

Numerische Untersuchungen zur Strömung von Taylor-Blasen in einem quadratischen Mini-Kanal

Dr.-Ing. Martin Wörner

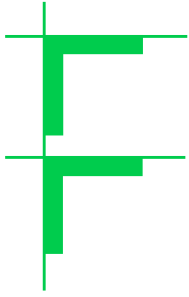
Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Reaktorsicherheit

*Prozessverfahrenstechnisches Seminar,
Institut für Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, TU Dresden*

21. November 2006

Forschungszentrum Karlsruhe





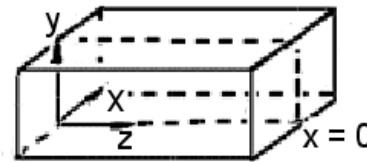
Arbeiten am Institut für Reaktorsicherheit (IRS) für das Programm NANOMIKRO

- Experimentelle Untersuchungen von Mikroströmungen mit μ PIV (H. Sauter)
- Vereinfachte Simulation von Mikrowärmetauschern mit dem In-house Code TwoPorFlow (U. Imke)
- *Detaillierte numerische Simulation von Blasenströmungen im einzelnen Minikanal (M. Wörner)*

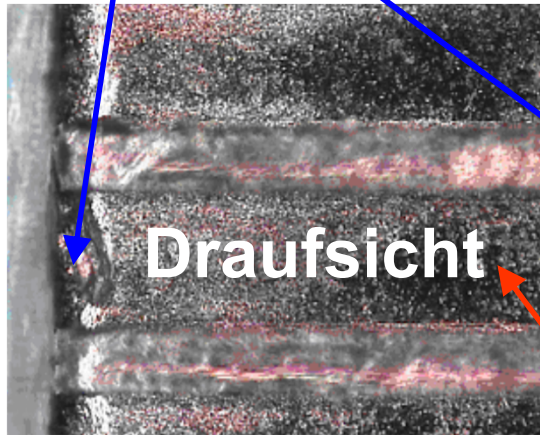
Experimentelle Untersuchung von Mikroströmungen mit μ PIV

Vertiefung am
Kanal-Eintritt

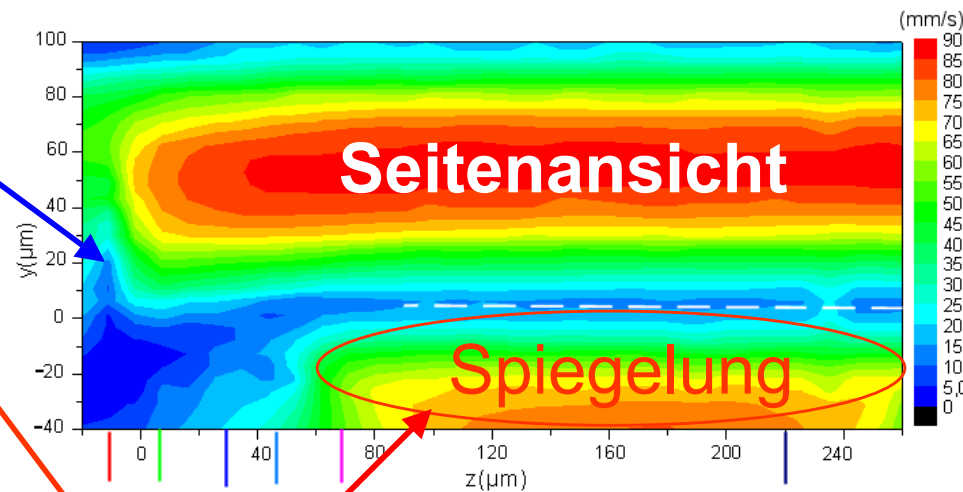
flow
direction
→



$Re \approx 5$

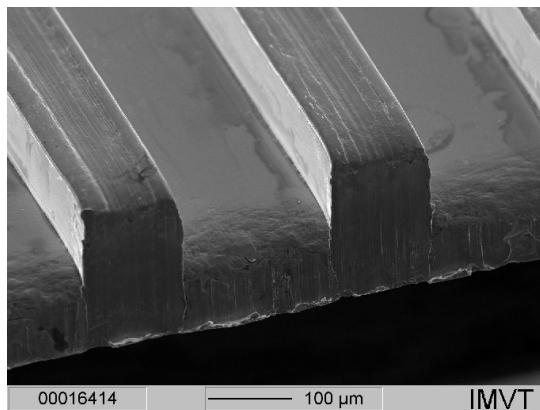


Draufsicht

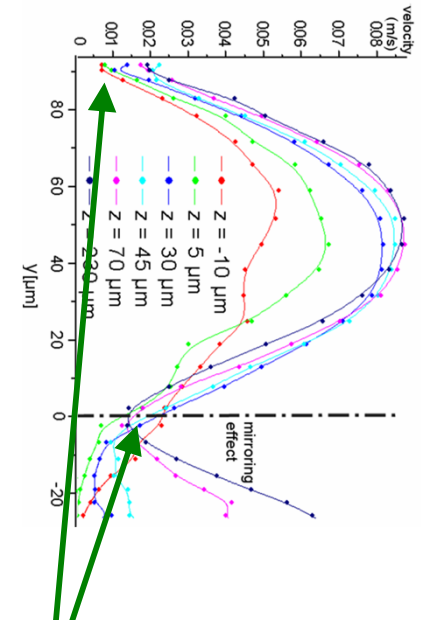


Seitenansicht

Spiegelung



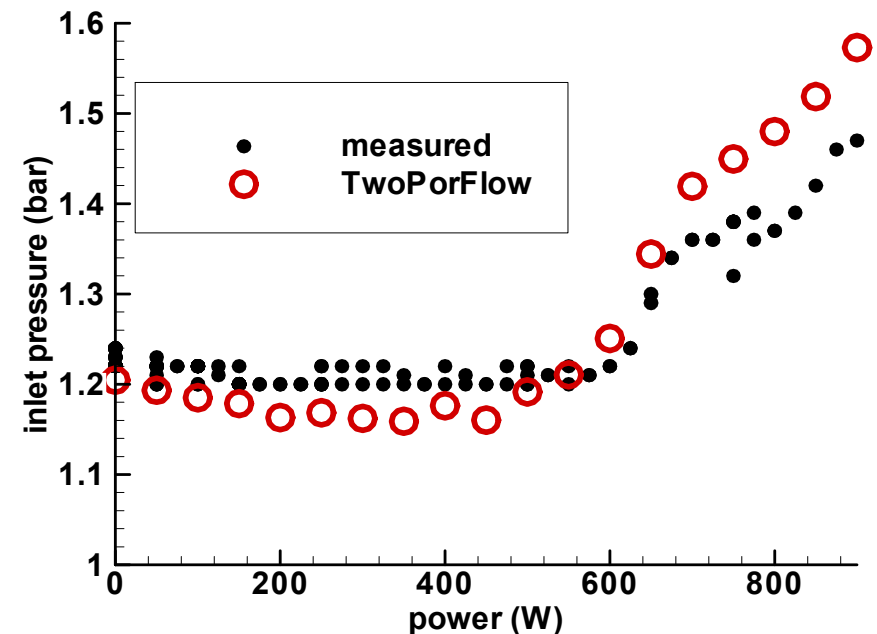
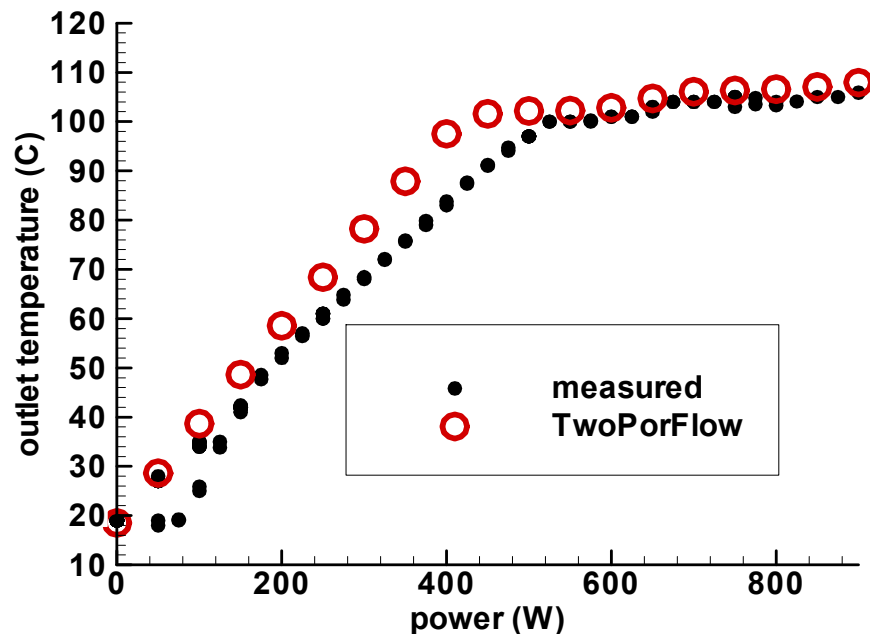
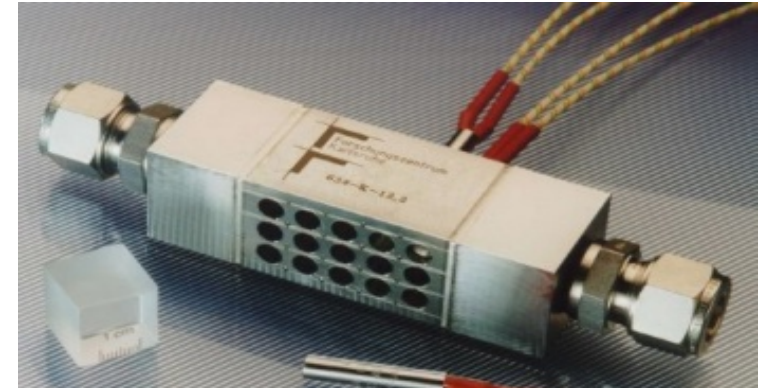
Spiegeleffekt durch glatten
Kupferboden stromab vom Eintritt

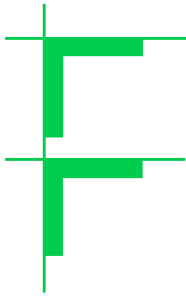


Schlupf an oberer
und unterer Wand?

