numerische Ergebnis für das Geschwindigkeitsfeld im Fall $\lambda = 1$ mit der analytischen Lösung zu vergleichen, wird die senkrechte Komponente der Relativgeschwindigkeit $w_r = w - w_T$ auf einer horizontalen Linie in x-Richtung durch den Blasenschwerpunkt untersucht. Diese Linie liegt auf der Äquatorebene, wo horizontale Geschwindigkeitskomponenten Null sind. Zunächst wird die analytische Lösung in kartesische Koordinaten umgewandelt: Sei der Blasenschwerpunkt bei $x=0$, so gilt auf der Äquatorebene: $w_r(x) = u_\theta(r = x, \theta = \pi/2)$. Hiermit können die Werte für w_r leicht aus (6.5) und (6.3) hergeleitet werden. Wie aus Abbildung 6.2 hervorgeht, ist der Nulldurchgang $w_r = 0$ für die theoretische Lösung wie für die analytische Lösung an derselben Stelle. Hier liegt das Zentrum des Hill'schen Wirbels (vgl. Seite 30). In der analytischen Lösung gilt $w_r(x \rightarrow \infty) = -w_T$, denn in unendlich großer Entfernung vom Tropfen ruht die kontinuierliche Phase ($w = 0 \Rightarrow w_r = -w_T$). In den Simulationen hingegen ist das Rechengebiet durch vertikale Wände begrenzt. Die durch den aufsteigenden Tropfen verdrängte kontinu-

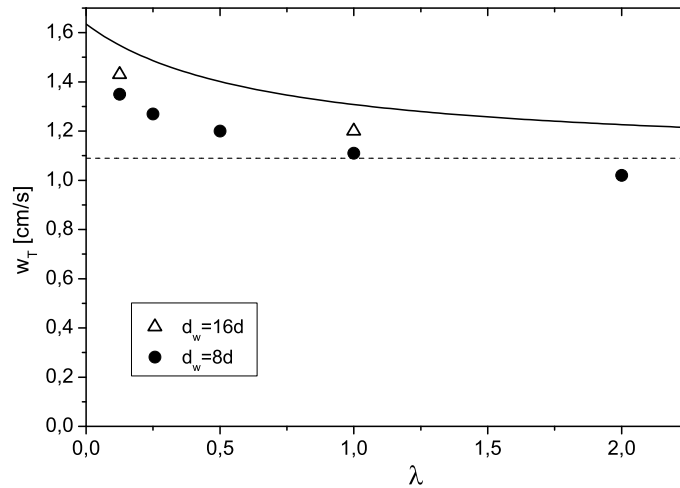


Abbildung 6.1.: Endgeschwindigkeit simulierter Modelltropfen in Abhängigkeit vom Viskositätenverhältnis λ . Kurve: w_T nach der Lösung von Hadamard-Rybczinski, Gleichung (6.12). Gestrichelte Linie: w_T für $\lambda \rightarrow \infty$ nach Gleichung (6.12). Symbole: Simulierte Aufstiegsgeschwindigkeiten w_T ; Kreise: Wandabstand $d_W = 8d$. Dreiecke: $d_W = 16d$.

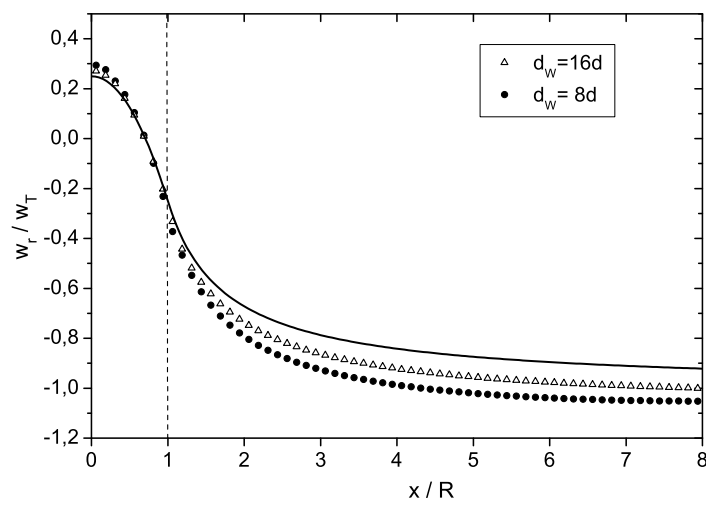


Abbildung 6.2.: Senkrechte Komponente der Relativgeschwindigkeit w_r (normiert auf die Aufstiegs geschwindigkeit w_T) in Abhängigkeit vom horizontalen Abstand x zum Tropfenschwerpunkt (normiert auf den Tropfenradius $d/2$) für $\lambda = 1$. Kurve: Analytische Lösung nach Hadamard-Rybczinski. Kreise: Wandabstand $d_W = 8d$. Dreiecke: Wandabstand $d_W = 16d$. Gestrichelte vertikale Linie: Lage der Phasengrenze.

ierliche Phase muß zwischen dem Tropfenrand und den Wänden abwärts strömen. Daher sind außerhalb des Tropfens die Beträge von w_r für die numerischen Lösungen größer als in der analytischen Lösung. Auch innerhalb des Tropfens sind die numerischen Beträge von w_r größer. Exemplarisch für die Stärke der inneren Zirkulation wird die Geschwindigkeit im Tropfenzentrum näher untersucht. Für die vertikale Relativgeschwindigkeit im Tropfenzentrum $w_{r,c} = w_r(x = 0)$ folgt aus (6.6)

$$\frac{w_{r,c}}{w_T} = \frac{1}{1 + \lambda} . \quad (6.13)$$

Für das eingangs beschriebene Modellsystem wird $w_{r,c}$ numerisch ermittelt und mit (6.13) verglichen (Abbildung 6.3). Das numerische Resultat ist stets größer als der analytische Wert, jedoch sinkt der Unterschied mit zunehmendem Wandabstand.

Nachdem für die Geschwindigkeitsfelder eine befriedigende Übereinstimmung zwischen numerischen und analytischen Lösungen gefundenen wurde, sollen nun die Druckfelder verglichen werden. Auf der Äquatorebene ($\theta = 0$) ist der Druck gemäß der Gleichungen (6.7) und (6.8) in beiden Fluiden konstant. Lediglich an der Phasengrenze tritt der durch die Oberflächenspannung verursachte Drucksprung $2\sigma/R$ auf. In der numerischen Lösung ist der Drucksprung über mehrere Zellen verschmiert, weil

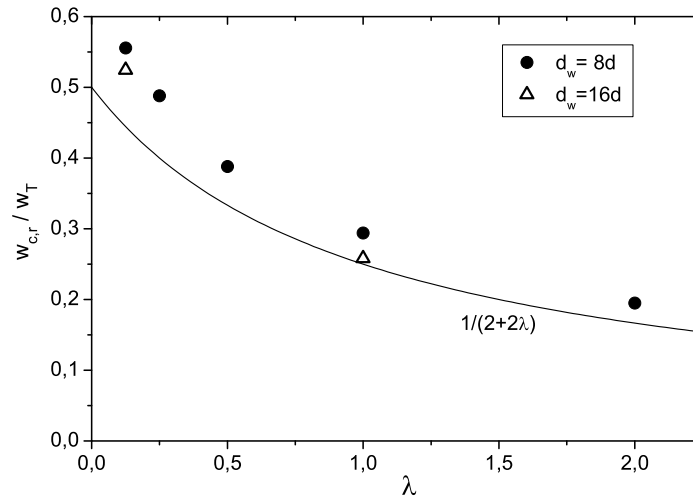


Abbildung 6.3.: Senkrechte Komponente der Relativgeschwindigkeit im Tropfenschwerpunkt in Abhängigkeit vom Viskositätenverhältnis λ . Kurve: Analytische Lösung nach Hadamard-Rybczynski. Kreise: Wandabstand $d_W = 8d$. Dreiecke: Wandabstand $d_W = 16d$.

die Oberflächenspannung als Volumenkraft modelliert ist, die auch in der Umgebung der Phasengrenze präsent ist (Abbildung 6.4). Als weitere Kontroll-Linie bietet sich die Vertikale durch den Tropfenschwerpunkt an. Gemäß (6.8) ändert sich hier der Innendruck des Tropfens linear mit der vertikalen Koordinate $z = r \cos \theta$:

$$p = p_0 - \rho_d g z - \frac{5 w_T \mu_c}{R^2} \frac{\lambda}{\lambda + 1} z + \frac{2 \sigma}{R} \quad \text{für } |z| < R . \quad (6.14)$$

Für den Außendruck gilt auf der vertikalen Kontroll-Linie:

$$p = p_0 - \rho_c g z + \frac{w_T \mu_c R}{z |z|} \frac{3\lambda + 2}{2\lambda + 2} \quad \text{für } |z| > R . \quad (6.15)$$

In Abbildung 6.5 ist der Gesamtdruck für einen Tropfen entlang der Vertikalen abgebildet. Der hydrodynamische Druckanteil ist jeweils der Gesamtdruck abzüglich der konstanten Beiträge und des hydrostatischen Druckes $-\rho g z$. Der dynamische Druckanteil p_D außerhalb des Tropfens entlang der Vertikalen ist in Abbildung 6.6 dargestellt. Der dynamische Druck p_D innerhalb des Tropfens hat die Steigung

$$\frac{\partial}{\partial z} p_D = -\frac{5 w_T \mu_c}{R^2} \frac{\lambda}{\lambda + 1} . \quad (6.16)$$

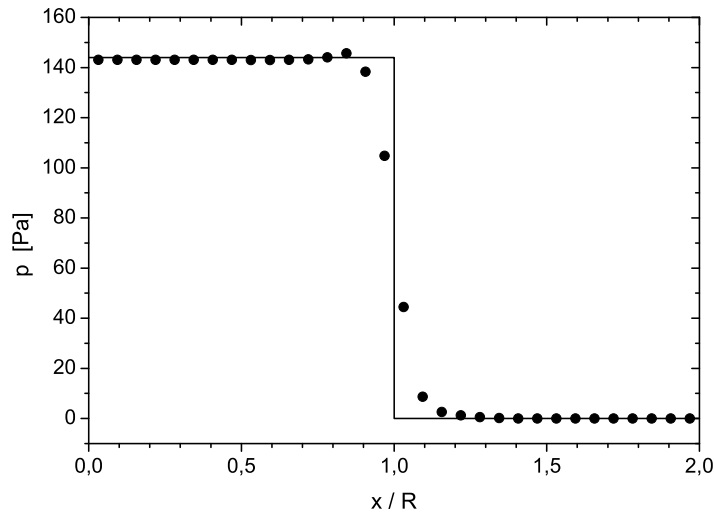


Abbildung 6.4.: Druck entlang einer horizontalen Linie durch den Tropfenschwerpunkt. Die horizontale Verschiebung x ist durch den Tropfenradius R normiert ($R=1$ mm; $\lambda = 1$). Punkte: Numerische Lösung für den Wandabstand $d_W = 8d$. Linie: Analytische Lösung.

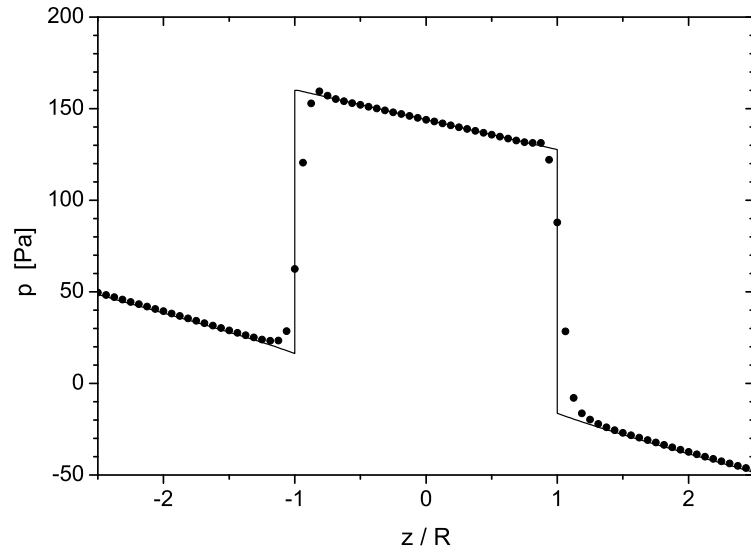


Abbildung 6.5.: Druck in Abhängigkeit von der Höhe auf einer vertikalen Kontroll-Linie durch den Tropfenmittelpunkt ($d=2$ mm, $\lambda = 1$, Wandabstand $d_W = 8d$).

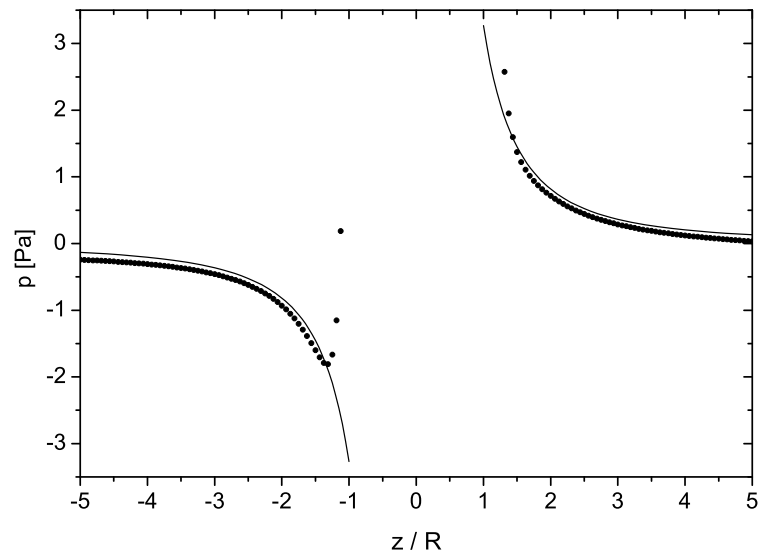


Abbildung 6.6.: Dynamischer Druck in Abhängigkeit von der Höhe auf einer vertikalen Kontroll-Linie durch den Tropfenmittelpunkt ($d=2$ mm, $\lambda = 1$, Wandabstand $d_W = 8d$).

Durch Einsetzen von (6.12) in (6.16) folgt:

$$\frac{\partial}{\partial z} p_D = -\frac{10}{3} (\rho_c - \rho_d) \frac{\lambda}{2 + 3\lambda}. \quad (6.17)$$

Für verschiedene Viskositätenverhältnisse λ wird die Steigung $\partial p_D / \partial z$ im Tropfeninneren aus numerischen Lösungen ermittelt und mit dem analytischen Wert nach (6.17) verglichen (Abbildung 6.7). Insgesamt wird das Druckfeld innerhalb und außerhalb des Tropfens in der numerischen Lösung befriedigend wiedergegeben. Lediglich direkt an der Phasengrenze kommt es aufgrund der Modellierung der Oberflächenspannung als Volumenkraft zu größeren Abweichungen von der analytischen Lösung.

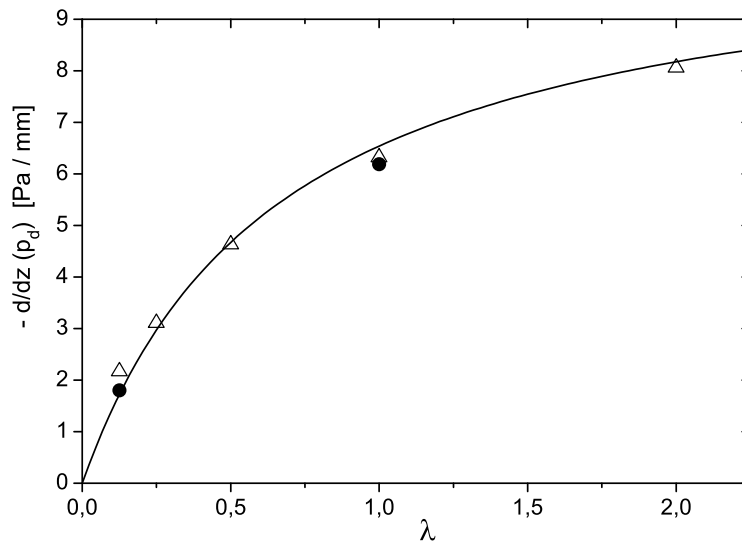


Abbildung 6.7.: Steigung des dynamischen Druckes im Tropfen ($d=2$ mm) in Abhängigkeit vom Viskositätenverhältnis λ . Kurve: Analytische Lösung (Gleichung 6.16). Symbole: Numerische Lösung. Kreise: Wandabstand $d_W = 8d$. Dreiecke: Wandabstand $d_W = 16d$.

Teil I.

Bewegung von Öltropfen in Wasser

Motivation

Die Bewegung von Öltropfen in Wasser ist ein Problem, welches bei der Förderung, der Verarbeitung und dem Transport von Rohöl eine große Rolle spielt. Durch die Verbrennung fossiler Energieträger wird Kohlendioxyd erzeugt, welches zur Erwärmung der Erdatmosphäre wesentlich beiträgt. In den letzten Jahren werden vermehrt Anstrengungen unternommen, Kohlendioxyd aus Abgasen abzuscheiden, um eine Freisetzung in der Atmosphäre zu verhindern. Dabei entsteht das Problem der Endlagerung des Gases, welches in hohen Konzentrationen tödlich ist. Eine zeitlang wurde erwogen, Kohlendioxyd in der Tiefsee endzulagern. Unter den dort vorherrschenden Drücken ist es flüssig und dichter als Wasser, so daß es ab einer bestimmten Tiefe von selbst bis zum Meeresboden absinken würde. Inzwischen bevorzugt man jedoch die Lösung, Kohlendioxyd in ausgebeutete Ölfelder zu pumpen. Ein großer Teil der Ölfelder liegt unter dem Meeresgrund. Daher ist es auch für die Planung solcher Projekte wichtig, das Verhalten flüssigen Kohlendioxyds in der Tiefsee zu kennen. Vor diesem Hintergrund wurden von Haljasmaa (2006) Experimente zur Sink- beziehungsweise Aufstiegsgeschwindigkeit von Tropfen flüssigen Kohlendioxyds und anderer Flüssigkeiten in Wasser unternommen. In Wasser eignet sich Öl als Modellsubstanz für flüssiges Kohlendioxyd, weil die Stoffeigenschaften (wie z.B. die Morton-Zahl) beider Systeme ähnlich sind. Während Kohlendioxyd nur unter hohem Druck flüssig bleibt, können Öltropfen unter Normalbedingungen untersucht werden und sind daher leichter handhabbar.

Haljasmaa hat in seinen Experimenten Maisöl und Rizinusöl verwendet. Die Stoffeigenschaften der Ölsorten und von Wasser sind in Tabelle 6.1 aufgelistet. Für die Ölsorten sind die Oberflächenspannungen σ gegenüber Wasser eingetragen. Zum Vergleich: Die Oberflächenspannung für Wasser gegenüber Luft beträgt 72 mN/m.

Fluid	ρ_l [kg/m ³]	μ_l [mPa s]	σ [mN/m]	$\log_{10}(\text{Mo})$
Maisöl	917	45	20,1	9E-11
Rizinusöl	957	900	16,8	7E-11
Wasser	998	1	-	-

Tabelle 6.1.: Stoffdaten für verschiedene Fluide aus Haljasmaa (2006)

7. Simulation von Maisöltropfen

7.1. Konfiguration des Rechengebietes

Ziel der Rechnungen ist es, die Bewegung von Öltropfen in einem „unendlich“ ausgedehnten Wasservolumen zu simulieren. Andererseits kann nur ein begrenztes Gebiet numerisch repräsentiert werden. Der hier verwendete Code *FS3D* sieht ausschließlich quaderförmige Rechengebiete vor. Die Randbedingungen sind so zu wählen, daß die räumliche Begrenzung möglichst geringen Einfluß auf die Tropfenbewegung hat. So wird an den Seitenwänden des Rechengebietes eine Schlupf-Randbedingung verwendet, um Reibung an der Wand auszuschließen. Am oberen Rand wird eine konstante Geschwindigkeit w_0 vorgegeben, um den Tropfen durch Gegenstrom möglichst lange im Rechengebiet zu halten. Am unteren Rand wurde eine Ausström-Randbedingung gewählt, wodurch die oben eingeführte Flüssigkeit das Rechengebiet wieder verlassen kann. Wenn nur zweidimensionale oder eindimensionale Trajektorien zugelassen werden, so kann das Rechengebiet durch Verwendung einer oder zweier Symmetrieebenen verkleinert werden. Dadurch verringert sich der Rechenaufwand erheblich. Die Symmetrieebenen verlaufen durch den Blasenschwerpunkt. Für zweidimensionale Trajektorien wird die x-z-Ebene als Symmetrieebene verwendet, für eindimensionale Trajektorien zusätzlich die y-z-Ebene. Das Gitter ist kartesisch mit kubischen Zellen. Als Wandabstand d_W wird der Abstand zweier gegenüberliegender Wände mit Schlupf-Randbedingung bezeichnet.

7.2. Einfluß des Wandabstandes auf die Aufstiegs geschwindigkeit

Ein Maisöltropfen mit einem Äquivalenzdurchmesser von $d=5,7$ mm steigt im Experiment geradlinig auf. Daher können in der Simulation dieses Vorgangs ohne Einschränkung der Physikalität zwei Symmetrieebenen verwendet werden. In Abbildung 7.1 ist die Endgeschwindigkeit w_T des Öltropfens in Abhängigkeit vom Wandabstand D_W dargestellt. Für den Wandeinfluß auf die Aufstiegs geschwindigkeit von Blasen

und Tropfen im zylindrischen Rohr mit Durchmesser D schlagen Clift et al. (1978) folgende Korrelation vor:

$$\frac{w_T}{w_{T,\infty}} = \left[1 - \left(\frac{d}{D} \right)^2 \right]^{3/2}. \quad (7.1)$$

Hierbei ist $w_{T,\infty}$ die Aufstiegsgeschwindigkeit ohne Wandeinfluß ($D = \infty$). Es wird $Eö < 40$, $Re > 0$ und $d/D < 0,6$ vorausgesetzt. Diese Bedingungen sind für den Maisöltropfen mit $d=5,7$ mm erfüllt. Setzt man $D = D_W$ ein, so kann für jeden Wandabstand aus dem jeweils berechneten w_T ein theoretischer Wert für $w_{T,\infty}$ ermittelt werden. Dieser Wert stellt jedoch aus zwei Gründen lediglich eine obere Abschätzung dar: Erstens ist der Kanalquerschnitt in der Simulation quadratisch, und hat damit eine größere Querschnittsfläche als ein Kreisrohr mit dem Durchmesser D_W . Zweitens wird durch die Schlupf-Randbedingung in der Simulation Reibung an der Wand unterbunden. Wenn die Schlupfbedingung an den Wänden durch eine Haftbedingung ersetzt wird, ändert sich die Aufstiegsgeschwindigkeit der Tropfen in den Simulationen allerdings nicht signifikant. Wegen des quadratischen Rohrquerschnitts wird $w_{T,\infty}$ durch Anwendung von (7.1) auf die simulierten Aufstiegsgeschwindigkeiten w_T systematisch überschätzt. Der so ermittelte Wert kann jedoch als obere Schranke interpretiert werden. In Abbildung 7.1 konvergieren $w_{T,\infty}$ und w_T schnell. Erhöht man den Wandabstand von $8d$ auf $16d$, so ändert sich die Aufstiegsgeschwindigkeit kaum. Daher wird für die folgenden Simulationen $d_W = 8d$ als Standardwandabstand gewählt.

7.3. Geschwindigkeiten innerhalb des Tropfens

Die Viskosität von Öl ist in der Regel um ein Vielfaches höher als die von Wasser. So ist für das hier untersuchte Maisöl das Viskositätsverhältnis $\lambda = 45$, für das Castoröl beträgt es sogar 900. Im Grenzfall $\lambda \rightarrow \infty$ kommen innere Geschwindigkeiten in einem Tropfen zum Erliegen und er verhält sich wie ein festes Partikel. Bei großem, jedoch endlichem λ ist zu erwarten, daß die Relativgeschwindigkeiten im fluiden Partikel sehr klein sind. Dadurch herrscht an der Phasengrenze in tangentialer Richtung quasi Haftbedingung. Jedoch ist eine langsame Deformation des Partikels durch geringe Geschwindigkeiten der Phasengrenze in normaler Richtung auch bei großen λ möglich.

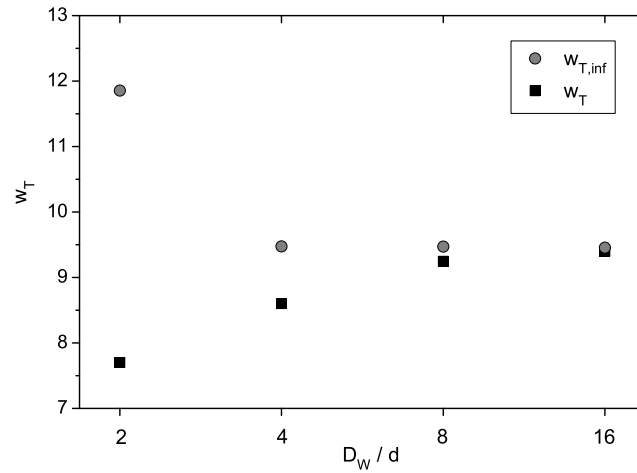


Abbildung 7.1.: Endgeschwindigkeit simulierter Maisöltropfen ($d=5,7$ mm) in Abhängigkeit vom Wandabstand (Quadrate). Kreise: $w_{T,\infty}$ nach (7.1)

Um eine Abschätzung zu erhalten, ab welchem Viskositätenverhältnis fluide Partikel als „fest“ im Sinne der tangentialen Geschwindigkeit an der Phasengrenze sind, vergleicht Haljasmaa (2006) die Standardkurve für den Widerstandsbeiwert fester Kugeln mit einer Korrelation von Feng und Michaelides für den Widerstandsbeiwert sphärischer fluider Partikel ohne Surfactants.

$$C_D(\text{Re}, \lambda) = \begin{cases} \frac{2-\lambda}{2} C_D(\text{Re}, 0) + \frac{4\lambda}{6+\lambda} C_D(\text{Re}, 2) & \text{für } 0 \leq \lambda \leq 2 ; \\ \frac{4}{\lambda+2} C_D(\text{Re}, 2) + \frac{\lambda-2}{\lambda+2} C_D(\text{Re}, \infty) & \text{für } 2 \leq \lambda \leq \infty ; \end{cases} \quad (7.2)$$

mit

$$C_D(\text{Re}, 0) = \frac{48}{\text{Re}} \left(1 + \frac{2,21}{\sqrt{\text{Re}}} - \frac{2,14}{\text{Re}} \right) ,$$

$$C_D(\text{Re}, 2) = 17,0 \text{Re}^{-2/3} ,$$

$$C_D(\text{Re}, \infty) = \frac{24}{\text{Re}} \left(1 + \frac{1}{6} \text{Re}^{2/3} \right) .$$

Diese Korrelation für den Bereich $\text{Re} < 1000$ erhalten Feng und Michaelides mittels einer numerischen Untersuchung, die eine Erweiterung der Lösung von Hadamard und Rybczinski hin zu mittleren Reynoldszahlen darstellt, indem der Ansatz von Levich (1962) auf $\lambda > 0$ verallgemeinert wird. In Abbildung 7.2 ist die Korrelation

(7.2) für verschiedene Werte von λ sowie die *Standard-Drag*-Kurve für feste Kugeln nach Gleichung (2.6) eingezeichnet. Ab $\lambda \geq 20$ stellt die Korrelation im Bereich $50 < Re < 1000$ eine gute Approximation der *Standard-Drag*-Kurve dar. Weil eine weitere Erhöhung des Viskositätenverhältnisses über 20 hinaus zu keiner Erhöhung des Widerstandsbeiwertes führt, geht Haljasmaa davon aus, daß ab $\lambda = 20$ die Phasengrenze in tangentialer Richtung unbeweglich ist. Für $\lambda = 0$ hingegen ergibt sich aus (7.2) der Drag für kugelförmige Blasen in reinem Wasser. Ab $Re = 500$ steigt der Drag für die Blasen stark an, was auf die zunehmende Deformation der Blasen und das Einsetzen horizontaler Oszillationen zurückzuführen ist. Diese Phänomene sind in der Korrelation nicht berücksichtigt. Nach der Annahme von Haljasmaa müßten bei in Wasser aufsteigenden Maisöltropfen ($\lambda = 45$) die Geschwindigkeiten innerhalb des Tropfens und damit auch die tangential Geschwindigkeitskomponente an der Phasengrenze vernachlässigbar klein sein.

Um diese Vermutung zu überprüfen, wird für eine Serie von Tropfen mit gleichem Durchmesser ($d=5,7$ mm) und verschiedenen Viskositäten μ_d der freie Aufstieg in Wasser simuliert. Für die Oberflächenspannung und Dichte werden die Stoffwerte

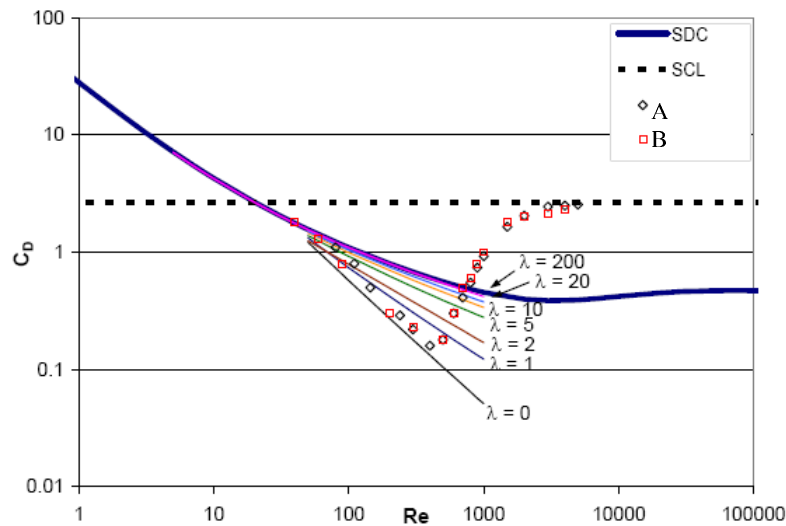


Abbildung 7.2.: Dragkoeffizient in Abhängigkeit von der Reynoldszahl für verschiedene Partikel: Fette Kurve: *Standard-Drag* für feste Kugeln. Dünne Linien: Korrelation (7.2) für verschiedene Viskositätenverhältnisse λ . Offene Symbole: Experimentell bestimmter Drag für Luftblasen in reinem Wasser. A: Maxworthy et al. (1996) B: Haberman und Morton (1953). Fette gestrichelte Linie: Schirmblasen, $C_D = 8/3$.

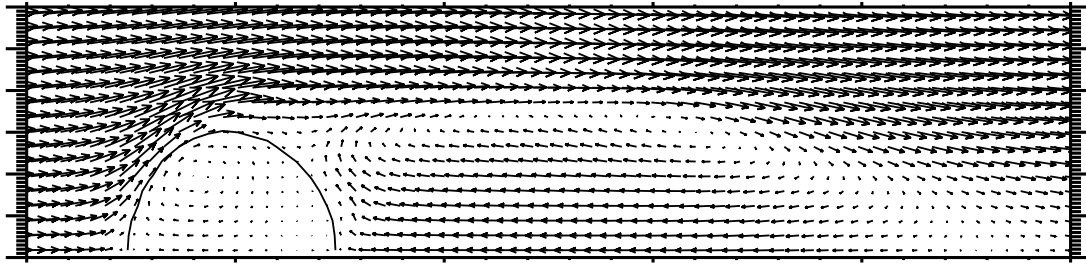


Abbildung 7.3.: Geschwindigkeitsfeld eines Maisöltropfens ($\lambda = 45$, $d=5,7$ mm) nach Erreichen der Endgeschwindigkeit w_T . (Bild um 90° gedreht, Aufstiegsrichtung nach links.)

von Maisöl übernommen ($\sigma = 20,1$ mN/m, $\rho = 917$ kg/m³). Aus Abbildung 7.4 ist erkennbar, daß die Aufstiegs geschwindigkeit auch über $\lambda = 20$ mit steigendem λ sinkt. Für Tropfen mit $\lambda = 20$ und $\lambda = 45$ wird das Geschwindigkeitsfeld im Tropfeninneren nach Erreichen der Endgeschwindigkeit w_T näher untersucht. Betrachtet man die vertikale Relativgeschwindigkeit $w_r = w - w_T$ auf einer horizontalen Linie durch den Tropfenschwerpunkt, so ergibt sich ein parabolisches Geschwindigkeitsprofil mit Scheitelpunkt als absolutem Maximum w_c im Tropfenzentrum und dem Minimum w_T an der Phasengrenze. Wie bei der Lösung von Hadamard-Rybczinski gilt $w_T = -w_c$. Das Wirbelzentrum liegt jedoch oberhalb der Äquatorebene des Tropfens und nicht innerhalb der Äquatorebene, wie es bei der Lösung von Hadamard-Rybczinski der Fall ist (siehe Abbildung 7.3). Für die Tropfen mit $\lambda = 20$ und $\lambda = 45$ ergibt sich $w_c = 0,24 w_T$ und $w_c = 0,14 w_T$. Der Betrag der Phasengrenzengeschwindigkeit am Tropfenäquator ist damit etwa ein Viertel bzw. ein Siebentel der Aufstiegs geschwindigkeit. Im Intervall $20 \leq \lambda \leq 45$ sinkt die Aufstiegs geschwindigkeit w_T um $0,3$ cm/s. Dies ist einerseits eine signifikante Änderung, andererseits entspricht dies nur einer relativen Absenkung von w_T um $0,3\%$. In einem doppelt logarithmischen Diagramm für C_D in Abhängigkeit von Re (wie Abbildung 7.2) ist eine solche Änderung praktisch nicht sichtbar, sodaß Haljasmaas Abschätzung in erster Näherung zutreffend ist. Aus Abbildung 7.4 ist ersichtlich, daß ab $\lambda \geq 100$ die Aufstiegs geschwindigkeit konstant bleibt. Unterhalb $\lambda = 20$ steigt die Geschwindigkeit der Tropfen mit $\sigma = 20,1$ mN/m zunächst stark an, was mit einer starken Abflachung des Tropfens einhergeht (Abbildung 7.5). Um den Einfluß von λ auf die Aufstiegs geschwindigkeit w_T ohne Formveränderung studieren zu können, wurde für eine weitere Serie von Tropfen mit $d=5,7$ mm und $\sigma = 75$ mN/m der Aufstieg in Wasser berechnet. Durch die

überhöhte Oberflächenspannung sind diese Tropfen nahezu kugelförmig und Änderungen der Aufstiegsgeschwindigkeiten werden im Wesentlichen durch Änderungen von λ bestimmt.

