

# **Numerische Untersuchung der Strömung von Taylor-Blasen in einem kleinen quadratischen Kanal**

Dr.-Ing. Martin Wörner

Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Reaktorsicherheit

*Seminar der Technischen Chemie, Universität Paderborn*

*12. Mai 2005*

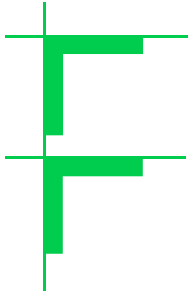
---

# Forschungszentrum Karlsruhe

**Beschäftigte:** 3800  
**Wissenschaftler:** 1420  
**Institute:** 22  
**Budget 2003:** 294 M€  
**Eigene Erträge:** 76 M€

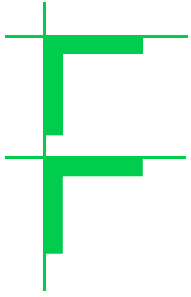
## **Forschungsgebiete:**

- Energie
- Gesundheit
- Struktur der Materie
- Erde und Umwelt
- Schlüsseltechnologien



# Gliederung des Vortrags

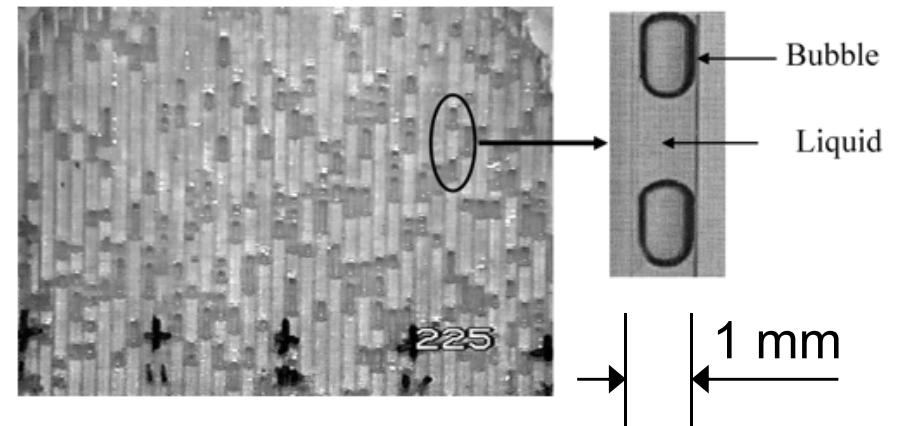
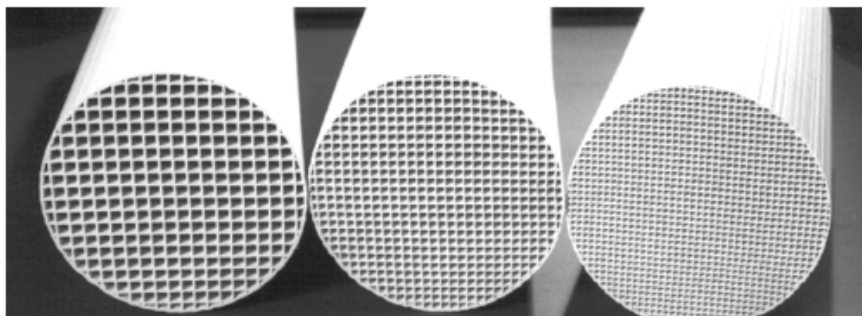
- Motivation
- Numerische Simulation
  - Rechenprogramm TURBIT-VOF
  - Beschreibung des physikalischen Problems
- Ergebnisse
  - Einfluss der Blasenlänge
  - Einfluss der Kapillarzahl
  - Bestimmung der Verweilzeitverteilung
- Zusammenfassung und Ausblick



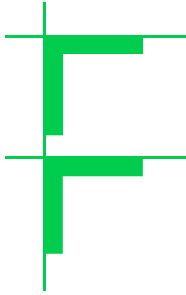
# Motivation

## Mehrphasenströmungen in kleinen Kanälen

- Monolithische Reaktoren mit katalytischen Wänden
  - Chemisch inerte Gasblasen segmentieren die flüssige Phase und verstärken deren Durchmischung

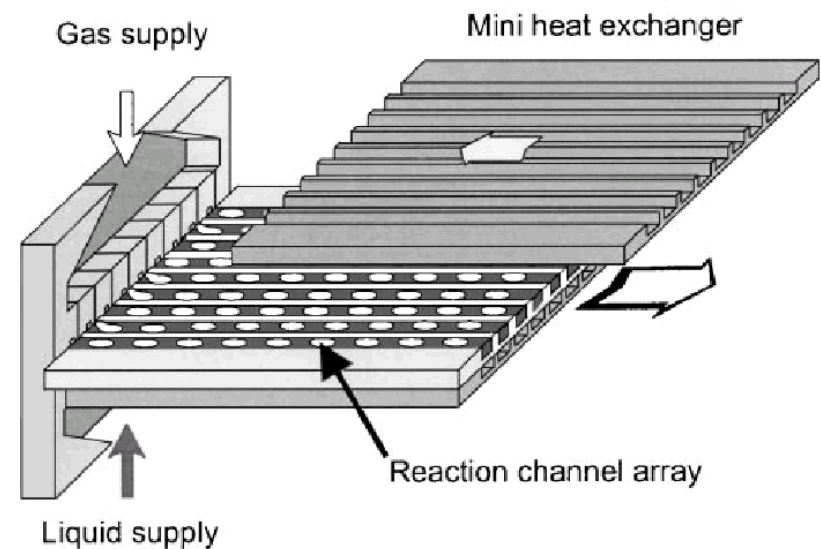




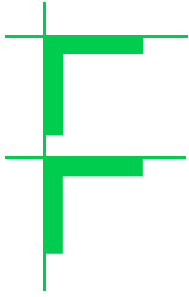


# Motivation

- Mikro-Blasensäule des IMM\*
  - Hohe Werte der Phasengrenzfläche pro Volumen
    - Effiziente Stoffübertragung über die Phasengrenzfläche (z.B. Absorption, Extraktion)
  - Definierte Geometrie der Phasengrenzfläche
    - Konzept des „numbering up“ anstatt „scaling up“

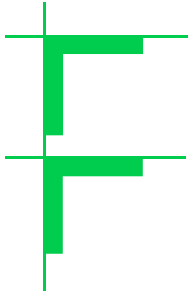


Kanalweite: mehrere 100  $\mu\text{m}$



# Motivation

- Experimentelle Untersuchungen der Strömungsvorgänge gestalten sich aufgrund der kleinen Kanalabmessungen schwierig und liefern häufig nur integrale Daten
- Ziel:  
Einblick in lokale Strömungsphänomene durch direkte numerische Simulation der Strömung zweier nicht mischbarer Fluide in einem einzelnen Kanal

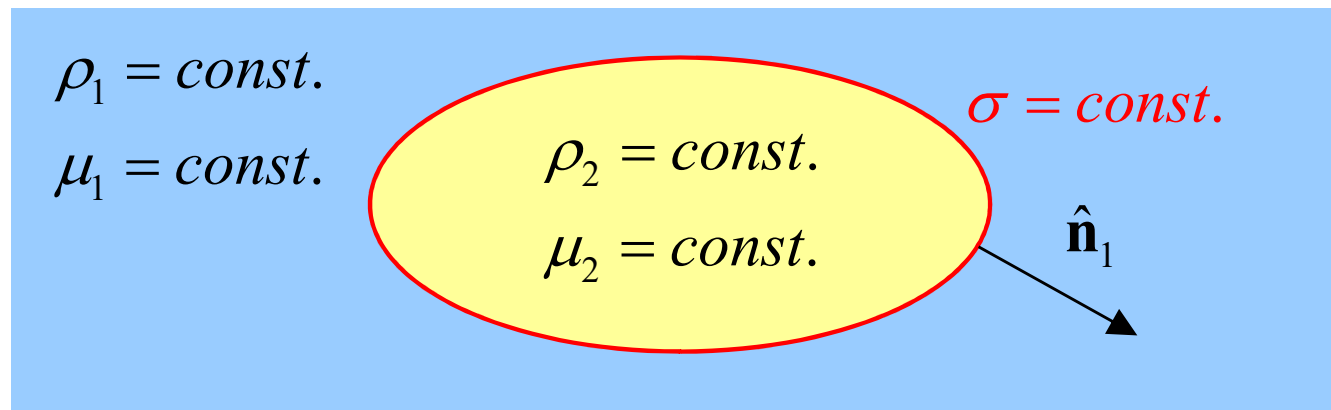


# Gliederung des Vortrags

- Motivation
- **Numerische Simulation**
  - Rechenprogramm TURBIT-VOF
  - Beschreibung des physikalischen Problems
- Ergebnisse
  - Einfluss der Blasenlänge
  - Einfluss der Kapillarzahl
  - Bestimmung der Verweilzeitverteilung
- Zusammenfassung und Ausblick