Vereinfachte Simulation mit TwoPorFlow

Verdampfung von Wasser im
elektrisch beheizten
Mikrowärmetauscher des IMVT
(Massenstrom 4,4 kg/h)



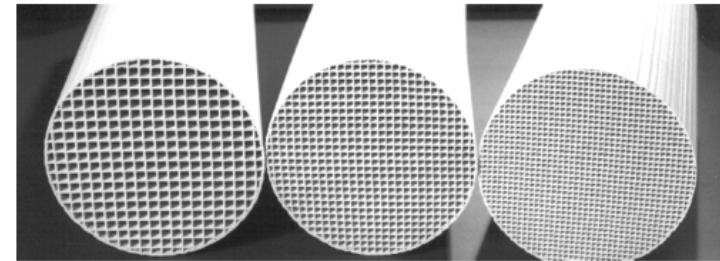


Gliederung des Vortrags

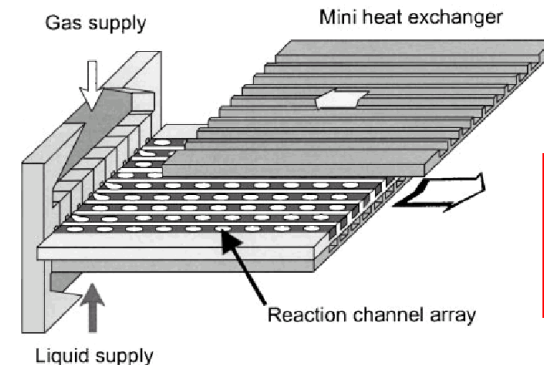
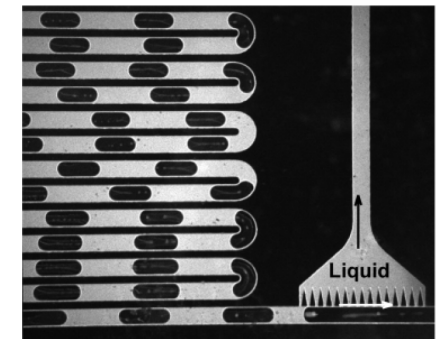
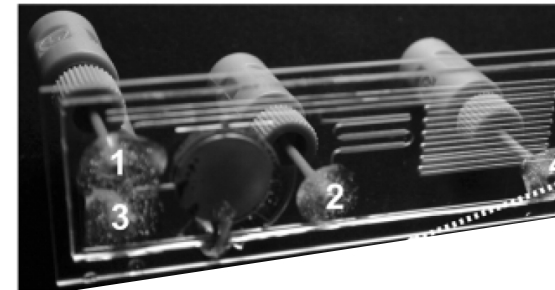
- **Einleitung und Motivation**
- **Numerische Simulation der Taylor-Strömung im Minikanal**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
 - Abbildung des physikalischen Problems
- **Ergebnisse**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - Verweilzeitverteilung der Flüssigphase
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - Bewertung von kommerziellen CFD-Programmen
- **Zusammenfassung und Ausblick**

Blasenströmung in kleinen Kanälen

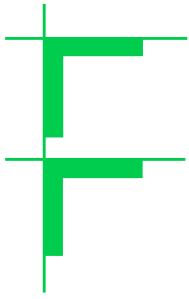
- Technische Anwendungen
 - Monolith-Reaktor mit katalytischen Wänden
 - Mikro-Kanal Netzwerk (MIT)
 - Mikro-Blasensäule (IMM)
- Vorteile
 - Gute Durchmischung der Flüssigkeit
 - Reduzierte axiale Dispersion
 - Effiziente Stoffübertragung über die Phasengrenzfläche



Quadr.
Kanäle
1–5 mm

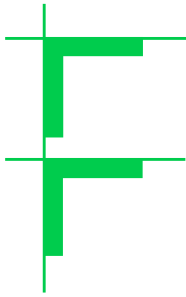


$300\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$
 $50\mu\text{m} \times 50\mu\text{m}$



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

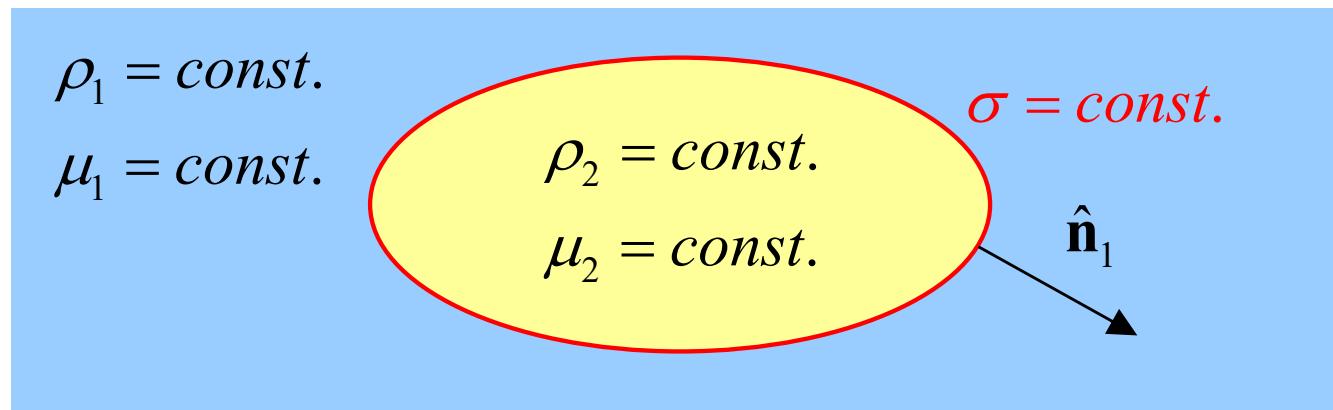


Gliederung des Vortrags

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerische Simulation der Taylor-Strömung im Minikanal**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
 - Abbildung des physikalischen Problems
- **Ergebnisse**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - Verweilzeitverteilung der Flüssigphase
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - Bewertung von kommerziellen CFD-Programmen
- **Zusammenfassung und Ausblick**

Annahmen

- Zwei nicht mischbare Fluide
- Phasengrenzfläche ist unendlich dünn
- Oberflächenspannung ist konstant
- Inkompressible Newton'sche Fluide mit konstanter Viskosität



Grundgleichungen#

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

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

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

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

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

X_1 = Indikatorfunktion
von Phase 1 (Flüssigkeit)

Grundgleichungen in Ein-Feld-Formulierung und dimensionsloser Form

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

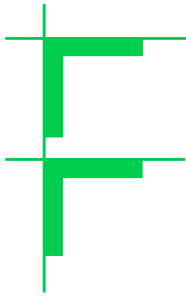
$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot f \mathbf{u}_m = 0$$

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

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

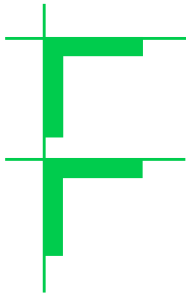
$$\mathbf{u}_m \equiv \frac{1}{U_{\text{ref}}^*} \frac{f \rho_1^* \mathbf{u}_1^* + (1-f) \rho_2^* \mathbf{u}_2^*}{f \rho_1^* + (1-f) \rho_2^*}, \quad P \equiv \frac{1}{\rho_1^* U_{\text{ref}}^{*2}} \left(p^* - \rho_1^* \mathbf{g}^* \cdot \mathbf{x}^* + \frac{|\Delta p^*|}{L_{\text{ref}}^*} \hat{\mathbf{e}}_p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

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



Gliederung des Vortrags

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerische Simulation der Taylor-Strömung im Minikanal**
 - Grundgleichungen
 - **Rechenprogramm TURBIT-VOF**
 - Abbildung des physikalischen Problems
- **Ergebnisse**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - Verweilzeitverteilung der Flüssigphase
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - Bewertung von kommerziellen CFD-Programmen
- **Zusammenfassung und Ausblick**