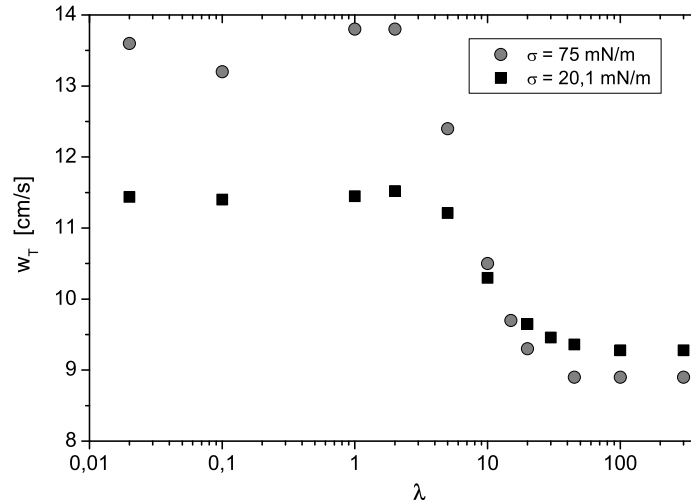


Abbildung 7.4.: Aufstiegsgeschwindigkeiten für Tropfen in Abhängigkeit vom Viskositätenverhältnis λ bei $d=5,7$ mm und $\rho_d = 917$ kg/m³. Quadrate: Oberflächenspannung $\sigma = 20,1$ mN/m. Kreise: $\sigma = 75$ mN/m.

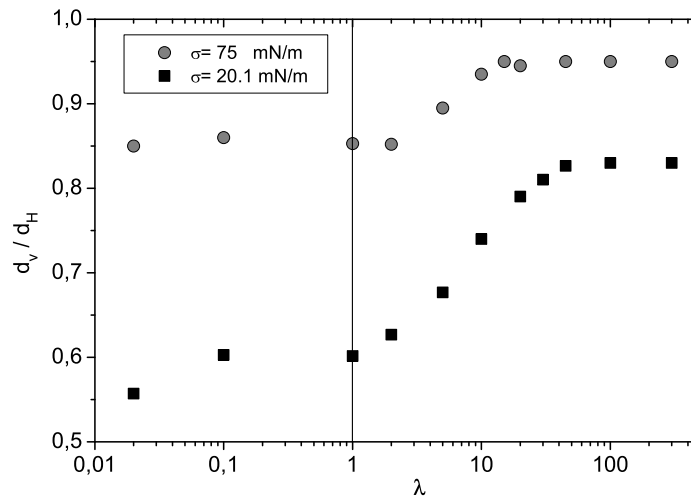


Abbildung 7.5.: Durchmesserverhältnis für Tropfen in Abhängigkeit vom Viskositätenverhältnis λ bei $d=5,7$ mm und $\rho_d = 917$ kg/m³. Quadrate: Oberflächenspannung $\sigma = 20,1$ mN/m. Kreise: $\sigma = 75$ mN/m.

7.4. Trajektorien

Während des freien Aufstiegs fluider Partikel können im Experiment periodische seitliche Oszillationen auftreten, so daß sich eine helikale (d.h. schraubenförmige) oder zickzack-förmige Bewegungsbahn ausbildet. Um zu prüfen, welche Klassen von Bewegungsbahnen in der Simulation auftreten, wird der Tropfenaufstieg zunächst für zwei exemplarische Tropfengrößen ohne die Verwendung von Symmetrieebenen bei einem Wandabstand $d_W=8d$ berechnet: Tropfen mit $d=5,7$ mm steigen im Experiment geradlinig auf, während Tropfen mit $d=13,2$ mm horizontal oszillieren. Durch periodische Randbedingungen an den Seitenwänden wird in der Simulation eine ungehinderte seitliche Bewegung zugelassen. Bei großen Tropfen stellen sich nach wenigen Sekunden freien Aufstiegs periodische seitliche Bewegungen ein, die eher zickzack-förmig als helikal sind (siehe Abbildung 7.6). Bei den kleinen Tropfen sind in der Simulation nicht-periodische seitliche Bewegungen festzustellen. Die Trajektorien verlaufen innerhalb der Ebenen $y=x$ oder $y=-x$. Weil diese Diagonalen im kubischen Gitter ausgezeichnete Raumrichtungen darstellen, könnten numerische Effekte - sogenannte „parasitäre Strömungen“, vgl. Koebe (2004) - die Ursache für die unregelmäßige Horizontalbewegung sein. Um dieses Phänomen zu unterdrücken, werden kleine Tropfen unter Verwendung zweier vertikaler Symmetrieebenen simuliert und so ein geradliniger Aufstieg erzwungen.

Abbildung 7.7 zeigt die zeitliche Entwicklung der Aufstiegs geschwindigkeit für Tropfen aus Rechnungen mit zwei Symmetrieebenen. Der kleine Tropfen erreicht nach einer Beschleunigungsphase eine konstante Endgeschwindigkeit w_T . Es prägt sich ein stationärer Nachlauf aus. Der große Tropfen hingegen wird nach Erreichen einer Maximalgeschwindigkeit w_{max} wieder abgebremst. Diese Abbremsung geht einher mit dem Auftreten von Instabilitäten im Nachlauf, die schließlich zu Wirbelablösungen führen.

Wird durch Verwendung von weniger als zwei Symmetrieebenen eine seitliche Bewegung des Tropfenschwerpunkts zugelassen, so gehen die Wirbelablösungen mit einer zickzack-förmigen Aufstiegsbewegung einher. Um die Rechenzeit gering zu halten, wird in diesem Fall nur eine Symmetrieebene verwendet. Dadurch wird die Bewegung des Tropfenschwerpunkts auf nur eine Ebene festgelegt. Dies schränkt die Physikalität der Simulation nicht ein, da zickzack-förmige Trajektorien nur zweidimensional sind.

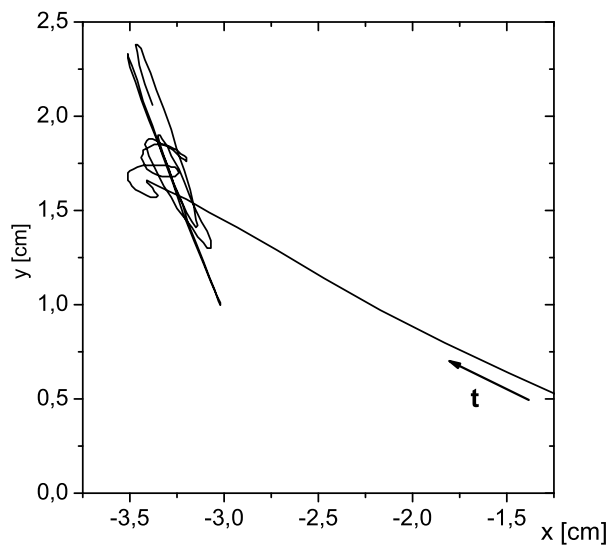


Abbildung 7.6.: Trajektorie eines Maisöltropfens ($d=13,2$ mm) in einer Simulation ohne Symmetrieebenen (Draufsicht).

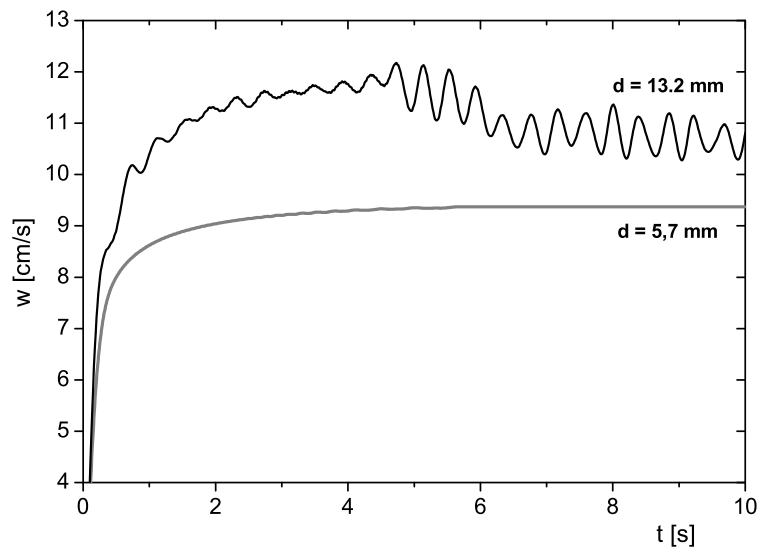


Abbildung 7.7.: Aufstiegsgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Zeit für mit zwei Symmetrieebenen simulierte Maisöltropfen ($d=5,7$ mm und $d=13,2$ mm).

Insgesamt wird die Trajektorie eines Tropfens nach folgendem Verfahren eingestuft: Bildet sich in einer Simulation mit zwei Symmetrieebenen ein stabiler Nachlauf, gilt der Tropfen als geradlinig aufsteigend. Andernfalls wird die Rechnung mit nur einer Symmetrieebene wiederholt. Die zeitliche Entwicklung des Geschwindigkeitsfeldes für einen Tropfen mit $d=13,2$ mm ist im Anhang A.4 dargestellt. Zunächst beschleunigt der Tropfen geradlinig. Während dieser Phase wird der Nachlauf des Tropfens immer länger, bis er instabil wird. Schließlich lösen sich Wirbel ab, wechselweise an der linken und der rechten Tropfenseite. Dies geht einher mit der horizontalen Oszillation. Für Luftblasen in Wasser wird dieser Vorgang ebenfalls in direkten numerischen Simulationen beobachtet (Koebe, 2004). Ein detailliertes Modell zur Entstehung der abwechselnden Wirbelablösung an den Blasenseiten beschreiben Fan und Tsuchiya (1990).

In den Abbildungen 7.8 und 7.9 sind die Aufstiegs geschwindigkeit und die horizontale Position des Schwerpunkts für zwei verschieden große Tropfen dargestellt. Beide Tropfen erreichen bei $t=4$ s die gleiche Maximalgeschwindigkeit w_{max} . Ab $t=5$ s beginnt eine periodische horizontale Oszillation. Die Aufstiegs geschwindigkeit schwankt dann um einen Mittelwert, der für den größeren Tropfen deutlich niedriger ist als für den kleineren Tropfen. Für oszillierende Tropfen wird eine Endgeschwindigkeit w_T durch diesen Mittelwert definiert. Aus Abbildung 7.9 ist ersichtlich, daß der größere Tropfen stärker oszilliert. Im Intervall 9 s $< t < 10$ s verringert sich die seitliche Bewegung des größeren Tropfens kurz. Gleichzeitig steigt die Vertikalgeschwindigkeit. Die Aufstiegs geschwindigkeit sinkt demnach mit steigender Amplitude der Oszillation.

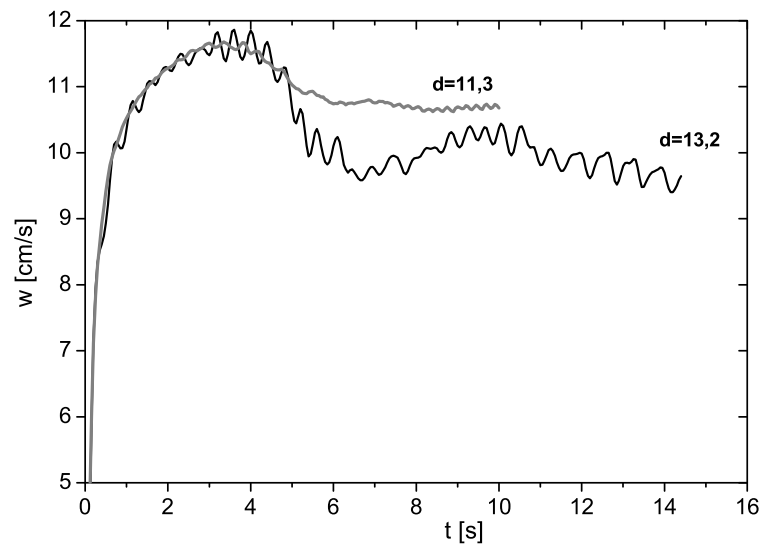


Abbildung 7.8.: Aufstiegsgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Zeit für mit einer Symmetrieebene simulierte Maisöltropfen ($d=11,3$ mm und $d=13,2$ mm).

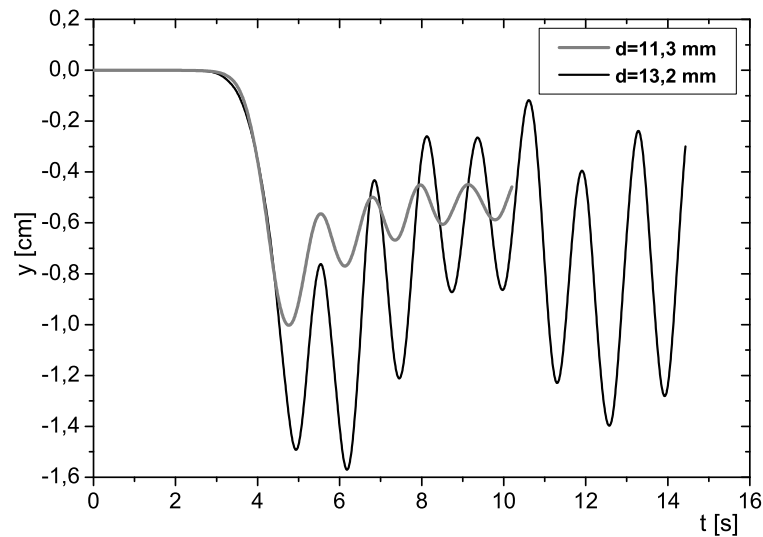


Abbildung 7.9.: Seitliche Verschiebung des Tropfenschwerpunkts in Abhängigkeit von der Zeit für mit einer Symmetrieebene simulierte Maisöltropfen ($d=11,3$ mm und $d=13,2$ mm).

7.5. Aufstiegsgeschwindigkeiten und Tropfenformen

In Simulationen mit zwei Symmetrieebenen entwickelt sich für Maisöltropfen bis zu einem Durchmesser von $d=9$ mm ein stabiler Nachlauf. Demnach werden sie als geradlinig aufsteigende Tropfen eingestuft. Bei größeren Tropfen wird der Nachlauf instabil. Ihre Aufstiegsbewegung wird mit einer Symmetrieebene berechnet, wobei sich eine zickzack-förmige Trajektorie einstellt. Die jeweiligen Aufstiegsgeschwindigkeiten w_T , w_{max} und w_{osz} sind in Abbildung 7.10 wiedergegeben. Im Bereich $9 \text{ mm} < d < 13 \text{ mm}$ nimmt die Amplitude der seitlichen Oszillation stark zu, was sinkende w_{osz} zur Folge hat. Ab $d=13$ mm ist w_{osz} nahezu unabhängig vom Tropfendurchmesser. Für geradlinig aufsteigende Tropfen ist w_T in der Simulation etwas kleiner als im Experiment, für oszillierende Tropfen ist w_{osz} ungefähr gleich groß. Oszillationen treten im Experiment ab $d=11$ mm auf. Die Durchmesser-Verhältnisse der Tropfen sind in Abbildung 7.11 dargestellt. Je höher die Aufstiegsgeschwindigkeit ist, desto flacher werden die Tropfen.

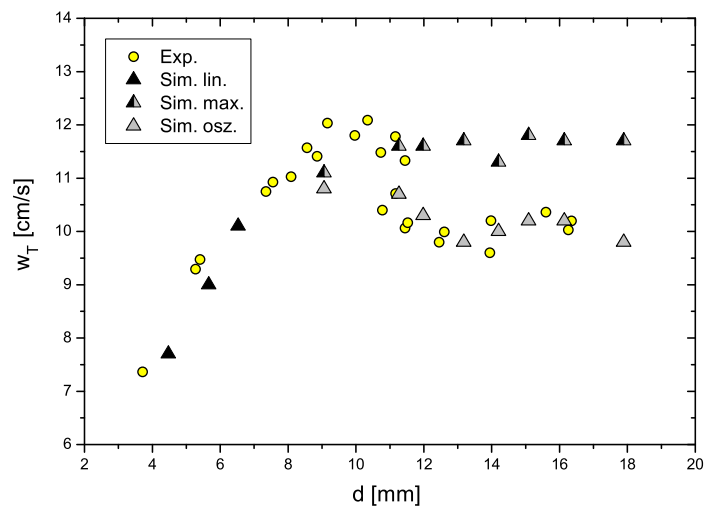


Abbildung 7.10.: Aufstiegsgeschwindigkeit für Maisöltropfen in Abhängigkeit vom Tropfendurchmesser. Kreise: Experiment. Dreiecke: Simulation. Geschlossene Dreiecke: w_T für geradlinigen Aufstieg. Offene Dreiecke: w_{osz} . Halboffene Dreiecke: w_{max} .

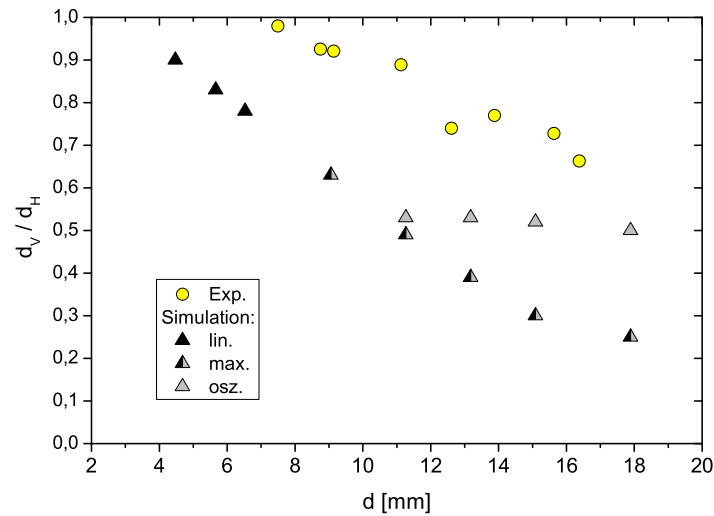


Abbildung 7.11.: Durchmesserverhältnisse für Maisöltropfen in Abhängigkeit vom Tropfendurchmesser. Kreise: Experiment. Dreiecke: Simulation. Geschlossene Dreiecke: Geradliniger Aufstieg. Offene Dreiecke: Mittelwert während seitlicher Oszillation. Halboffene Dreiecke: Durchmesserverhältnis zum Zeitpunkt des Auftretens der Maximalgeschwindigkeit w_{max} .

7.6. Einfluß der trägen Masse fluider Partikel auf das Aufstiegsverhalten

Oftmals werden aufsteigende oder sinkende fluide Partikel durch die dimensionslosen Kennzahlen λ , Re , $Eö$ und Mo gekennzeichnet. Die Dichtedifferenz $\Delta\rho$ ist als Faktor in $Eö$ und Mo enthalten. Im Allgemeinen werden $Eö$ und Mo auf der Basis von $|\Delta\rho|$ berechnet, so daß sich positive Kennzahlen ergeben. Haljasmaa weist darauf hin, daß hierbei die Information verloren geht, ob es sich um ein aufsteigendes oder sinkendes Partikel handelt. Bei gleichem $|\Delta\rho|$ unterscheiden sich aufsteigendes und sinkendes Partikel durch ihre träge Masse. Bei gleichförmiger Bewegung (wie dem geradlinigen Aufstieg oder Sinken mit konstanter Geschwindigkeit w_T) tritt die träge Masse nicht in Erscheinung. Während einer beschleunigten Bewegung jedoch wirkt die träge Masse den beschleunigenden Kräften entgegen. Haljasmaa vergleicht zickzack-förmige fluide Partikel mit mechanischen harmonischen Oszillatoren. Sind diese reibungsbefahet, so sinkt die Amplitude erzwungener Schwingungen mit wachsender träger

Masse. Frei aufsteigende Tropfen sind keine harmonischen Oszillatoren, weil es keine zu irgendeiner Auslenkung proportionale Rückstellkraft gibt. Dennoch ist die Annahme plausibel, daß die Amplitude einer horizontalen Oszillation mit wachsender träger Masse des Partikels kleiner wird. Um diese Annahme zu überprüfen, wird ein Modellfluid untersucht, das bis auf die Dichte gleiche Stoffeigenschaften wie Maisöl hat. Als Dichte wird $\rho_d = 1097 \text{ kg/m}^3$ gewählt, sodaß die Dichtedifferenz des Modellfluids gegenüber Wasser den gleichen Betrag hat wie bei Maisöl ($|\Delta\rho| = 81 \text{ kg/m}^3$). Ein Tropfen des Modellfluids hat wegen seiner größeren Dichte eine um 18% größere träge Masse als ein gleich großer Maisöltropfen. Die Auftriebskraft beider Tropfen hat den gleichen Betrag, jedoch unterschiedliches Vorzeichen. Bei gleicher Größe oszilliert ein Tropfen des Modellfluids in der Simulation weniger stark als ein Maisöltropfen (Abbildung 7.12), einhergehend mit einer höheren Aufstiegsgeschwindigkeit der Modelltropfen (Abbildung 7.13). Während eines geradlinigen Aufstiegs/Sinkens sind die Beträge der Geschwindigkeiten für Partikel beider Fluide gleich.

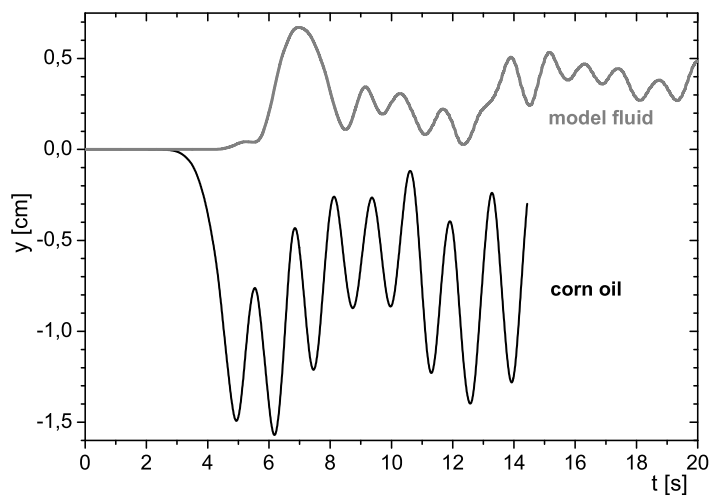


Abbildung 7.12.: Horizontale Verschiebung des Tropfenschwerpunkts in Abhängigkeit von der Zeit. Maisöl und Modellfluid, $d=13,2 \text{ mm}$.

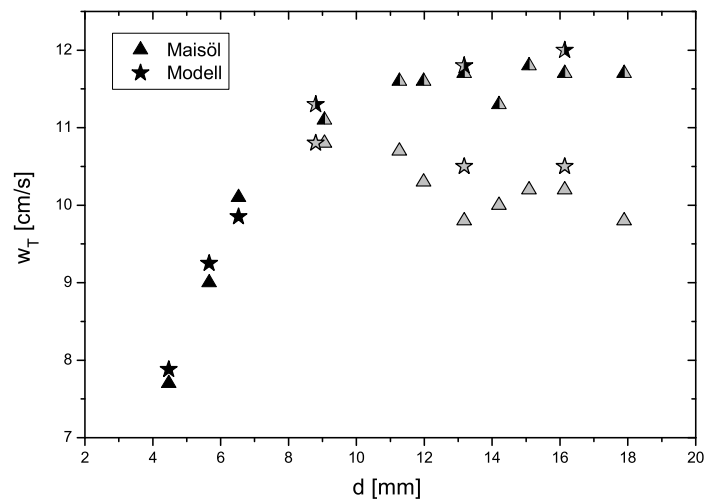


Abbildung 7.13.: Simulierte Aufstiegsgeschwindigkeiten für Tropfen in Abhängigkeit vom Durchmesser. Dreiecke: Maisöl. Sterne: Modellfluid. Geschlossene Symbole: Geradliniger Aufstieg. Offene Symbole: Horizontale Oszillation. Halboffene Symbole: Maximalgeschwindigkeit vor Einsetzen der Oszillation.

8. Rizinusöl

Die dynamische Viskosität von Rizinusöl ist 900 mal höher als die von Wasser. Aus Abbildung 8.1 ist ersichtlich, daß in einem Rizinustropfen die inneren Geschwindigkeiten vernachlässigbar klein sind.

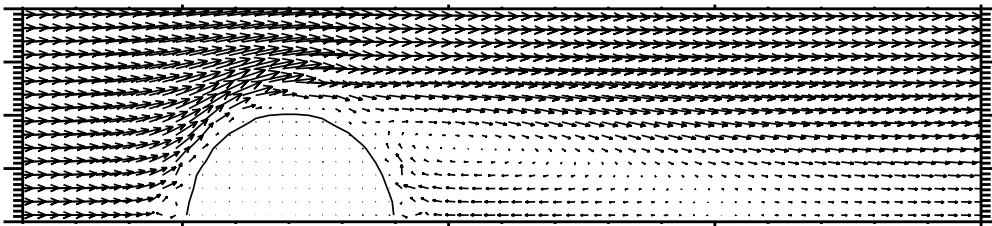


Abbildung 8.1.: Geschwindigkeitsfeld eines Rizinusöltropfens ($d=4$ mm) nach Erreichen der Endgeschwindigkeit w_T . (Bild um 90° gedreht, Aufstiegsrichtung nach links.)

8.1. Aufstiegsgeschwindigkeiten und Tropfenformen

Im Experiment steigen Rizinustropfen langsamer auf als Maisöltropfen, was im Wesentlichen auf die höhere Dichte des Rizinusöls zurückzuführen ist. Dadurch ist die Auftriebskraft eines Rizinustropfens nur halb so groß wie die eines Maisöltropfens. Die Aufstiegsgeschwindigkeit simulierter Maisöltropfen liegt im Falle geradlinigen Aufstiegs etwas unterhalb der von Haljasmaa (2006) gemessenen Aufstiegsgeschwindigkeiten. Im Falle oszillierender Trajektorien sind die Geschwindigkeiten für Simulation und Experiment ähnlich. In der Simulation tritt Wirbelablösung im Nachlauf schon ab $d=10$ mm auf, im Experiment hingegen erst ab $d=13,5$ mm. Im Bereich $13 \text{ mm} \leq d \leq 13,5 \text{ mm}$ werden im Experiment sowohl geradlinige als auch zickzackförmige Trajektorien beobachtet. Entsprechend gabelt sich der Graph $w_T(d)$ in diesem Bereich in zwei Äste auf (englisch: *Bifurcation*). Für Tropfendurchmesser $d > 13$ mm werden nur zickzackförmige Trajektorien beobachtet. In der Simulation tritt das Phänomen der *Bifurcation* nicht auf: Für eine bestimmte Tropfengröße ist der Nachlauf entweder ($d < 10$ mm) stabil oder instabil ($d \geq 10$ mm).

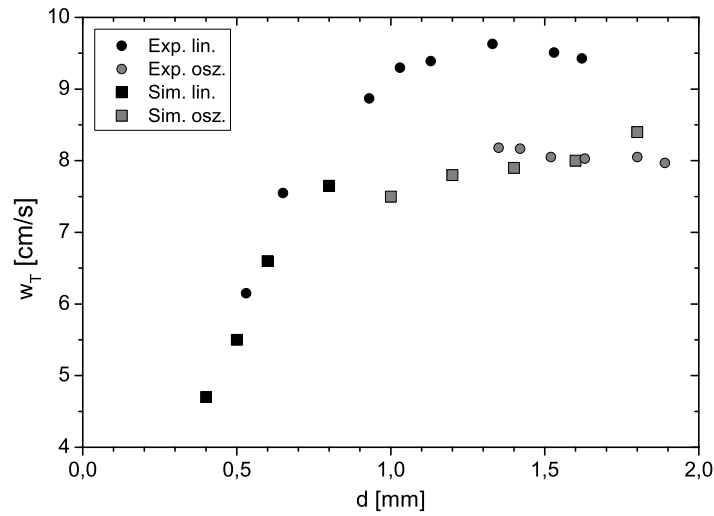


Abbildung 8.2.: Aufstiegsgeschwindigkeiten für Rizinusöltropfen in Abhängigkeit vom Durchmesser d . Schwarze Symbole: Geradliniger Aufstieg. Graue Symbole: Horizontale Oszillation. Kreise: Experiment. Quadrate: Simulation.

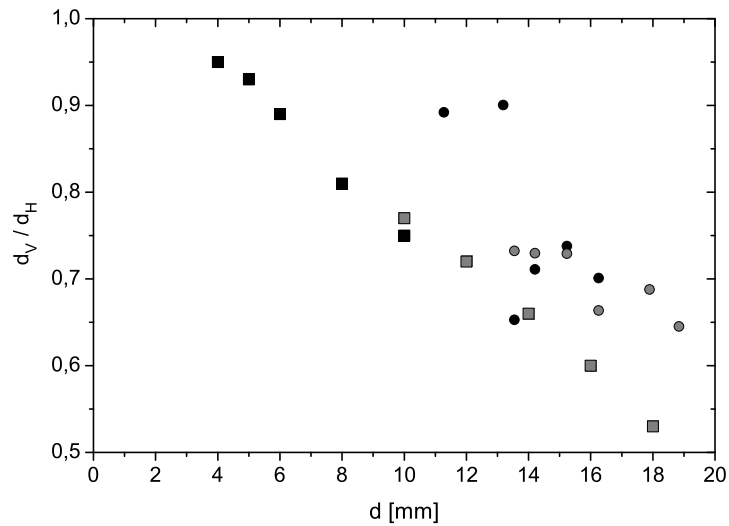


Abbildung 8.3.: Durchmesserverhältnisse für Rizinusöltropfen in Abhängigkeit vom Durchmesser d . Schwarze Symbole: Geradliniger Aufstieg. Graue Symbole: Horizontale Oszillation. Kreise: Experiment. Quadrate: Simulation.