# Annahmen

- Zwei nicht mischbare Fluide
- Phasengrenzfläche ist unendlich dünn
- Oberflächenspannung ist konstant
- Inkompressible Fluide
- Newtonsche Fluide mit konstanter Viskosität





# Grundgleichungen#

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho_1^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot \rho_1^* \mathbf{u}_1^* &= 0 \\ \frac{\partial (\rho_1^* \mathbf{u}_1^*)}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\rho_1^* \mathbf{u}_1^* \mathbf{u}_1^*) &= -\nabla^* p_1^* + \nabla^* \cdot \mu_1^* \left( \nabla^* \mathbf{u}_1^* + (\nabla^* \mathbf{u}_1^*)^T \right) + \rho_1^* \mathbf{g}^* \end{aligned} \right\} \mathbf{x}^* \in \Omega_1(t^*)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho_2^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot \rho_2^* \mathbf{u}_2^* &= 0 \\ \frac{\partial (\rho_2^* \mathbf{u}_2^*)}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\rho_2^* \mathbf{u}_2^* \mathbf{u}_2^*) &= -\nabla^* p_2^* + \nabla^* \cdot \mu_2^* \left( \nabla^* \mathbf{u}_2^* + (\nabla^* \mathbf{u}_2^*)^T \right) + \rho_2^* \mathbf{g}^* \end{aligned} \right\} \mathbf{x}^* \in \Omega_2(t^*)$$

$$\mathbf{u}_1^* = \mathbf{u}_2^* = \mathbf{u}_i^*, \quad (p_1^* - p_2^* + H^* \sigma^*) \hat{\mathbf{n}}_1 = (\mathbb{T}_1^* - \mathbb{T}_2^*) \cdot \hat{\mathbf{n}}_1, \quad \mathbf{x}^* \in S_i(t^*)$$

$$\Omega_1(t^*) \quad \Omega_2(t^*) \quad S_i(t^*)$$

$$X_1 = 1 \quad X_1 = 0$$

# Grundgleichungen in Ein-Feld-Formulierung und dimensionsloser Form

$$f \equiv \frac{1}{V} \iiint_V X_1 dV, \quad \mathbf{x} \equiv \frac{\mathbf{x}^*}{L_{\text{ref}}^*}, \quad t \equiv \frac{t^* U_{\text{ref}}^*}{L_{\text{ref}}^*}, \quad \rho_m \equiv \frac{f \rho_1^* + (1-f) \rho_2^*}{\rho_1^*}, \quad \mu_m \equiv \frac{f \mu_1^* + (1-f) \mu_2^*}{\mu_1^*}$$

$$\mathbf{u}_m \equiv \frac{1}{U_{\text{ref}}^*} \frac{f \rho_1^* \mathbf{u}_1^* + (1-f) \rho_2^* \mathbf{u}_2^*}{f \rho_1^* + (1-f) \rho_2^*}, \quad P \equiv \frac{1}{\rho_1^* U_{\text{ref}}^{*2}} \left( p^* - \rho_1^* \mathbf{g}^* \cdot \mathbf{x}^* + \frac{|\Delta p^*|}{L_{\text{ref}}^*} \hat{\mathbf{e}}_p \cdot \mathbf{x}^* \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_m \mathbf{u}_m + \nabla \cdot \rho_m \mathbf{u}_m \mathbf{u}_m = -\nabla P + \frac{\nabla \cdot \left[ \mu_m \left( \nabla \mathbf{u}_m + \nabla \mathbf{u}_m^T \right) \right]}{Re_{\text{ref}}} - (1-f) \frac{E\ddot{o}_{\text{ref}}}{We_{\text{ref}}} \frac{\mathbf{g}^*}{g^*} + Eu_{\text{ref}} \hat{\mathbf{e}}_p + \frac{a_i \kappa \hat{\mathbf{n}}_i}{We_{\text{ref}}}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot f \mathbf{u}_m = 0$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_m = 0$$

$$Re_{\text{ref}} \equiv \frac{\rho_1^* L_{\text{ref}}^* U_{\text{ref}}^*}{\mu_1^*}, \quad E\ddot{o}_{\text{ref}} \equiv \frac{(\rho_1^* - \rho_2^*) g^* L_{\text{ref}}^{*2}}{\sigma^*}, \quad We_{\text{ref}} \equiv \frac{\rho_1^* L_{\text{ref}}^* U_{\text{ref}}^{*2}}{\sigma^*}, \quad Eu_{\text{ref}} \equiv \frac{|\Delta p^*|}{\rho_1^* U_{\text{ref}}^{*2}}$$



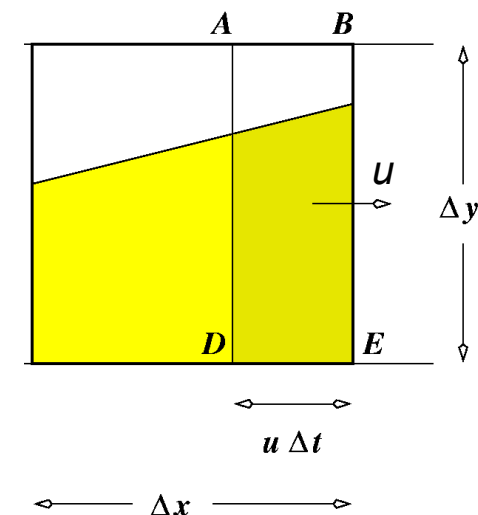
# Rechenprogramm TURBIT-VOF

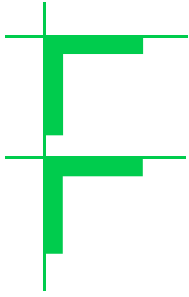
- Eigenentwicklung des IRS
- Diskretisierung im Raum
  - Finite-Volumen Formulierung
  - Strukturiertes, kartesisches, versetztes Gitter
  - Zentrale Differenzen-Approximationen 2. Ordnung
- Lösungsstrategie
  - Projektionsmethode
  - Lösung der Druck-Poisson-Gleichung mit CG-Verfahren
  - Explizites Runge-Kutta Zeitintegrationsverfahren 3. Ordnung
- Lösung der  $f$ -Gleichung mit Volume-of-Fluid Methode

# Volume-of-Fluid Methode (VOF)

- $f_{i,j,k} \equiv$  Volumenfraktion von Phase 1 in einer Gitterzelle ( $0 \leq f_{i,j,k} \leq 1$ )
- In Zellen mit  $0 < f_{i,j,k} < 1$  wird die Phasengrenzfläche lokal als Ebene angenähert
- Position und Orientierung der Ebene wird aus Verteilung von  $f$  in Nachbarzellen „rekonstruiert“
- „Geometrische“ Berechnung der konvektiven Flüsse von  $f$

0.493	0.493	0.177	0.0
1.0	1.0	0.925	0.177
1.0	1.0	1.0	0.493
1.0	1.0	1.0	0.493



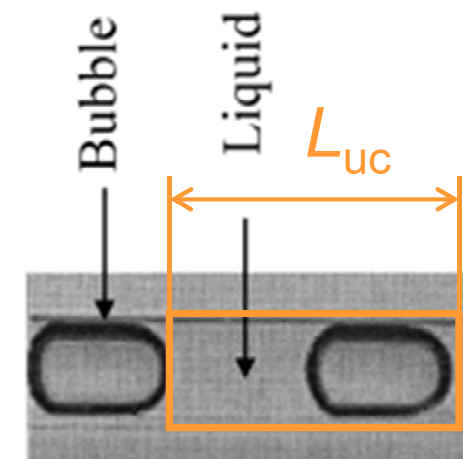
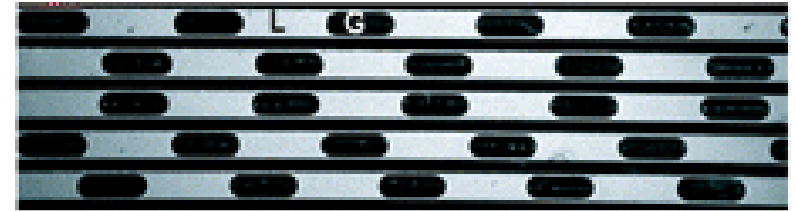