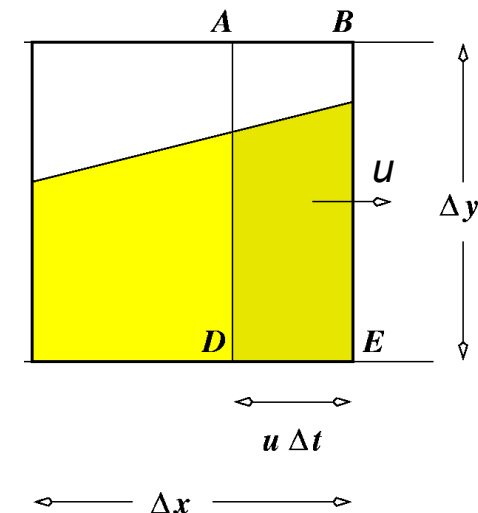
Rechenprogramm TURBIT-VOF

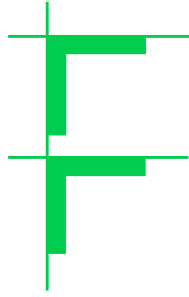
- Eigenentwicklung des IRS*
- Diskretisierung im Raum
 - Finite-Volumen Formulierung
 - Strukturiertes, kartesisches, versetztes Gitter
 - Zentrale Differenzen-Approximationen 2. Ordnung
- Lösungsstrategie
 - Projektionsmethode
 - Lösung der Druck-Poisson-Gleichung mit CG-Verfahren
 - Explizites Runge-Kutta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

Volume-of-Fluid Methode (VOF)

- $f_{i,j,k}$ = 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



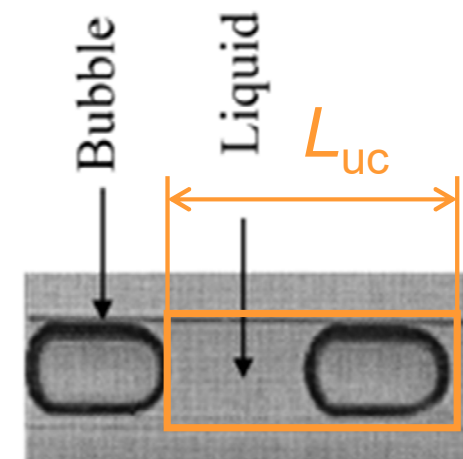
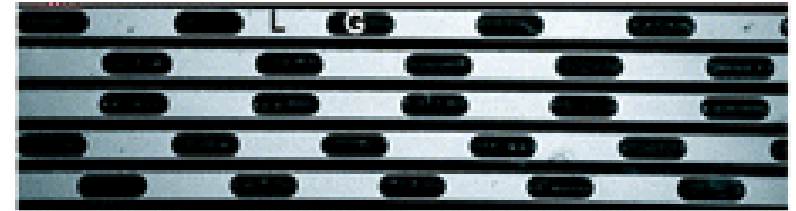


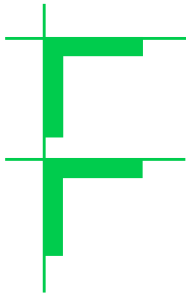
Gliederung des Vortrags

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerische Simulation der Taylor-Strömung im Minikanal**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
 - **Abbildung des physikalischen Problems**
- **Ergebnisse**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - Verweilzeitverteilung der Flüssigphase
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - Bewertung von kommerziellen CFD-Programmen
- **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 $Ca_B \equiv \mu_L U_B / \sigma$
- Aufprägung des Volumenstroms von Luft und Öl
- Länge der Einheitszelle (L_{uc}), Gasanteil in der Einheitszelle (ε) und Druckverlust stellen sich ein

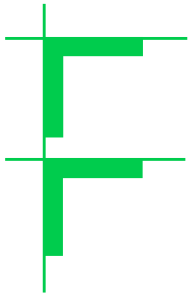
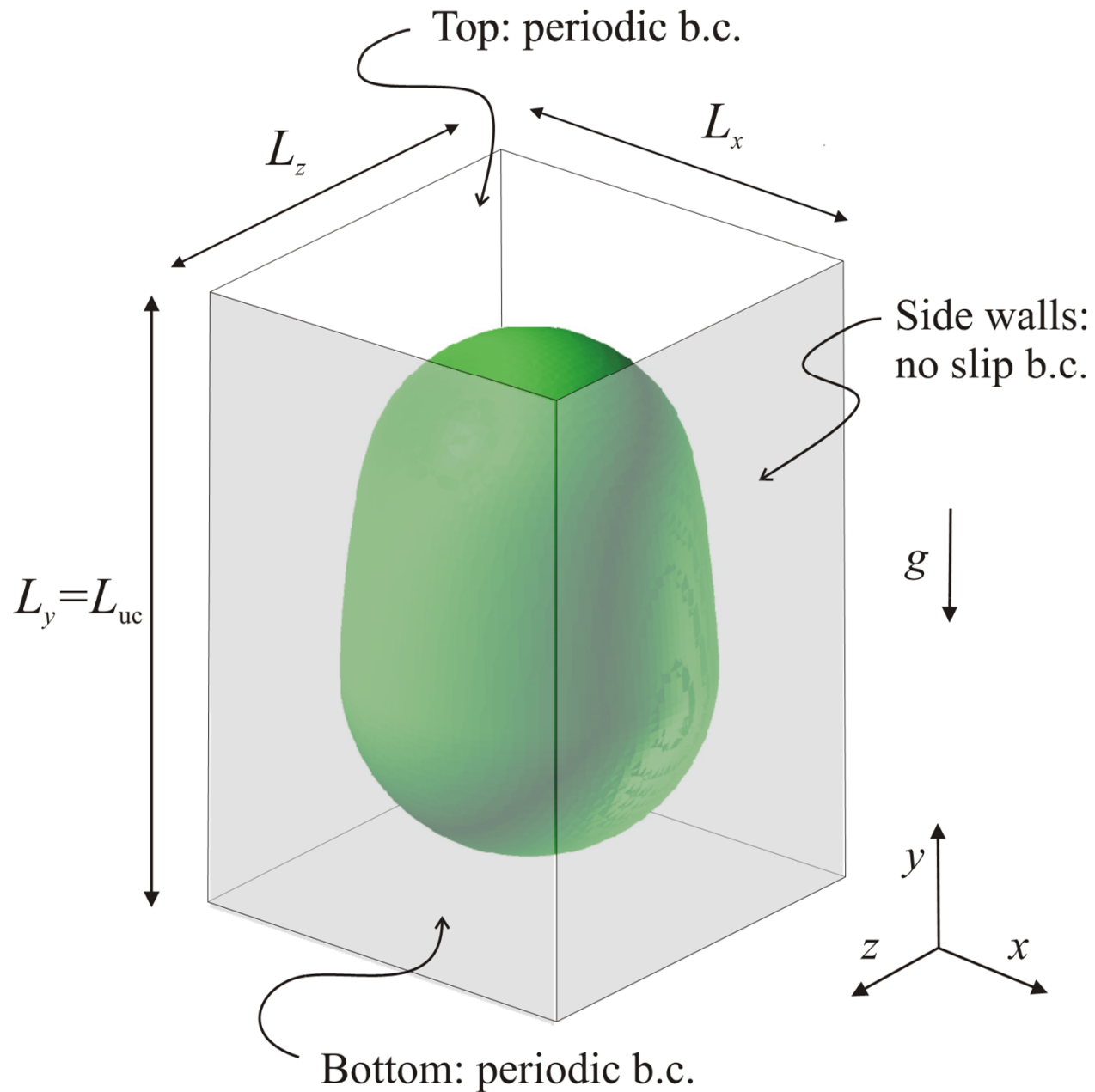
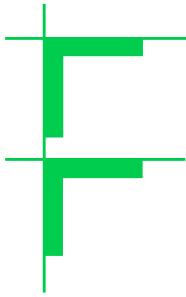


Abbildung im Rechenprogramm

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



- $L_x = L_z = W = 2 \text{ mm}$
- Gasgehalt in der Einheitszelle in allen Simulationen: $\varepsilon = 33\%$
- Alle Simulationen starten aus Ruhezustand
- $L_{\text{ref}} = 2 \text{ mm}$
- $U_{\text{ref}} = 2,64 \text{ cm/s}$
- $t_{\text{ref}} = L_{\text{ref}} / U_{\text{ref}} = 0,757 \text{ s}$



Gliederung des Vortrags

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerische Simulation der Taylor-Strömung im Minikanal**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
 - Abbildung des physikalischen Problems
- **Ergebnisse**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - Verweilzeitverteilung der Flüssigphase
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - Bewertung von kommerziellen CFD-Programmen
- **Zusammenfassung und Ausblick**