9. Widerstandsbeiwerte für Öltropfen

Basierend auf dem Äquivalenzdurchmesser d kann jedem Tropfen eine Reynoldszahl und ein Widerstandsbeiwert zugeordnet werden:

$$\text{Re} = \frac{\rho_d d w_T}{\mu_d} ; \quad (9.1)$$

$$C_D = \frac{4 \Delta \rho g d}{3 \rho_c w_T^2} . \quad (9.2)$$

Dabei beruht es lediglich auf Konvention, in (9.1) den Äquivalenzdurchmesser d zu benutzen. Es könnte beispielsweise auch eine Reynoldszahl basierend auf dem horizontalen Tropfendurchmesser d_H definiert werden. Ebenso wird über (9.2) für nicht-sphärische Partikel ein Widerstandsbeiwert *definiert*, weil diese Gleichung unter der Voraussetzung einer Kugelform aus (2.1) hergeleitet wurde. Berücksichtigt man, daß für nicht-sphärische Partikel der Anströmquerschnitt durch den Horizontaldurchmesser d_H festgelegt wird, so ergibt sich stattdessen

$$C_D = \frac{4 \Delta \rho g d}{3 \rho_c w_T^2} \frac{d^2}{d_H^2} . \quad (9.3)$$

Im allgemeinen sind fluide Partikel abgeflacht ($d < d_H$), weswegen (9.3) kleinere Widerstandsbeiwerte liefert als (9.2). Insbesondere für zeitlich nicht formstabile fluide Partikel ist es jedoch durchaus sinnvoll, als charakteristische Länge den Äquivalenzdurchmesser d zu verwenden. In diesem Falle wird durch (9.2) ein Widerstandsbeiwert bestimmt, der nicht identisch mit dem durch (2.1) definierten Widerstandsbeiwert ist. Unter Verwendung von (9.1) und (9.2) können Graphen für die Aufstiegs geschwindigkeit von der dimensionsbehafteten Form $w_T(d)$ in die dimensionslose Form $C_D(\text{Re})$ überführt werden. Diese Darstellungsform erlaubt auch den Vergleich mit der Standard-Drag-Kurve (2.6) für feste Kugeln. Aus Abbildung 9.1 ist ersichtlich, daß kleinere Öltropfen im Experiment ähnliche Widerstandsbeiwerte aufweisen wie feste Kugeln. Mit wachsendem Tropfendurchmesser wächst jedoch der Abstand zur Standard-Drag-Kurve, weil die Tropfen immer flacher werden und daher eine größere

angeströmte Querschnittsfläche aufweisen als Kugeln. Ab $Re=1200$ steigt der Widerstandsbeiwert der Öltropfen im Experiment in Verbindung mit oszillierenden Trajektorien sprunghaft an. Im Experiment setzt die Oszillation bereits unter $Re=1000$ ein. Die Standard-Drag-Kurve gilt nur für fixierte angeströmte Kugeln. An frei aufstei-

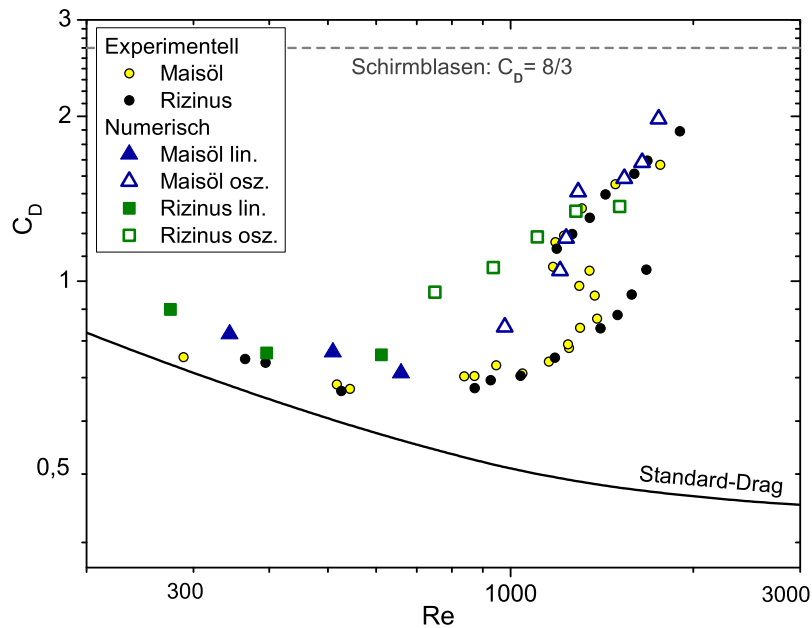


Abbildung 9.1.: Widerstandsbeiwerte in Abhängigkeit von der Reynoldszahl für Öltropfen. Gelbe Kreise: Maisöltropfen im Experiment. Schwarze Kreise: Rizinusöltropfen im Experiment. Vielecke: Simulationen. Geschlossene Vielecke: Geradlinige Trajektorien. Offene Vielecke: Oszillierende Trajektorien. Dreiecke: Maisöl. Quadrate: Rizinusöl.

genden Kugeln beobachtet Haljasmaa ebenfalls einen sprunghaften Anstieg für C_D , weil auch sie ab einer bestimmten Größe bzw. Reynoldszahl nicht geradlinig aufsteigen sondern oszillieren. Auch hier ist dies eine Folge periodischer Wirbelablösung. Ausgehend von der Vorstellung, daß die träge Masse fluider Partikel einer Oszillation entgegenwirkt, vermutete Haljasmaa zunächst, daß für fluide Partikel mit größerer Dichte als Wasser die kritische Reynoldszahl über 1200 liegt. In seinen Experimenten hingegen beobachtete er für sinkende fluide Partikel ein Einsetzen der Oszillation ab $Re=800$. Dieses Phänomen führt Haljasmaa auf Formoszillationen (Oszillationen des Durchmesserhältnisses) zurück, die besonders bei Tropfen mit hoher Dichte auftreten. Formoszillationen lösen möglicherweise seitliche Oszillationen aus.

10. Zusammenfassung des ersten Teils

Unter Verwendung des massiv parallelen VoF-Codes *FS3D* wird der Aufstieg von Tropfen in flüssigen Medien untersucht. Der Code wird validiert, indem der langsame Aufstieg von Tropfen in einer sehr viskosen Flüssigkeit berechnet wird. Die hierfür numerisch ermittelten Druck- und Geschwindigkeitsfelder stimmen mit der analytischen Lösung für den Kriechfall gut überein. Unterschiede lassen sich darauf zurückführen, daß die numerische Simulation auf ein begrenztes Volumen (einen Rechteckkanal) beschränkt ist, wohingegen die analytische Lösung für einen unendlich ausgedehnten Raum gilt.

Für kleine, geradlinig aufsteigende Tropfen wird die Aufstiegsgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der inneren Viskosität und der Oberflächenspannung numerisch untersucht. Je höher die Viskosität des Tropfens ist, um so kleiner ist die Aufstiegsgeschwindigkeit. Wenn die Tropfenviskosität etwa hundertmal höher ist als die Viskosität der umgebenden Flüssigkeit, erreicht die Aufstiegsgeschwindigkeit ihr Minimum. Bei weiterer Erhöhung der Tropfenviskosität ändert sich die Aufstiegsgeschwindigkeit nicht mehr signifikant. Die inneren Geschwindigkeiten im Tropfen werden sehr klein im Vergleich zu den äußeren Geschwindigkeiten. Die tangentielle Geschwindigkeit der Phasengrenze wird vernachlässigbar klein, sodaß das fluide Partikel ähnlich wie ein festes Partikel gleicher Form umströmt wird. Tropfen mit hoher Oberflächenspannung steigen im Allgemeinen schneller auf, weil sie durch hydrodynamische Effekte nicht so stark abgeflacht werden und daher eine kleinere angeströmte Querschnittsfläche aufweisen.

Für schnell aufsteigende Tropfen existiert keine analytische Lösung. Dies gilt beispielsweise für den Aufstieg von Öltropfen in Wasser. Für diesen Fall werden Experimente zum Vergleich mit Simulationen herangezogen. Kleine Öltropfen steigen im Experiment geradlinig auf, während der Schwerpunkt großer Tropfen während des Aufstiegs horizontal oszilliert, woraus sich zickzack-förmige oder helikale Trajektorien ergeben. In Simulationen konnte gezeigt werden, dass diese Oszillation durch eine periodische

Wirbelablösung hervorgerufen wird: Große Tropfen beschleunigen geradlinig bis der Nachlauf instabil wird und die Wirbelablösung einsetzt. Diese führt zu einer spontanen Verringerung der Aufstiegsgeschwindigkeit. Da eine periodische Wirbelablösung auch hinter festen, in Strömungskanälen fixierten Kugeln beobachtet wird, setzt die periodische Wirbelablösung ihrerseits offenbar keine Oszillation des umströmten Partikels voraus. Wenn das Geschwindigkeitsfeld zum Startzeitpunkt durch Initialisation mit Zufallswerten gestört ist, setzt die seitliche Oszillation deutlich früher ein. In der Simulation wird bereits bei kleineren Tropfendurchmessern als im Experiment nicht-geradliniger Aufstieg beobachtet. Kleine, geradlinig aufsteigende Öltropfen sind in der Simulation etwas langsamer als im Experiment. Für große, nicht geradlinig aufsteigende Öltropfen ergibt sich eine befriedigende Übereinstimmung für die Aufstiegsgeschwindigkeit.

Die simulierten Tropfen sind deutlich flacher als im Experiment. Weil im Experiment Leitungswasser benutzt wurde, könnten Verunreinigungen („*Surfactants*“) hier eine Rolle gespielt haben. Die Anlagerung von *Surfactants* an eine freie Oberfläche kann komplexe Oberflächenphänomene - sogenannte Marangoni-Effekte - hervorrufen. Um diese zu unterbinden, müssten die Experimente in hochreinem Wasser durchgeführt werden. Außerdem wurden natürliche Öle verwendet, die ihrerseits verschiedenste Moleküle enthalten. Um eine homogene, chemisch eindeutig definierte Grenzfläche zu erhalten, sollten auch die Tropfen aus reinen Stoffen erzeugt werden.

Teil II.

Blasenaufstieg in linearen Scherströmungen

11. Stand des Wissens

11.1. Blasen in vertikalen Rohren

Steigen fluide Partikel in ruhenden Flüssigkeiten auf, so wirken auf sie im Wesentlichen Auftriebskraft und Widerstandskraft. Bewegt sich die umgebende Flüssigkeit (d.h. die kontinuierliche Phase) in einem durch äußere Wände begrenzten Gebiet, so treten im Allgemeinen Inhomogenitäten in ihrem Geschwindigkeitsfeld auf. In einer Rohrleitung zum Beispiel ist die Fließgeschwindigkeit in der Rohrachse maximal, an den Wänden ist sie Null. Durchströmt eine Flüssigkeit ein vertikales Rohr in Aufwärtsrichtung, so kann man an darin aufsteigenden Blasen eine seitliche Migration beobachten: Kleine Blasen wandern während ihres Aufstiegs in Richtung Rohrwand, große Blasen zur Rohrmitte (Zun, 1980, 1988). Detaillierte Untersuchungen zur Blasenmigration im vertikalen Rohr wurden von Prasser et al. (2005) mittels eines Gittersensors durchgeführt: Ein Gitter aus feinen Drähten wird senkrecht zur Hauptströmungsrichtung in den Rohrquerschnitt gespannt. An den Kreuzungspunkten der Drähte wird simultan die Leitfähigkeit in der Strömung gemessen. Passiert eine Blase einen Kreuzungspunkt, ist die Leitfähigkeit nahezu Null. Ist der Kreuzungspunkt vollständig mit Wasser umgeben, so wird hohe Leitfähigkeit gemessen. So kann für jeden Zeitpunkt die Verteilung des Gasgehaltes über den Rohrquerschnitt gemessen werden. Größere Blasen legen gleichzeitig mehrere benachbarte Gitterknoten trocken und können so individuell registriert und vermessen werden. Auf diese Weise ist es möglich, die radiale Verteilung des Gasgehaltes in einem Rohr nach Größenklassen aufzuschlüsseln. In Abbildung 11.1 sind solche Verteilungen für einen Rohrradius von 97,5 mm dargestellt. Für das System Wasser/Luft unter Normalbedingungen erkennt man eine deutlich erhöhte Konzentration kleiner Blasen in der Nähe der Rohrwand. Beispielsweise haben Blasen mit einem Durchmesser von 0 – 3,5 mm in einer Entfernung von 70 mm von der Rohrachse nur einen Volumenanteil von knapp 0,4%. Bei 95 mm ist ihr Volumenanteil doppelt so hoch. Im Gegensatz hierzu fällt der Volumen-

anteil der Blasen mit einem Durchmesser von 6,5 – 7 mm zum Rand hin stark ab. Im System Wasser/Dampf bei 6,5 M Pa zeigt nur die Größenklasse bis 0 – 3,5 mm einen deutliches Maximum an der Rohrwand.

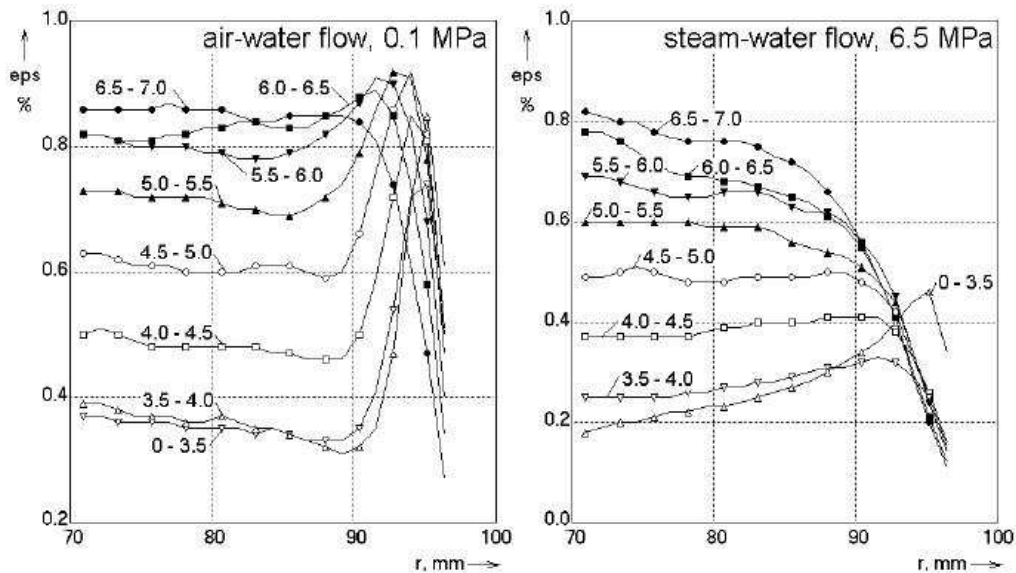


Abbildung 11.1.: Radiale Verteilung des Gasgehaltes in einem Rohr mit einem Radius von 97,5 mm, aufgeschlüsselt nach Blasengrößenklassen (Äquivalenzdurchmesser in mm). Links: Luftblasen in Wasser unter Normalbedingungen. Rechts: Dampfblasen in siedendem Wasser bei 6,5 M Pa.

Ist die Flüssigkeitsströmung in einem vertikalen Rohr abwärts gerichtet, so kehrt sich der Effekt um: Die kleinen Blasen wandern zur Rohrmitte und die großen nach außen. Dieses Phänomen deutet darauf hin, daß auf Blasen in inhomogenen strömenden Flüssigkeiten zusätzlich zu Auftriebs- und Widerstandskraft eine weitere Kraft wirkt, die Liftkraft genannt wird. Eine genaue Kenntnis dieser Kraft ist erforderlich, wenn die Blasenbewegung in chemischen Reaktoren korrekt simuliert werden soll - etwa mit dem Euler-Euler oder dem Euler-Lagrange Verfahren. Hier wird ein Schließungsterm benötigt, der die Liftkraft in Abhängigkeit von den Eigenschaften der Blase und den Geschwindigkeitsfeldern beider Phasen modelliert. So wurde beispielsweise durch Lucas et al. (2005) gezeigt, daß die Liftkraft einen erheblichen Einfluß auf den Betriebszustand von Blasensäulen hat. Die Liftkraft kann dazu beitragen, daß der Strömungszustand in Blasensäulen instationär wird.

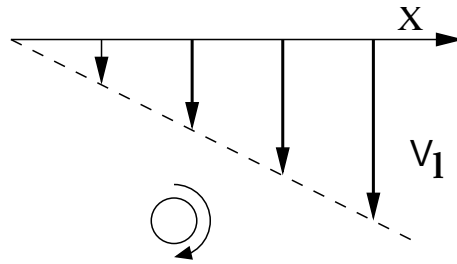


Abbildung 11.2.: Geschwindigkeitsfeld einer linearen Scherströmung.

Der einfachste Fall einer inhomogenen Strömung ist die lineare Scherströmung, wie sie in Abb. 11.2 dargestellt ist. Hier nimmt die vertikale Geschwindigkeitskomponente proportional zur Verschiebung in einer horizontalen Richtung zu. Die Proportionalitätskonstante ω hat die Einheit [1/s] und wird „Scherrate“ genannt.

$$\mathbf{v}_l = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\omega x \end{pmatrix} \Rightarrow \text{rot } \mathbf{v}_l = \begin{pmatrix} 0 \\ \omega \\ 0 \end{pmatrix} =: \boldsymbol{\omega} \quad (11.1)$$

Die Rotation eines Geschwindigkeitsfeldes ist eine vektorielle Größe, die angibt, mit welcher Winkelgeschwindigkeit ein Lagrange'sches Partikel im Strömungsfeld rotieren würde. Für die in Abbildung 11.2 dargestellte Scherströmung ist anschaulich klar, daß ein infinitesimal kleines, festes Partikel im Uhrzeigersinn rotieren würde, weil es auf der „rechten“ Seite stärker angeströmt wird. Also zeigt $\boldsymbol{\omega}$ in die Bildebene hinein (Rechte-Hand-Regel). In einer linearen Scherströmung ist die Rotation $\boldsymbol{\omega}$ räumlich und zeitlich konstant und soll „Scherratenvektor“ genannt werden. Es gilt $|\boldsymbol{\omega}| = \omega$. Bewegt sich ein Partikel mit einer Relativgeschwindigkeit \mathbf{v}_r in dieser Scherströmung, so erfährt es eine Liftkraft senkrecht zu \mathbf{v}_r und zu $\boldsymbol{\omega}$. Nach umfassenden Experimenten zur Blasenbewegung in einem aufwärts durchströmten vertikalen Rohr mit quadratischem Querschnitt schlägt Zun (1980) folgenden Term für die Liftkraft vor:

$$\mathbf{F}_L = -C_L V_p \rho_l \mathbf{v}_r \times \boldsymbol{\omega} . \quad (11.2)$$

Hier ist V_p das Partikelvolumen, ρ_l die Dichte der Flüssigkeit und C_L ein dimensionsloser Koeffizient. Die Relativgeschwindigkeit ist die Differenz der Partikelgeschwindigkeit \mathbf{v}_p und der Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{v}_l , wie sie im ungestörten Fall am Ort

des Partikelschwerpunkts vorläge. Gleichung (11.2) kann als Schließungsterm für die Liftkraft verwendet werden, wenn der Wert von C_L bekannt ist.

11.2. Theoretische Untersuchungen zu kugelförmigen Blasen in linearen Scherströmungen

Für feste, kugelförmige Partikel in linearen Scherströmungen konnte Auton (1987) auf analytischem Wege den Liftkoeffizienten bestimmen. Unter der Annahme eines idealen Fluids und einer „kleinen“ Scherrate konnte er zeigen, daß $C_L = 0,5$ gilt. „Klein“ heißt hier, daß die Änderung von \mathbf{v}_L entlang des Partikeldurchmessers D klein gegenüber der Relativgeschwindigkeit ist:

$$\omega D \ll |\mathbf{v}_r| \quad \text{mit} \quad \mathbf{v}_r = \mathbf{v}_p - \mathbf{v}_l ,$$

oder anders formuliert

$$\text{Sr} \ll 1 \quad \text{mit} \quad \text{Sr} = \frac{\omega D}{|\mathbf{v}_r|} ,$$

wobei Sr eine dimensionslose Scherrate ist. In Mehrphasenströmungen mit Scheranteil tritt sie als fünfte dimensionslose Kennzahl zu Re , Mo , Eo und dem Dichteverhältnis hinzu. Unter Verweis auf Autons Resultat für feste Kugeln wird in der Literatur $C_L = 0,5$ oftmals auch für kugelförmige Blasen angenommen (Legrende und Magnaudet, 1998; Tomiyama, 2004). Feste Kugeln weisen an der Phasengrenze eine Haftbedingung auf. Dies gilt auch für Gasblasen, wenn die Oberfläche vollständig mit Surfactants belegt ist. Für Gasblasen in vollkommen reinem Wasser gilt an der Oberfläche Schlupfbedingung, wenn die Viskosität des Gases vernachlässigt wird. In der Herleitung von Auton ist die Flüssigkeit ideal ($\mu_l = 0$). In diesem Fall geht die Haftbedingung in eine Schlupfbedingung über. Die Anwendung von Autons Resultat auf Kugelblasen setzt voraus, daß die Viskosität der Flüssigkeit „hinreichend“ klein ist, um die Annahme einer idealen Flüssigkeit zu rechtfertigen. Ist die Blasenoberfläche ungleichmäßig stark mit Surfactants belegt, so variiert die Oberflächenspannung und es treten sogenannte Marangoni-Effekte auf (Alke, 2007). Derartige Effekte sind hier nicht berücksichtigt.

Für sphärische Blasen in reibungsbehafteten linearen Scherströmungen haben Legrende und Magnaudet (1998) umfassende theoretische Untersuchungen durchgeführt, die

von einer Kugel mit Schlupfbedingung als Modell für eine kugelförmige Blase ausgehen. Als Resultat analytischer Ansätze in Verbindung mit numerischen Rechnungen erhalten sie eine Korrelation für den Liftkoeffizienten in Abhängigkeit von Reynoldszahl und Scherrate:

$$C_L = \sqrt{\left(\frac{6}{\pi^2} \frac{2,255}{(\text{Re Sr})^{1/2}(1 + 0,2 \text{Re}/\text{Sr})^{3/2}}\right)^2 + \left(\frac{1}{2} \frac{1 + 16/\text{Re}}{1 + 29/\text{Re}}\right)^2} . \quad (11.3)$$

Im Falle $\text{Re} \gg \text{Sr}$ ist der Nenner des ersten Terms proportional zu Re^2/Sr , im Falle $\text{Re} \ll \text{Sr}$ ist er proportional zu $(\text{Re Sr})^{1/2}$. Im Grenzfall $\text{Re} \rightarrow \infty$ verschwindet bei fester Scherrate der erste Term und es ergibt sich insgesamt $C_L = 1/2$. Im Grenzfall $\text{Re} \rightarrow 0$ wird C_L unendlich groß. Die Abhängigkeit des Liftkoeffizienten von der Scherrate wird im Bereich $\text{Re} > 5$ verschwindend gering.

11.3. Das Experiment von Tomiyama

Die prominentesten Experimente zu der Bewegung von Blasen in linearen Scherströmungen wurden von Tomiyama und Mitarbeitern durchgeführt (Tomiyama et al., 1995, 2002; Tomiyama, 2004). Der Versuchsaufbau besteht aus einem hohen quaderförmigen Tank, der mit einer Wasser-Glycerin-Lösung gefüllt ist. In dem Tank verläuft parallel zu einer Wand in senkrechter Richtung ein breites Gummiband, welches einem Förderband ähnelt. In dem 30 mm breiten Spalt zwischen Wand und Band entsteht eine lineare Scherströmung, sobald das Band in Bewegung gesetzt wird. Die Geschwindigkeit des Bandes legt die Scherrate im Spalt fest. Durch eine Düse werden Luftblasen in den Spalt injiziert, deren Form und Bewegung mit Hochgeschwindigkeitskameras aufgezeichnet wird. Der Tank wird mehrfach mit Wasser und Glycerin befüllt, jeweils in unterschiedlichen Mischungsverhältnissen. Daraus ergeben sich unterschiedliche Viskositäten bei nur geringen Änderungen der Dichte und der Oberflächenspannung (siehe Tabelle 12.1). Tomiyama et al. (2002) zeichneten die Aufstiegsbahnen verschieden großer Blasen ($d = 3 \dots 6$ mm) in Lösungen mit Viskositäten von 18 bis 89 mPa s auf. Sie verwendeten destilliertes Wasser, um den Einfluß von Verunreinigungen (*surfactants*) zu minimieren. Je nach Größe migrierten die Blasen während ihres Aufstiegs im Spalt entweder zur Tankwand oder zum Förderband. Unter Verwendung der Bewegungsgleichung (12.6) für Blasen wurden die jeweiligen Liftkoeffizienten mittels eines nicht näher beschriebenen numerischen Verfahrens aus

den Trajektorien ermittelt. Für kleine Blasen wurden positive Liftkoeffizienten ermittelt, deren Beträge von der Reynoldszahl abhängig sind. Für mittlere bis große Blasen können Vorzeichen und Betrag als Funktion einer modifizierten Eötvös-Zahl $E\ddot{o}_H$ beschrieben werden, die sich auf den horizontalen Durchmesser d_H der Blase bezieht:

$$E\ddot{o}_H = \frac{g \Delta\rho d_H^2}{\sigma} . \quad (11.4)$$

Insgesamt faßt Tomiyama die Ergebnisse des Experiments in folgender Korrelation zusammen:

$$C_L = \begin{cases} \min[f_1(Re), f_2(E\ddot{o}_H)] & \text{für } E\ddot{o}_H < 4 \\ f_2(E\ddot{o}_H) & \text{für } E\ddot{o}_H \geq 4 , \end{cases} \quad (11.5)$$

wobei

$$f_1(Re) = 0,288 \tanh(0,121 Re) \quad (11.6)$$

und

$$f_2(E\ddot{o}_H) = 0,00105 E\ddot{o}_H^3 - 0,0159 E\ddot{o}_H^2 - 0,00204 E\ddot{o}_H + 0,474 . \quad (11.7)$$

Diese Korrelation ist rein empirisch und wurde durch Interpolation der Datenpunkte für Blasen im Bereich $Re > 5$ erhalten. Demnach wechselt C_L bei $E\ddot{o}_H \approx 6$ das Vorzeichen. Für größere Blasen ist C_L negativ, d.h. sie migrieren in entgegengesetzte Richtung verglichen mit kleineren Blasen. Durch die theoretischen Resultate von Legendre und Magnaudet (1998) motiviert, wurde das Experiment für kleine Blasen ($Re < 5$) wiederholt (Tomiyama, 2004). Abhängig von der Viskosität der Flüssigkeit waren die Ergebnisse sehr unterschiedlich. Bei $\mu_l = 55 \text{ mPa s}$ wurden hin zu kleinen Reynoldszahlen sehr große positive Liftkoeffizienten (bis zu $C_L = 10$) festgestellt, in Übereinstimmung mit Gleichung (11.3). Bei kleineren Viskositäten konnten jedoch auch negative Liftkoeffizienten (bis zu $C_L = -2$) beobachtet werden, was im Widerspruch zu Gleichung (11.3) steht.

12. Simulation von Blasen in Glycerinlösungen

Mit dem Code *FS3D* ist es möglich, die Bewegung von Blasen in Scherströmungen zu berechnen, wobei die Verformung der Phasengrenze Bestandteil der numerischen Lösung ist. Umfassende Simulation mit *FS3D* zum Blasenauftstieg in ruhenden wässrigen Systemen wurden durch Koebe (2004) durchgeführt.

12.1. Randbedingungen

Für verschiedene Wasser-Glycerin Lösungen und Blasendurchmesser wird das Experiment von Tomiyama nachgerechnet. Die Stoffwerte der Fluide sind Tabelle 12.1 zu entnehmen, die Blasendurchmesser gehen aus Abb. 12.2 hervor. Testrechnungen ergeben, daß ein Wandabstand von vier Blasendurchmessern in y-Richtung und von acht Blasendurchmessern in x-Richtung (die Richtung der Migration) ausreicht, um die Wandeinflüsse auf die Blasenbewegung zu eliminieren. Weil die Randbedingungen in y-Richtung vollkommen symmetrisch sind, ist eine Spiegelsymmetrie der Lösung bezüglich der x-y-Ebene zu erwarten. Daher kann das Rechengebiet durch Verwendung einer Spiegelebene am Rand um die Hälfte verkleinert werden (vgl. Abbildung 12.1). Eine Spiegelsymmetrie als Randbedingung bedeutet eine Schlupfbedingung für das Geschwindigkeitsfeld, und einen Kontaktwinkel von 90° für die Phasengrenze, d.h. die Phasengrenze muß senkrecht auf die Spiegelebene auftreffen. Um eine lineare Scherströmung in der Flüssigphase im Rechengebiet zu gewährleisten, sind die beiden Wände, die sich in x-Richtung gegenüberliegen, mit einer Haftbedingung ausgestattet. Die Wand bei $x = 0$ ist fest, die Wand bei $x = 8d$ bewegt sich mit einer festen Geschwindigkeit $U_0 = -\omega 8d$. Demnach sind an diesen Wänden die Geschwindigkeiten mit $\mathbf{v} = (0, 0, 0)$ bzw. $\mathbf{v} = (0, 0, U_0)$ fest vorgegeben (Dirichlet'sche Randbedingung). Als Standardauflösung werden 32 Zellen pro Blasendurchmesser gewählt. Am oberen Rand des Rechengebietes (bei $z=0$) wird $\mathbf{v} = -\omega x$ vorgegeben, d.h. Flüssigphase wird von oben mit einer bereits voll ausgeprägten Scherströmung eingeleitet. Die

gegeneinander bewegten Wände erhalten dieses Geschwindigkeitsprofil im gesamten Rechengebiet aufrecht.

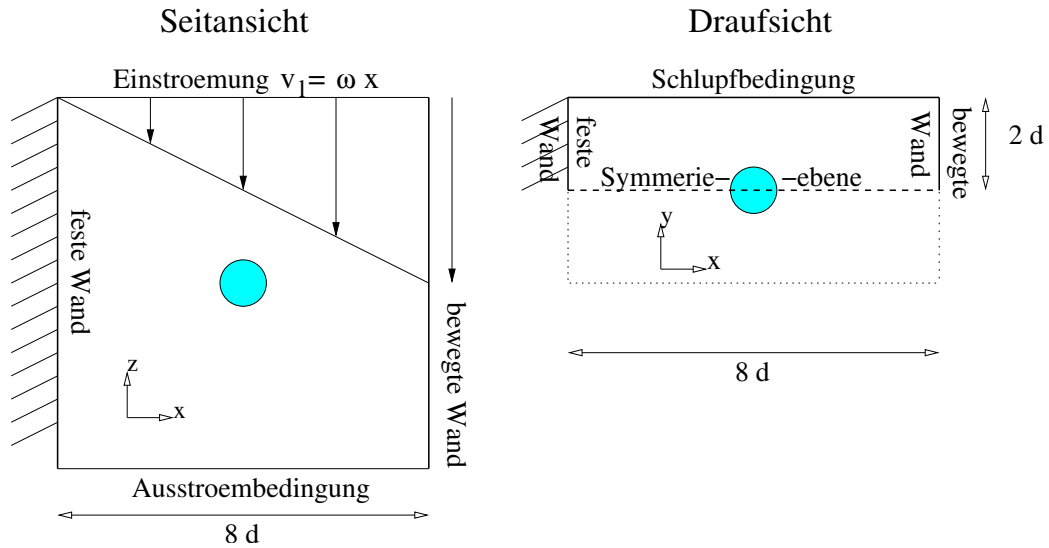


Abbildung 12.1.: Geometrie des Rechengebietes. Randbedingungen für die Simulation von Blasen mit FS3D

Tabelle 12.1.: Stoffdaten für Wasser-Glycerin Lösungen aus (Tomiya et al., 2002) ($\mu_l = 18 \dots 53 \text{ mPa s}$). Zum Vergleich sind auch die Stoffdaten von Wasser aufgeführt ($\mu_l = 1 \text{ mPa s}$)

μ_l [mPa s]	1	18	19	53
ρ_l [kg/m ³]	1000	1150	1154	1180
σ [mN/m]	72	63	61	63
$\log_{10}(\text{Mo})$	-10,6	-5,5	-5,3	-3,6

12.2. Blasenformen und Aufstiegsgeschwindigkeiten

Das experimentelle Ergebnis von Tomiyama et al. (2002) läßt vermuten, daß zwischen Blasenform und Liftkraft eine Wechselbeziehung besteht, denn die Eötvös-Zahl geht maßgeblich in die empirische Korrelation ein. Die Blasenform wiederum ist eng mit

der Eötvös-Zahl verknüpft: Blasen mit kleiner Eötvös-Zahl sind eher kugelförmig, solche mit großer Eötvös-Zahl stärker deformiert (abgeflacht). Dieser Zusammenhang wird ersichtlich aus der Bedeutung der Eötvös-Zahl als Quotient aus Auftriebskraft durch die Kraft der Oberflächenspannung (vgl. Kap. 5.2). Dominiert die Oberflächenspannung, so ist die Blase eher kugelförmig. Dominiert die Auftriebskraft, so wird die Blase stärker durch hydrodynamische Effekte deformiert und insbesondere abgeflacht. Darauf wird in Kapitel 13.2.2 noch näher eingegangen.

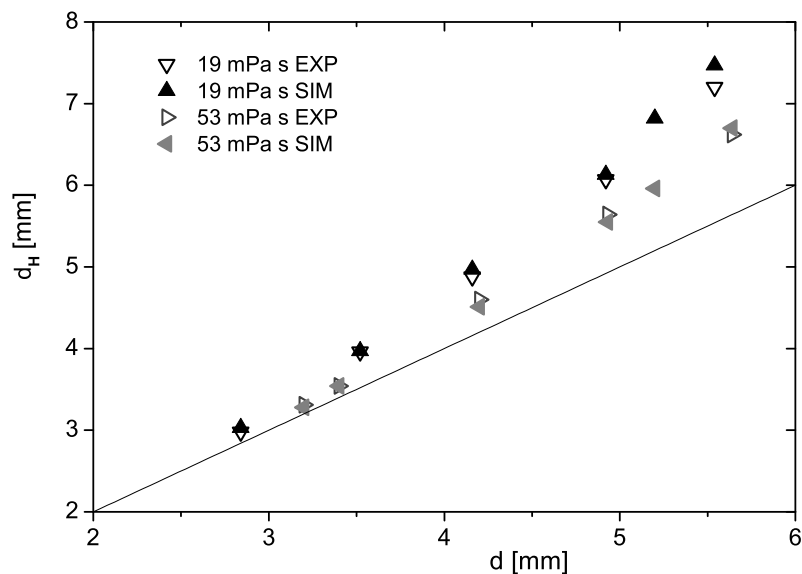


Abbildung 12.2.: Horizontaler Blasendurchmesser d_H in Abhängigkeit vom Äquivalenzdurchmesser d . Schwarze Symbole: $\mu_l = 53$ mPa s. Graue Symbole: $\mu_l = 19$ mPa s. Offene Symbole: Blasenformen im Experiment. Geschlossene Symbole: Simulierte Blasenformen. Durchgezogene Linie: Kugelform ($d_H = d$).