# Gliederung des Vortrags

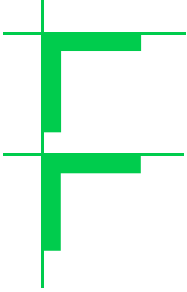
- Motivation
- Numerische Simulation
  - Rechenprogramm TURBIT-VOF
  - **Beschreibung des physikalischen Problems**
- Ergebnisse
  - Einfluss der Blasenlänge
  - Einfluss der Kapillarzahl
  - Bestimmung der Verweilzeitverteilung
- Zusammenfassung und Ausblick

# Charakterisierung der Strömung

- Blasen sind lang gestreckt und füllen nahezu den ganzen Kanalquerschnitt aus (Taylor-Blasen)
- Die Blasen haben identische Form und bewegen sich mit gleicher Geschwindigkeit durch den Kanal
- Die Strömung wird vollständig beschrieben durch eine **Einheitszelle** der Länge  $L_{uc}$  bestehend aus Blase und „Slug“ der Flüssigkeit







## Experiment von Thulasidas et al.\*

- Quadratischer vertikaler Kanal
  - Querschnittsfläche:  $2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$  ( $W^* = 2 \text{ mm}$ )
- Luftblasen in Silikonöl
  - Silikonöl unterschiedlicher Viskosität
  - Breiter Bereich der Kapillar-Zahl  $Ca_B \equiv \mu_1^* U_B^* / \sigma^*$
- Aufprägung des Volumenstroms von Luft und Öl
- Länge der Einheitszelle, Gasanteil in der Einheitszelle und Druckverlust stellen sich ein



# Abbildung im Rechenprogramm

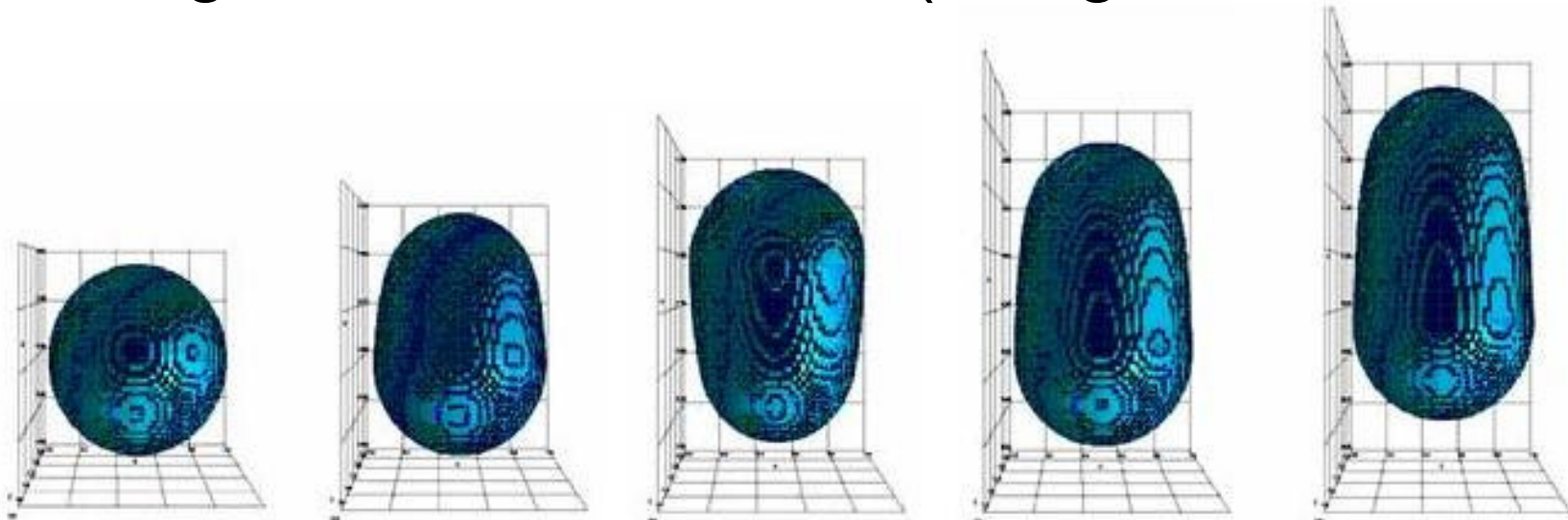
- Betrachtung einer Einheitszelle (eine Blase, ein Slug)
- Einfluss der vor- und nacheilenden Blasen wird durch periodische Randbedingungen abgebildet
  - Aufspaltung des Druckes (siehe Grundgleichungen)
- Die Strömung wird angetrieben vom Auftrieb und einem vorgegeben axialen Druckgradienten
  - Volumenstrom von Gas und Flüssigkeit stellt sich ein
- Der Gasgehalt der Einheitszelle und deren Länge wird zu Beginn der Simulation vorgegeben
  - Untersuchung des Einflusses von  $L_{uc}^* / W^*$

# Stoffwerte und Anfangsbedingungen

- Stoffwerte  $\rho_2^*$  und  $\mu_2^*$  sind um Faktor 10 höher als bei Luft

$\rho_1^*$	$\rho_2^*$	$\mu_1^*$	$\mu_2^*$	$\sigma^*$
957 kg/m <sup>3</sup>	11,7 kg/m <sup>3</sup>	0,048 Pa s	$1,84 \times 10^{-4}$ Pa s	0,022 N/m

- Anfängliche Blasenformen (Gasgehalt  $\varepsilon = 33\%$ )

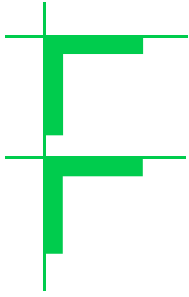


- Simulationen starten aus Ruhezustand

# Numerische Parameter

Fall	$L_{uc}^* / W^*$	Gebiet	Gitter	Zeitschritte
A1	1	$1 \times 1 \times 1$	$48 \times 48 \times 48$	24.000
A2	1	$1 \times 1 \times 1$	$64 \times 64 \times 64$	60.000
B	1,25	$1 \times 1,25 \times 1$	$48 \times 60 \times 48$	24.000
C	1,5	$1 \times 1,5 \times 1$	$48 \times 72 \times 48$	26.000
D	1,75	$1 \times 1,75 \times 1$	$48 \times 84 \times 48$	26.000
E	2	$1 \times 2 \times 1$	$48 \times 96 \times 48$	28.000