Numerische Vorstudien

- Stoffwerte im Experiment

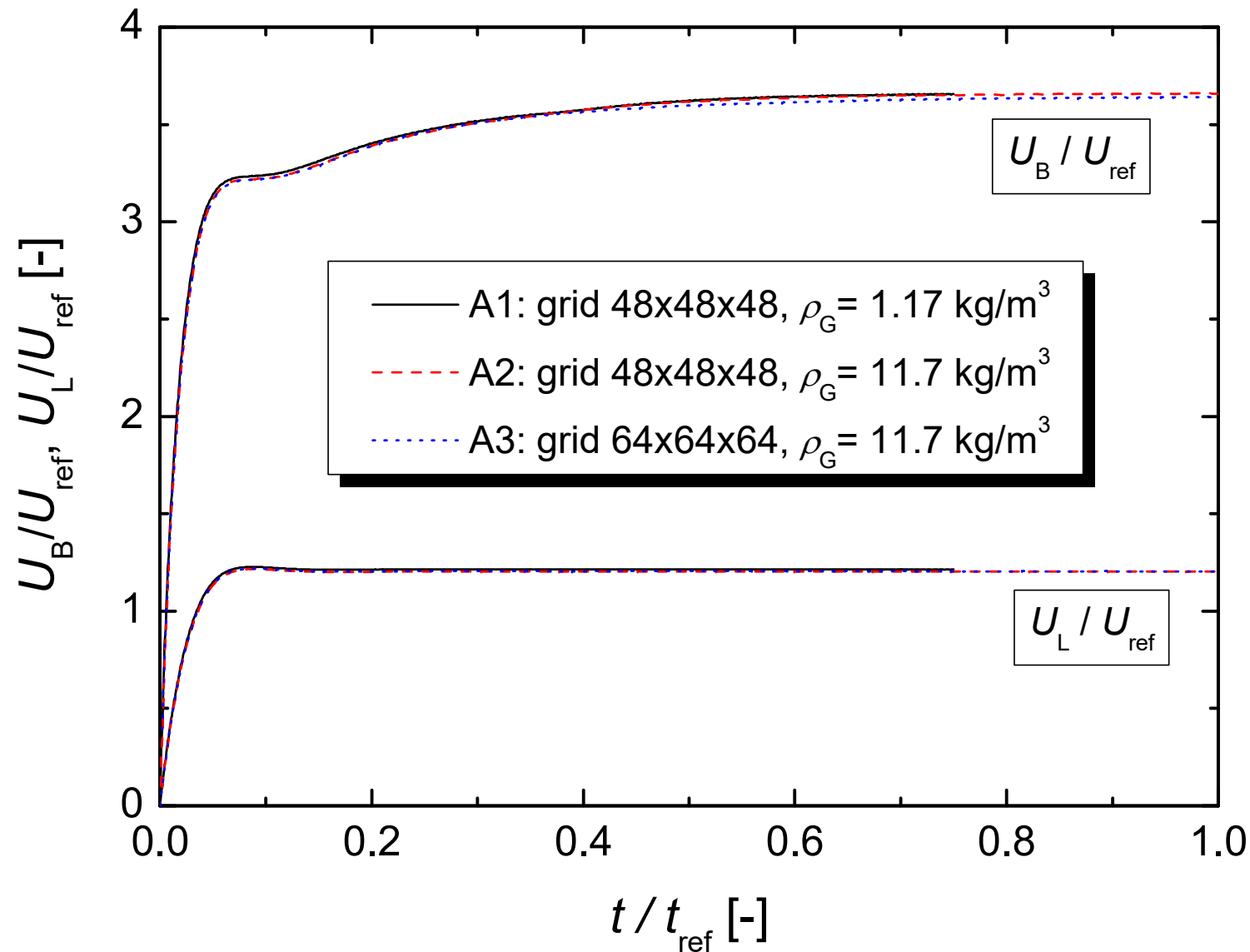
ρ_L	ρ_G	μ_L	μ_G	σ
957 kg/m ³	1,17 kg/m ³	0,048 Pa s	1,84×10 ⁻⁵ Pa s	0,022 N/m

- Simulationen für $L_{uc} / W = 1$

Fall	ρ_G [kg/m ³]	μ_G [m Pa s]	Gitter	$\Delta t / t_{ref}$ [-]
A1	1,17	0,0184	48 × 48 × 48	2,5 × 10 ⁻⁶
A2	11,7	0,184	48 × 48 × 48	2,5 × 10 ⁻⁵
A3	11,7	0,184	64 × 64 × 64	1,0 × 10 ⁻⁵

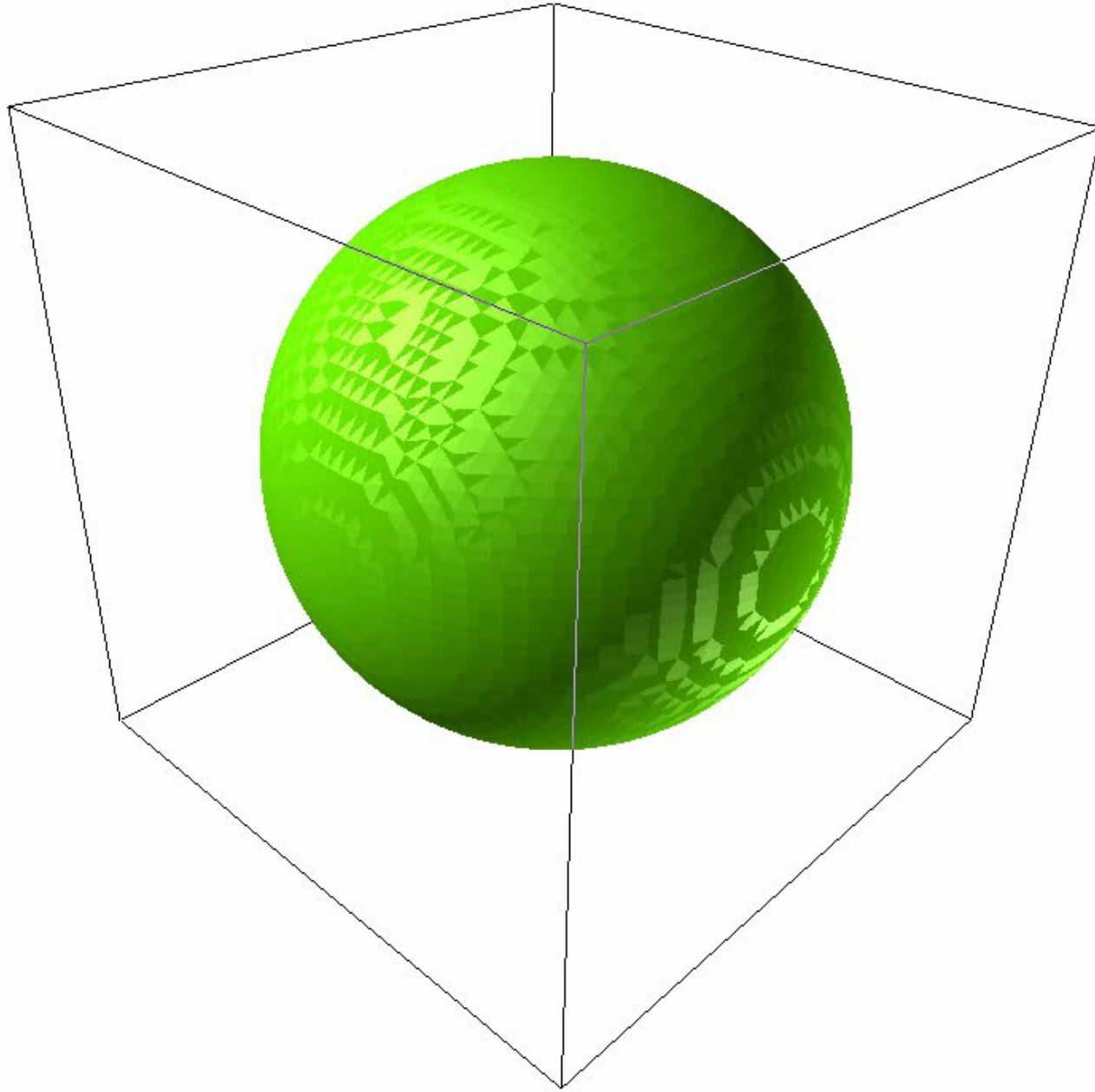
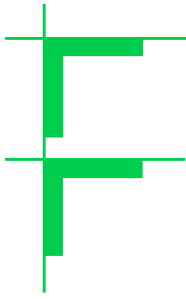
ρ_G und μ_G sind um Faktor 10 höher als bei Luft

Mittlere Geschwindigkeiten



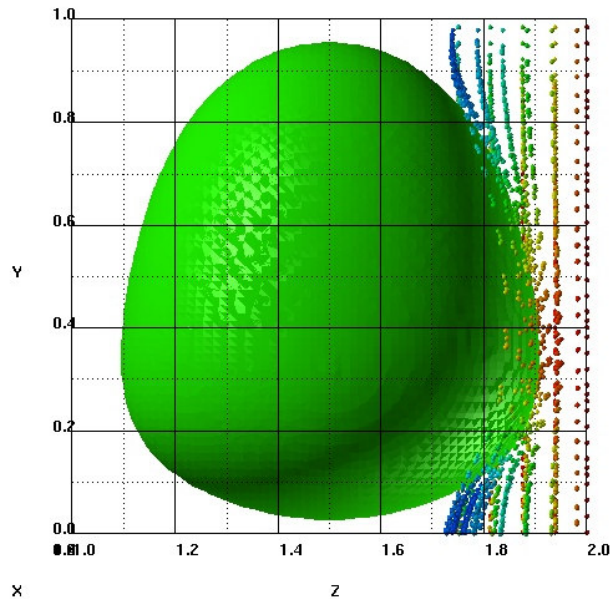
Simulationen für verschiedene Werte von L_{uc}