In Abbildung 12.2 werden die experimentell beobachteten mit den simulierten Blasenformen verglichen. Die Übereinstimmung ist sehr gut: Die simulierten Horizontaldurchmesser weichen maximal um 2% von den beobachteten ab. Die durchgezogene Linie repräsentiert kugelförmige Blasen ($d_H = d$). Je weiter Datenpunkte über dieser Linie liegen, desto stärker sind die zugehörigen Blasen abgeflacht. Blasen in der weniger viskosen Lösung sind breiter (und flacher) als in der viskoserer Lösung. Große Blasen sind flacher als kleine. Die simulierten Horizontaldurchmesser sind un-

abhängig von der Scherrate; insbesondere sind die Horizontaldurchmesser in x- wie in y-Richtung stets gleich, trotz Anisotropie des Geschwindigkeitsfeldes der Flüssigphase. Die Abflachung der Blasen hängt eng mit ihrer Aufstiegs geschwindigkeit zusammen: Schnelle Blasen sind flacher als langsame. Daher liegt es nahe, auch die simulierten Aufstiegs geschwindigkeiten mit experimentellen Werten zu vergleichen. Tomiyama et al. (2002) schlagen drei verschiedene semi-empirische Korrelationen für den Widerstandsbeiwert als Funktion der Reynoldszahl vor - je nach Verunreinigung der Flüssigphase:

Für reine Systeme

$$C_D = \max \left\{ \min \left[\frac{16}{\text{Re}} (1 + 0,15 \text{Re}^{0,687}), \frac{48}{\text{Re}} \right], \frac{8}{3} \frac{\text{Eö}}{\text{Eö} + 4} \right\} ; \quad (12.1)$$

für leicht kontaminierte Systeme

$$C_D = \max \left\{ \min \left[\frac{24}{\text{Re}} (1 + 0,15 \text{Re}^{0,687}), \frac{72}{\text{Re}} \right], \frac{8}{3} \frac{\text{Eö}}{\text{Eö} + 4} \right\} ; \quad (12.2)$$

für vollständig kontaminierte Systeme

$$C_D = \max \left\{ \frac{24}{\text{Re}} (1 + 0,15 \text{Re}^{0,687}), \frac{8}{3} \frac{\text{Eö}}{\text{Eö} + 4} \right\} . \quad (12.3)$$

Im Grenzfall $\text{Re} \rightarrow 0$ geht die Korrelation für reine Systeme in die Beziehung $C_D = 16/\text{Re}$ über, die sich aus der Lösung von Hadamard (1911) und Rybczynski (1911) für Blasen ergibt. Die Korrelationen für kontaminierte Systeme gehen in $C_D = 24/\text{Re}$ über, was der Stoke'schen Lösung für feste Kugeln entspricht. In der konkreten Anwendung der Korrelation (12.1) auf die simulierten Blasen wird der Dragkoeffizient entweder durch das erste Argument der Minimumsfunktion (für kleine Blasen) oder durch die Eötvöszahl (für große Blasen) festgelegt. Mittels eines iterativen Algorithmus können die Beziehungen von der Form $C_D(\text{Re}, \text{Eö})$ in die Form $w_T(d)$ überführt werden. In Abbildung 12.3 werden die simulierten Aufstiegs geschwindigkeiten mit den Resultaten der Korrelationen verglichen. Für $\mu_l = 53 \text{ mPa s}$ sind auch die Aufstiegs geschwindigkeiten in kontaminiertem Wasser eingezeichnet. Im entsprechenden Wertebereich vereinfachen sich die Korrelationen (12.2) und (12.3) zu

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}} (1 + 0,15 \text{Re}^{0,687}) . \quad (12.4)$$

Dies ist eine empirische Korrelation für den Widerstandsbeiwert starrer Kugeln. Insbesondere für kleine Blasen stimmen die simulierten Aufstiegsgeschwindigkeiten besser mit der Korrelation für reines Wasser überein. Dies ist zu erwarten, denn eine Belegung der Phasengrenze mit Surfactants ist in der Simulation nicht modelliert.

12.3. Aufstiegsbahnen

Die Aufstiegsgeschwindigkeiten aus Abbildung 12.3 sind in ruhender Flüssigkeit berechnet worden, d.h. bei $\omega = 0$. Steigt eine Blase im Abstand x von der festen Wand im Rechengebiet auf, so erfährt sie eine Gegenströmung der Flüssigphase mit dem Betrag ωx (siehe Abb. 11.2). Ihre absolute Aufstiegsgeschwindigkeit \mathbf{v}_p im ortsfesten Bezugssystem hängt also von x ab. Eine ortsunabhängige Aufstiegsgeschwindigkeit kann in Scherströmungen nur über die Relativgeschwindigkeit definiert werden. Hierzu bildet man die Differenz der absoluten Aufstiegsgeschwindigkeit \mathbf{v}_p und der Flüssigkeitsgeschwindigkeit \mathbf{v}_l , wie sie im ungestörten Fall (d.h. ohne Anwesenheit der Blase) am Ort des Blasenschwerpunkts vorläge. Für die lineare Scherströmung ergibt sich

$$\mathbf{v}_r = \mathbf{v}_p - \mathbf{v}_l = \mathbf{v}_p - (0, 0, -\omega x) . \quad (12.5)$$

Im Folgenden sollen u , v und w jeweils die Komponenten der Relativgeschwindigkeit \mathbf{v}_r bezeichnen. Wegen der Symmetrieebene bei den Randbedingungen (vgl. Abbildung 12.1) wird eine Blasenbewegung in y -Richtung in den Simulationen nicht zugelassen, d.h. v ist stets Null. Die Zeitabhängigkeit von u und w ist in den Abbildungen 12.4 und 12.5 für zwei exemplarische Blasen dargestellt. Zum Zeitpunkt $t = 0$ starten jeweils kugelförmige Blasen in einer linearen Scherströmung. Bereits ab etwa 0,2 s stellen sich konstante Geschwindigkeiten in vertikaler Richtung ein (Abb. 12.4). Die relative Endgeschwindigkeit w in vertikaler Richtung ist jeweils identisch mit den absoluten Endgeschwindigkeiten w_T gleich großer Blasen in ruhender Flüssigkeit. Auch in horizontaler Richtung stellt sich für alle Blasen eine konstante Endgeschwindigkeit u ein, mit Ausnahme der großen Blase bei $\mu_l = 53$ mPa s, bei der u gedämpft oszilliert (Abb. 12.5). In diesem Fall läßt sich durch Mittelung der Extrema ein konstanter Endwert für u extrapolieren. In Übereinstimmung mit dem Experiment kommen Oszillationen der Horizontalgeschwindigkeit u nur bei großen Blasen und geringen Viskositäten μ_l vor. In den ersten hundertstel Sekunden ist u maximal (besonders deutlich bei $d=2,8$ mm).

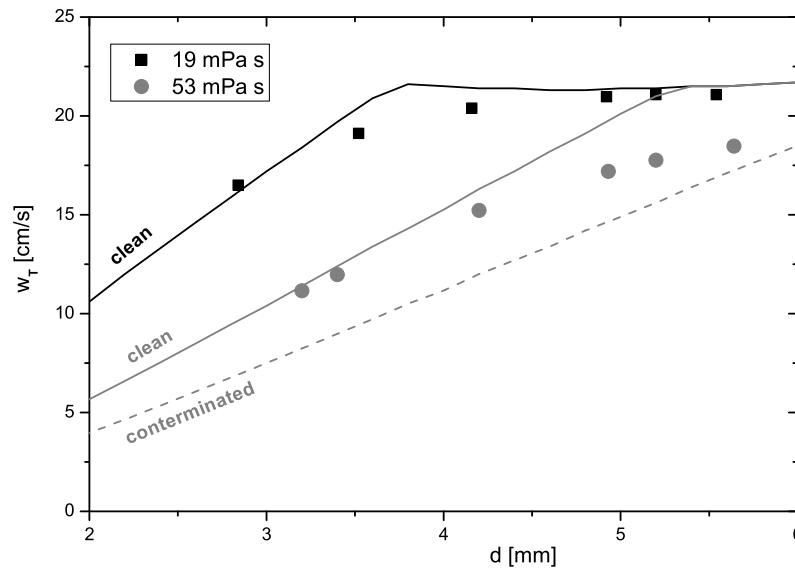


Abbildung 12.3.: Aufstiegsgeschwindigkeiten w_T in Abhängigkeit vom Äquivalenzdiameter d . Datenpunkte: Simulierte Werte. Durchgezogene Linien: Korrelation (12.1) ausgewertet für $\mu_l = 19$ mPa s (schwarz) und für $\mu_l = 53$ mPa s (grau). Gestrichelte Linie: Korrelation (12.2) für kontaminiertes Wasser, ausgewertet für $\mu_l = 53$ mPa s.

Dies geht einher mit einer starken Abflachung der Blasen unmittelbar nach dem Start als Kugelform. Wenn die Blasen ihre endgültige stabile Form erreicht haben, stimmen ihre Horizontaldurchmesser d_H mit denen aus Abbildung 12.2 überein. Es wird also kein Einfluß der Scherrate auf d_H beobachtet. In allen untersuchten Fällen ist die dimensionslose Scherrate Sr klein ($Sr < 0,26$). Bei kleinen Blasen stellt sich eine positive Horizontalgeschwindigkeit u ein, d.h. sie migrieren in ein Gebiet mit stärkerer Gegenströmung, wodurch ihre absolute Aufstiegsgeschwindigkeit sinkt. Die großen Blasen migrieren seitlich in Richtung Gegenströmung ($u < 0$) mit steigender absoluter Aufstiegsgeschwindigkeit. Eine Bewegung mit konstanten Relativgeschwindigkeiten einer linearen Scherströmung bedeutet im ortsfesten Bezugssystem eine gleichförmige Horizontalbewegung und eine gleichmäßig beschleunigte Vertikalbewegung. Daraus ergibt sich (wie beim schiefen Wurf) eine parabelförmige Bewegungsbahn.

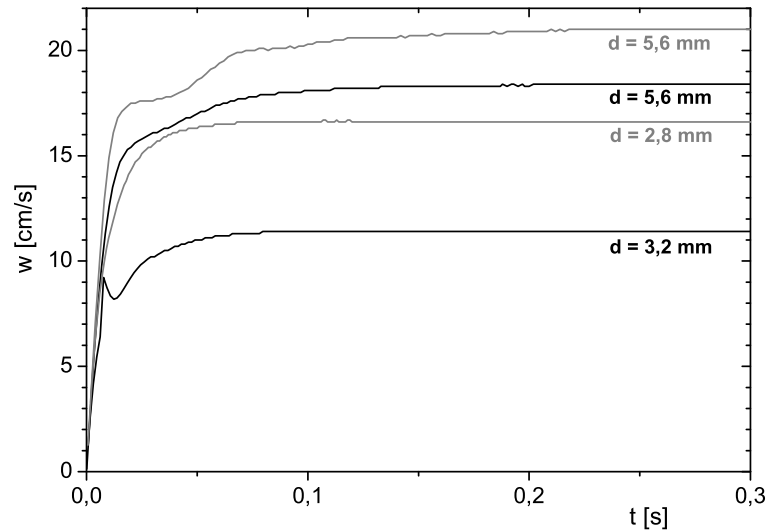


Abbildung 12.4.: Vertikale Komponente der Relativgeschwindigkeit simulierter Blasen in Abhängigkeit von der Zeit. Graue Kurven: $\mu_l = 19 \text{ mPa s}$, $\omega = 8,3 \text{ s}^{-1}$. Schwarze Kurven: $\mu_l = 19 \text{ mPa s}$, $\omega = 6,2 \text{ s}^{-1}$

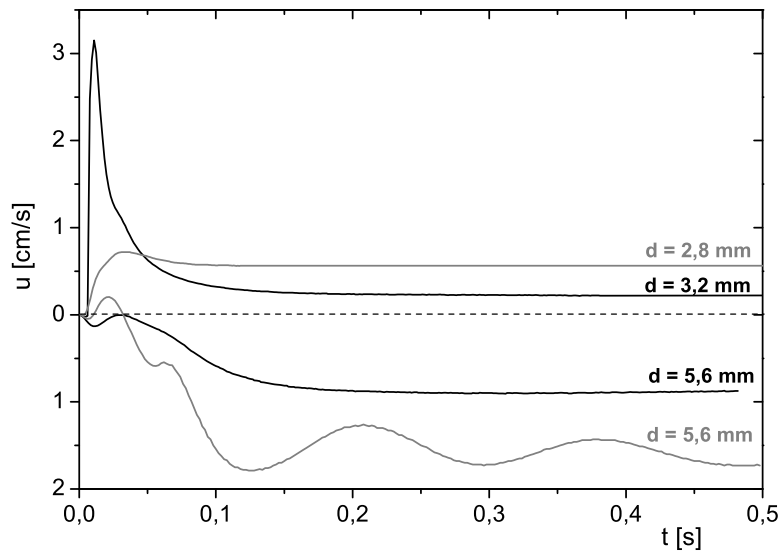


Abbildung 12.5.: Horizontale Komponente der Geschwindigkeit simulierter Blasen.

12.4. Die Bestimmung des Liftkoeffizienten C_L aus Blasentrajektorien

Betrachtet man die Blase als Massepunkt, so lautet ihre Bewegungsgleichung

$$(\rho_g + 0,5 \rho_l) \frac{d \mathbf{v}_p}{dt} = -\frac{3C_D \rho_l}{4d} |\mathbf{v}_r| \mathbf{v}_r - C_L \rho_l \mathbf{v}_r \times \text{rot} \mathbf{v}_l + (\rho_g - \rho_l) \mathbf{g} . \quad (12.6)$$

Diese Gleichung ist eine Gleichung für Kraftdichten. Wenn man sie mit dem Blasenvolumen V_B multipliziert, so erhält man die Gleichung für Kräfte. Die Terme von links nach rechts sind: Trägheitskraft, Widerstandskraft, Liftkraft und Auftriebskraft. Für die träge Masse der Blase wird $V_B (\rho_g + 0,5 \rho_l)$ angenommen. Es wird also davon ausgegangen, daß die Blase zusätzlich zur Masse des Gases in ihrer unmittelbaren Umgebung (beispielsweise in der Nähe der Phasengrenze oder im Nachlauf) eine Wassermenge mitführt, die der Hälfte ihres Volumens entspricht. Die Masse $0,5 V_B \rho_g$ wird *virtuelle Masse* genannt. Gegenüber der virtuellen Masse ist die Masse des Gases vernachlässigbar klein. Der Faktor 0,5 ist lediglich ein Schätzwert. In der folgenden Rechnung wird die virtuelle Masse eliminiert, weshalb das Problem ihrer Abschätzung hier ohne Bedeutung ist.

Dividiert man die Bewegungsgleichung auf beiden Seiten durch die Flüssigkeitsdichte ρ_l und vernachlässigt man die Gasdichte ($\rho_g \ll \rho_l$), so vereinfacht sie sich zu

$$0,5 \frac{d \mathbf{v}_p}{dt} = -D |\mathbf{v}_r| \mathbf{v}_r - C_L \mathbf{v}_r \times \boldsymbol{\omega} - \mathbf{g} \quad \text{mit} \quad D = \frac{3C_D}{4d} . \quad (12.7)$$

Zunächst soll die linke Seite berechnet werden. Für die Lagrange'sche Ableitung einer skalaren Größe Φ entlang einer Blasentrajektorie gilt:

$$\frac{d \Phi}{dt} = \partial_t \Phi + (\mathbf{v}_p \cdot \nabla) \Phi .$$

Anstelle von Φ wird $\mathbf{v}_p = \mathbf{v}_l + \mathbf{v}_r$ eingesetzt. Weil \mathbf{v}_l und \mathbf{v}_r nicht explizit von der Zeit abhängen und nur \mathbf{v}_l ortsabhängig ist, bleibt

$$\frac{d \mathbf{v}_p}{dt} = (\mathbf{v}_p \cdot \nabla) \mathbf{v}_l .$$

Nach Einsetzen von \mathbf{v}_r und \mathbf{v}_l ergibt sich

$$\frac{d \mathbf{v}_p}{dt} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega u \end{pmatrix} . \quad (12.8)$$

Dies bedeutet, daß die Blase sich in horizontaler Richtung mit gleichbleibender Geschwindigkeit bewegt. In der vertikalen Richtung erfährt sie jedoch eine gleichmäßige Beschleunigung ωu . Durch Einsetzen von Gleichung (12.8) und (11.1) in (12.7) ergibt sich unter der Annahme einer konstanten Relativgeschwindigkeit $\mathbf{v}_r = (u, 0, w)$

$$-0,5 \omega \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ u \end{pmatrix} = -D|\mathbf{v}_r| \begin{pmatrix} u \\ 0 \\ w \end{pmatrix} - C_L \omega \begin{pmatrix} -w \\ 0 \\ u \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ g \end{pmatrix}. \quad (12.9)$$

Hier ist $g = |\mathbf{g}|$ positiv, weil die Auftriebskraft in Richtung $+z$ wirkt. Gl. (12.9) kann als Gleichungssystem mit einer Gleichung für jede Raumrichtung interpretiert werden. Die zweite Gleichung für die y -Richtung ist trivial ($0 = 0$). Für die anderen beiden Raumrichtungen ergeben sich die Gleichungen

$$0 = -D|\mathbf{v}_r|u + C_L \omega w \quad \text{für die x-Richtung,} \quad (12.10)$$

und

$$-0,5 \omega u = -D|\mathbf{v}_r|w - C_L \omega u + g \quad \text{für die z-Richtung.} \quad (12.11)$$

Dieses Gleichungssystem enthält die beiden Unbekannten C_L und D , wobei letztere den Dragkoeffizienten C_D enthält. Durch Auflösen von (12.10) nach D und Einsetzen in (12.11) kann D eliminiert werden:

$$-0,5 \omega u = -C_L \omega \frac{w^2}{u} - C_L \omega u + g. \quad (12.12)$$

Auflösen nach C_L liefert:

$$C_L = \frac{u}{u^2 + w^2} \left(\frac{g}{\omega} + 0,5u \right). \quad (12.13)$$

Für die Simulationen gilt stets $0,5u \ll g/\omega$ und $u^2 \ll w^2$. Somit kann man (12.13) vereinfachen zu:

$$C_L = \frac{g u}{\omega w^2}. \quad (12.14)$$

12.5. Die Abhängigkeit des Liftkoeffizienten von der Scherrate

Für Blasen mit den Äquivalenzdurchmessern $d=3,56$ mm und $d=4,85$ mm werden die Aufstiegsbahnen in der Lösung mit $\mu_l = 18$ mPa s (vgl. Tabelle 12.1) für verschiedene Scherraten simuliert und jeweils der Liftkoeffizient nach Gleichung (12.14) ermittelt. Aus Abbildung 12.8 ist ersichtlich, daß der Liftkoeffizient von der Scherrate unabhängig ist. Dies steht nicht im Widerspruch zum Ergebnis von Magnaudet (vgl. Gleichung 11.3), weil die hier untersuchten Blasen im Bereich mittlerer Reynoldszahlen liegen ($Re > 5$). Die Vorzeichen der simulierten Liftkoeffizienten stimmen mit den experimentellen Beobachtungen von Tomiyama et al. (2002) überein. Für den Blasendurchmesser $d=4,85$ mm fällt jedoch auf, daß der Betrag des simulierten Liftkoeffizienten etwas größer ist als im Experiment. Im Folgenden wird stets auf das Experiment von Tomiyama et al. (2002) Bezug genommen. Wo nicht ausdrücklich erwähnt, wird für Simulationen die Standardauflösung von 32 Zellen pro Äquivalenzdurchmesser d verwendet.

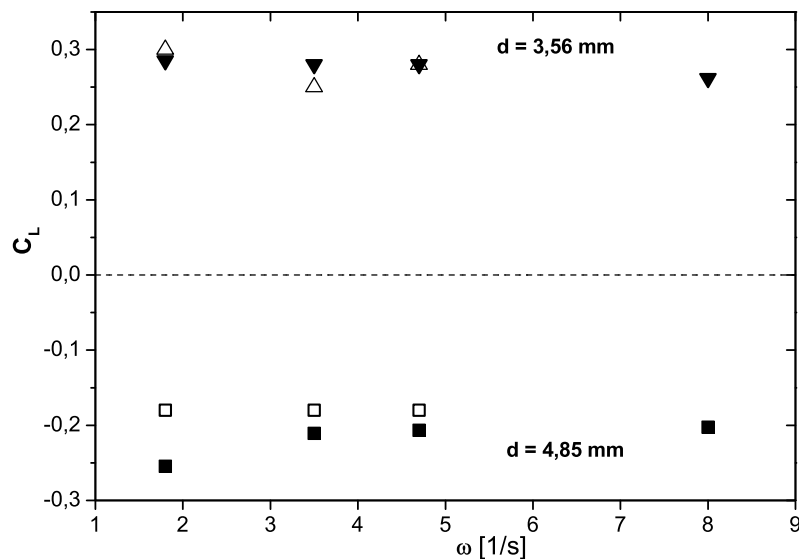


Abbildung 12.6.: Liftkoeffizient für Blasen ($d=3,56$ und $d=4,85$) in Abhängigkeit von der Scherrate ($\mu_l = 18$ mPa s). Offene Symbole: Experiment. Geschlossene Symbole: Simulation. Für $\omega = 8\text{s}^{-1}$ liegt kein experimenteller Wert vor.

12.6. C_L in Abhängigkeit vom Blasendurchmesser

Für Blasen verschiedener Größen ($d=2,8-5,6$ mm) wird die Bewegung in Glycerinlösungen bei jeweils konstant gehaltener Scherrate simuliert und die Liftkoeffizienten in Abhängigkeit von der modifizierten Eötvös-Zahl $Eö_H$ dargestellt. Fast alle simulierten Werte liegen unterhalb der Kurve, welche die experimentelle Korrelation (11.5) repräsentiert. Zudem zeigt sich in der Simulation - anders als im Experiment - eine deutliche Abhängigkeit der simulierten Werte von der Viskosität der Flüssigphase ab. Es können verschiedene Ursachen für die Unterschiede zwischen Simulation und Experiment verantwortlich sein:

- Die Auflösung des Gitters ist bei 32 Zellen/ d möglicherweise noch nicht hoch genug, um alle relevanten Strömungsphänomene abzubilden.
- Im Löser treten numerische Fehler auf (beispielsweise in Form unphysikalischer Geschwindigkeitsfelder, sogenannter „parasitärer Strömungen“).
- Nicht alle im Experiment auftretenden Phänomene sind in dem mathematischen Modell berücksichtigt, das dem numerischen Löser zugrunde liegt. Beispielsweise ist der Einfluß von *Surfactants* nicht berücksichtigt. Zwar wurde im Experiment destilliertes Wasser zur Herstellung der Lösungen verwendet, aber dennoch könnten geringe Verunreinigungen eine Rolle spielen.

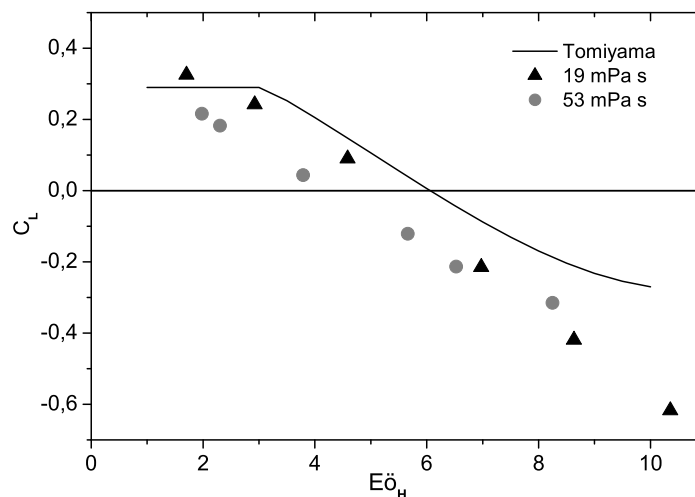


Abbildung 12.7.: Liftkoeffizient für Blasen in Abhängigkeit von $Eö_H$ bei einer Auflösung von 32 Zellen/ d . Dreiecke: $\mu_l = 19$ mPa s, bei $\omega = 6,2$ s^{-1} . Kreise: $\mu_l = 53$ mPa s, bei $\omega = 8,3$ s^{-1} .

12.7. Abhängigkeit der simulierten Liftkoeffizienten von der Auflösung

Die Rechnungen aus dem vorangegangenen Abschnitt werden mit verschiedenen Auflösungen (16 bis 64 Zellen pro Blasendurchmesser) wiederholt. Wegen des hohen Rechenaufwandes konnte nur ein Fall mit der Auflösung 64 Zellen/ d gerechnet werden. Die Beträge für die Liftkoeffizienten werden für große Blasen kleiner und kommen somit den Werten der Korrelation von Tomiyama näher. Es ist jedoch nicht zu erwarten, daß bei weiterer Erhöhung der Auflösung noch signifikante Änderungen der Resultate auftreten, denn bereits bei einer Auflösung von 32 Zellen/ d ist die Breite der Zellen kleiner als die Kolmogorov-Längenskala λ_K . Diese liefert eine Abschätzung für die Größe der kleinsten möglichen Wirbel in der Flüssigphase:

$$\lambda_K = \left(\frac{\nu_l^3}{\epsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (12.15)$$

mit der kinematischen Viskosität $\nu_l = \mu_l / \rho_l$ und der auf die Masse bezogenen Dissipationsrate ϵ . Für aufsteigende Partikel kann diese abgeschätzt werden als $\epsilon = gw$.

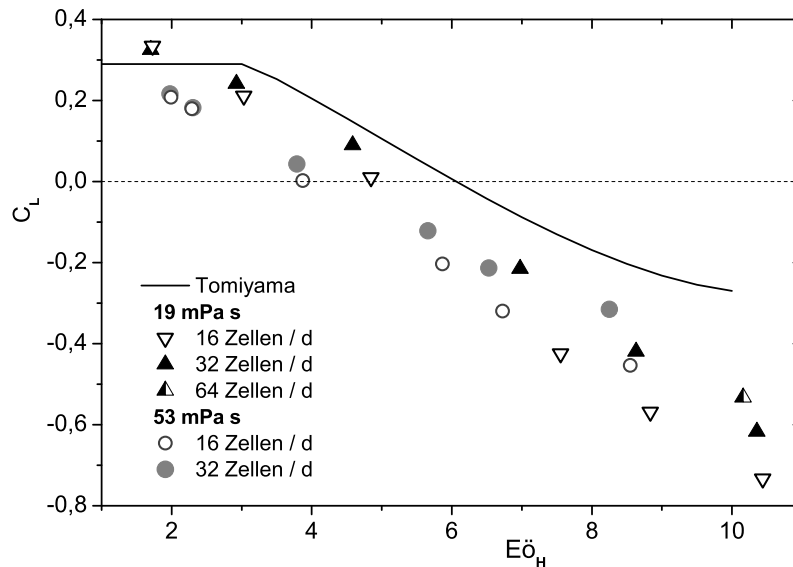


Abbildung 12.8.: Liftkoeffizient für Blasen in Abhängigkeit von $Eö_H$ bei verschiedenen Auflösungen .

Aus den Geschwindigkeitsfeldern ist ersichtlich, daß sich bei $\mu_l = 53 \text{ mPa s}$ im Nachlauf der Blasen keine Wirbel bilden (Abb. 12.9). Für $\mu_l = 19 \text{ mPa s}$ sehen die Geschwindigkeitsfelder qualitativ ähnlich aus. Die Blasen sind lediglich etwas flacher. Wegen der einfachen Struktur dieser Geschwindigkeitsfelder kann davon ausgegangen werden, daß alle relevanten strömungsmechanischen Phänomene bei den verwendeten Gitterauflösungen voll erfaßt sind. Es nicht zu erwarten, daß bei höheren Auflösungen komplexere Strukturen in den Geschwindigkeitsfeldern - etwa kleine Wirbel - erkennbar würden.

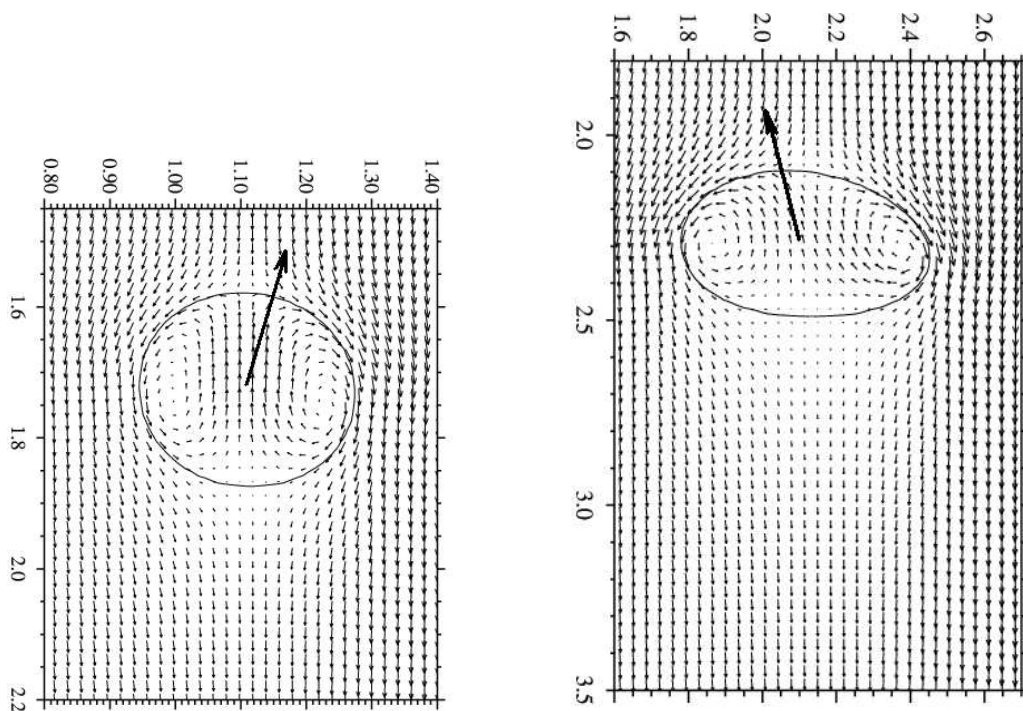


Abbildung 12.9.: Geschwindigkeitsfelder um Blasen bei $\mu_l = 53 \text{ mPa s}$ und $\omega = 8,3\text{s}^{-1}$. Fette Pfeile: Bewegungsrichtung der Blase. Links: Kleine Blase; $d=3,2 \text{ mm}$. Rechts: Große Blase; $d=5,6 \text{ mm}$. Die Längeneinheit der Skalierung ist [cm]. Man beachte, daß der Maßstab der beiden Abbildungen unterschiedlich ist. Die Geschwindigkeit der Gegenströmung steigt von links nach rechts.

Parasitäre Strömungen treten bei Zweiphasen-Simulationen an der Phasengrenze auf (Koebe, 2004). Nach Augenschein sind die Geschwindigkeitsfelder in Abbildungen 12.9 und 12.10 auch an der Phasengrenze physikalisch plausibel. Erfahrungsgemäß spielen parasitäre Strömungen eine Rolle, wenn die gesamte kinetische Energie nahe Null ist (Scardovelli und Zaleski, 1999). Dies trifft auf die betrachteten Situationen nicht zu.

Auch in DNS-Simulationen mit anderen Codes sind die berechneten Liftkoeffizienten systematisch kleiner als nach der Korrelation von Tomiyama (Sousa et al., 2006; Rusche, 2002; Kuipers et al., 2006). Das spricht für die Annahme, daß im Experiment außer der reinen Zweiphasenströmung weitere Effekte - wie etwa *Surfactants* - eine Rolle spielen.