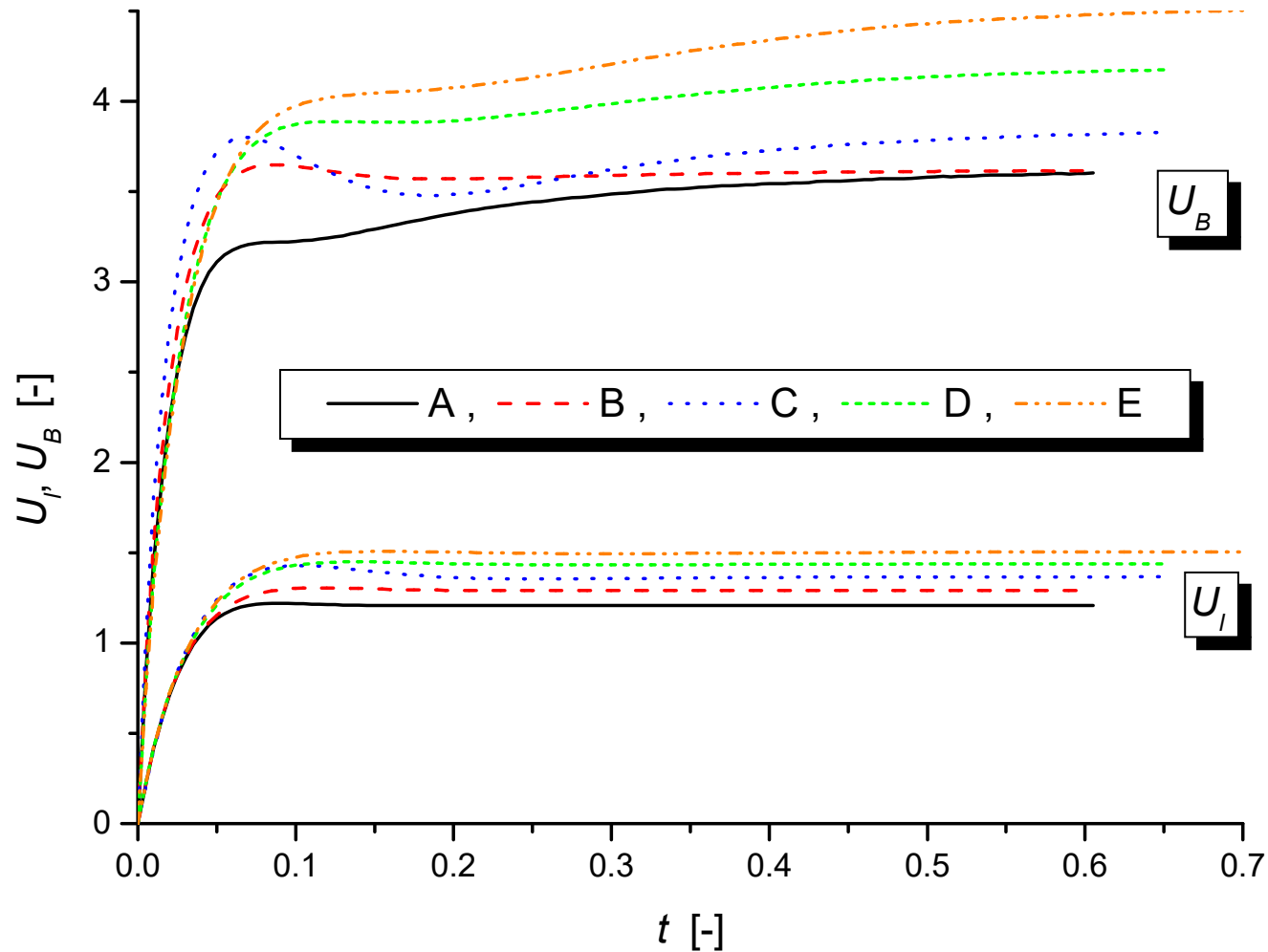
Ergebnisse auf beiden Gittern zeigen nur geringe Unterschiede



# Gliederung des Vortrags

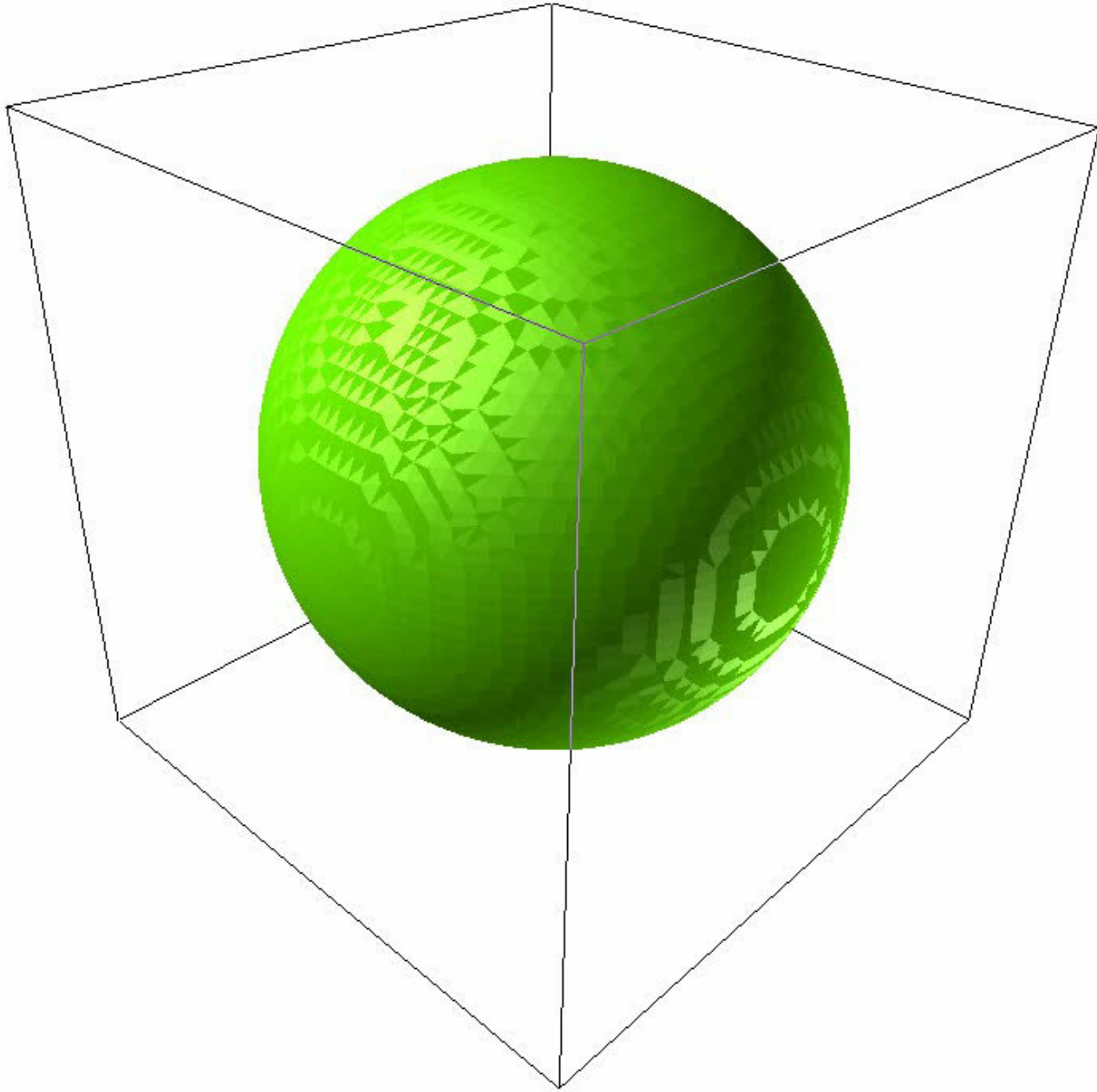
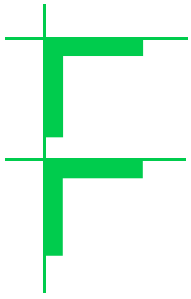
- Motivation
- Numerische Simulation
  - Rechenprogramm TURBIT-VOF
  - Beschreibung des physikalischen Problems
- **Ergebnisse**
  - Einfluss der Blasenlänge
  - Einfluss der Kapillarzahl
  - Bestimmung der Verweilzeitverteilung
- Zusammenfassung und Ausblick

# Entwicklung der mittleren Geschwindigkeit



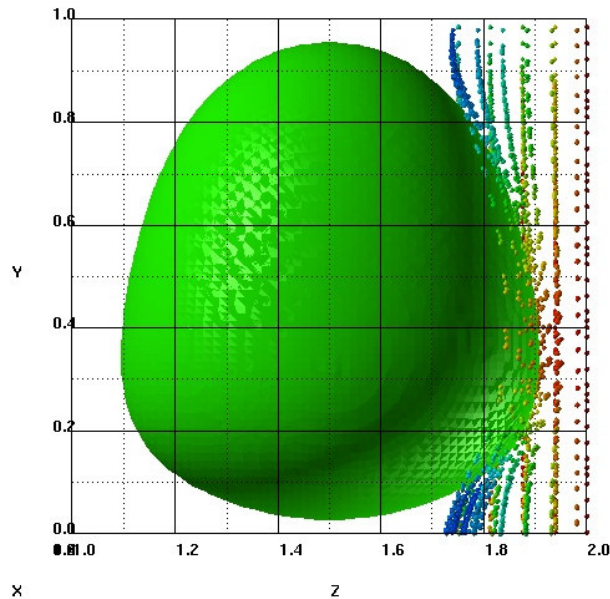
Geschwindigkeit von Blase und Flüssigkeit nehmen mit Zunahme von  $L_{uc}$  zu