Fall	L_{uc} / W	Gebiet [-]	Gitter
A2	1	$1 \times 1 \times 1$	$48 \times 48 \times 48$
B	1,125	$1 \times 1,125 \times 1$	$48 \times 54 \times 48$
C	1,25	$1 \times 1,25 \times 1$	$48 \times 60 \times 48$
D	1,375	$1 \times 1,375 \times 1$	$48 \times 66 \times 48$
E	1,5	$1 \times 1,5 \times 1$	$48 \times 72 \times 48$
F	1,625	$1 \times 1,625 \times 1$	$48 \times 78 \times 48$
G	1,75	$1 \times 1,75 \times 1$	$48 \times 84 \times 48$
H	2	$1 \times 2 \times 1$	$48 \times 96 \times 48$

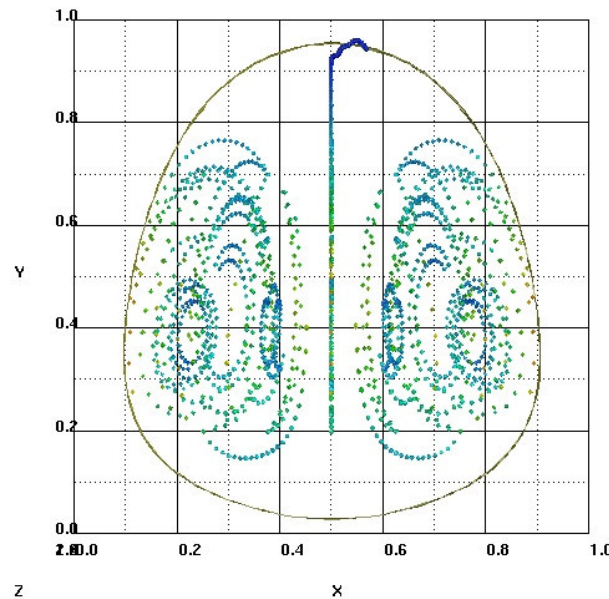


Fall A2

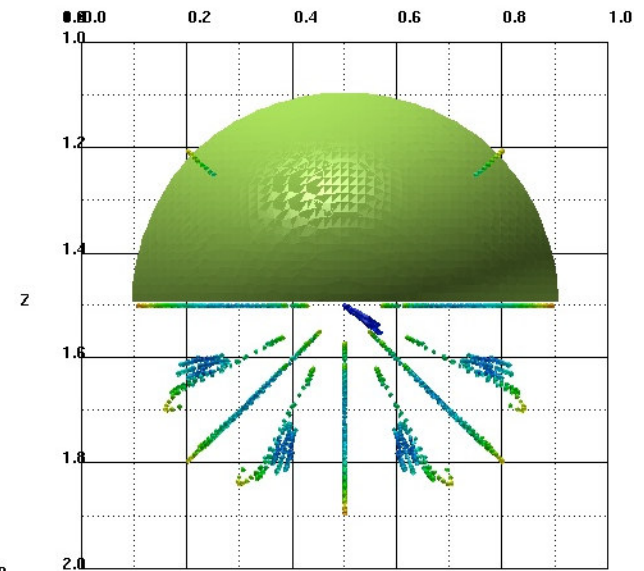
Blasenform und Bahnen von virtuellen Partikeln für Fall A2



Seitenansicht

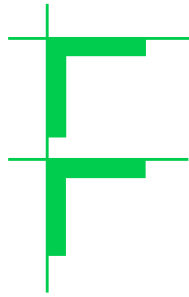


Seitenansicht



Draufsicht

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

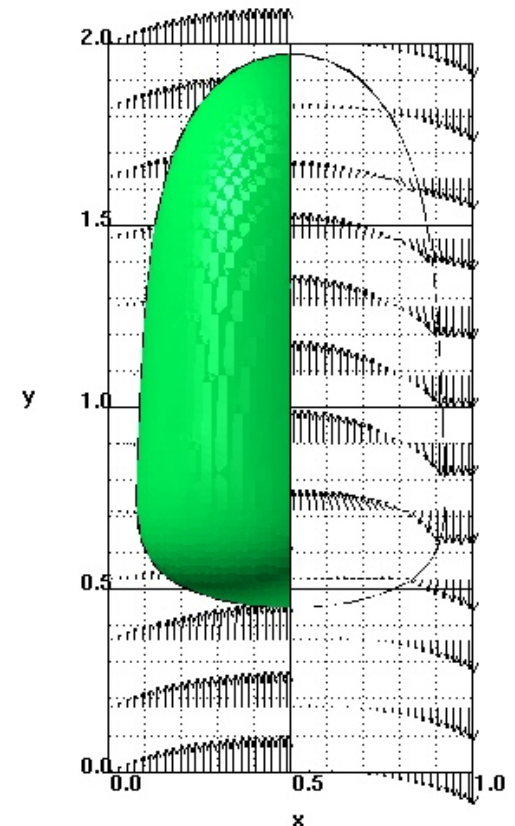
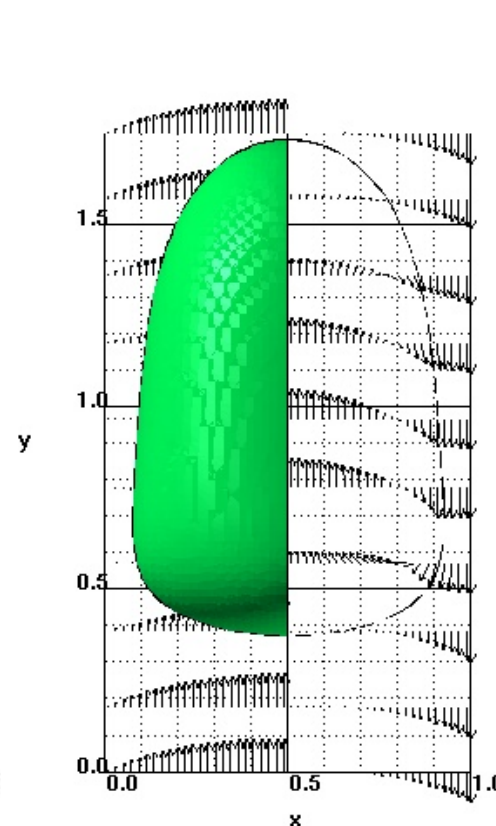
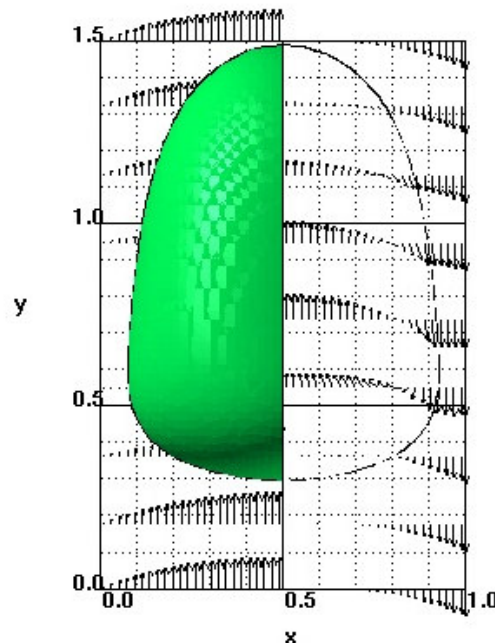
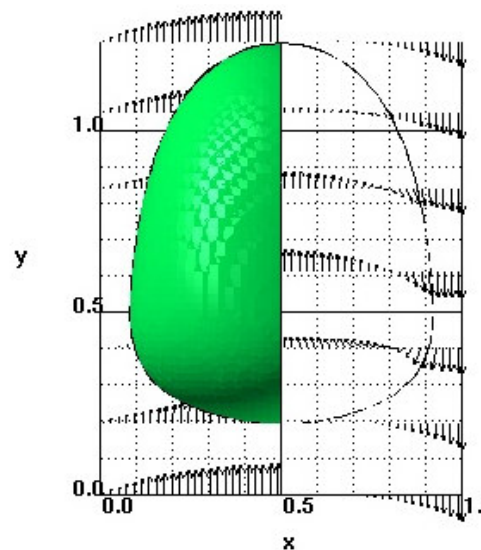
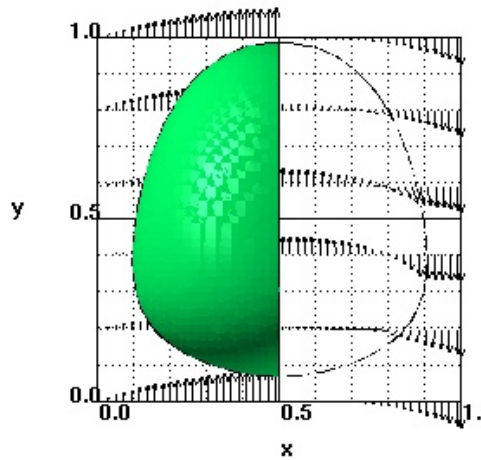