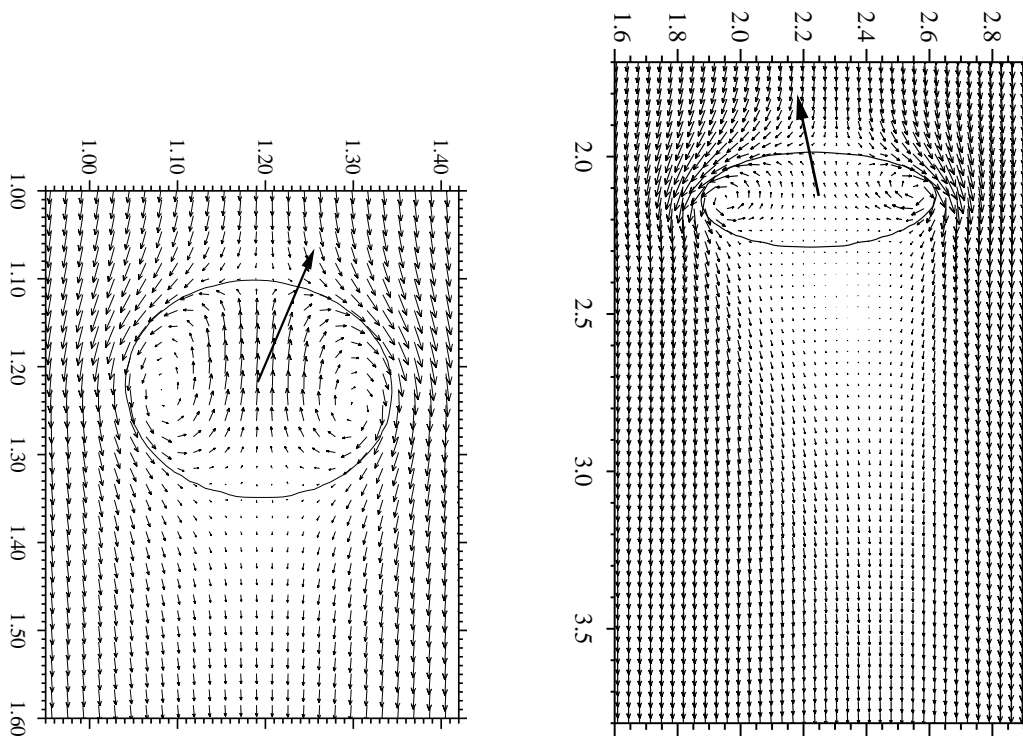


Abbildung 12.10.: Geschwindigkeitsfelder um Blasen bei $\mu_l = 19 \text{ mPa s}$ und $\omega = 6,2s^{-1}$. Links: Kleine Blase; $d=2,8 \text{ mm}$. Rechts: Große Blase; $d=5,6 \text{ mm}$. Die Längeneinheit der Skalierung ist [cm]. Man beachte, daß der Maßstab der beiden Abbildungen unterschiedlich ist. Die Geschwindigkeit der Gegenströmung steigt von links nach rechts.

12.8. Variation der Oberflächenspannung

Gemäß der Korrelation (11.5) ist der Liftkoeffizient eine Funktion der modifizierten Eötvös-Zahl $E\ddot{o}_H$, mit

$$E\ddot{o}_H = \frac{g \Delta \rho d_H^2}{\sigma}.$$

Im Experiment ebenso wie in den vorangegangenen Abschnitten wurde $E\ddot{o}_H$ durch die Variation des Blasendurchmessers verändert. Prinzipiell kann $E\ddot{o}_H$ jedoch auch über die Auftriebskraft oder die Oberflächenspannung variiert werden. Steigt beispielsweise die Oberflächenspannung σ , so sinkt $E\ddot{o}_H$ aus zwei Gründen: Erstens tritt σ im Nenner von $E\ddot{o}_H$ auf, zweitens sinkt der horizontale Blasendurchmesser d_H , weil die Oberflächenspannung einer Abflachung der Blasen entgegenwirkt. Im Folgenden werden Simulationsergebnisse für Serien von Modellsystemen vorgestellt, in denen jeweils nur die Oberflächenspannung unterschiedlich ist (Tabelle 12.2). Indem σ variiert wird, verändert sich auch die Mortonzahl des Systems, weil im Nenner der Mortonzahl σ in der dritten Potenz auftritt:

$$Mo = \frac{g \Delta \rho \mu_l^4}{\rho_l^2 \sigma^3}$$

Hebt man etwa in System A die Oberflächenspannung von 10 auf 75 mN/m, so sinkt die Mortonzahl um knapp drei Größenordnungen. Derartige Serien von Stoffsystemen lassen sich in der Natur nicht finden, denn im Allgemeinen unterscheiden sich unterschiedliche Stoffsysteme meist in mehreren Parametern. Zudem sind die Oberflächenspannungen im Modellsystem B unrealistisch hoch. In einer Simulation hingegen können auch „unrealistische“ Stoffsysteme untersucht werden. Hier wird beispielsweise der Einfluß der Oberflächenspannung auf den Liftkoeffizienten untersucht.

Tabelle 12.2.: Serien von Modellsystemen zur Variation der Oberflächenspannung. Serie A: $\sigma = 10, 15, 20, 30, 40, 50, 60, 75$ mN/m. Serie B: $\sigma = 100, 200, 300, 400, 600, 800$ mN/m.

Serie	d [mm]	μ_l [mPa s]	ρ_l [kg/m ³]	σ [mN/m]	log(Mo)
A	3,2	19	1,154	10...75	-2,9... -5,6
B	10	100	1,000	100...800	-3,0... -5,7

In Abbildung 12.11 ist die Abhängigkeit des Liftkoeffizienten von $E\ddot{o}_H$ dargestellt, wobei $E\ddot{o}_H$ auf zweierlei Weise variiert wurde: Durch Simulation von Blasen mit unterschiedlichem Durchmesser d (bei gleichbleibender Oberflächenspannung) oder durch Simulation von Blasen mit verschiedenen Oberflächenspannungen (bei gleichbleibendem Blasendurchmesser). Alle Datenreihen können gut approximiert werden durch die lineare Funktion

$$C_L = -0,1 E\ddot{o}_H + 0,5 . \quad (12.16)$$

Die Steigung dieser Funktion ist ähnlich wie die Steigung der Tomiyama-Korrelation im Bereich $4 < E\ddot{o}_H < 7$. Die lineare Approximation wechselt ihr Vorzeichen bei $E\ddot{o}_H = 5$, die Korrelation jedoch erst bei ungefähr $E\ddot{o}_H \approx 6$. Im Grenzfall unendlich großer Oberflächenspannung werden Blasen kugelförmig und $E\ddot{o}_H$ geht gegen Null. Für $E\ddot{o}_H = 0$ liefert Gleichung (12.16) den Wert $C_L = 0,5$. Dies entspricht genau dem Liftkoeffizienten, den Auton für feste Kugel in linearen Scherströmungen berechnet hat.

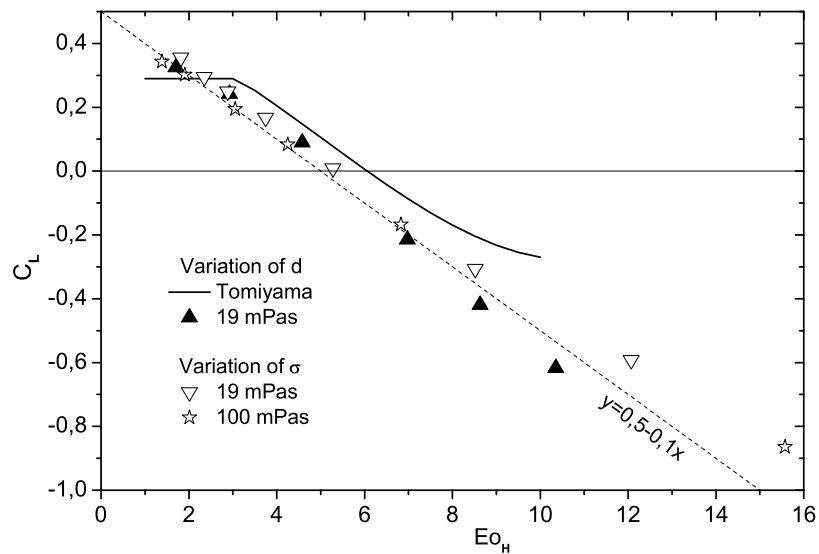


Abbildung 12.11.: Liftkoeffizient in Abhängigkeit von $E\ddot{o}_H$. Schwarze Kurve: Tomiyama-Korrelation. Geschlossene Dreiecke: $\mu_l = 19$ mPa s; $\sigma = 61$ mN/m; $d = 2,8 \dots 5,5$ mm. Offene Dreiecke: $\mu_l = 19$ mPa s; $\sigma = 10 \dots 75$ mN/m; $d = 3,2$ mm („Serie A“). Sterne: $\mu_l = 100$ mPa s; $\sigma = 100 \dots 800$ mN/m; $d = 10$ mm („Serie B“).

In den Serien A und B werden jeweils fast drei Größenordnungen von Mo überstrichen, wohingegen bei der dritten Datenreihe in Abbildung 12.11 (Variation von d bei $\mu_l = 19 \text{ mPa s}$) Mo konstant ist ($\log Mo = -5,3$). Dennoch lassen sich alle Datenreihen durch eine Funktion von $Eö_H$ gut approximieren (Abb. 12.11). Offenbar hat die Mortonzahl des Systems kaum einen Einfluß auf die Liftkraft.

In den Abbildungen 12.12 und 12.13 ist der Liftkoeffizient in Abhängigkeit von der auf den Äquivalenzdurchmesser bezogenen Eötvöszahl $Eö$ beziehungsweise in Abhängigkeit vom Durchmesserverhältnis d_V/d_H abgetragen. In beiden Darstellungen haben die Datenreihen für unterschiedliche Systeme jeweils einen anderen Verlauf. Daraus ist ersichtlich, daß sich C_L nicht als Funktion von $Eö$ oder d_V/d_H beschreiben läßt. Damit verbleibt allein $Eö_H$ als entscheidende Kennzahl, die den Betrag des Liftkoeffizienten bestimmt. Für stark abgeflachte Blasen (kleines d_V/d_H) ist der Liftkoeffizient negativ, für annähernd kugelförmige Blasen ($d_V/d_H \approx 1$) ist er positiv. Sowohl in der Simulation (Abb. 12.13) als auch im Experiment (Abb. 12.14) können bei $d_V/d_H \approx 0,6$ sowohl positive als auch negative Liftkoeffizienten auftreten - je nach Stoffsystem.

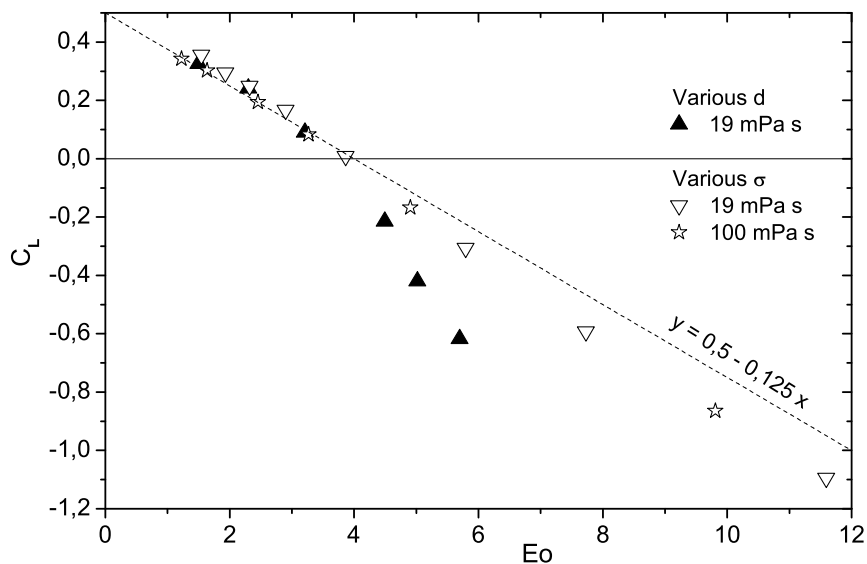


Abbildung 12.12.: Liftkoeffizient in Abhängigkeit von $Eö$ (auf den Äquivalenzdurchmesser d bezogene Eötvöszahl). Stoffsysteme wie in Abb. 12.11 und Tabelle 12.2.

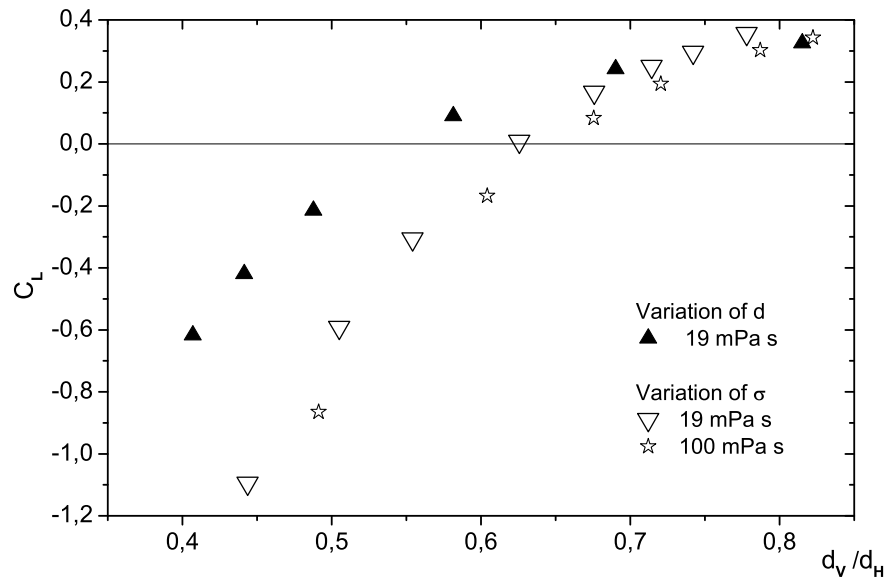


Abbildung 12.13.: Liftkoeffizient in Abhängigkeit vom Durchmesserverhältnis d_V/d_H . Stoffsysteme wie in Abb. 12.11 und Tabelle 12.2.

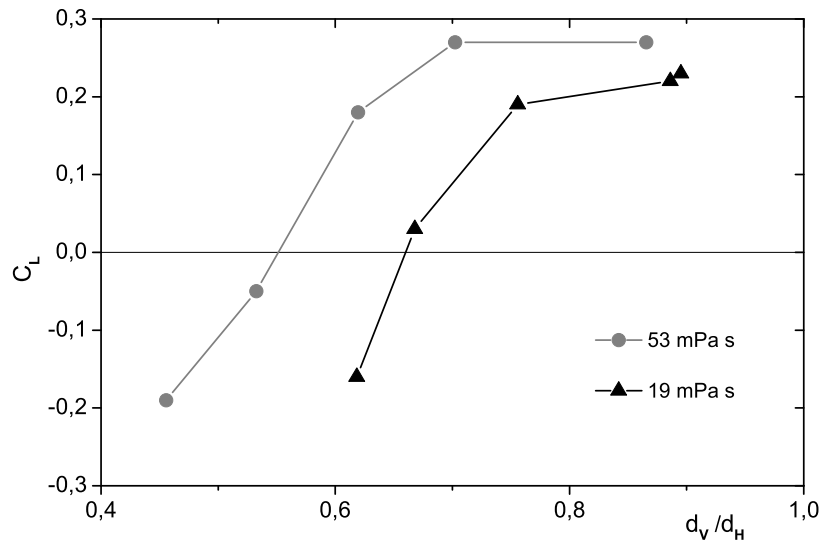


Abbildung 12.14.: Liftkoeffizient in Abhängigkeit vom Durchmesserverhältnis d_V/d_H für Blasen aus dem Experiment von Tomiyama et al. (2002).

12.9. Variation der Gravitation

Da die Eötvöszahl das Verhältnis von Auftriebskraft zur Oberflächenspannungskraft angibt, kann $E\ddot{o}_H$ auch über die Gravitation variiert werden. Für einen Blase mit fest vorgegebenem Durchmesser ($d=5,5$ mm) wird die Trajektorie für den Aufstieg bei unterschiedlicher Gravitation berechnet ($g = 9,81; 8; 6; 4; 2$ m^2/s). Je geringer die Gravitation, desto langsamer steigt die Blase auf, und die Deformation durch hydrodynamische Effekte (Abflachung) nimmt ab. Als Flüssigphase wurde das System $\mu_l = 19$ mPa s aus Tabelle 12.1 gewählt, mit der Scherrate $\omega = 6,2$ s^{-1} . Aus Abbildung 12.15 ist ersichtlich, daß der Liftkoeffizient in ähnlicher Weise von $E\ddot{o}_H$ abhängt, wie der Durchmesser der Blasen bei konstanter Gravitation ($g = 9,81$ m^2/s) variiert wird. In beiden Fällen lassen sich alle Werte mit der linearen Funktion (12.16) approximieren.

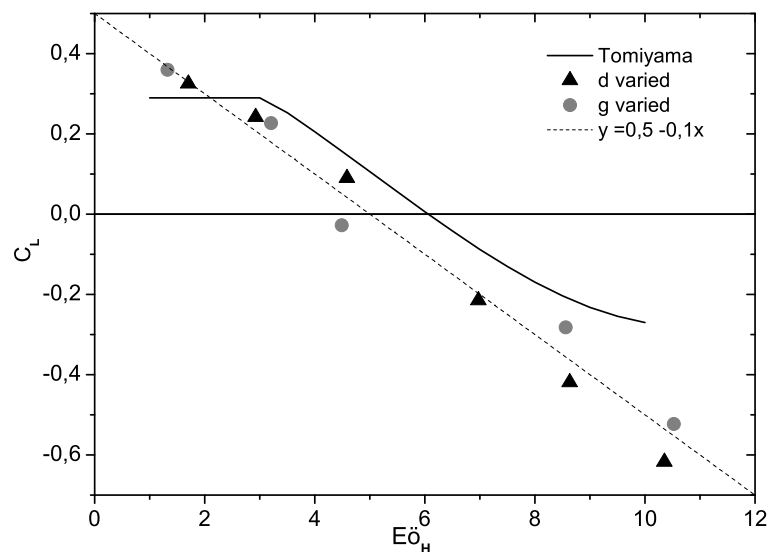


Abbildung 12.15.: Liftkoeffizient in Abhängigkeit von $E\ddot{o}_H$. Schwarze Dreiecke: Variation des Blasendurchmessers (vgl. Abb. 12.7). Graue Kreise: Variation der Gravitation.

12.10. Luftblasen in Wasser

Von besonderem Interesse ist die Größe der Liftkraft auf Blasen in Wasser. Hierfür gibt es zwar eine Anzahl von Experimenten, die eine Abschätzung des kritischen Blasendurchmessers ermöglichen, bei dem der Liftkoeffizient sein Vorzeichen wechselt (beispielsweise Beobachtungen der Blasenverteilung in vertikalen Rohren, vgl. Abschnitt 11.1). Es sind jedoch bisher noch nicht die Beträge des Liftkoeffizienten für Blasen in Wasser experimentell ermittelt worden. Dies liegt unter anderem daran, daß es wegen der geringen dynamischen Viskosität schwer ist, in Wasser eine stabile lineare Scherströmung zu erzeugen. Aufgrund der Kelvin-Helmholtz-Instabilität kann bei höheren Reynoldszahlen eine lineare Scherströmung zusammenbrechen und es können Turbulenzen entstehen. In der Simulation mit *FS3D* bleibt die Scherströmung auch für Wasser stabil. Anders als im Experiment kann in der Simulation eine völlig ungestörte Scherströmung als Anfangsbedingung eingestellt werden. Störungen wie thermische Konvektion oder Erschütterungen können hier ausgeschlossen werden. Zur Stabilisierung des simulierten Geschwindigkeitsprofils trägt die Einström-Randbedingung mit einer linearen Scherströmung am oberen Rand des Rechengebietes bei. Es werden Trajektorien für Blasen ($d=1\dots 6$ mm) in Wasser berechnet. Die relative Aufstiegsge-

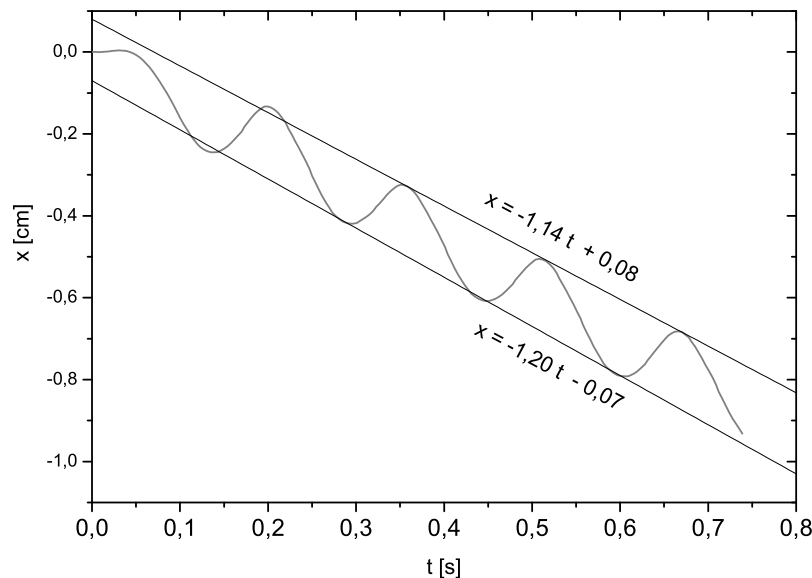


Abbildung 12.16.: Graue Kurve: Horizontale Koordinate des Schwerpunkts einer Blase ($d=6$ mm) in Wasser in Abhängigkeit von der Zeit. $\omega = 10s^{-1}$.

schwindigkeit dieser Blasen liegt zwischen 20 und 24 cm/s, und ist damit vergleichbar mit experimentell beobachteten Aufstiegsgeschwindigkeiten von Blasen in ruhendem Wasser (Simulationen von Blasen in ruhenden Flüssigkeiten und Vergleiche mit Experimenten hat Koebe (2004) detailliert durchgeführt). Anders als in den viskosen Glycerinlösungen oszillieren größere Blasen in Wasser so stark, daß eine zickzack-förmige Trajektorie mit periodischer Richtungsumkehr der Horizontalbewegung entsteht. In diesem Fall stellt sich zwar keine konstante Horizontalgeschwindigkeit ein, jedoch nach wenigen horizontalen Schwingungen ist die mittlere Horizontalgeschwindigkeit (gemittelt über jeweils eine Schwingungsperiode) konstant. Im Weg-Zeit-Diagramm können die relativen Maxima oder Minima des Graphen $x(t)$ durch Geraden verbunden werden. Die Steigung dieser Geraden ergibt jeweils einen Wert für die mittlere Horizontalgeschwindigkeit. Der Mittelwert der beiden Geradensteigungen wird als Wert für die Horizontalgeschwindigkeit verwendet. Tomiyama wendet die aus dem Expe-

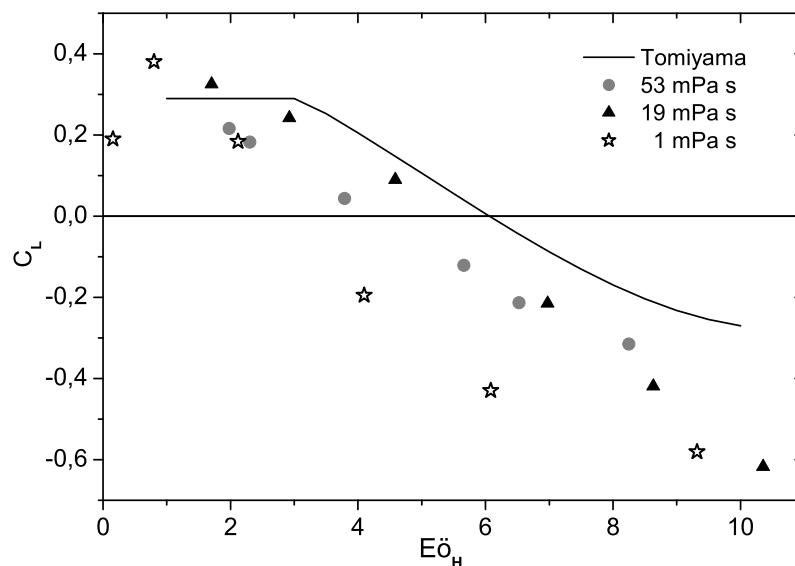


Abbildung 12.17.: Liftkoeffizient von Blasen in Abhängigkeit von der modifizierten Eötvös-Zahl $E\ddot{o}_H$. Schwarze Kurve: Korrelation von Tomiyama. Sterne: Simulierte Blasen in Wasser ($\mu_l = 1$ mPa s), bei einer Auflösung von 16 Zellen/d. Schwarze Dreiecke und graue Kreise: Simulierte Blasen in Glycerinlösungen $\mu_l = 53$ bzw. 19 mPa s bei einer Auflösung von 32 Zellen/d.

riment mit Glycerinlösungen gewonnene Korrelation auch auf Luftblasen in Wasser an. Um den Liftkoeffizienten für eine bestimmte Blasengröße d zu ermitteln, ist die Kenntnis des dazugehörigen Horizontaldurchmessers d_H erforderlich. Tomiyama verwendet die Korrelation von Wellek et al. für Blasen in vollständig kontaminiertem Wasser, um den Horizontaldurchmesser der Blasen abzuschätzen:

$$\frac{d_V}{d_H} = \frac{1}{1 + 0,163 \text{Eo}^{0,757}} . \quad (12.17)$$

Unter der zusätzlichen Annahme elliptischer Blasenformen ($d^3 = d_V d_H^2$) kann mittels der Wellek-Korrelation zu jedem Äquivalenzdurchmesser d der zugehörige Horizontaldurchmesser d_H in kontaminiertem Wasser d_H ermittelt werden. Aus d_H und den Stoffdaten ergibt sich Eö_H , und über Tomiyamas Korrelation (11.5) wird schließlich der zugehörige Liftkoeffizient ermittelt. So kann der Liftkoeffizient als Funktion vom Äquivalenzdurchmesser dargestellt werden. Diese Funktion ist in Abbildung 12.19 eingezeichnet. Ihr Nulldurchgang liegt bei $d=5,8$ mm und stimmt recht gut mit dem kritischen Blasendurchmesser aus experimentellen Beobachtungen überein. Nach der gleichen Vorgehensweise hat Prasser et al. (2005) den kritischen Durchmesser für Dampfblasen in siedendem Wasser unter einem Druck von 6,5 MPa errechnet. Die Siedetemperatur bei diesem Druck beträgt 280 K. Wegen der geringen Oberflächenspannung ($\sigma =$) ergibt sich aus der Tomiyama-Korrelation ein kritischer Blasendurchmesser von 3,5 mm, was mit dem Experiment übereinstimmt (vgl. Abb. 11.1). Dennoch ist die Verknüpfung von Wellek-Korrelation (12.17) und Tomiyama-Korrelation (11.5) nicht konsistent, denn Tomiyama verwendete in seinem Experiment destilliertes Wasser, um den Einfluß von Surfactants auszuschließen. Die Wellek-Korrelation hingegen gilt nur für vollständig kontaminiertes Wasser. Blasen in reinem Wasser hingegen können deutlich flacher sein. So schlagen Fan und Tsuchiya (1990) für Blasen in reinen Systemen eine Korrelation vor, die auf der sogenannten Tadaki-Zahl $\text{Ta} = \text{ReMo}^{0,23}$ beruht:

$$\frac{d_V}{d_H} = \{0,81 + 0,2 \tanh[1,8(0,4 - \log \text{Ta})]\}^3 \quad \text{für} \quad 0,3 \leq \text{Ta} \leq 20 . \quad (12.18)$$

Diese Korrelation gilt für ellipsoide Blasen. Unterhalb $\text{Ta} = 0,3$ gelte $d_V/d_H = 1,0$ (sphärische Blasen), oberhalb $\text{Ta} = 20$ sei $d_V/d_H = 0,24$ (Kappenblasen). Aus Abbildung 12.18 geht hervor, daß die Korrelation (12.18) die simulierten Blasenformen

weitaus besser trifft als diejenige von Wellek. In der Simulation oszilliert der Horizontaldurchmesser größerer Blasen in Verbindung mit einer zickzack-förmigen Aufstiegsbahn. In solchen Fällen werden Mittelwerte für d_V und d_H verwendet.

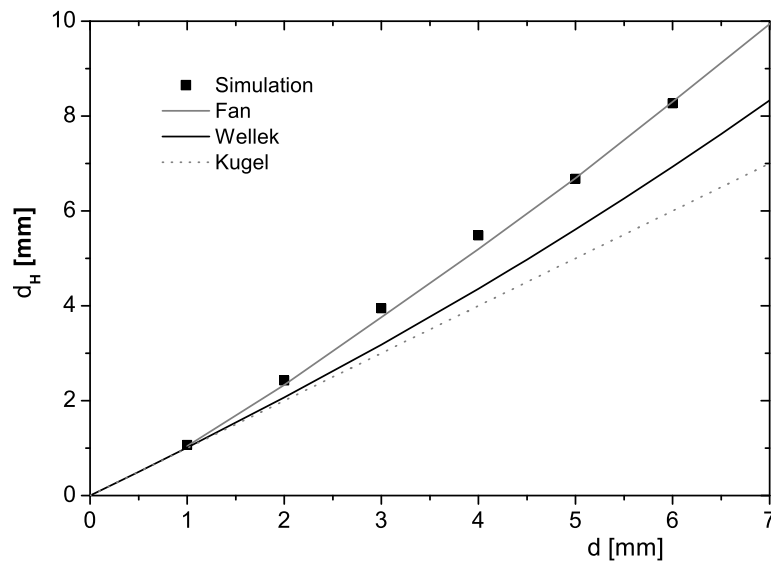


Abbildung 12.18.: Horizontaler Durchmesser d_H als Funktion des Äquivalenzdurchmessers d . Gestrichelte Gerade: Kugelform ($d_H = d$). Schwarze Kurve: Korrelation (12.17) von Wellek. Graue Kurve: Korrelation (Fan und Tsuchiya (1990)). Schwarze Quadrate: Simulierte Blasen.

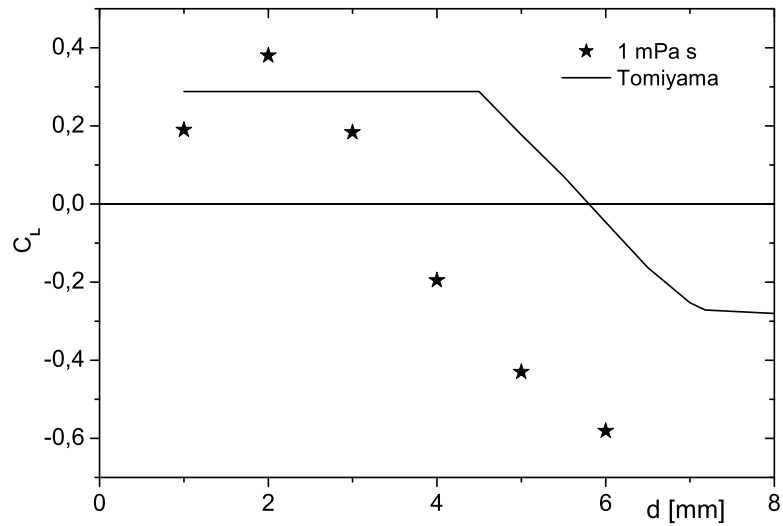


Abbildung 12.19.: Liftkoeffizient von Blasen in Wasser in Abhängigkeit vom Äquivalenzdiameter d . Schwarze Kurve: Korrelation von Tomiyama. Sterne: Simulierte Blasen, bei einer Auflösung von 16 Zellen/ d .

13. Untersuchung der Geschwindigkeits- und Druckfelder an der Phasengrenze

Alle Kräfte, die zwischen Blase und Flüssigkeit wirken, werden über die Phasengrenze ausgetauscht. Um das Zustandekommen der Liftkraft (und insbesondere ihres Vorzeichenwechsels) zu verstehen, liegt es daher nahe, die Druck- und Geschwindigkeitsfelder an der Phasengrenze zu untersuchen. Es bietet sich an, mit dem zweidimensionalen Fall zu beginnen, weil hier die Felder besonders einfach visualisiert werden können. Allerdings gibt es zu zweidimensionalen Blasen kein Äquivalent in der Natur. Eine kreisförmige 2D-Blase entspräche beispielsweise einem unendlich ausgedehntem Zylinder.