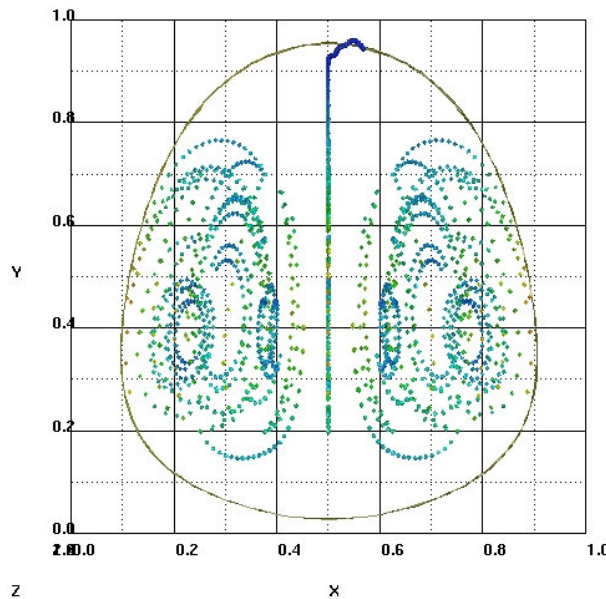


Fall A2

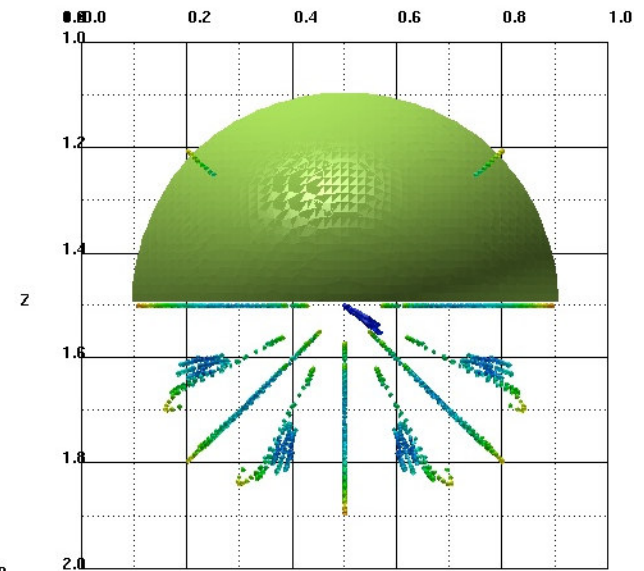
# Blasenform und Bahnen von virtuellen Partikeln für Fall A2



Seitenansicht

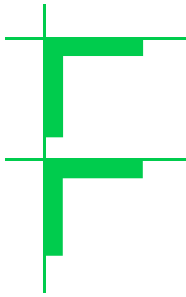


Seitenansicht



Draufsicht

- Blase ist rotationssymmetrisch
- Ein großer Wirbel in der Blase
- Geringe Strömung in Umfangsrichtung innerhalb der Blase

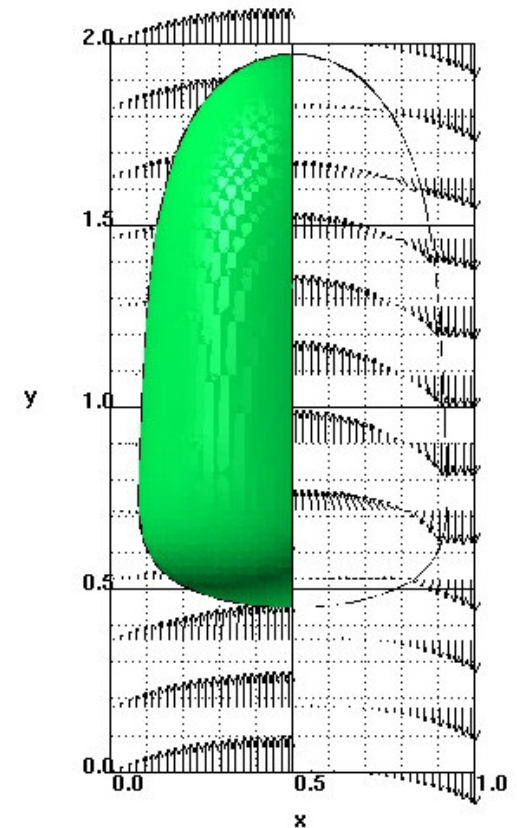
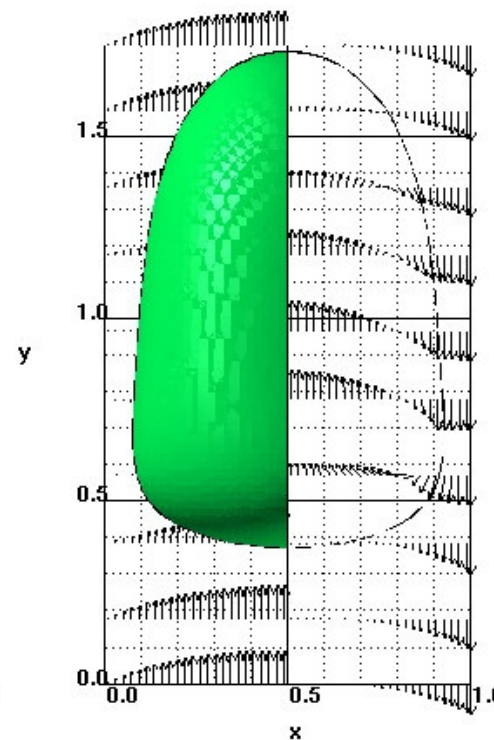
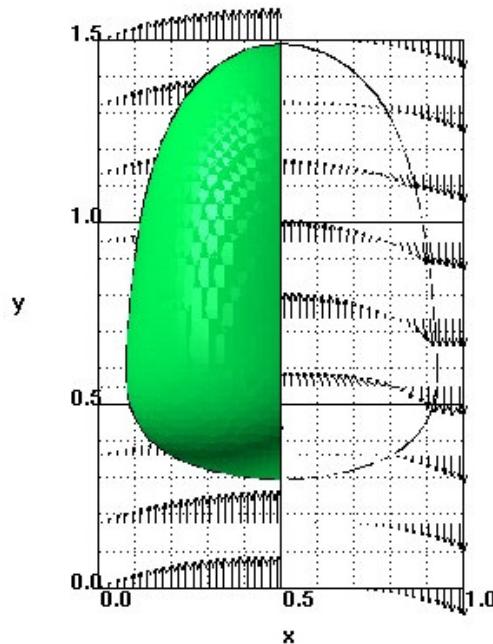
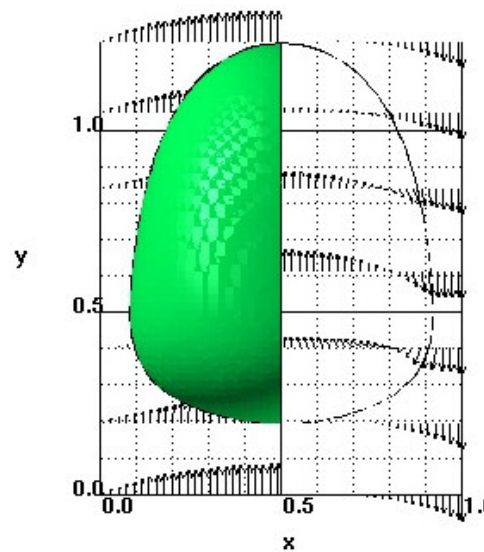
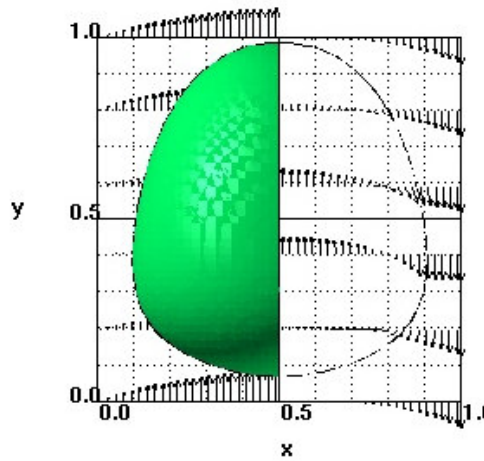


# Blasenform und Geschwindigkeitsfeld

Geschwindigkeitsfeld in vertikaler Mittelebene\*

Rechte Hälfte: mit Blase mitbewegtes Bezugssystem

Linke Hälfte: ortsfestes Bezugssystem



\* In y-Richtung ist nur jeder 8. Vektor dargestellt

# Vergleich mit dem Experiment\*

Dimensionsloser Blasendurchmesser

Relativgeschw.