Blasenform und Geschwindigkeitsfeld für verschiedene Werte von L_{uc}

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

Dimensionsloses U_B

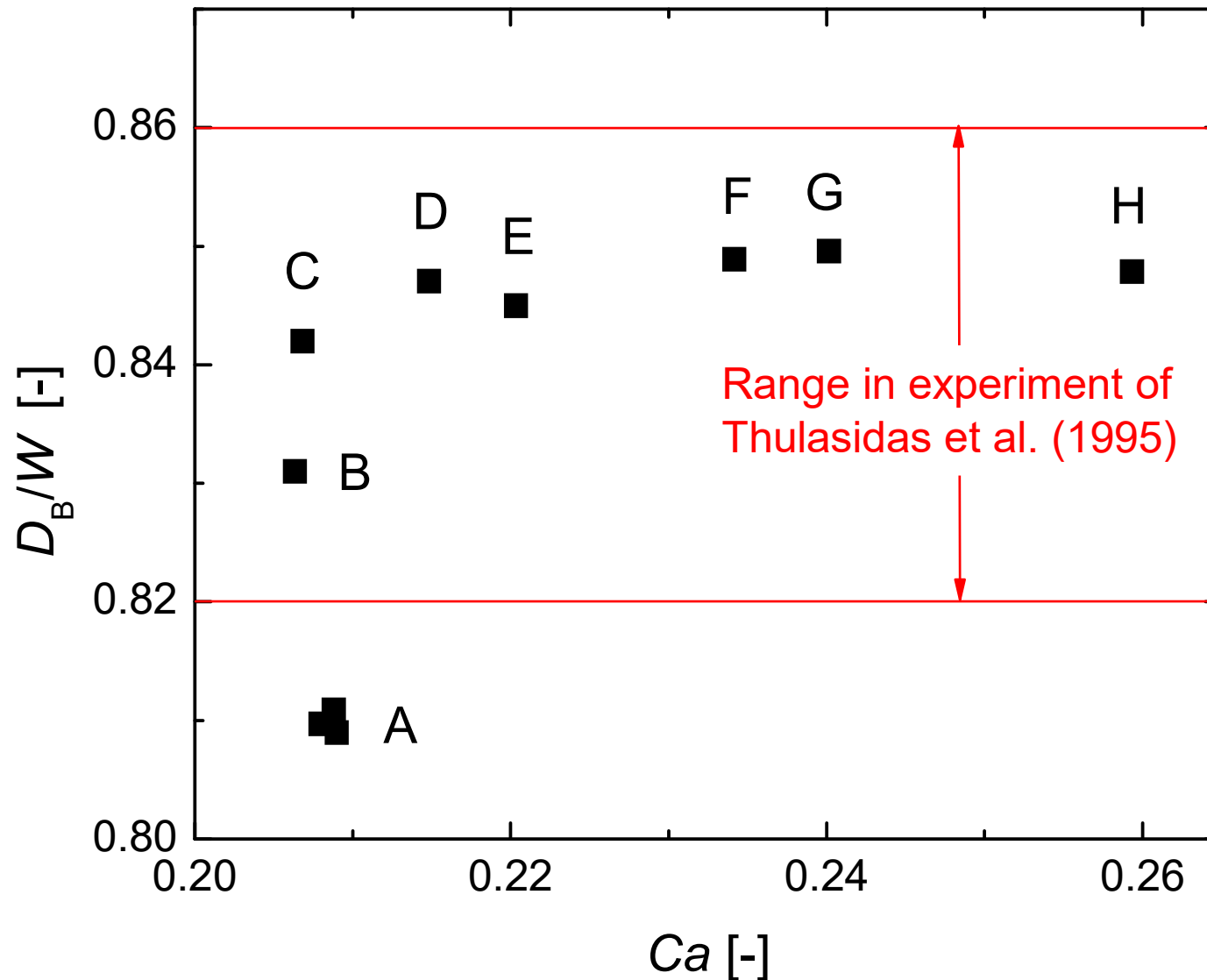
Relativgeschw.

Fall	L_{uc}/W	Ca_B	D_B / W	U_B/J_{ges}	$(U_B - J_{ges})/J_{ges}$
A	1	0,204	0,81	1,80	0,445
C	1,25	0,207	0,84	1,75	0,430
E	1,5	0,215	0,85	1,75	0,430
G	1,75	0,238	0,85	1,78	0,438
H	2	0,253	0,85	1,8	0,445
Experimentelle Daten*			als Funktion der Kapillar-Zahl $Ca_B \equiv \mu_L U_B / \sigma$		
		0,2 – 0,25	0,82 – 0,86	1,68 – 1,84	0,435–0,475