13.1. Zweidimensionale Blasen

Erste numerische Simulationen zu Blasen in Scherströmungen wurden von Tomiyama und Magnaudet durchgeführt. Hierbei beschränkte man sich wegen der begrenzten Rechenleistung auf die Untersuchung zweidimensionaler Blasen. Es konnte gezeigt werden, daß bereits im zweidimensionalen Fall kleine Blasen in Richtung stärkerer Gegenströmung migrieren, wogegen große Blasen in die entgegengesetzte Richtung wandern Tomiyama et al. (1993a); Ervin und Tryggvason (1997). Dieses Phänomen wird auch in Simulationen mit *FS3D* beobachtet. In Abbildung 13.1 sind die Geschwindigkeitsfelder um 2D-Blasen in einer Glycerin-ähnlichen Modellflüssigkeit mit $\rho_l = 1,2 \text{ kg/m}^3$, $\mu_l = 100 \text{ mPa s}$ und $\sigma = 64 \text{ mN/m}$ dargestellt. Nur für die große Blase ($d=6 \text{ mm}$) stellt sich nach einer beschleunigten Startphase eine konstante Relativgeschwindigkeit ein. Die horizontale Migrationsgeschwindigkeit der kleinen Blase ($d=3 \text{ mm}$) erreicht ihr Maximum nach der Startphase, wenn die maximale Relativgeschwindigkeit in vertikaler Richtung erreicht ist. Danach fällt die Migrationsgeschwindigkeit jedoch monoton. Diese Abbremsung kann durch Vergrößerung des horizontalen Wandabstandes d_W verringert werden. Allerdings ist auch für $d_W = 16d$ zu keinem

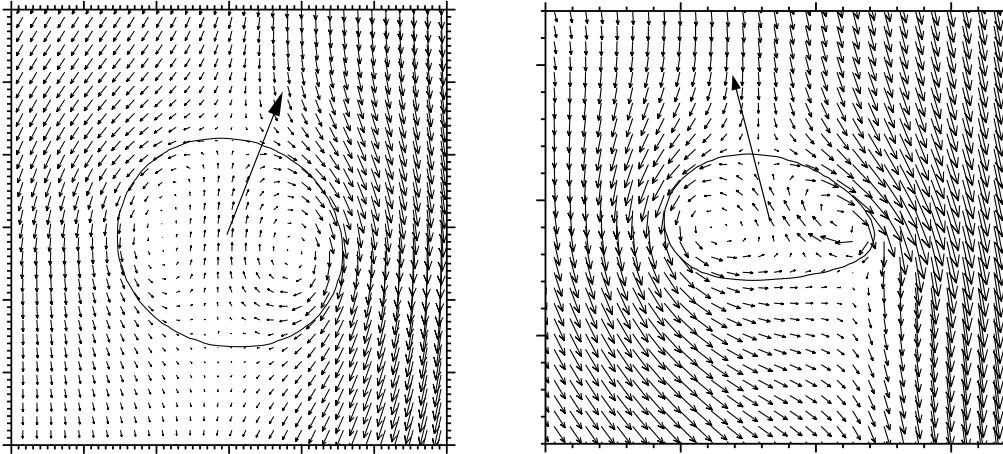


Abbildung 13.1.: Geschwindigkeitsfelder um 2D-Blasen bei $\omega = 10s^{-1}$. Links: Kleine Blase; $d=3$ mm. Rechts: Große Blase; $d=6$ mm. Man beachte, daß der Maßstab der beiden Abbildungen unterschiedlich ist. Der Geschwindigkeit der Gegenströmung steigt von links nach rechts.

Zeitintervall die Horizontalgeschwindigkeit der kleinen Blase konstant, weshalb die Bestimmung des Liftkoeffizienten nach Gleichung (12.14) in diesem Fall unmöglich ist. Zum stärkeren Wandeinfluß in 2D-Simulationen könnte folgender Zusammenhang beitragen: Wenn sich eine zweidimensionale Blase in eine Raumrichtung bewegt, so kann die verdrängte Flüssigkeit nur in *eine* andere Richtung ausweichen. Bei einer dreidimensionalen Blase kann verdrängte Flüssigkeit stets in *zwei* Raumrichtungen ausweichen.

13.1.1. Zirkulation um zweidimensionale Blasen

In der kleinen Blase aus Abbildung 13.1 (links) ist der rechte Wirbel ausgeprägter, weil er von der vorbeistreichenden Flüssigphase stärker angetrieben wird. In der großen Blase hingegen ist aufgrund der Deformation der linke Wirbel ausgeprägter. Beide Blasen migrieren in Richtung des stärker ausgeprägten Wirbels. Dieses Phänomen beschreiben auch Ervin und Tryggvason (1997) und vermuten, daß die Richtung der Migration durch die Zirkulation des Geschwindigkeitsfeldes um die Phasengrenze bestimmt wird. Die Zirkulation Z um die Blase ist das Linienintegral

$$Z = \oint_{\Gamma} \mathbf{v} \, ds \quad (13.1)$$

entlang der Phasengrenze Γ gegen den Uhrzeigersinn um die Blase. Dabei ist ds ein infinitesimales Linienelement der Phasengrenze. Anstatt des Skalarprodukts $\mathbf{v}ds$ kann auch das Kreuzprodukt $\mathbf{v} \times \mathbf{n}$ integriert werden, mit \mathbf{n} als äußerer Normale der Phasengrenze.

$$Z = \mathbf{e}_y \oint_{\Gamma} \mathbf{v} \times \mathbf{n} ds . \quad (13.2)$$

Hierbei ist ds die Länge eines infinitesimalen Linienelementes der Phasengrenze, und \mathbf{e}_y ein Einheitsvektor senkrecht zur Aufstiegsrichtung und senkrecht zur Richtung der seitlichen Migration (also senkrecht auf der simulierten 2D-Ebene). Das Linienintegral (13.2) kann unter Verwendung von $\mathbf{n} = -\nabla f / |\nabla f|$ in ein Flächenintegral über das Rechengebiet G umgewandelt werden:

$$Z = \int_G \mathbf{e}_y [\mathbf{v} \times (-\nabla f)] dA . \quad (13.3)$$

In dieser Form wird die Zirkulation um die in Abbildung 13.1 dargestellten Blasen numerisch berechnet. Es ergibt sich für die kleine Blase $Z = -0,80 \text{ cm}^2/s$ und für die große Blase $Z=2,37$. Teilt man die Zirkulation um eine 2D-Blase durch ihre Fläche, so ergibt sich ein Wert für die durchschnittliche Rotation der Gasphase:

$$\omega_g = \frac{Z}{A} . \quad (13.4)$$

Auf diese Weise erhält man für die kleine Blase $\omega_g = 8,4s^{-1}$ und für die große Blase $\omega_g = -11,5s^{-1}$. Die Rotation der ungestörten Scherströmung ist hier $\omega = 10s^{-1}$. In der großen Blase hat die durchschnittliche Rotation also ein anderes Vorzeichen als in der Flüssigphase und in der kleinen Blase. Diese Fallbeispiele stützen demnach die Hypothese von Magnaudet, wonach die Richtung der Blasenmigration vom Vorzeichen der Gaszirkulation abhängt.

13.1.2. Dynamischer Druck um zweidimensionale Blasen

Der Druck p in der Flüssigphase läßt sich zerlegen in einen hydrostatischen Druck $p_s = p_0 - \rho_l g z$ und einen hydrodynamischen Druckanteil p_d :

$$p_d := p - p_s = p - p_0 + \rho_l g z .$$

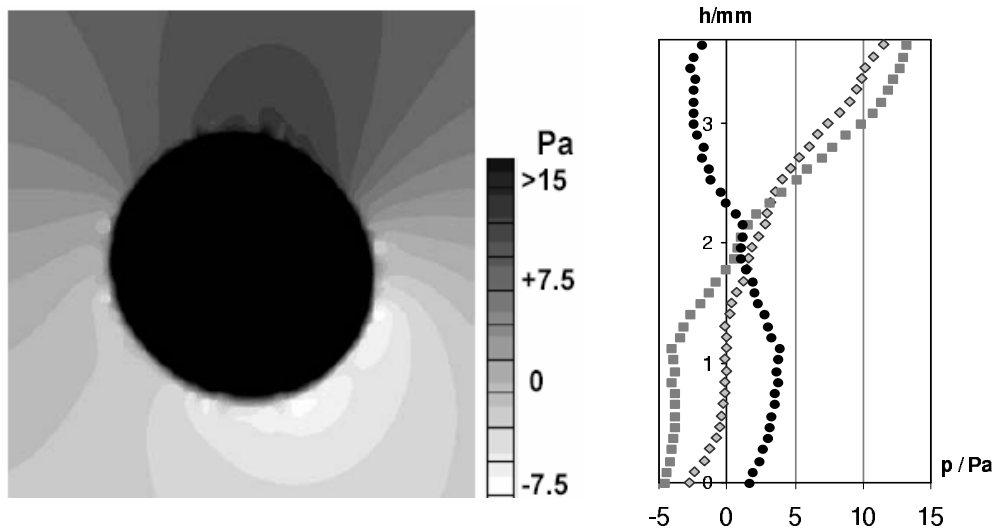


Abbildung 13.2.: Kleine Blase, $d=3$ mm (vgl. Abb. 13.1) Links: Feld des dynamischen Drucks in der Umgebung der Blase. Rechts: Dynamischer Druck nahe der Phasengrenze als Funktion der Höhe h über der Blasenbasis. Graue Quadrate: Dynamischer Druck auf die linke Blasenseite. Graue Rauten: Dynamischer Druck auf die rechte Blasenseite. Schwarze Kreise: Differenz der beiden Drücke.

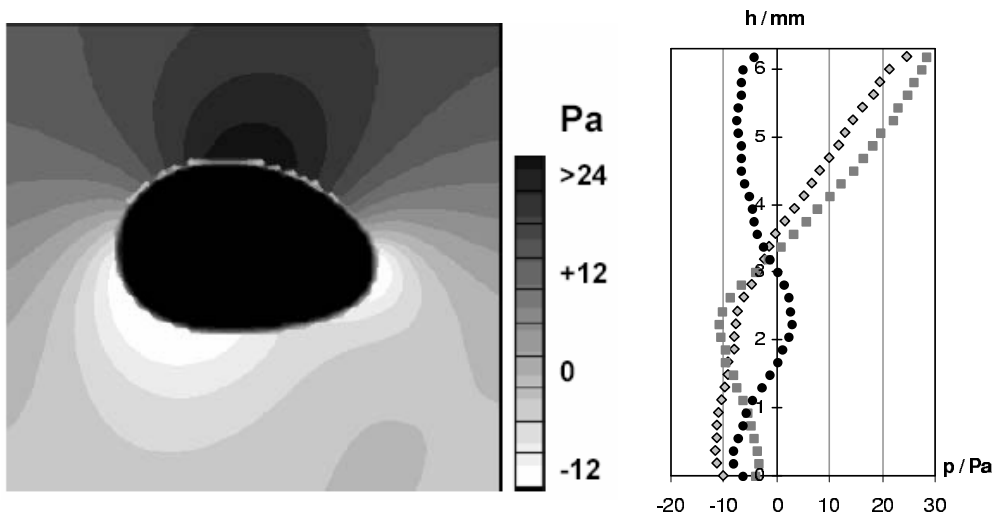


Abbildung 13.3.: Große Blase, $d=6$ mm (vgl. Abb. 13.1) Links: Feld des dynamischen Drucks in der Umgebung der Blase. Rechts: Dynamischer Druck nahe der Phasengrenze als Funktion der Höhe h über der Blasenbasis. Graue Quadrate: Dynamischer Druck auf die linke Blasenseite. Graue Rauten: Dynamischer Druck auf die rechte Blasenseite. Schwarze Kreise: Differenz der beiden Drücke.

Der hydrostatische Druck verursacht die Auftriebskraft der Blase, die ausschließlich in vertikaler Richtung wirkt. Der dynamische Druck hingegen kann auch horizontale Kräfte verursachen, wenn in dieser Richtung Asymmetrien auftreten. In den Abbildungen 13.2 und 13.3 sind die Druckfelder von p_d um die kleine und die große Blase dargestellt. Wegen der Oberflächenspannung ist der Druck in der Blase hoch und übersteigt die Grauskala. Daher sind die Blasen in diesen Abbildungen schwarz. Unterdruckgebiete hingegen zeichnen sich hell ab. Sie befinden sich an der Phasengrenze und sind asymmetrisch angeordnet. Bei der kleinen Blase tritt ein Unterdruckgebiet auf der rechten Seite auf, wo sie von der Flüssigphase stärker angeströmt wird. Bei der großen Blase treten beiderseits Unterdruckgebiete auf, wovon jedoch das linke stärker ausgeprägt ist. Um die Kraft des dynamischen Druckes auf die Blase zu berechnen, muß der Beitrag jedes Flächenelementes bestimmt werden. Für ein Flächenelement der Länge s ist dies $\mathbf{F} = p_d s \mathbf{n}$. Die horizontale Komponente hiervon ist

$$F_y = p_d s \mathbf{n}_y = p_d s \cos(\alpha) = p_d s \Delta h \quad (13.5)$$

mit Δh als Höhendifferenz der Endpunkte des Linienstücks s (vgl. Abbildung 13.4). Die Horizontalkraft auf eine Blasenseite ist daher das Integral $\int p_d(h) dh$ über die gesamte Blasenhöhe H von der Blasenbasis bis zu ihrem höchsten Punkt. Seien $p_{d,L}$ und $p_{d,R}$ jeweils der Druck auf der linken und der rechten Blasenseite, so ist die

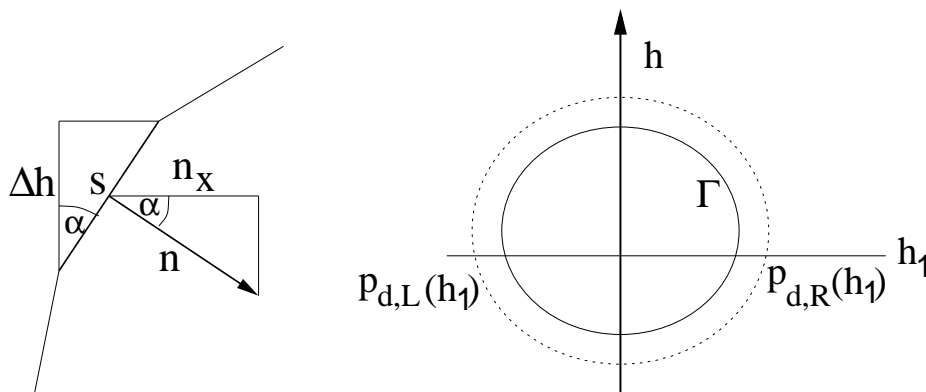


Abbildung 13.4.: Links: Oberflächenelement an der Phasengrenze einer 2D-Blase
 Rechts: Phasengrenze einer 2D-Blase und Kontrolllinie (gestrichelt) außerhalb der Phasengrenze.

horizontale Komponente des dynamischen Druckes auf die gesamte Phasengrenze

$$F_y = \int_0^H [p_{d,L}(h) - p_{d,R}(h)]dh . \quad (13.6)$$

Weil die Oberflächenspannung in *FS3D* als Volumenkraft modelliert ist, sind die Druckwerte in der Flüssigphase in der Nähe der Phasengrenze stark erhöht - auch in Zellen, die keine Gasphase enthalten ($f=0$). Erst in einem Abstand von drei Zellbreiten jenseits der Phasengrenze verschwindet der Einfluß der „verschmierten“ Oberflächenspannungskraft. Daher werden die Druckwerte auf einer Kontrolllinie im Abstand von drei Zellen außerhalb der Phasengrenze untersucht. In Abbildung 13.2 und 13.3 sind jeweils rechts die so gewonnenen Werte für $p_{d,L}$ und $p_{d,R}$ zusammen mit ihrer Differenz gegenüber der Höhe h abgetragen. In Abbildung 13.2 ist $p_{d,L} - p_{d,R}$ überwiegend positiv, in Abbildung 13.3 überwiegend negativ. Es ergibt sich nach Gleichung (13.6) in beiden Fällen eine Kraft in Richtung der Blasenmigration. Dies legt die Vermutung nahe, daß der dynamische Druck zur Liftkraft beiträgt. Wegen des starken Wandeinflusses in 2D-Simulationen wird eine genauere quantitative Untersuchung zu den Kräften an der Phasengrenze nur für 3D-Blasen durchgeführt.

13.2. Dreidimensionale Blasen

13.2.1. Zirkulation um dreidimensionale Blasen

Analog zu Abschnitt 13.1.1 soll auch für 3D-Blasen überprüft werden, ob die Migrationsrichtung und das Vorzeichen der Zirkulation um die Blase zusammenhängen. Dazu muß die Definition der Zirkulation (13.1) von zwei auf drei Dimensionen erweitert werden. Nach dem Satz von Stokes läßt sich ein Linienintegral entlang der geschlossenen Kurve Γ in ein Flächenintegral über die von Γ umschlossene Fläche umwandeln:

$$Z = \oint_{\Gamma} \mathbf{v} ds = \int_A (\nabla \times \mathbf{v}) da . \quad (13.7)$$

Durch

$$\mathbf{Z} = \int_V (\nabla \times \mathbf{v}) dv \quad (13.8)$$

wird eine vektorielle Zirkulation um ein geschlossenes, endliches Volumen V (beispielsweise dem Blasenvolumen) definiert. Um die physikalische Bedeutung des Vektors \mathbf{Z}

zu verdeutlichen, soll nun eine Komponente gesondert betrachtet werden:

$$Z_y = \mathbf{e}_y \mathbf{Z} = \int_V (\nabla \times \mathbf{v}) \mathbf{e}_y dv = \int \int_{A_y} (\nabla \times \mathbf{v}) d\mathbf{a} dy = \int \oint_{\Gamma_y} \mathbf{v} ds dy . \quad (13.9)$$

Hierbei bezeichnet A_y eine Querschnittsfläche des Volumens V parallel zur x-z-Ebene durch den Punkt $(0,y,0)$. Der Rand von A_y ist die geschlossene Kurve Γ_y . Damit kann Z_y folgendermaßen interpretiert werden: Sei $Z(y)$ die Zirkulation um die Schnittfläche A_y mit dem Rand Γ_y , so gilt:

$$Z_y = \int Z(y) dy . \quad (13.10)$$

Die Integrationsgrenzen sind die minimale und die maximale y-Koordinate des Volumens V . Wenn V beispielsweise eine ellipsoide Blase ist, so wird y über dem Intervall $[-d_H, +d_H]$ integriert. Weil die x-z-Ebene in der Simulation eine Symmetrieebene ist, kann nur die y-Komponente von \mathbf{Z} von Null verschieden sein. Denn Schnittflächen durch das Blasenvolumen senkrecht zur x-z-Ebene können wegen der Spiegelsymmetrie des Geschwindigkeitsfeldes keine von Null verschiedene Zirkulation an ihrem Rand aufweisen. Analog zum 2D-Fall kann eine durchschnittliche Rotation in der Gasphase definiert werden, wenn man die Zirkulation durch das Blasenvolumen V_B teilt.

$$\omega_g = \frac{Z_y}{V_B} \quad (13.11)$$

Für starre Körper (z.B. Tragflächen), die von einem Fluid mit einer Geschwindigkeit \mathbf{v}_r angeströmt werden, ergibt sich nach dem Theorem von Kutta-Joukowski eine Auftriebskraft \mathbf{F}_L , die proportional zur Zirkulation \mathbf{Z} ist:

$$\mathbf{F}_L = \rho_l \mathbf{v}_r \times \mathbf{Z} . \quad (13.12)$$

Durch Gleichsetzen dieses Theorems mit Gleichung (11.2) ergibt sich:

$$C_L = \frac{\omega_g}{\omega_l} . \quad (13.13)$$

Aus Abbildung 13.5 ist erkennbar, daß das Vorzeichen des Liftkoeffizienten nicht von dem Vorzeichen von ω_g abhängt. Insbesondere ist Gleichung (13.13) nicht erfüllt. Es läßt sich auch kein stoffunabhängiger funktionaler Zusammenhang zwischen C_L und ω_g herstellen.

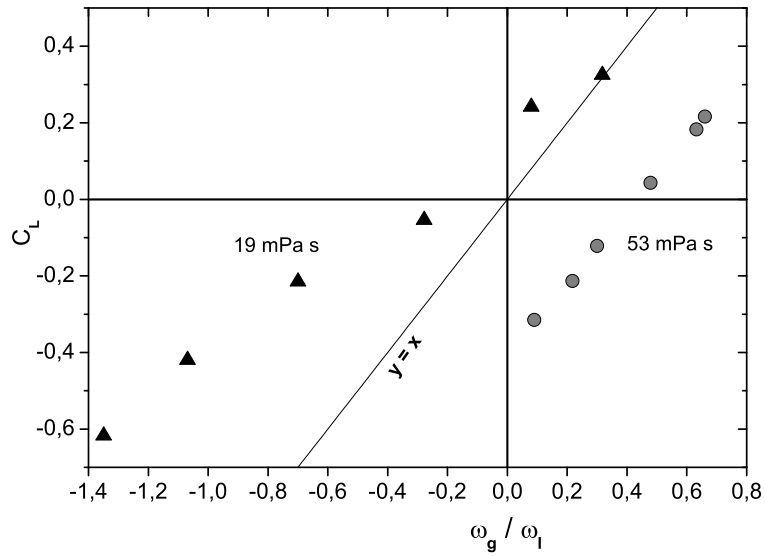


Abbildung 13.5.: Liftkoeffizient in Abhängigkeit von ω_g/ω_l für Luftblasen in Glycerinlösungen (siehe auch Tabelle 12.1, sowie Abbildung 12.7).

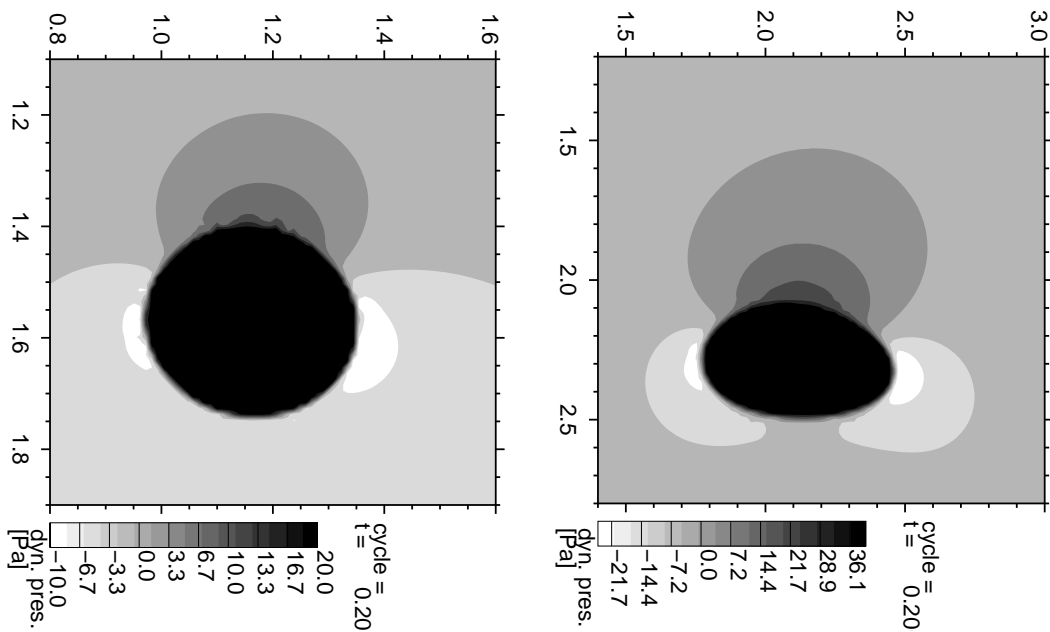


Abbildung 13.6.: Dynamischer Druck um 3D-Blasen, $\mu_l = 53 \text{ mPa s}$. Links: Kleine Blase, $d=3,2 \text{ mm}$. Rechts: Große Blase, $d=5,6 \text{ mm}$. Scherrate $\omega = 8,3 \text{ s}^{-1}$. Die Gegenströmung nimmt jeweils nach rechts zu. Dazugehörige Geschwindigkeitsfelder: Siehe Abbildung 12.9.

13.2.2. Dynamischer Druck und Scherkraft an der Phasengrenze

Dreidimensionale Blasen sind entlang ihres „Äquators“ von einem ringförmigen Unterdruckgebiet umgeben, welches sie in horizontaler Richtung dehnt (Abbildung 13.6). Das verdrängte Wasser streicht an der Blase vorbei, wobei die Wassergeschwindigkeit zunimmt. Gemäß dem Bernoulli-Effekt sinkt der Wasserdruck mit dem Geschwindigkeitsanstieg. Dies erklärt auch, warum schnelle Blasen flacher sind, als langsame (vgl. Abb. 12.2 und 12.3). Für alle 3D-Blasen bei $\mu_l \leq 53 \text{ mPa s}$ liegt das absolute Minimum des dynamischen Druckes auf der stärker angeströmten Seite, unabhängig vom Blasendurchmesser. Nur für große Blasen bei höheren Viskositäten (z.B. $d=10 \text{ mm}$ und $\mu_l = 100 \text{ mPa s}$) tritt das absolute Minimum auf der schwächer angeströmten Seite auf. Um die gesamte Kraft \mathbf{F}_p auszurechnen, die der dynamische Druck p_d auf die Blase ausübt, muß p_d über die Phasengrenze Γ integriert werden:

$$\mathbf{F}_p = \int_{\Gamma} -p_d \mathbf{n} dA, \quad (13.14)$$

mit der äußeren Flächennormalen \mathbf{n} . Wie bereits in Abschnitt 13.1.2 dargelegt, sind die durch *FS3D* errechneten Druckwerte in der Nähe der Phasengrenze durch die Modellierung der Oberflächenspannung als Volumenkraft stark erhöht. Erst in einem Abstand von drei bis vier Zellbreiten von der Phasengrenze verschwindet der Einfluß dieser Volumenkraft, und die errechneten Werte können als physikalische Druckwerte in der Flüssigphase interpretiert werden. Daher kann \mathbf{F}_p nicht direkt durch Integration über die Phasengrenze berechnet werden, sondern wird durch eine Extrapolation angenähert. Hierzu werden Flächen A_δ ermittelt, die in einem festen Abstand δ parallel zur Phasengrenze in der Flüssigphase verlaufen (vgl. Abbildung 13.7). Der Algorithmus zur Ermittlung dieser Flächen ist im Anhang A.3 beschrieben. Im Grenzfall

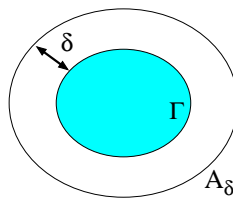


Abbildung 13.7.: Fläche A_δ im Abstand δ zur Phasengrenze Γ .

$\delta \rightarrow 0$ geht A_δ in die Phasengrenze Γ über. Daher gilt

$$\mathbf{F}_p = \lim_{\delta \rightarrow 0} \mathbf{F}_{p,\delta} \quad \text{mit} \quad \mathbf{F}_{p,\delta} = \int_{A_\delta} -p_d \mathbf{n} dA . \quad (13.15)$$

Analog zum Druck kann auch die Scherkraft \mathbf{F}_S an der Phasengrenze untersucht werden:

$$\mathbf{F}_S = \int_{\Gamma} \mathbf{S} \mathbf{n} dA \quad \text{mit} \quad \mathbf{S} = \mu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) . \quad (13.16)$$

Anders als beim Druck weist das Geschwindigkeitsfeld keine Unstetigkeit an der Phasengrenze auf. Allerdings ergibt sich durch den Sprung der Viskosität an der Phasengrenze eine Unstetigkeit für $\nabla \mathbf{v}$. Daher wird auch für \mathbf{F}_S eine Extrapolation durchgeführt:

$$\mathbf{F}_S = \lim_{\delta \rightarrow 0} \mathbf{F}_{S,\delta} \quad \text{mit} \quad \mathbf{F}_{S,\delta} = \int_{A_\delta} \mathbf{S} \mathbf{n} dA . \quad (13.17)$$

13.2.3. Validierung des Verfahrens zur Berechnung der Kräfte an der Phasengrenze

Um das numerische Verfahren zur Berechnung von \mathbf{F}_p und \mathbf{F}_S zu validieren, werden zunächst Blasen in ruhenden Flüssigkeiten (d.h. bei $\omega = 0$) untersucht, die nach einer anfänglichen Beschleunigungsphase mit konstanter Geschwindigkeit w_T aufsteigen. Nach Erreichen der Endgeschwindigkeit w_T sind Widerstandskraft \mathbf{F}_D und Auftriebskraft \mathbf{F}_A im Gleichgewicht:

$$\mathbf{F}_D = -\mathbf{F}_A = \Delta \rho V_B \mathbf{g} .$$

Die Widerstandskraft setzt sich aus den Beiträgen des dynamischen Druckes und der Scherkraft zusammen: $\mathbf{F}_D = \mathbf{F}_p + \mathbf{F}_S$. Es muß also für jede Blase nach Erreichen der Endgeschwindigkeit w_T gelten:

$$\mathbf{F}_p + \mathbf{F}_S = -\mathbf{F}_A . \quad (13.18)$$

Diese Gleichheit wird für verschiedene Blasendurchmesser d bei $\mu_l = 19$ mPa s und $\mu_l = 53$ mPa s überprüft. In Abbildung 13.8 wird am Beispiel einer Blase mit $d=3,2$ mm bei $\mu_l = 53$ dargestellt, wie \mathbf{F}_p und \mathbf{F}_S durch Extrapolation gewonnen werden. Als Abstand zur Phasengrenze werden jeweils Vielfache der Zellbreite c gewählt:

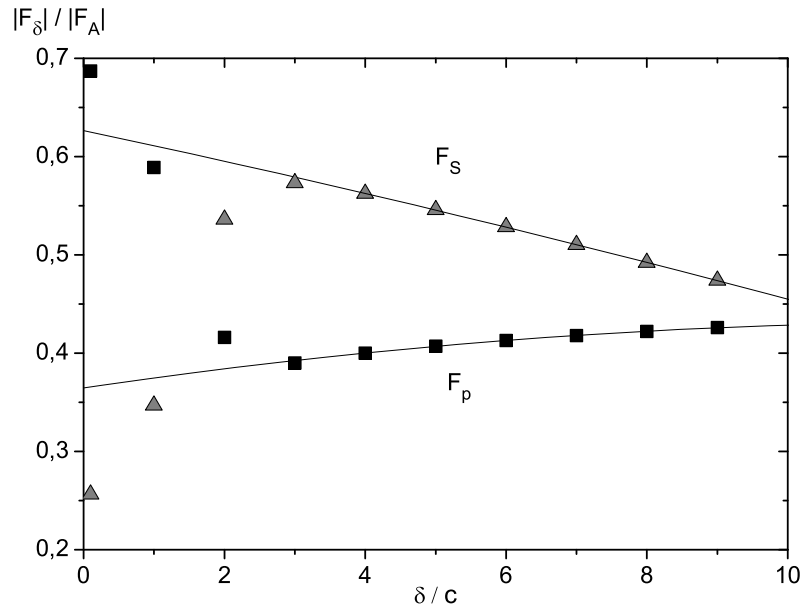


Abbildung 13.8.: Druckkraft und Scherkraft auf Kontrollflächen A_δ in Abhängigkeit vom Abstand δ zur Phasengrenze. Die Kräfte sind durch die Auftriebskraft normiert, der Abstand ist durch die Kantenlänge c der kubischen Zellen normiert.

$\delta = 9c, 8c, \dots, 0$. Die Werte von $\mathbf{F}_{p,\delta}$ und $\mathbf{F}_{S,\delta}$ lassen sich für $\delta > 3c$ jeweils sehr gut durch ein quadratisches Polynom *fitten*. Extrapoliert man die *Fits* in Richtung $\delta \rightarrow 0$ so ergibt sich in diesem Falle $\mathbf{F}_p = -0,36 \mathbf{F}_A$ und $\mathbf{F}_S = -0,62 \mathbf{F}_A$ und damit insgesamt $\mathbf{F}_D = -0,98 \mathbf{F}_A$. Für alle simulierten Blasen ist Gleichung (13.18) (bis auf relative Fehler von wenigen Prozent) erfüllt, wenn beide Anteile des Drags durch Extrapolation bestimmt werden. Berechnet man \mathbf{F}_p oder \mathbf{F}_S oder beide Kräfte stattdessen direkt an der Phasengrenze ($\delta = 0$), so ist Gleichung (13.18) im Allgemeinen nicht erfüllt. Aus Abbildung 13.9 ist ersichtlich, daß im Falle $Re \rightarrow 0$ der Anteil von \mathbf{F}_p an der gesamten Widerstandskraft \mathbf{F}_D ein Drittel beträgt. Dieser Wert ergibt sich auch aus der analytischen Lösung von Hadamard (1911) und Rybczynski (1911) für kugelförmige Fluidpartikel im Grenzfall $\mu_g \rightarrow 0$. Je größer hingegen die Reynoldszahl wird, desto größer ist der Anteil des dynamischen Druckes an der Widerstandskraft. Auch dies entspricht der Theorie, denn im Grenzfall $Re \rightarrow \infty$ spielen Scherkräfte keine Rolle. Durch Bilanzierung der Kräfte an frei aufsteigenden Blasen konnten die numerischen Routinen zur Berechnung der Oberflächenintegrale validiert werden. Es wurde gezeigt,

daß die durch Extrapolation ermittelten Werte für die Kräfte an der Phasengrenze plausibel sind.