Dimensionsloses  $U_B$

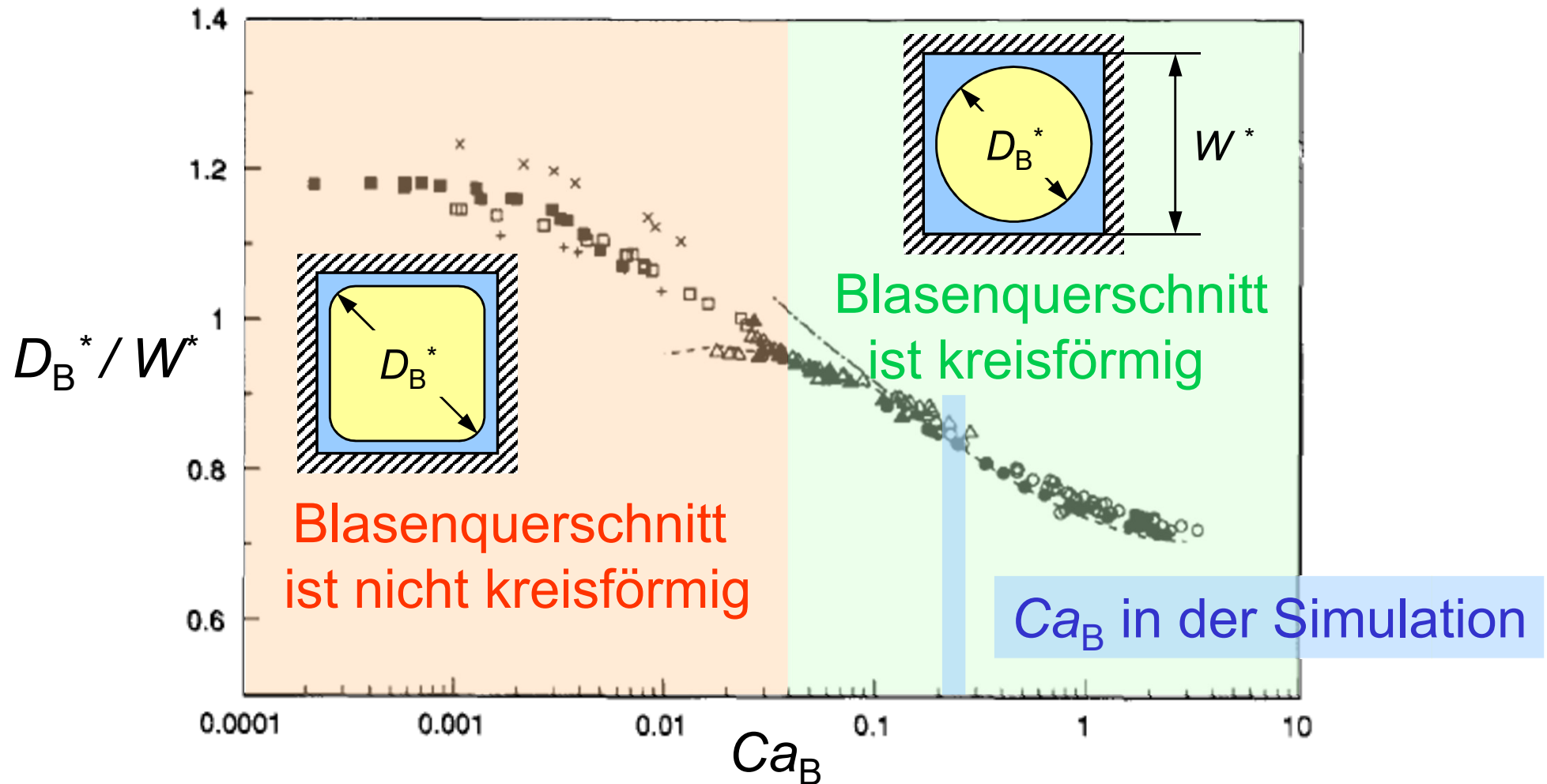
Fall	$L_{uc}^*/W^*$	$Ca_B$	$D_B^*/W^*$	$(U_B^* - J_{ges}^*)/U_B^*$	$U_B^*/J_{ges}^*$
A	1	0,204	0,81	1,80	0,445
B	1,25	0,207	0,84	1,75	0,430
C	1,5	0,215	0,85	1,75	0,430
D	1,75	0,238	0,85	1,78	0,438
E	2	0,253	0,85	1,8	0,445

Experimentelle Daten\* als Funktion der Kapillar-Zahl  $Ca_B \equiv \mu_1^* U_B^* / \sigma^*$