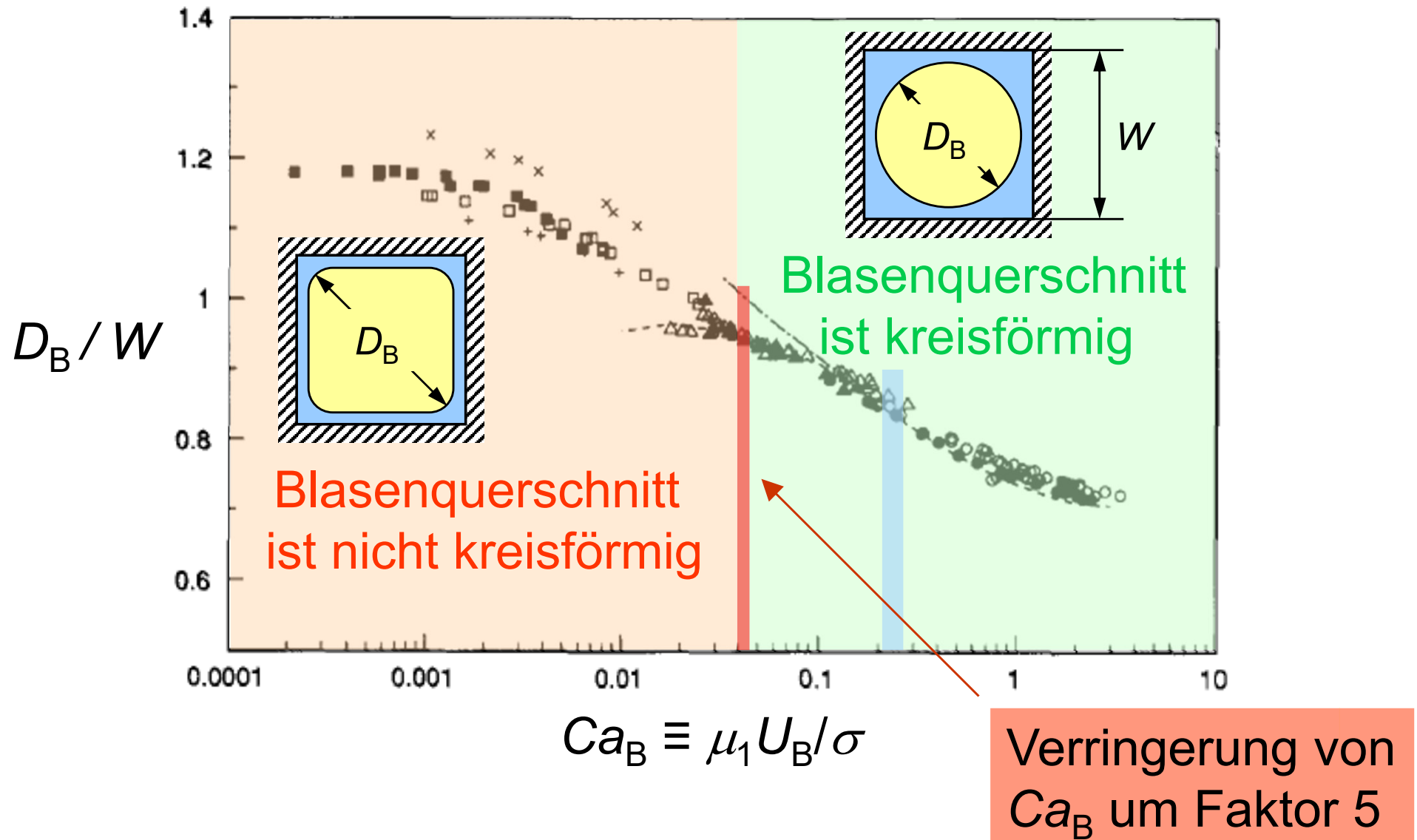


* Thulasidas, Abraham, Cerro, Chem. Eng. Science 50 (1995) 183-199

Dimensionsloser Blasendurchmesser

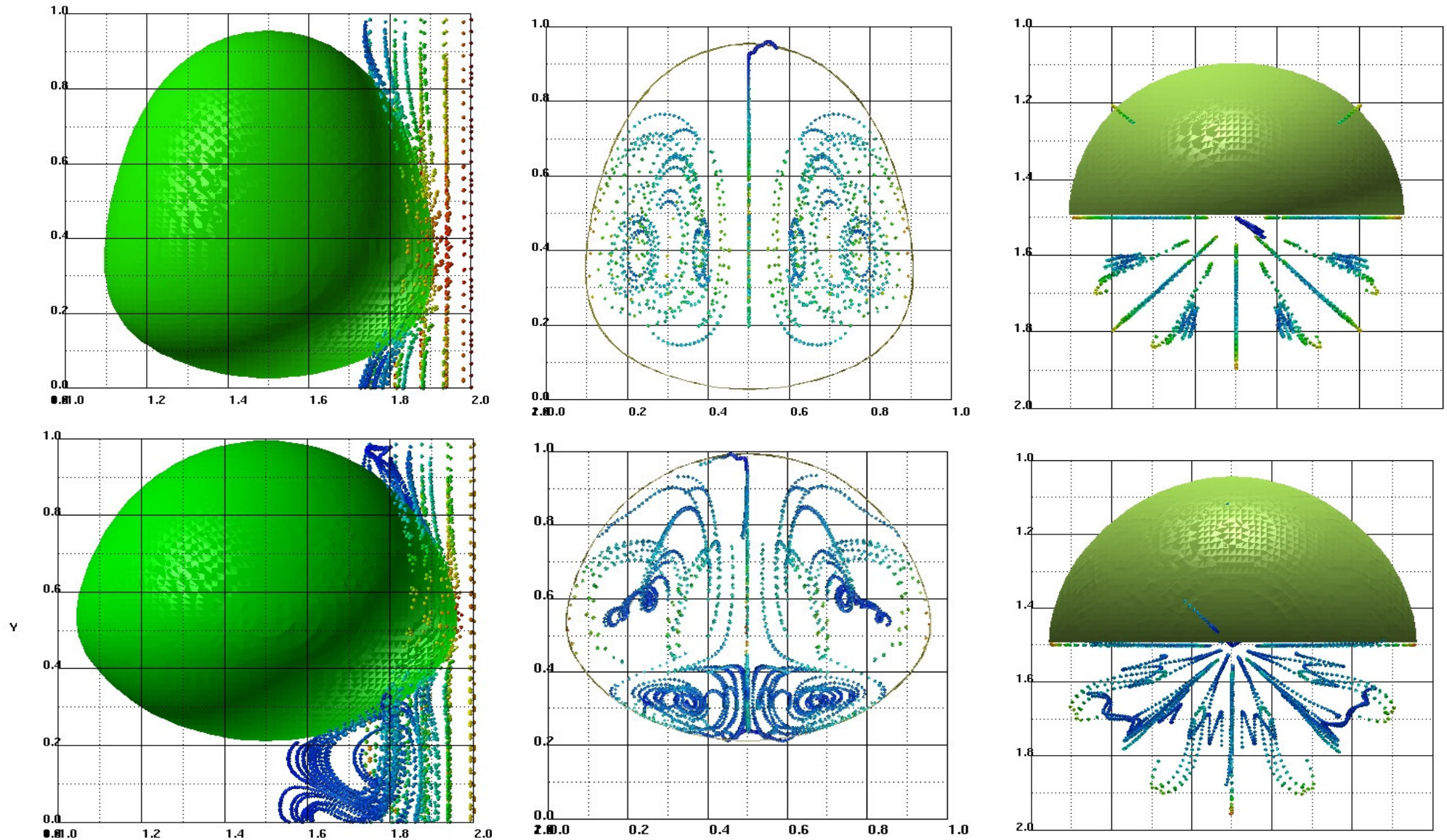


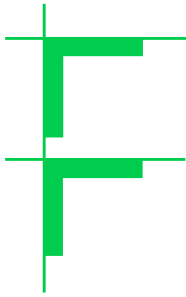
Blasendurchmesser über Diagonale*



Einfluss der Kapillar-Zahl*

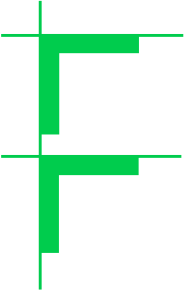
obere Reihe: $Ca_B = 0,205$; untere Reihe: $Ca_B = 0,043$





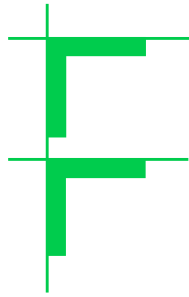
Gliederung des Vortrags

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerische Simulation der Taylor-Strömung im Minikanal**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
 - Abbildung des physikalischen Problems
- **Ergebnisse**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - **Verweilzeitverteilung der Flüssigphase**
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - Bewertung von kommerziellen CFD-Programmen
- **Zusammenfassung und Ausblick**



Auswertung 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

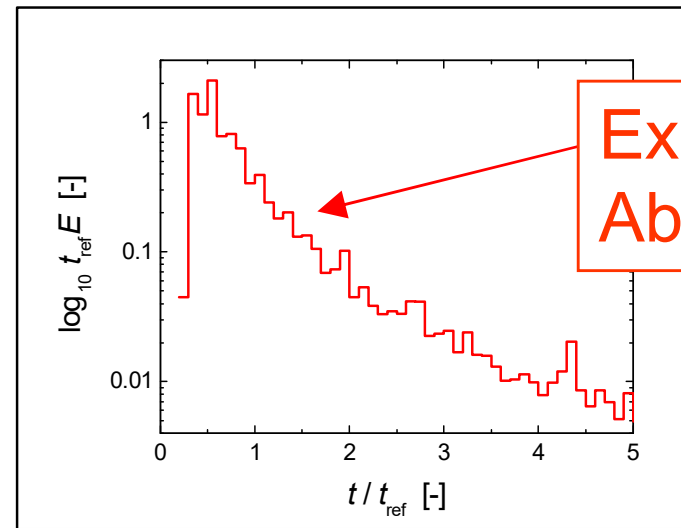
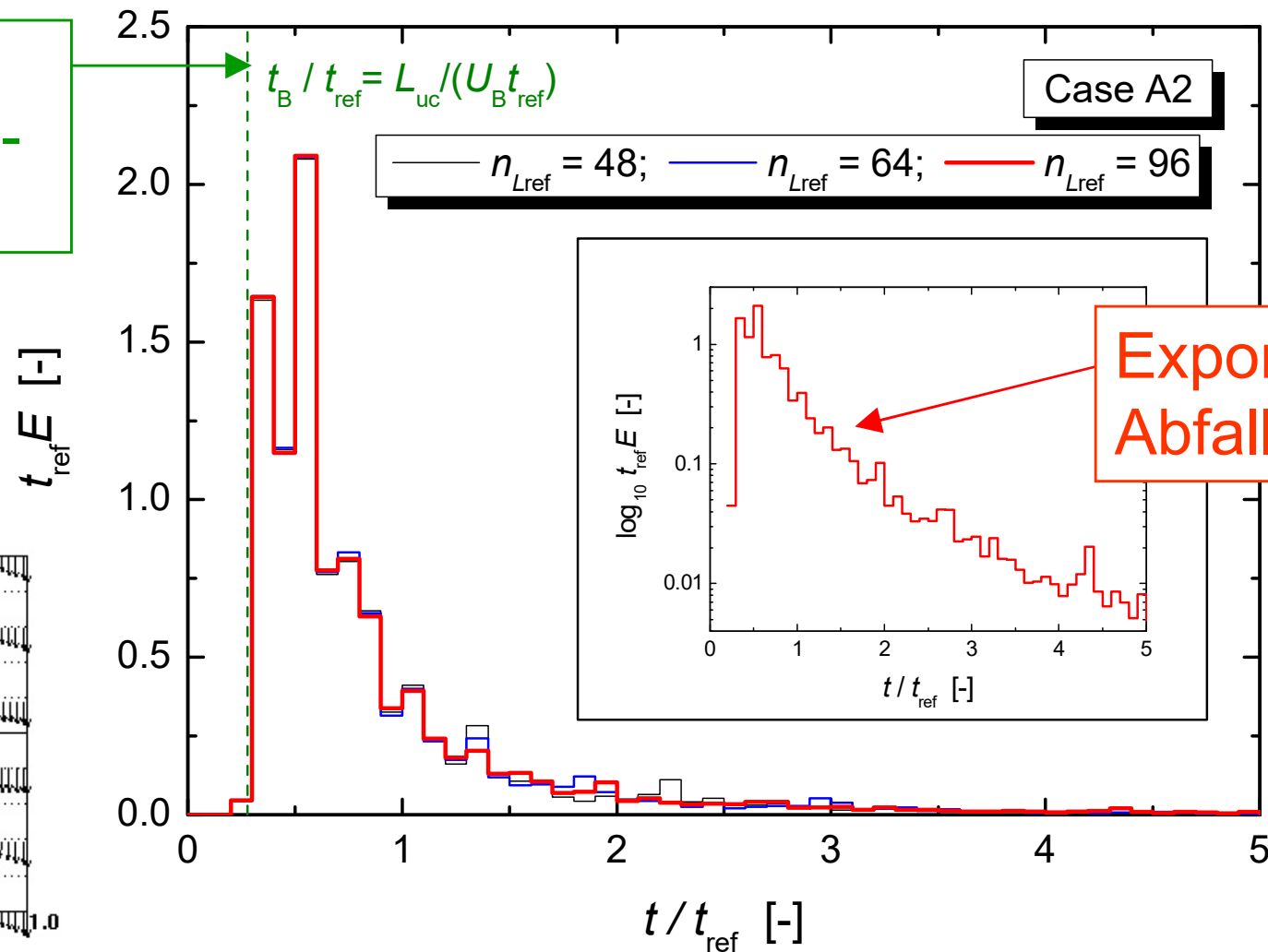
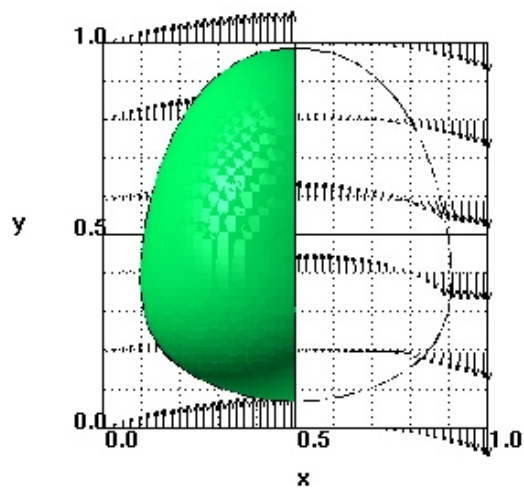