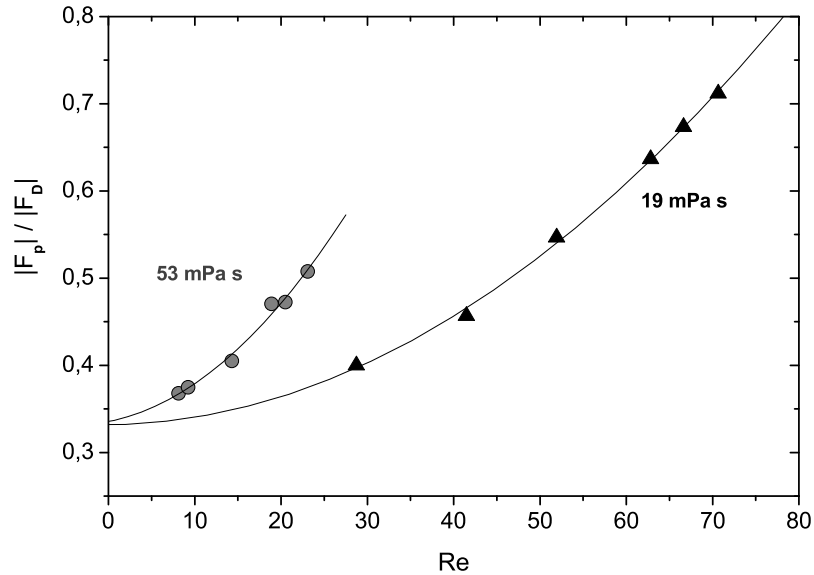


Abbildung 13.9.: Anteil des dynamischen Druckes an der Widerstandskraft in Abhängigkeit von der Reynoldszahl für Blasen verschiedener Größen bei $\mu_l = 19$ und 53 mPa s.

Berechnung der Horizontalkräfte an Blasenoberflächen in Scherströmungen

Betrachtet man die Druckfelder in Abbildung 13.6, so liegt die Vermutung nahe, daß sich im 3D-Fall aus dem dynamischen Druck allein nicht die unterschiedliche Migrationsrichtung kleiner und großer Blasen in Scherströmungen erklären läßt. Allerdings kann man die horizontale Komponente der Druckkraft \mathbf{F}_p schlecht per Augenschein abschätzen, weil die Seiten der großen Blase unterschiedlich gekrümmt sind. Daher werden die horizontalen Komponenten von \mathbf{F}_p und \mathbf{F}_S mit dem oben beschriebenen Verfahren berechnet. Hierfür werden die Geschwindigkeits- und Druckfelder ausgewertet, die sich jeweils nach dem Erreichen konstanter Blasen-Relativgeschwindigkeit einstellen. Weil die horizontale Blasengeschwindigkeit dann konstant ist, müssen sich die Horizontalkräfte an der Phasengrenze im Gleichgewicht befinden:

$$F_{S,x} = -F_{p,x} . \quad (13.19)$$

In den Abbildungen 13.10 und 13.11 sind die Horizontalkräfte in Abhängigkeit vom Blasendurchmesser aufgetragen. Bei $\mu_l=53$ mPa s ist Gleichung (13.19) bis auf Fehler von wenigen Prozent erfüllt. $F_{p,x}$ ist stets positiv, d.h. große Blasen migrieren entgegengesetzt zu der von $F_{p,x}$ vorgegebenen Richtung. Bei $\mu_l=19$ mPa s stimmt die Migrationsrichtung stets mit der Richtung von $F_{p,x}$ überein, jedoch ist Gleichung (13.19) nicht erfüllt. Zwar ist das Vorzeichen von $F_{S,x}$ stets dem von $F_{p,x}$ entgegengesetzt, jedoch ist der Betrag von $F_{S,x}$ nur etwa halb so groß wie der von $F_{p,x}$. Die Blase müßte also in horizontaler Richtung beschleunigen, was aber nicht der Fall ist. Möglicherweise versagt die Extrapolation hier, weil die Blasen bei $\mu_l=19$ mPa s sehr flach sind, und die Integration um stark gekrümmte Oberflächen aufgrund der beschränkten Gitterauflösung ungenau wird. Insgesamt ergibt sich aus den Werten für die Horizontalkräfte an der Phasengrenze kein schlüssiges Gesamtbild. Lediglich für Blasen mit positivem Liftkoeffizienten kann man feststellen, daß sie stets in die Richtung migrieren, die aus dem dynamische Druck auf der Phasengrenze resultiert. Sie migrieren zur stärker angeströmten Seite, wo wegen des Bernoulli-Effekts der Unterdruck am stärksten ist. Das Vorzeichen der Scherkraft $F_{S,x}$ ist für alle Blasengrößen dem der Druckkraft $F_{p,x}$ entgegengesetzt.

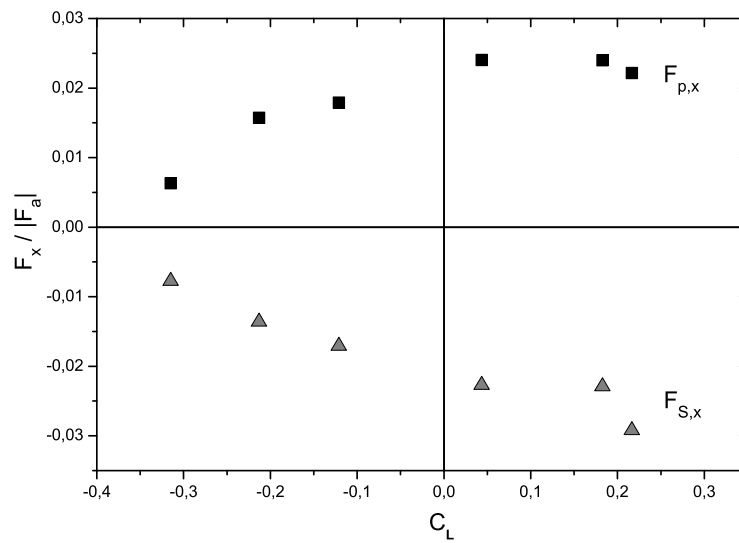


Abbildung 13.10.: Horizontale Komponenten der Druck- und Scherkraft auf Blasen bei $\mu_l = 53 \text{ mPa s}$ in Abhängigkeit vom Liftkoeffizienten. Die Horizontalkräfte sind durch die jeweilige Auftriebskraft normiert.

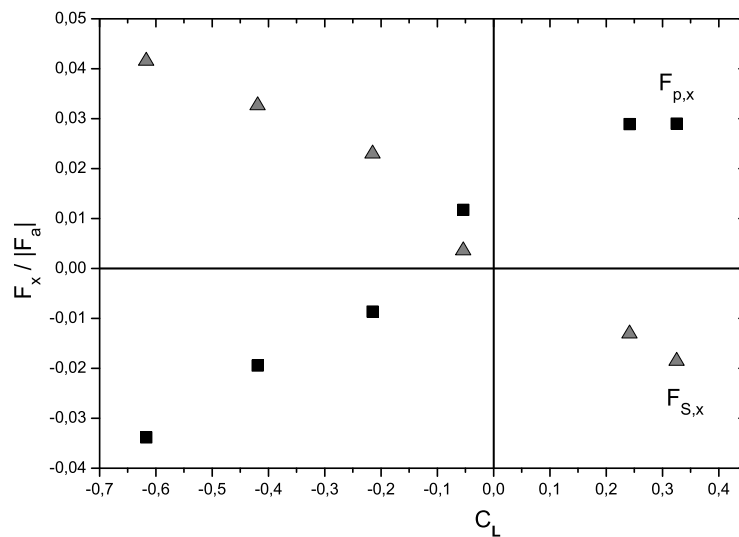


Abbildung 13.11.: Horizontale Komponenten der Druck- und Scherkraft auf Blasen bei $\mu_l = 19 \text{ mPa s}$ in Abhängigkeit vom Liftkoeffizienten. Die Horizontalkräfte sind durch die jeweilige Auftriebskraft normiert.

14. Horizontalgeschwindigkeiten im Blasennachlauf

In Abbildung 12.10 und 13.1 ist zu erkennen, daß der Nachlauf großer Blasen leicht in Richtung stärkerer Gegenströmung abgeschrägt ist. Tomiyama (1992) vermutet, daß die Geometrie des Nachlaufes wesentlich zum Lift beiträgt. In einem abgeschrägten Nachlauf findet ein horizontaler Flüssigkeitstransport statt. Eingehende numerische Untersuchungen zur Struktur des Nachlaufes hinter Partikeln in linearen Scherströmungen wurden von Richard et al. (2007) durchgeführt. Als Modell für Blasen wurden formfeste, abgeflachte Ellipsoide mit einer *Slip*-Randbedingung verwendet. Die rotationsymmetrischen Ellipsoide wurden fest im Rechengebiet positioniert, und die Kräfte der umgebenden Scherströmung auf den Körper in Abhängigkeit von der Reynoldszahl, der Scherrate und des Durchmesserhältnisses berechnet. Aufgrund dieser Vorgehensweise sind die Resultate dieser Rechnungen nicht direkt mit experimentellen Ergebnissen zu vergleichen, weil das Durchmesserverhältnis und die Reynoldszahl im Experiment nicht unabhängig voneinander variiert werden können. Blasenform und Geschwindigkeit sind im Experiment wie auch in Simulationen mit freier Phasengrenze untrennbar verknüpft: Je nach Blasengröße und Scherrate stellt sich eine Form und eine Aufstiegsgeschwindigkeit ein. Daher werden im Folgenden die Ergebnisse von Richard et al. (2007) vorwiegend qualitativ mit den experimentellen Resultaten von Tomiyama und der eigenen Rechnungen mit *FS3D* verglichen. Die Liftkraft ist in den Rechnungen von Richard et al. (2007) abhängig von der Scherrate. Negative Liftkräfte treten dort erst bei Durchmesserhältnissen von $d_V/d_H < 0,455$ auf. Je höher die Scherrate ist, desto kleiner ist das kritische Durchmesserverhältnis, bei dem die Liftkraft ihr Vorzeichen wechselt. Im Experiment von Tomiyama wie auch in den *FS3D*-Simulationen liegt das kritische Durchmesserverhältnis zwischen 0,55 und 0,65 - je nach Stoffsystem (vgl. Abbildung 11.5 und 12.13). Eine Abhängigkeit der Liftkraft von der Scherrate besteht hier nicht (vgl. Abschnitt 12.5). Das Vorzeichen der Liftkraft bringen Richard et al. (2007) mit der Rotation in der Flüssigphase hinter der Blase in Zusammenhang. Für ein Ellipsoid mit einem Durchmesserverhältnis von

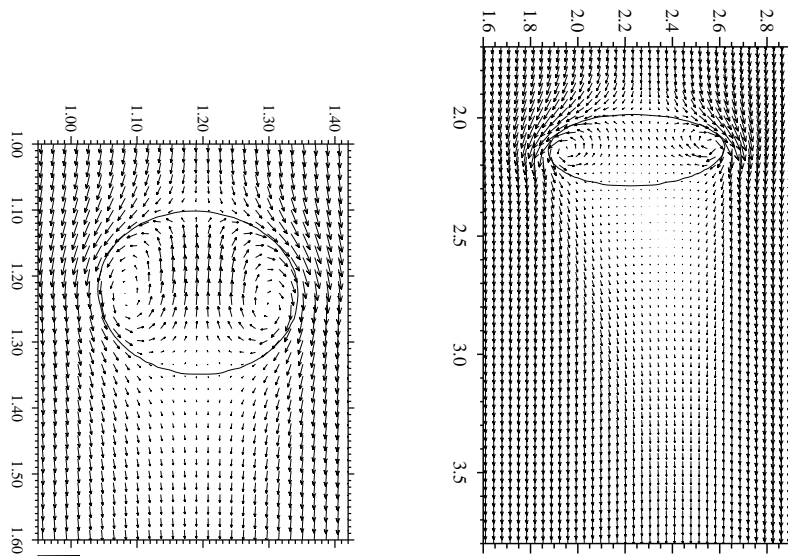


Abbildung 14.1.: Geschwindigkeitsfelder auf der Symmetrieebene für Blasen in einer Glycerinlösung ($\mu_l = 19 \text{ mPa s}$). Die Gegenströmung nimmt nach rechts zu. Links: Kleine Blase ($d=3,2 \text{ mm}$), Migration nach rechts. Rechts: Große Blase ($d=5,6 \text{ mm}$), Migration nach links.

$d_V/d_H = 0,444$ beobachten sie eine von Null verschiedene Rotation $\omega_z = \mathbf{e}_z \cdot \text{rot} \mathbf{v}_l$ im Nachlauf. Aus Symmetriegründen ist das Vorzeichen der Rotation im Halbraum $y < 0$ stets umgekehrt wie im Halbraum $y > 0$. Daraus ergibt sich ein Transport der Flüssigphase entlang der Symmetrieebene (hier die x-z-Ebene). Gleichzeitig ist eine Liftkraft in entgegengesetzte Richtung zu beobachten. Abhängig von der Reynoldszahl kehrt sich das Vorzeichen der Rotation ω_z um, und mit ihr zugleich auch das Vorzeichen des Liftkoeffizienten. Diese Beobachtung läßt sich zu folgender anschaulichen Erklärung zusammenfassen: Hinter der Blase entsteht ein Paar von entgegengesetzt rotierenden Wirbelwalzen, zwischen denen Flüssigkeit in Richtung $\pm \mathbf{e}_x$ transportiert wird. Die Blase migriert stets in entgegengesetzte Richtung, als sei sie von der transportierten Flüssigkeit wie von einem Jet angetrieben (vgl. Abbildung 14.2). Auch in analytischen Rechnungen zu sphärischen Partikeln in Scherströmungen reibungsfreier Fluide ergibt sich eine Rotation ω_z im Nachlauf (Auton, 1984; Legrende und Magnaudet, 1998). Unter Verwendung der Wirbeltransportgleichung bei Vernachlässigung des Terms für viskose Diffusion leiten Richard et al. (2007) die Entstehung der Rotation im Nachlauf sphärischer Partikel her und motivieren, wie eine elliptische Deformation des Partikels zur Umkehrung der Rotation führen kann. Diese Überlegungen sind wegen

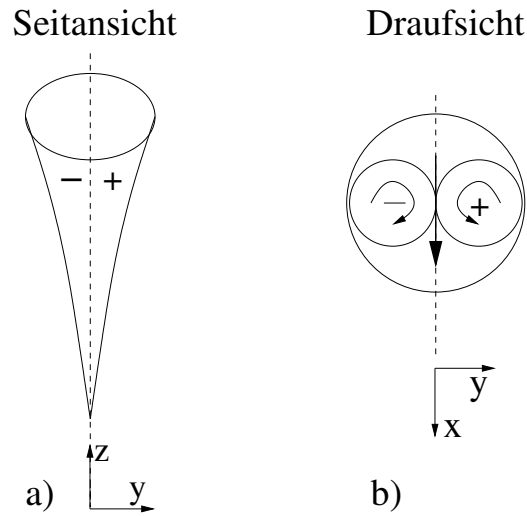


Abbildung 14.2.: Rotation ω_z im Nachlauf einer Blase. Gestrichelte Linie: Symmetrieebene (x-z Ebene). a) Vertikaler Schnitt durch den Blasen Schwerpunkt (y-z Ebene). b) Horizontaler Schnitt durch den Nachlauf. Äußerer Kreis: Projektion des Blasenrandes auf die horizontale Ebene. Innere Kreise: Gegensinnig rotierende Wirbelwalzen (schematisch).

der Annahme der Reibungsfreiheit nur im Fall $Re \gg 1$ gültig. Auch die numerischen Untersuchungen von Richard et al. (2007) konzentrieren sich überwiegend auf den Bereich $Re \geq 400$. Für die in der vorliegenden Arbeit untersuchten Blasen in Glycerinlösungen sind die Reynoldszahlen jedoch relativ klein ($Re < 100$) und die Formen weichen teilweise erkennbar von Ellipsoiden ab. Im Folgenden soll überprüft werden, ob hier auch die oben beschriebenen Wirbelwalzen im Nachlauf auftreten und ob ihr Drehsinn mit dem Vorzeichen des Liftkoeffizienten in Verbindung steht. In Abbildung 14.3 sind für eine Blase mit $C_L < 0$ ($d = 5,6$ mm, $\mu_l = 19$ mPa s) die Rotation ω_z und die Horizontalgeschwindigkeit u auf der x-z-Ebene dargestellt. Man beachte, daß diese Schnittebene senkrecht zur Symmetrieebene ist. Die Druck- und Geschwindigkeitsfelder wurden in den vorangegangenen Kapiteln stets ausschließlich auf der Symmetrieebene (x-z-Ebene) untersucht. Das Vorzeichen von ω_z ist im Nachlauf positiv, wodurch auch u im Nachlauf positiv ist. Die Blase migriert in entgegengesetzte Richtung, in Übereinstimmung mit dem von Richard et al. (2007) beschriebenen Mechanismus. Anders als in der schematischen Zeichnung 14.2b liegt das Zentrum der Wirbelwalze in x-Richtung nicht mittig unter der Blase, sondern in Richtung stärkerer Gegenströmung verschoben.

Aus Abbildung 14.5 ist ersichtlich, daß die Horizontalgeschwindigkeit u im Nachlauf der großen Blase ($d = 5,6$ mm) fast überall positiv ist - mit Ausnahme der unmittelbaren Nähe der Phasengrenze. Damit wird im Nachlauf Flüssigkeit vorwiegend in Richtung \mathbf{e}_x transportiert. Die große Blase ($d = 5,6$ mm) migriert in entgegengesetzte Richtung in Übereinstimmung mit der Beobachtung von Richard et al. (2007). Anders verhält es sich bei der kleinen Blase ($d = 2,8$ mm), die in der gleichen Flüssigkeit ($\mu_l = 19$ mPa s) einen positiven Liftkoeffizienten hat. In ihrem Nachlauf ist u überall positiv (vgl. Abbildung 14.5). Demnach wird im Nachlauf Flüssigkeit in die gleiche Richtung transportiert, in die auch die Blase migriert. Das Erklärungsmodell für die Vorzeichenumkehr der Liftkraft von Richard et al. (2007) trifft auf dieses Blasenpaar also nicht zu.

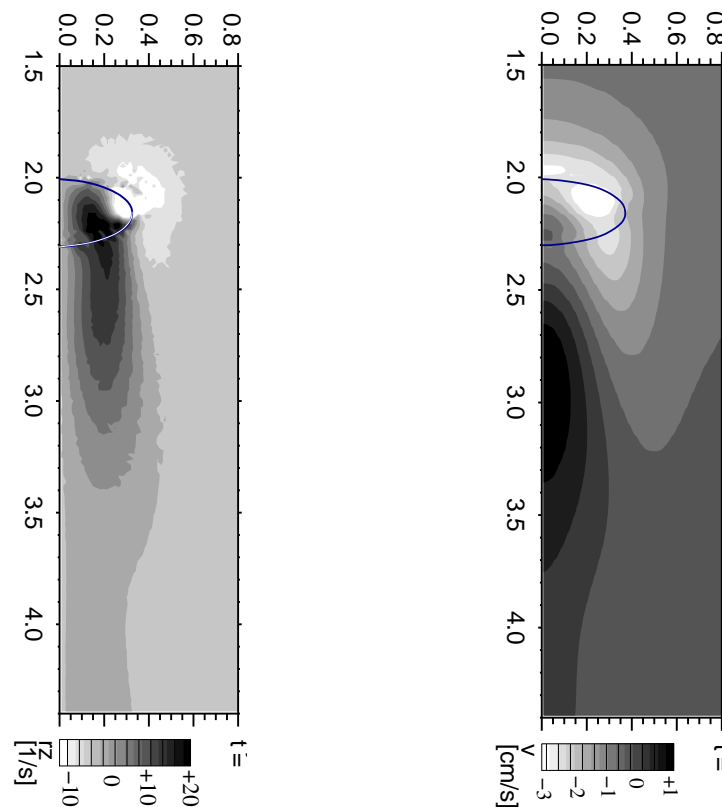


Abbildung 14.3.: Vertikaler Schnitt durch den Schwerpunkt einer Blase ($d=5,6$ mm, $\mu_l = 19$ mPa s). Elliptische Linie: Blasenrand. Es ist nur die Halbebene $y > 0$ dargestellt. Links: Rotation ω_z (vgl. Abb. 14.2 a) Rechts: Horizontale Geschwindigkeitskomponente \mathbf{v}_x .

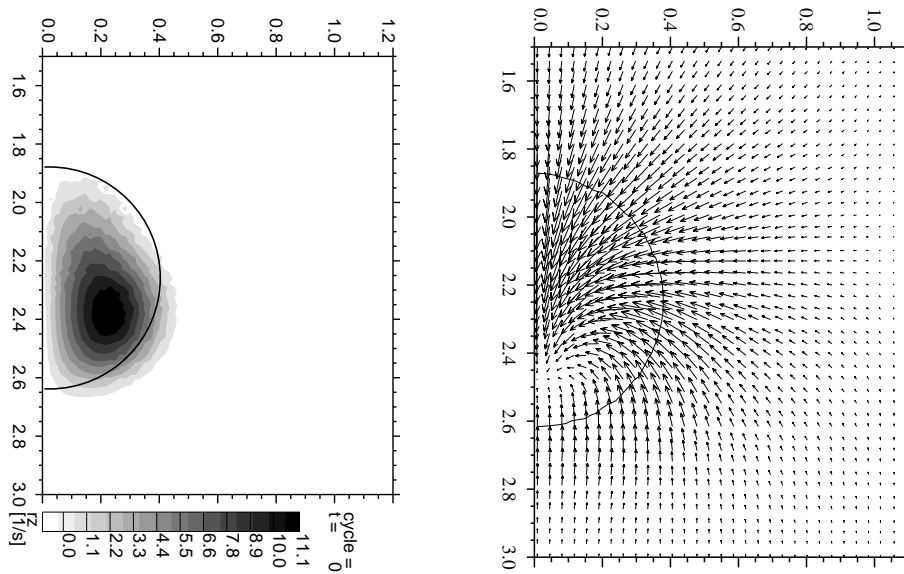


Abbildung 14.4.: Horizontaler Schnitt durch den Nachlauf einer Blase ($d=5,6\text{mm}$, $\mu_l = 19\text{ mPa s}$). Die Schnittebene liegt $1,5d$ unterhalb des Blaseschwerpunkts. Es ist nur die Halbebene $y > 0$ dargestellt. Kreisförmige Linie: Projektion des Blasenrandes auf die Schnittebene. Links: Rotation ω_z (vgl. Abb. 14.2 b) Rechts: Horizontale Geschwindigkeiten.

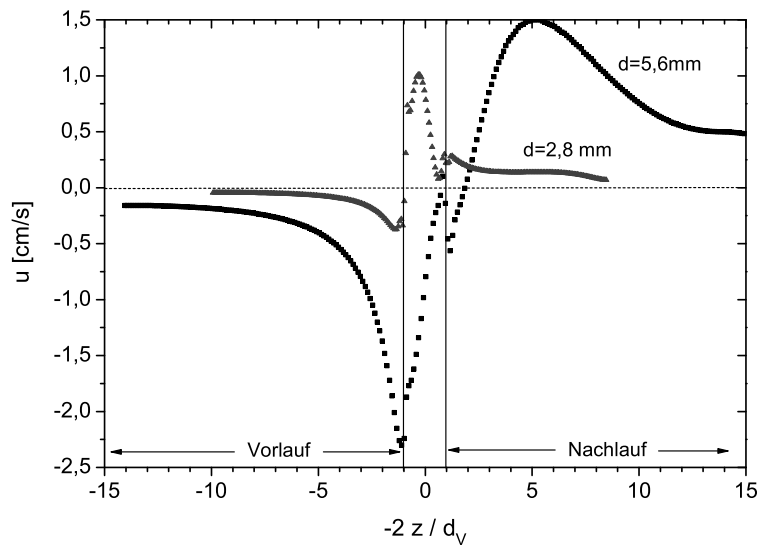


Abbildung 14.5.: Horizontalgeschwindigkeit u in Abhängigkeit von der Höhe z auf einer vertikalen Linie durch den Blaseschwerpunkt. Die Höhe wird unter Verwendung von d_V so normiert, daß die Phasengrenze für beide Blasen ($d=3,2\text{ mm}$ und $d=5,6\text{ mm}$) bei ± 1 liegt.

15. Zusammenfassung des zweiten Teils

Neben experimentellen Untersuchungen, werden häufig auch numerische Strömungssimulationen eingesetzt, um das Verständnis von mehrphasigen Strömungen in technischen Anlagen - wie beispielsweise in Blasensäulen - zu verbessern. Eine akkurate Simulation der Blasenbewegung erfordert eine detaillierte Kenntnis der Wechselwirkungskräfte zwischen Gas- und Flüssigphase. Steigen Blasen in nicht homogenen Strömungen auf, so tritt eine Kraft senkrecht zu ihrer Relativgeschwindigkeit gegenüber der Flüssigphase auf. Diese Kraft wird *Liftkraft* genannt. Mit dem Zweiphasencode *FS3D* wird die Bewegung von Blasen in linearen Scherströmungen simuliert. Aus der Analyse der Bewegungsbahnen wird die jeweils aufgetretene Liftkraft bestimmt, deren Vorzeichen und Betrag in Form eines dimensionslosen Liftkoeffizienten beschrieben wird. Die Abhängigkeit des Liftkoeffizienten von der Blasengröße und den Stoffeigenschaften der Flüssigkeit wird numerisch untersucht und mit experimentellen Resultaten verglichen (Tomiya et al., 2002). Wie im Experiment hängt auch in den Simulationen der Liftkoeffizient im Wesentlichen von einer modifizierten Eötvös-Zahl ab, die auf dem horizontalen Durchmesser der Blase basiert. Die Eötvös-Zahl ist eine dimensionslose Kennzahl, die das Verhältnis von Auftriebskraft zu Oberflächenspannung beschreibt. Blasen mit einer kleinen Eötvös-Zahl sind eher kugelförmig, wohingegen Blasen mit einer großen Eötvös-Zahl stärker abgeflacht sind. In Übereinstimmung mit dem Experiment ist der Liftkoeffizient für Blasen mit kleiner Eötvös-Zahl positiv und für Blasen mit großer Eötvös-Zahl negativ. Dies bedeutet eine Richtungsumkehr der Liftkraft. In Experimenten mit Blasen in Glycerinlösungen variierten Tomiya et al. (2002) die Blasengrößen. Diese Experimente wurden nachgerechnet. Zusätzlich wurde in den Simulationen Oberflächenspannung und Gravitation variiert. Für alle Fälle konnte gezeigt werden, daß sich der Liftkoeffizient C_L als eine Funktion der modifizierten Eötvös-Zahl $E\ddot{o}_H$ beschreiben läßt. Die ermittelten Funktionen $C_L(E\ddot{o}_H)$ sind sich ähnlich, unabhängig davon, auf welche Weise $E\ddot{o}_H$ variiert wurde. Die aus den Simulationen ermittelten Liftkoeffizienten sind jedoch stets etwas kleiner als die

experimentell bestimmten. Diese systematische Abweichung wurde auch in anderen numerischen Rechnungen beobachtet (Rusche, 2002; Kuipers et al., 2006; Sousa et al., 2006). Möglichweise treten im Experiment Phänomene auf, die in den numerischen Codes nicht modelliert sind. Beispielsweise spielen im Experiment Verunreinigungen der Flüssigkeit eine Rolle, welche sich an der Blasenoberfläche anlagern und die Oberflächeneigenschaften verändern (vgl. Kapitel 10).

Die Simulationen liefern vollständige Geschwindigkeits- und Druckfelder. Durch Auswertung dieser Felder kann gezeigt werden, daß die Liftkraft an dreidimensionalen Blasen nicht als Funktion der Zirkulation des Geschwindigkeitsfeldes an der Phasengrenze beschrieben werden kann. Demnach kann die Liftkraft nicht auf den *Magnus-effekt* zurückgeführt werden, der an umströmten rotierenden Zylindern auftritt.

Es wurden Routinen zur Integration und Extrapolation der Druck- und Scherkräfte an der Phasengrenze entwickelt und für frei aufsteigende Blasen validiert. Für eher kugelförmige Blasen ($E\ddot{o}_H$ klein) in linearen Scherströmungen kann auf diese Weise gezeigt werden, daß der dynamische Druck um die Blasen in Richtung der Liftkraft wirkt. Dies läßt sich durch den Bernoulli-Effekt erklären. Für stärker deformierte Blasen ($E\ddot{o}_H$ groß) wird kein Zusammenhang zwischen der Richtung der Liftkraft und dem dynamischen Druck in der Umgebung der Blase festgestellt. Insgesamt kann mit den verwendeten Methoden nicht eindeutig gezeigt werden, daß die Liftkraft in allen Fällen durch den dynamischen Druck um die Blase verursacht wird. Weil die Phasengrenze in der VoF-Methode nicht räumlich scharf lokalisiert ist, sondern über einige Zellbreiten verschmiert wird, sind exakte Werte für Druck und Geschwindigkeit an der Phasengrenze nicht eindeutig zu ermitteln. Daher bietet es sich an, für Untersuchungen der Kräfte an der Phasengrenze einen numerischen Löser zu verwenden, in dem die Phasengrenze scharf lokalisiert ist - beispielsweise durch ein bewegtes Gitter.

A. Anhang

A.1. Symbolverzeichnis

Tabelle A.1.: Lateinische Symbole

Symbol	Einheit	Bedeutung
C_D	[-]	Widerstandsbeiwert (<i>drag coefficient</i>)
d	m	Äquivalenzdurchmesser
d_W	m	Wandabstand
f	[-]	Volumenanteilsfunktion („VoF-Variable“)
g	m/s ²	Erdbeschleunigung
\mathbf{g}	m/s ²	Erdbeschleunigung (vektoriell)
\mathbf{I}	[-]	Einheitstensor
\mathbf{n}	n	Flächennormale
p	Pa	Druck
p_d	Pa	dynamischer Druck
\mathbf{S}	[-]	Zähigkeitsspannungstensor
\mathbf{T}	[-]	Spannungstensor
u	m/s	horizontale Geschwindigkeit (x-Komponente)
\mathbf{u}	m/s	Geschwindigkeitsvektor
v	m/s	horizontale Geschwindigkeit (y-Komponente)
\mathbf{v}	m/s	Geschwindigkeitsvektor
V	m ³	Volumen
V_B	m ³	Blasenvolumen
w	m/s	vertikale Geschwindigkeit (z-Komponente)
w_T	m/s	vertikale Endgeschwindigkeit (<i>terminal velocity</i>)
Z	m ² /s	Zirkulation

Tabelle A.2.: Dimensionslose Kennzahlen

Eö	Eötvöszahl
Eu	Eulerzahl
Fr	Froudezahl
Mo	Mortonzahl
Re	Reynoldszahl
Sr	dimensionslose Scherrate
λ	Viskositätenverhältnis

Tabelle A.3.: Griechische Symbole

Symbol	Einheit	Bedeutung
κ	1/m ²	Krümmung
λ_K	m	Kolmogorov-Länge
μ	Pa s	dynamische Viskosität
ν	m ² /s	kinematische Viskosität
ω	1/s	Scherrate
ρ	kg/m ³	Dichte
σ	N/m	Grenzflächenspannung

Tabelle A.4.: Indices

Symbol	Bedeutung
c	kontinuierlich
d	dispers
g	gasförmig
l	flüssig (<i>liquid</i>)
B	Blase
P	Partikel
H	horizontal
V	vertikal
r	relativ
Γ	Phasengrenze

A.2. Das Druckfeld in einem Hill'schen Wirbel

Das Geschwindigkeitsfeld eines Hill'schen Wirbels lautet in Kugelkoordinaten:

$$u_r = (a + br^2) \cos \theta, \quad (\text{A.1})$$

$$u_\theta = -(a + 2br^2) \sin \theta. \quad (\text{A.2})$$

Durch Vergleich mit (6.4) und (6.5) ergibt sich, daß das Geschwindigkeitsfeld der Hadamard-Rybzinski-Lösung innerhalb des fluiden Partikels ein Hill'scher Wirbel mit

$$a = \frac{w_T}{2 + 2\lambda} \quad \text{und} \quad b = -\frac{a}{R^2} \quad (\text{A.3})$$

ist. Das dazugehörige Druckfeld ergibt sich, wenn man die Impulsgleichung nach ∇p auflöst.

$$\nabla p = -\rho \partial_t \mathbf{u} - \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \mu \Delta \mathbf{u} - \rho g \mathbf{e}_z \quad (\text{A.4})$$

Da der Hill'sche Wirbel zeitunabhängig ist, entfällt der erste Term auf der rechten Seite. Wird zusätzlich eine schleichende Strömung angenommen, so entfällt auch der nächste Term, der den konvektiven Impulstransport beschreibt. Es verbleibt

$$\nabla p = \mu \Delta \mathbf{u} - \rho g \mathbf{e}_z. \quad (\text{A.5})$$

Nun soll $\Delta \mathbf{u}$ berechnet werden. Dies bereitet in Kugelkoordinaten Schwierigkeiten, weil dann der Ursprung ein ausgezeichnete Punkt ist: In Kugelkoordinaten ist eine negative radiale Koordinate r nicht zulässig und somit liegt der Ursprung mit $r = 0$ am Rand des Definitionsgebietes. Dieses Problem wird umgangen, indem das Geschwindigkeitsfeld des Hill'schen Wirbels in kartesische Koordinaten umgewandelt wird:

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} -bxz \\ -byz \\ 2bx^2 + 2by^2 + bz^2 + a \end{pmatrix}. \quad (\text{A.6})$$

Die Anwendung des kartesischen Laplace-Operators $\Delta := \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$ liefert

$$\Delta \mathbf{u} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 10b \end{pmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

Einsetzen dieses Ergebnisses in (A.5) liefert

$$\partial_x p = 0, \quad (\text{A.8})$$

$$\partial_y p = 0, \quad (\text{A.9})$$

$$\partial_z p = 10\mu b - \rho g. \quad (\text{A.10})$$

Dies bedeutet, daß der Druck im Hill'schen Wirbel in horizontaler Richtung konstant ist. In vertikaler Richtung wächst der Druck linear mit der Höhe z . Integration nach z liefert

$$p(z) = 10\mu b z - \rho g z + c = -\frac{5\mu w_T}{\lambda + 1} \frac{z}{R^2} - \rho g z + c. \quad (\text{A.11})$$

Wenn sich ein Hill'scher Wirbel in einem fluiden Partikel mit einer Oberflächenspannung σ befindet, und ein Außendruck p_0 auf der Höhe $z = 0$ herrscht, so gilt $c = p_0 + 2\sigma/R^2$. Durch Umwandlung in Kugelkoordinaten ($z = r \cos \theta$) geht Gleichung (A.11) schließlich in (6.8) über.