0,2 – 0,25    0,82 – 0,86    1,68 – 1,84    0,435–0,475

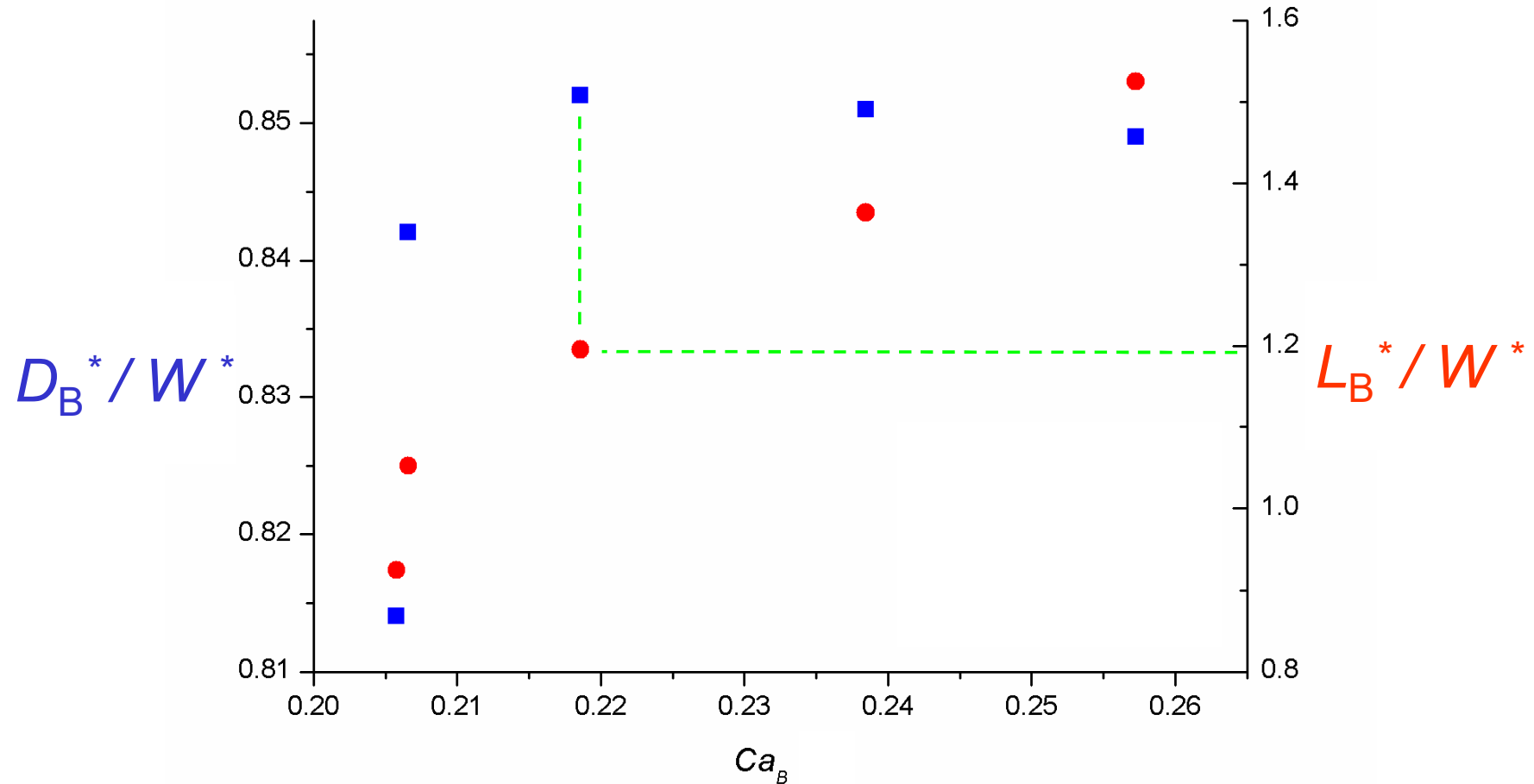


# Blasendurchmesser über Diagonale\*



⇒  $D_B^* / W^*$  nimmt mit Zunahme von  $Ca_B$  ab

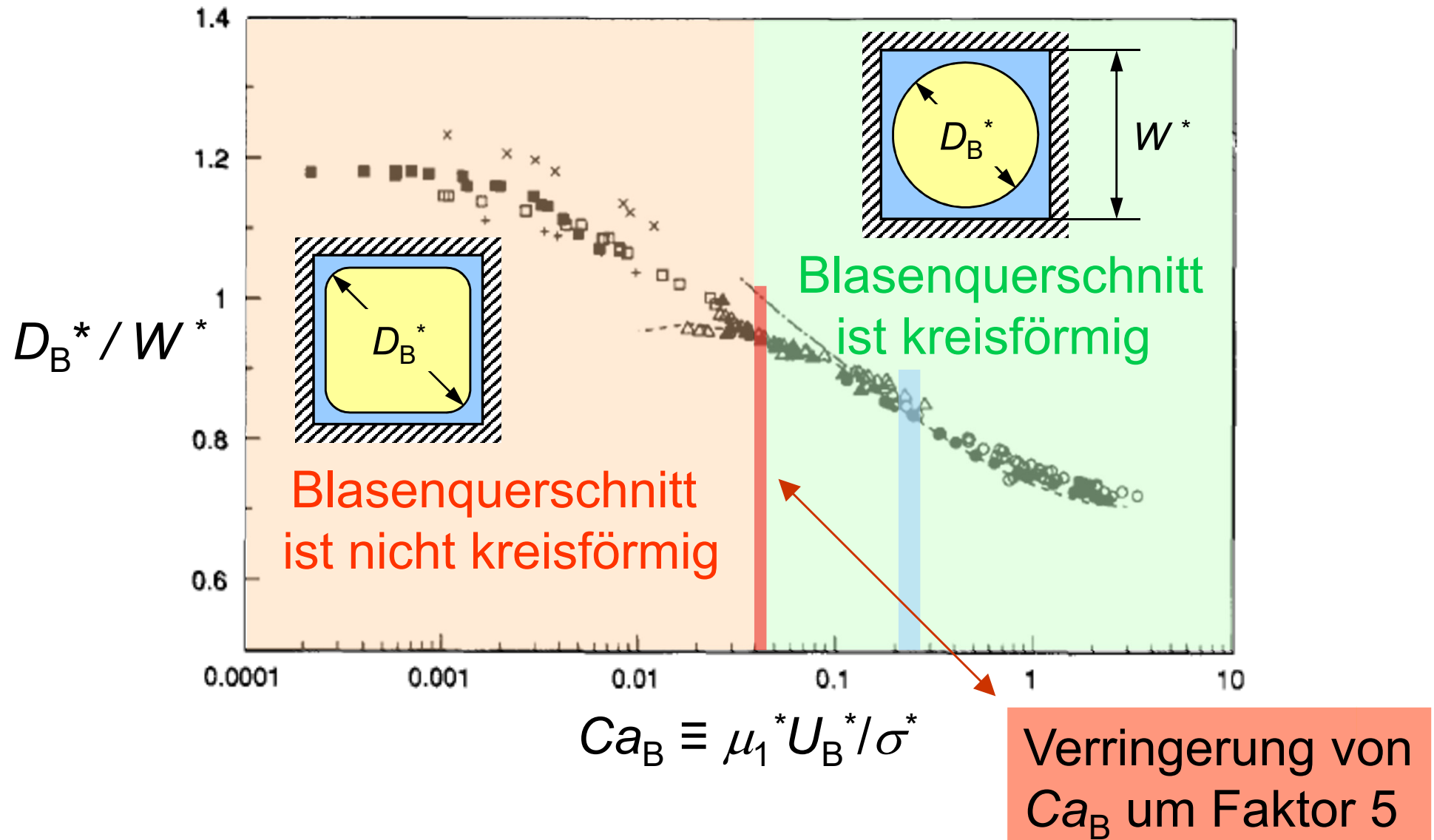
# Blasendurchmesser in der Simulation



$D_B^* / W^*$  nimmt mit Zunahme von  $Ca_B$  nur ab, wenn die Blasenlänge  $L_B^* / W^*$  größer ist als ca. 1,2 mal Kanalweite (dies ist in den Experimenten von Thulasidas et al. der Fall)