Setzt man keine schleichende Strömung voraus, so muß der konvektive $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ Term berücksichtigt werden. Es ist nun ein Druck p zu finden, der folgende Gleichung erfüllt:

$$\nabla p = \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \mu \Delta \mathbf{u} - \rho g \mathbf{e}_z. \quad (\text{A.12})$$

Diese Gleichung ist gelöst, wenn man \tilde{p} findet mit

$$\nabla \tilde{p} = \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}. \quad (\text{A.13})$$

Dieser Druck ist dann zur bisherigen Lösung p_s nach Gleichung (A.11) zu addieren. Die Summe $p = p_s + \tilde{p}$ ist Lösung der Gleichung (A.12). Durch Einsetzen des Geschwindigkeitsfeldes (A.6) in den konvektiven Term erhält man

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = \begin{pmatrix} -2b^2 x^3 - 2b^2 x y^2 - b x a \\ -2b^2 y^3 - 2b^2 x^2 y - b y a \\ 2z^3 b^2 + 2abz \end{pmatrix}. \quad (\text{A.14})$$

Durch Einsetzen dieses Ausdrucks in (A.13) und Integration ergibt sich

$$\tilde{p} = \frac{\rho}{2} b^2 (z^4 - x^4 - y^4) + \frac{\rho}{2} ab (2z^2 - x^2 - y^2) - \rho b^2 x^2 y^2. \quad (\text{A.15})$$

Dieses Druckfeld wird nun auf der vertikalen Linie $(0,0,z)$ untersucht. Mit $b = -a/R^2$ (vgl. (A.3)) ergibt sich

$$\tilde{p}(z) = -\rho \frac{a^2}{2R^4} z^4 - \rho \frac{a^2}{R^2} z^2 . \quad (\text{A.16})$$

Wenn der Hill'sche Wirbel sich in einem Tropfen mit dem Radius R befindet, so erreicht der Betrag von $\tilde{p}(z)$ sein Maximum bei $z = \pm R$. An diesen Stellen gilt $\tilde{p} = \rho a^2/2$. Die Größe dieses Beitrages des konvektiven Terms soll nun mit dem hydrodynamischen Anteil p_d aus (A.11) verglichen werden. Dieser hat an den Stellen $z = \pm R$ den Betrag $p_d = 10\mu bR = 10\mu a/R$. Nun wird \tilde{p} hierzu ins Verhältnis gesetzt:

$$\frac{\tilde{p}}{p_d} = \frac{\rho R a}{20\mu} = \frac{\rho R w_T}{\mu} \frac{1}{40(1+\lambda)} . \quad (\text{A.17})$$

Interpretiert man $\rho R w_T/\mu$ als Reynoldszahl des Hill'schen Wirbels, so gilt

$$\text{Re} \ll 40 \quad \Rightarrow \quad \tilde{p} \ll p_d . \quad (\text{A.18})$$

Diese Bedingung ist für alle zur Validierung des Codes simulierten Tropfen erfüllt. Deshalb tauchen im inneren Druckfeld praktisch keine Abweichungen von dem linearen Druckverlauf gemäß (A.11) auf.

A.3. Konstruktion einer einhüllenden Fläche parallel zur Phasengrenze

Es liege eine Verteilung der dispersen Phase mit der Phasengrenze Γ vor. Gesucht ist eine einhüllende Fläche Γ' im Abstand δ zu Γ . Zur Veranschaulichung wird der Algorithmus zur Lösung dieses Problems an einem eindimensionalen Fallbeispiel vorgestellt: Die Verteilung der VoF Variable sei als eindimensionale Datenreihe f_i gegeben, wobei i die Zellnummer ist. In Abbildung A.1 ist ein Beispiel für f_i dargestellt mit $f_i > 0$ in den Intervallen $5 \leq i \leq 10$ und $20 \leq i \leq 25$, d.h. in diesen Intervallen ist disperse Phase präsent. Die Ränder dieser Intervalle bilden die Phasengrenze Γ . Es soll nun eine Reihe f'_i konstruiert werden, deren Phasengrenze Γ' die ursprüngliche Phasengrenze in einem festen Abstand umschließt. Der gewünschte Abstand betrage i_δ Zellbreiten. Zunächst wird durch einmaliges räumliches Glätten von f_i die Datenreihe f_i^1 erzeugt.

$$f_i^1 = \max[(f_{i-1} + f_i + f_{i+1})/3, f_i] \quad (\text{A.19})$$

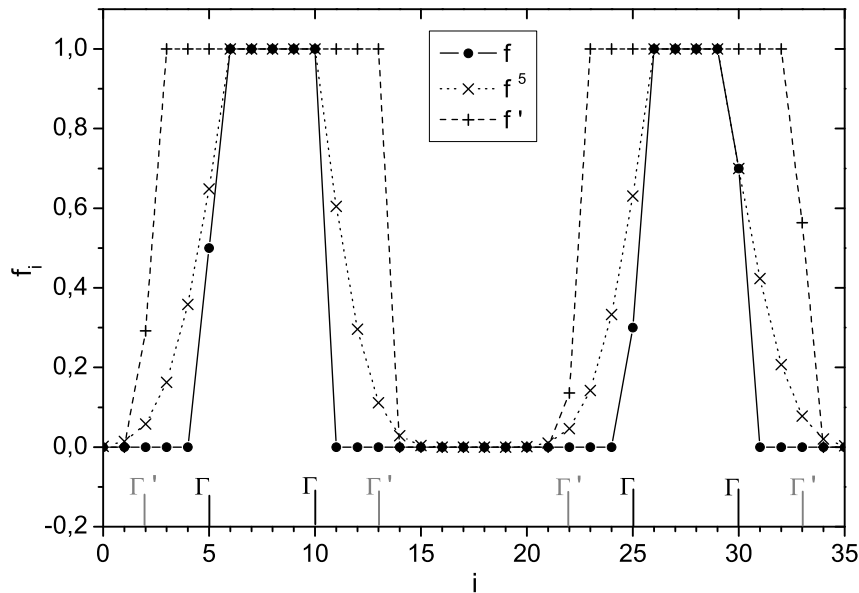


Abbildung A.1.: Eindimensionale Verteilung der VoF-Variablen. Kreise: Ursprüngliche Verteilung f_i mit der Phasengrenze Γ . 'X'-Symbole: 5-fache Glättung f_i^5 . '+'-Symbole: Verteilung f'_i mit der Phasengrenze Γ' im Abstand von 3 Zellen zu Γ .

Durch n -fache Glättung entsteht

$$f_i^n = \max[(f_{i-1}^{n-1} + f_i^{n-1} + f_{i+1}^{n-1})/3, f_i^{n-1}] . \quad (\text{A.20})$$

Nach n -facher Glättung enthalten auch Zellen im Abstand n von der ursprünglichen Phasengrenze positive Werte. Sei $i_\delta = 3$, so wird eine VoF-Verteilung f'_i gesucht, deren Phasengrenzen gegenüber f_i um jeweils drei Zellen nach außen verschoben sind. Im Beispiel sei also $f'_i > 0$ in den Intervallen $2 \leq i \leq 13$ und $17 \leq i \leq 28$. Es soll für f'_i also eine Phasengrenze bei $i = 2$ liegen. Es muß dann gelten $f'_1 = 0$, $f'_3 = 1$ und $0 < f'_2 < 1$. Eine derartiges f'_i läßt sich aus f_i^5 in einfacher Weise konstruieren:

$$f'_i = \begin{cases} 1 & \text{für } f_i^5 \geq f_o \\ 0 & \text{für } f_i^5 \leq f_u \\ \frac{f_i^5 - f_u}{f_o - f_u} & \text{für } f_u < f_i^5 < f_o , \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

$$\text{mit } f_u := (f_1^5 + f_2^5)/2 \quad \text{und} \quad f_o := (f_2^5 + f_3^5)/2 .$$

Die so konstruierte Verteilung f'_i erfüllt die Anforderung, daß ihre Phasengrenze Γ' überall um drei Zellen gegenüber Γ verschoben ist (vgl. Abbildung A.1). Der Algorithmus soll noch einmal für einen beliebigen Abstand i_δ formuliert werden. Sei i_γ das kleinste i mit $f_i > 0$, so befindet sich eine „Referenz“-Phasengrenze an der Stelle i_γ . Sei der gesuchte Abstand der neuen Phasengrenze in Einheiten der Zellbreite i_δ , so soll die neue Phasengrenze an der Stelle $i_\gamma - i_\delta$ liegen. Man wähle ein n mit $n > i_\delta$ und erhält durch n -faches räumliches Glätten f_i^n . Die gesuchte VoF-Verteilung f'_i ergibt sich dann als

$$f'_i = \begin{cases} 1 & \text{für } f_i^n \geq f_o \\ 0 & \text{für } f_i^n \leq f_u \\ \frac{f_i^n - f_u}{f_o - f_u} & \text{für } f_u < f_i^n < f_o , \end{cases} \quad (\text{A.22})$$

$$\text{mit } f_u := (f_{i_\gamma - i_\delta - 1}^n + f_{i_\gamma - i_\delta}^n)/2 \quad \text{und} \quad f_o := (f_{i_\gamma - i_\delta}^n + f_{i_\gamma - i_\delta + 1}^n)/2 .$$

A.4. Geschwindigkeitsfeld um einen oszillierenden Öltropfen

In den Abbildungen A.2 bis A.4 ist die zeitliche Entwicklung des Geschwindigkeitsfeldes für einen aufsteigenden Maisöltropfen ($d=13,2$ mm) dargestellt. Zunächst beschleunigt der Tropfen geradlinig. Während dieser Phase wird der Nachlauf des Tropfens immer länger, bis er instabil wird. Schließlich lösen sich Wirbel ab, wechselweise an der linken und der rechten Tropfenseite. Dies geht einher mit der horizontalen Oszillation. Siehe auch: Kapitel 7.4, Seite 51.

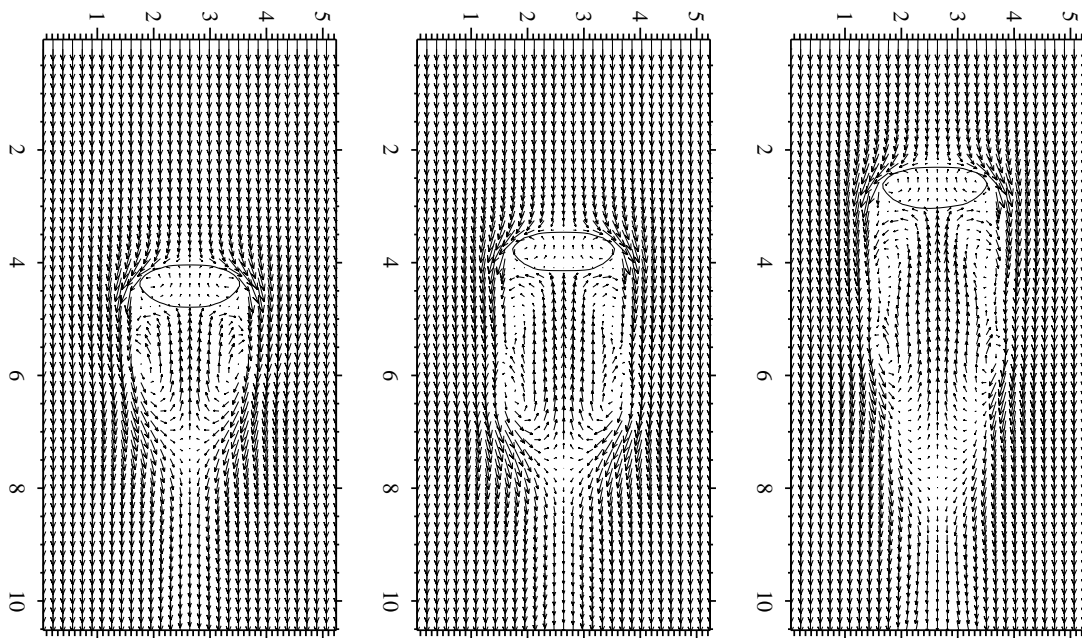


Abbildung A.2.: Geschwindigkeitsfeld um einen Maisöltropfen ($d = 13,2$ mm) während der Beschleunigungsphase. Links: $t = 1,5$ s. Mitte: $t = 2,5$ s. Rechts: $t = 4,0$ s.

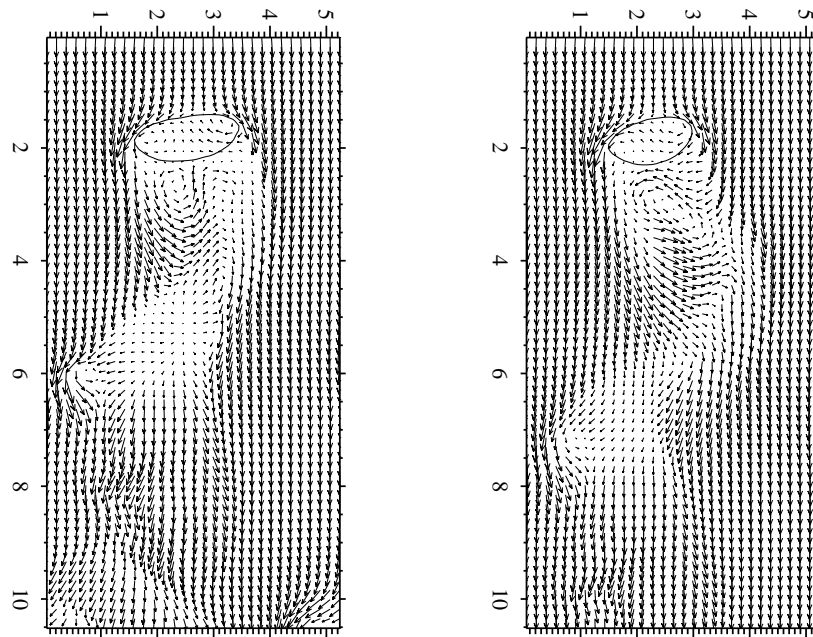


Abbildung A.3.: Geschwindigkeitsfeld um einen Maisöltropfen ($d = 13,2$ mm) mit periodischer Wirbelablösung. Links: $t = 6,25$ s. Rechts: $t = 6,45$ s.

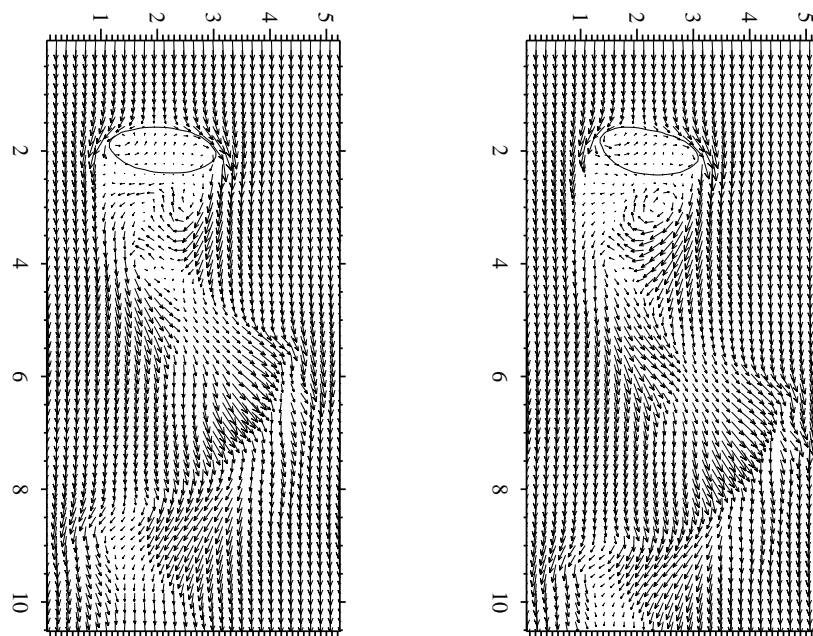


Abbildung A.4.: Geschwindigkeitsfeld um einen Maisöltropfen ($d = 13,2$ mm) mit periodischer Wirbelablösung. Links: $t = 6,75$ s. Rechts: $t = 6,85$ s.

Literaturverzeichnis

- (Alke 2007) Alke, A.: *Numerische Modellierung des Einflusses löslicher Tenside auf fluide Zweiphasensysteme*. Dissertation, Universität Paderborn 2007.
- (Auton 1984) Auton, T. R.: *The dynamics of bubbles, drops and particles in motion in liquids*. Ph.D. Thesis, University of Cambridge 1984.
- (Auton 1987) Auton, T. R.: *The lift force on a spherical body in a rotational flow*. J. Fluid. Mech. 183, S. 199-218 (1987).
- (Bothe 2002) Bothe, D.: *Computational Fluid Dynamics, Modellierung und Anwendung*. Vorlesungsskript, Universität Paderborn, Technische Chemie 2002.
- (Bothe et al. 2003a) Bothe, D.; Koebe, M.; Warnecke, H.-J.: *VoF-Simulation of the Rise Behavior of Single Air Bubbles with Oxygen Transfer to the Ambient Liquid*. IBW2 Conference on Transport Phenomena with Moving Boundaries. VDI, S. 1-13 (2003).
- (Bothe et al. 2003b) Bothe D.; Koebe, M.; Wielage, K.; Prüss, J.; Warnecke, H.-J.: *Direct Numerical Simulation of Mass Transfer Between Rising Gas Bubbles and Water*. Sommerfeld; M (Hrsg.): *Bubbly Flows - Analysis, Modelling and Calculation*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York 2003.
- (Bothe et al 2003c) Bothe D.; Koebe, M.; Wielage, K.; Warnecke, H.-J.: *VoF-Simulations of Mass Transfer from Bubbles and Bubble Chains Rising in Aqueous Solutions*. ASME FEDSM 2003, Honolulu, USA, ASME (Veranst.) S. 1-7 (2003)
- (Brackbill et al. 1992) Brackbill, J. U.; Kothe, D. B.; Zemach, C.: *A Continuum Method for Modelling Surface Tension*. J. Comp. Physics 100, S. 335-354 (1992).
- (Brauer 1971) Brauer, H.: *Grundlagen der Ein- und Mehrphasenströmungen*. Verlag Sauerländer, Aarau und Frankfurt/Main 1971.

- (Clift et al. 1978) Clift, R.; Grace, J. R.; Weber, M. E.: *Bubbles, Drops and Particles*. Academic Press 1978.
- (Drew und Lahey Jr. 1987) Drew, D.; Lahey Jr., R. T.: *The virtual mass and lift force on a sphere in a rotating and straining flow*. Int J. Multiphase Flow 13, S. 113-121 (1987).
- (Ervin und Tryggvason 1997) Ervin, E. A.; Tryggvason, G.: *The Rise of Bubbles in Vertical Shear Flow*. J. of Fluids Eng. 119, S. 443-449 (1997).
- (Fan und Tsuchiya 1990) Fan, L. S.; Tsuchiya, K.: *Bubble Wake Dynamics in Liquids and Liquid-Solid Suspension*. Butterworth-Heinemann, Boston 1990.
- (Feng und Michaelides 1994) Feng, Z. G.; Michaelides, E. E.: *Drag coefficients of viscous spheres at intermediate and high Reynolds numbers*. J. Fluid Eng. - Trans. ASME, 123(4) S. 841-849 (2001).
- (Frohn 1990) Frohn, A.: *Numerische Modellierung der Dynamik freier Oberflächen in Zweiphasenströmungen*. DFG-Bericht zum Forschungsvorhaben Fr-235/43-1 1999.
- (Grossetete 1995) Grossetete C.: *Experimental investigation of void profile development in a cylindrical pipe*. In *Advances in multiphase flow* (Serizawa, A.; Fukano, T.; Bataille, J.; Eds) Amsterdam Elsevier 1995.
- (Haberman und Morton 1953) Haberman, W. L.; Morton, R. K.: *An experimental investigation of the drag and shape of air bubbles rising in various fluids*. Navy Dept., The David W. Taylor Model Basin 1953.
- (Hadamard 1911) Hadamard, J. S.: *Mouvement permanent lent d'une sphère liquide et visqueuse dans un liquide visqueux*. Comptes Rendus des Scéances de l'Académie des Sciences, 152 S. 1735-1738 (1911).
- (Haljasmaa et al. 2005) Haljasmaa, I. V.; Vipperman, J. S.; Lynn, R. J.; Warzinski, R. P.: *Control of a fluid particle under simulated deep-ocean conditions in a high-pressure water tunnel*. Rev. Sci. Instrum., 76(2) S. 1-11 (2005).

- (Haljasmaa 2006)** Haljasmaa, I.: *On the Drag of Fluid and Solid Particles freely moving in a Continuous Medium*. Dissertation, University of Pittsburgh 2006.
- (Hirt und Nichols 1981)** Hirt, C. W.; Nichols, B. D.: *Volume of Fluid (VoF) method for the dynamics of free Boundaries*. J. Comp. Phys. 39, S. 201-225 (1981).
- (Ishii 1975)** Ishii, M.: *Thermo-Fluid Dynamic Theory of Two Phase Flow*. Eyrolles, Paris 1975.
- (Koebe et al. 2002)** Koebe, M.; Bothe, D.; Prüss, J.; Warnecke, H.-J.: *3D Direct Numerical Simulation of Air Bubbles in Water at High Reynolds-Numbers*. ASME FEDSM 2002; Montreal; Canada ASME (Veranst.), S. 1-8 (2002).
- (Koebe et al. 2003)** Koebe, M.; Bothe, D.; Warnecke, H.-J.: *Direct Numerical Simulation of Air Bubbles in Water/Glycerol Mixtures: Shapes and Velocity Fields*. ASME FEDSM 2003, Honolulu, USA, ASME (Veranst.), S. 1-7 (2003).
- (Koebe 2004)** Koebe, M.: *Numerische Simulation aufsteigender Blasen mit und ohne Stoffaustausch mittels der Volume of Fluid (VoF) Methode*. Dissertation, Universität Paderborn, 2004.
- (Kuipers et al. 2006)** *Numerical investigation of the lift force acting on single air bubbles in liquids with different viscosities using a 3D Front Tracking method*. Euromech Colloquium 479, Scheveningen, Niederlande (2006).
- (Kurose et al. 2001)** Kurose, R.; Misumi, R.; Komori, S.: *Drag and lift forces on a spherical bubble in linear shear flow*. Int. J. Multiphase Flow 27, S. 1247-1258 (2001).
- (Lafaurie et al. 1994)** Lafaurie, B.; Nardonne, C.; Scardovelli, R.; Zaleski, S.; Zannetti, G.: *Modelling, merging and fragmentation in multiphase flow with SURFER*. J. Comp. Phys. 113, S. 134-147 (1994).
- (Legrende und Magnaudet 1998)** Legrende, D.; Magnaudet, J.: *The lift force on a spherical bubble in a viscous linear shear flow*. J. Fluid Mech. 368, S. 81-126 (1998).

- (**LeVan und Newman 1976**) LeVan, M. D.; Newman, J.: *The effect of surfactant on the terminal and interfacial velocities of a bubble or drop*. AIChE J.,22(4), S. 695-701 (1976).
- (**Levich 1962**) Levich, V. G.: *Physicochemical Hydrodynamics*. N. J. Enlewood Cliffs, Prentice Hall 1962.
- (**Lucas et al. 2005**) Lucas, D.; Prasser, H. M.; Manera, A.: *Influence of the lift force on the stability of a bubble column*. Chem. Eng. Sci. 60, S. 3609-3619 (2005).
- (**Maxworthy et al. 1996**) Maxworthy, T.; Gnann, C.; Kürten, M.; Durst, F.: *Experiments on the Rise of Air Bubbles in Clean Viscous Liquids*. Journal of Fluid Mechanics 321, S. 421-441 (1996).
- (**Natarajan und Acrivos 1993**) Natarajan, R.; Acrivos, A.: *The instability of steady flow past spheres and disks*. J. Fluid Mech. 254, S. 323-344 (1993).
- (**Prasser et al. 2005**) Prasser, H. M.; Beyer, M.; Gregor, S.; Lucas, D.; Pietruske, H.; Schütz, P.; Weiss, F. P.: *Evolution of the Structure of a Gas-Liquid Two-Phase Flow in a Large Vertical Pipe*. NURETH-11, Avinion, France (2005).
- (**Preukschat 1962**) Preukschat, A. W.: *Measurements of drag coefficients for falling and rising spheres in free motion*. Calif. Inst. Technol., Pasadena 1962.
- (**Raymont und Rosant 1999**) Raymont, F.; Rosant, J-M.: *A numerical and experimental study of the terminal velocity and shape of bubbles in viscous liquids*. Chem. Eng. Sci. 55, S. 943-955 (1999).
- (**Reipschläger 2002**) Reipschläger, O.: *Desintegration von Fluiden im Ultraschallfeld: Modellierung, Simulation, Experiment*. Universität Paderborn, Dissertation 2002.
- (**Richard et al. 2007**) Richard, A.; Legendre, D.; Magnaudet, J.: *Force and torque on an oblate spheroidal bubble in a linear shear flow*. ICMF 2007, Leipzig 2007.
- (**Rieber und Frohn 1997**) Rieber, M.; Frohn, A.: *Navier-Stokes simulation of droplet collision dynamics*. Proc. 7th Int. Symp. On Comp. Fluid Dynamics, (Zhang, F. G. Ed) Beijing, China, S. 520-525 (1997).

- (**Rieber 2004**) Rieber, M.: *Numerische Modellierung der Dynamik freier Grenzflächen in Zweiphasenströmungen*. Fortschritt-Berichte VDI, Reihe 7, Strömungstechnik 459 Ph.D. thesis, Stuttgart University, Germany 2004.
- (**Rider und Kothe 1998**) Rider, W. J.; Kothe, D. B.: *Reconstructing volume tracking*. J. Comp. Phys. 141, S. 112-152 (1998).
- (**Rusche 2002**) Rusche, H.: *Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions*. Dissertation, University of London 2002.
- (**Rybczynski 1911**) Rybczynski, W.: *On the translatory motion of a fluid sphere in a viscous medium*. Bulletin International de l'Académie Polonaise des Sciences et des Lettres, Classe des Sciences Mathématiques et Naturelles, A., S. 40-46 (1911).
- (**Sabisch 2000**) Sabisch, W.: *Dreidimensionale numerische Simulation der Dynamik von aufsteigenden Einzelblasen und Blasenschwärmen mit einer Volume-of-Fluid Methode*. Forschungszentrum Karlsruhe, Dissertation 2000.
- (**Sadhil et al. 1997**) Sadhil, S. S.; Ayyaswamy, P. S.; Chung, J. N.: *Transport Phenomena with Drops and Bubbles*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York 1997.
- (**Scardovelli und Zaleski 1999**) Scardovelli, R.; Zaleski, S.: *Direct Numerical Simulation of Free-Surface Flow and Interfacial Flow*. Annual Review of Fluid Mechanics 31, S. 567-603 (1999).
- (**Slattery 1999**) Slattery, J. C.: *Advanced Transport Phenomena*. Cambridge University Press, 1999
- (**Sousa et al. 2006**) Sousa, F. S.; Portela, L. M.; Mudde, R. F.; Mangiavacchi, N.: *Direct Numerical Simulation of Deformable Bubbles in Wall Bounded Shear Flows*. European Conference on Computational Fluid Dynamics, TU Delft, S. 1-13 (2006)
- (**Stokes 1851**) Stokes, G. G.: *On the Effect of the Internal Friction of Fluids on the Motion of Pendulums*. Cambridge Philos. Trans., 9 S. 8-106 (1851).
- (**Tomiyama et al. 1993a**) Tomiyama, A.; Sou, A.; Minagawa, H.; Sakaguchi, T.: *Numerical Analysis of a Single Bubble by VoF-Method*. JSME International Journal 36, Nr. 1, S. 51-56 (1993).

- (**Tomiyama et al. 1995**) Tomiyama, A.; Sou, A.; Zun, I.; Kanami, A.; Sakaguchi, T.: *Effect of Eötvös number and dimensionless liquid volumetric flux on lateral motion of a bubble in laminar duct flow*. In: *Advances in Multiphase Flow* (Serizawa, A.; Fukano, T.; Bataille, J.; Eds) Amsterdam, Elsevier, S. 3-15 (1995).
- (**Tomiyama et al. 2002**) Tomiyama, A.; Tamai, H.; Zun, I.; Hosokawa, S.: *Transverse Migration of single Bubbles in Simple Shear Flows*. Chem. Eng. Sci. 57(11), S. 1849-1858 (2002).
- (**Tomiyama 2004**) Tomiyama, A.: *Drag, lift and virtual mass forces on a single bubble*. 3th International Symposium on Two-Phase Flow Modeling and Experimentation, Pisa 2004.
- (**Turton und Levenspiel 1986**) Turton, R.; Levenspiel, O.: *A short note on the drag correlation for spheres*. Powder Technol. 47, S. 83-86 (1986).
- (**US Department of Energy Report 1999**) US Department of Energy Report: *Carbon sequestration research and development*. DOE/SC/FE-1, available from NTIS 1999.
- (**Warzinski et al. 2002**) Warzinski, R. P.; Lynn, R. J.; Robertson, A. M.; Haljasmaa, I. V.: *High-pressure water tunnel facility for ocean CO₂ storage experimentation*. ACS Division of Fuel Chemistry, 47(1), S. 25-26 (2002).
- (**Wellek et al. 1966**) Wellek, R. M.; Agrawal, A. K.; Skelland, A.H.P.: *Shapes of liquid drops moving in liquid media*. A.I.Ch.E. Journal, 12, S. 854-862 (1966).
- (**Zun 1980**) Zun, I.: *Transverse migration of bubbles influenced by walls in vertical flow*. Int J. Multiphase Flow 6, S. 583-588 (1980).
- (**Zun 1988**) Zun I.: *Transition from wall void peaking to core void peaking in turbulent bubbly flow*. Proceedings of transient phenomena in multiphase flow. ICHMT international seminar, Dubrovnik, Croatia, S. 225-233 (1988).

Danksagung

Viele Menschen haben dazu beigetragen, daß diese Dissertation entstehen konnte.

Mein besonderer Dank gilt

Professor Dr. Hans-Joachim Warnecke für die Möglichkeit der Mitarbeit in seinem Arbeitskreis. Durch ihn erhielt ich viele interessante Einblicke in die technische Chemie. Er hat diese Arbeit in vielfältiger Weise unterstützt, nicht zuletzt auch in organisatorischer und menschlicher Hinsicht.

Professor Dr. Dieter Bothe, der diese Arbeit mit großem Engagement fachlich betreut hat. Im interdisziplinären Gespräch mit ihm und Professor Dr. Hans-Joachim Warnecke entwickelten sich immer wieder neue Blickweisen auf die Problemstellungen, die zu weiteren Untersuchungen anspornten.

Professor Dr. Marsmann und Professor Dr. Huber für ihre Bereitschaft, als Mitglieder der Prüfungskommission zu wirken.

Dr. Kerstin Wielage und Michael Kröger, die den Code *FS3D* gewartet und für diese Arbeit erweitert haben, sowie Dr. Mario Koebe, der mich in die Benutzung von *FS3D* eingewiesen hat.

Dem Paderborn Center for Parallel Computing (PC²) für die zur Verfügung gestellte Rechenleistung und die gute Benutzerberatung seitens der Systemadministratoren, insbesondere durch Axel Keller.

Meinen ehemaligen Kollegen Bhaskar Bandarapu und Houman Shirzadi im „Multikulti-Büro“, sowie allen Mitarbeitern der technischen Chemie für die gute und fruchtbare Arbeitsatmosphäre.

Meinen neuen Kollegen am Forschungszentrum Dresden-Rossendorf für ihre technische und organisatorische Unterstützung beim Aufschreiben dieser Dissertation.

Dr. Alexander Grahn für nützliche Hinweise im Umgang mit LATEX.

Schließlich möchte ich in besonderer Weise meinen Eltern danken, die mich während dieser Arbeit nach Kräften unterstützt haben.