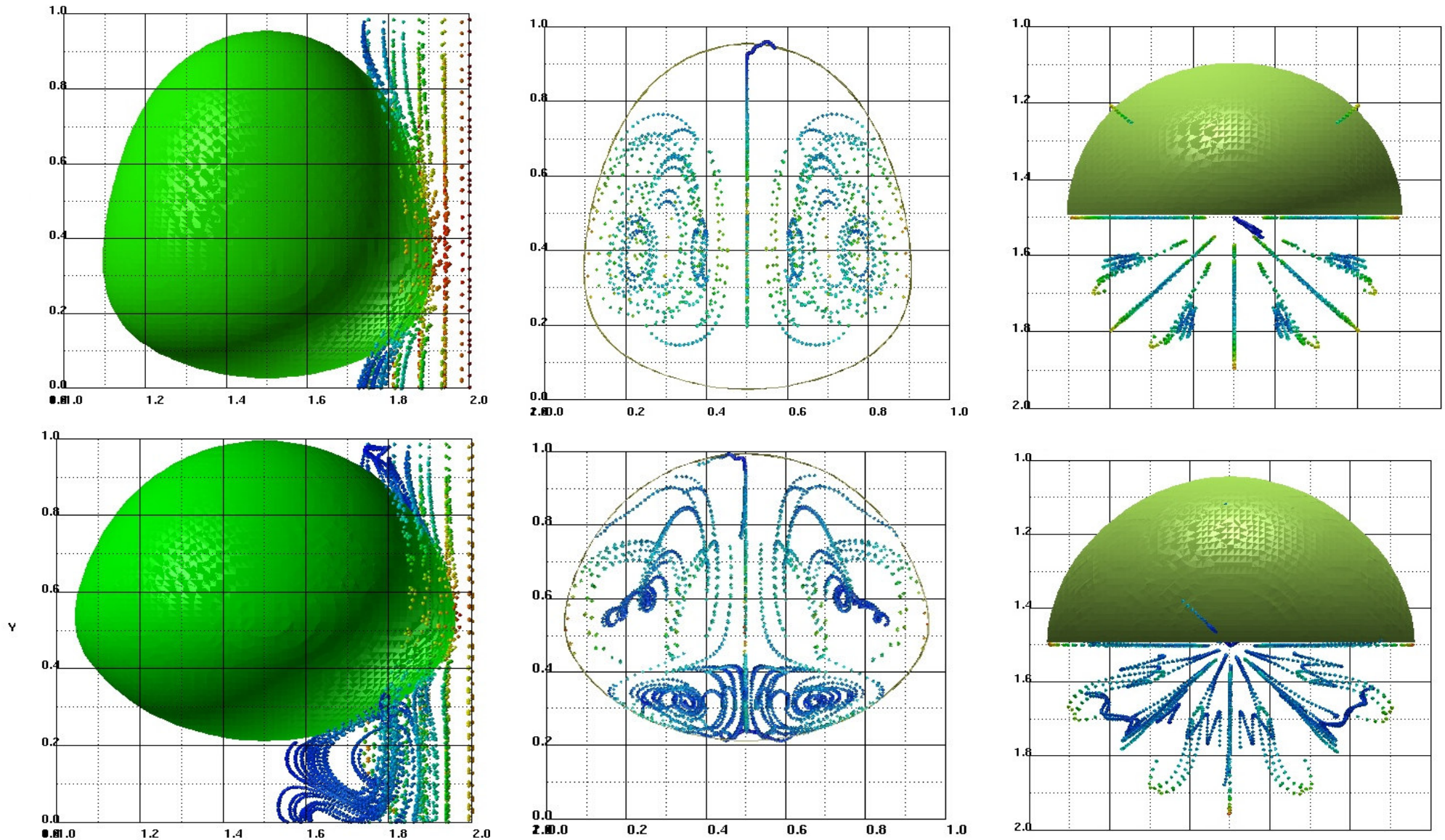


# Blasendurchmesser über Diagonale\*



# Einfluss der Kapillar-Zahl\*

obere Reihe:  $Ca_B = 0,205$ ; untere Reihe:  $Ca_B = 0,043$





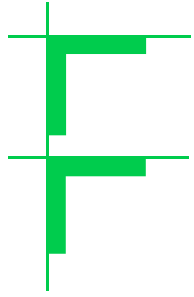
# Bestimmung der Verweilzeitverteilung

- Die Verweilzeitverteilung ist eine wichtige Größe zur Charakterisierung eines chemischen Reaktors
  - Verweilzeitverteilung beeinflusst Ausbeute und Selektivität
- Experimentelle Bestimmung der Verweilzeitverteilung
  - Zugabe eines Tracers in den Zulauf (als Impuls oder Sprung) und Messung der Konzentration des Tracers im Ablauf
- Probleme bei Mikro-Reaktoren
  - Reaktionsvolumen ist häufig kleiner als das des Zulaufs und ist kleiner als das notwendige Messvolumen im Ablauf
  - Die Folge sind experimentelle Ungenauigkeiten
- Alternative: Bestimmung der Verweilzeitverteilung aus CFD

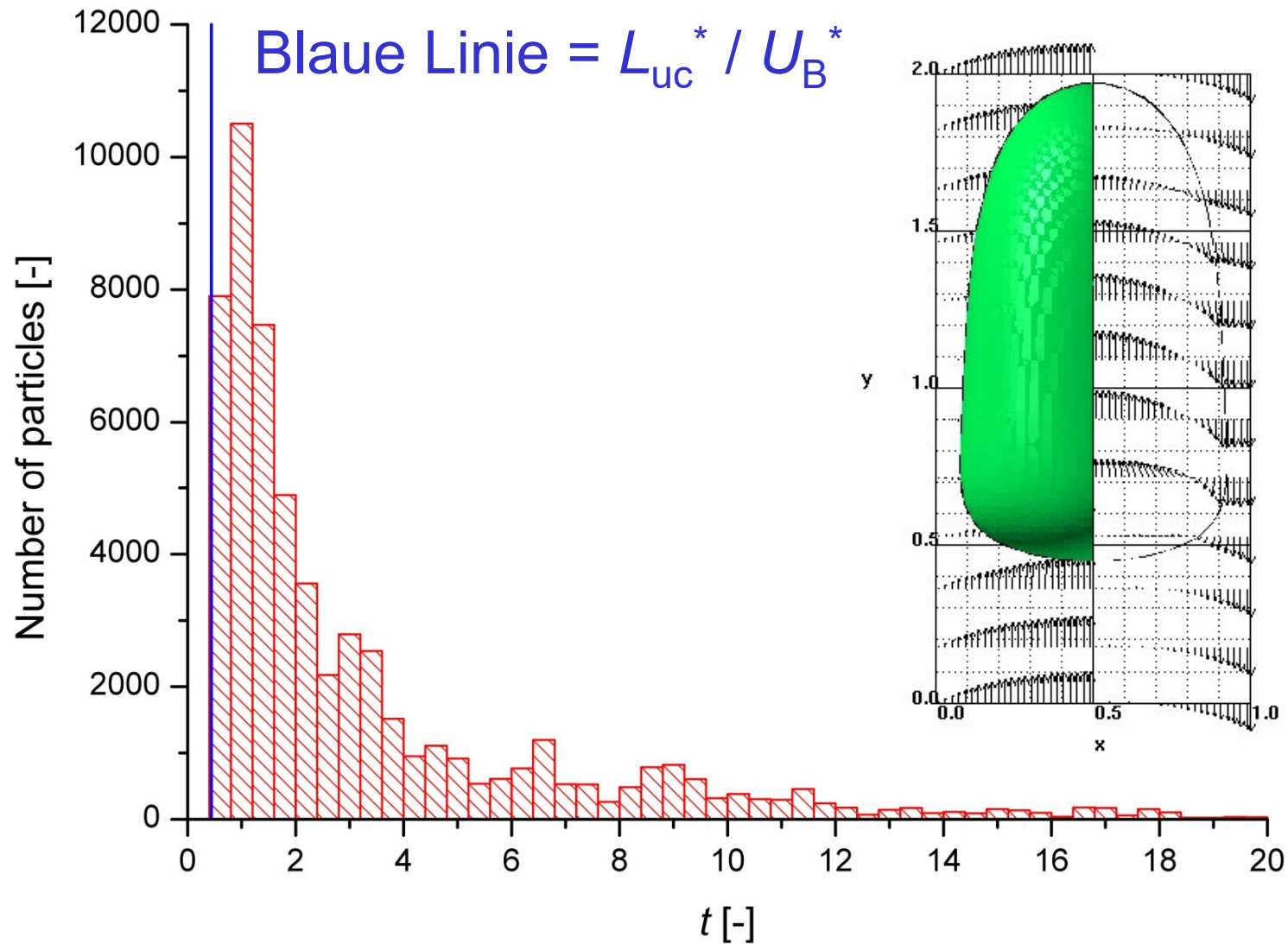


# Entwickelte Postprocessing-Methode

- Verwendung des zuvor berechneten voll entwickelten Strömungsfeldes zu einem bestimmten Zeitpunkt
- Initialisierung virtueller Partikel in regelmäßigem Abstand in Gitterzellen, die vollständig mit Flüssigkeit gefüllt
- Berechnung der Partikel-Bahnlinien und Bestimmung der Zeit, die jedes Partikel braucht um sich in axialer Richtung um die Länge der Einheitszelle  $L_{uc}$  weiterzubewegen
- Bestimmung der momentanen Geschwindigkeit des Partikels auf seiner Bahn aus seiner relativen Position zur virtuell mit der Geschwindigkeit  $U_B$  bewegten Blase
- Normierung der Häufigkeitsverteilung liefert die Verweilzeitverteilung der Flüssigkeit



# Beispiel für Häufigkeitsverteilung

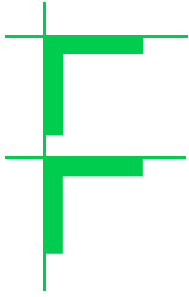






# Zusammenfassung

- Direkte numerische Simulation von Taylor-Blasen
  - Quadratischer vertikaler Kanal von  $W^* = 2$  mm Breite
  - Untersuchung des Einflusses der Länge der Einheitszelle
  - Gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten aus Literatur
- Abhängigkeit des Blasendurchmessers von Kapillar-Zahl
  - Regime I: Zunahme von  $D_B^*$  mit  $Ca_B$  für  $L_B^* < 1,2 W^*$
  - Regime II: Abnahme von  $D_B^*$  mit  $Ca_B$  für  $L_B^* > 1,2 W^*$
  - Aus Experimenten ist nur Regime II bekannt (lange Blasen)
- Großer Einfluss der Kapillar-Zahl auf Blasenform und Strömung in der Blase und im Flüssigkeits-Slug
- Vorstellung einer Methode zur Bestimmung der Verweilzeitverteilung der Flüssigkeit



# Ausblick

- Erweiterung des Rechenprogramms zur Beschreibung von Stoffübergang und einfachen chemischen Reaktionen (Doktorarbeit von A. Onea)
- Aktuelle Anwendungen
  - Kanal mit Querschnitt  $300\mu\text{m} \times 400\mu\text{m}$
  - Kleinere Werte der Kapillar-Zahl so dass die Blasenform nicht mehr rotationssymmetrisch ist