Grundidee der neuen Methode*

- Auswertung der Verweilzeitverteilung als Post-Processing:
 - Verwendung des zuvor berechneten voll entwickelten Strömungsfeldes zu einem bestimmten Zeitpunkt
- Initialisierung virtueller Partikel in regelmäßigem Abstand in Gitterzellen, die vollständig mit Flüssigkeit gefüllt sind
- 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
- Geeignete Normierung der Häufigkeitsverteilung aller Partikel liefert die Verweilzeitverteilung

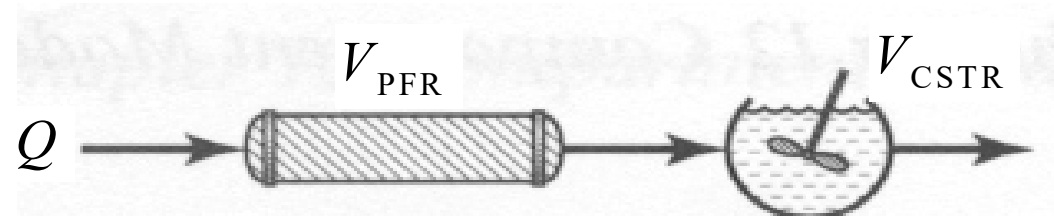
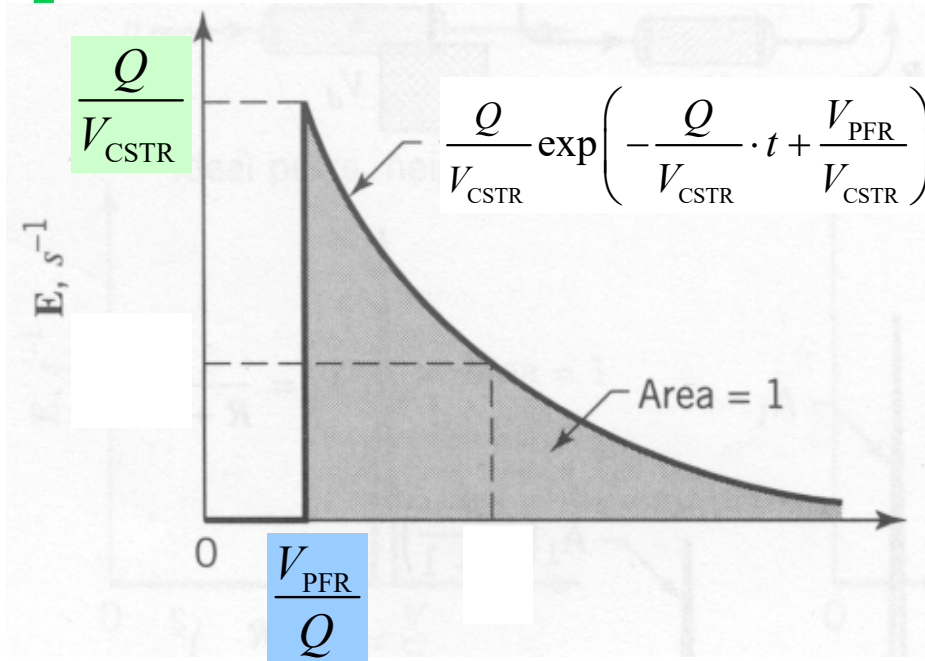
RTD für Blasenströmung (Fall A2)

Blasen-
Durchbruch-
Zeit t_B



Exponentieller
Abfall

Ersatz-Modell (einphasig): Ideales Strömungsrrohr (PFR) und idealer Rührkessel (CSTR) in Serienschaltung



PFR = Blase
CSTR = Flüssigkeits-Slug

$$\frac{V_{PFR}}{Q} = \bar{t}_{PFR} \cong t_B = \frac{L_{uc}}{U_B}$$

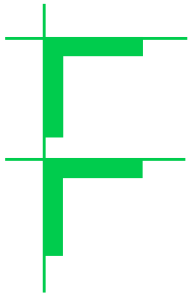
$$\frac{Q}{V_{CSTR}} = \frac{1}{\bar{t}_{CSTR}}$$

Modell 1: $\bar{t}_{CSTR} \cong \frac{L_{uc}}{U_{Slug}} = \frac{L_{uc}}{J_{ges}} = \frac{L_{uc}}{\varepsilon U_B + (1-\varepsilon)U_L}$

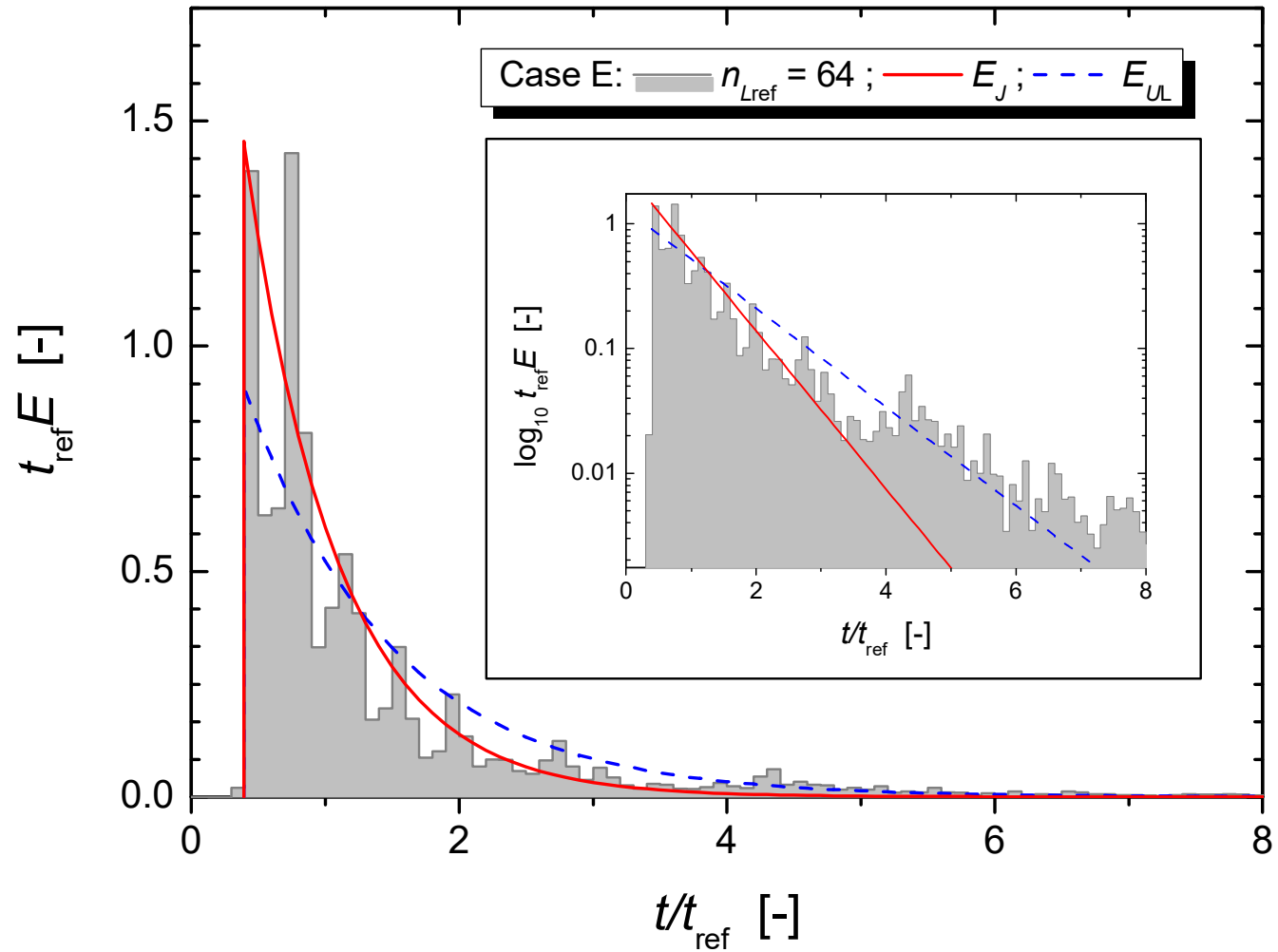
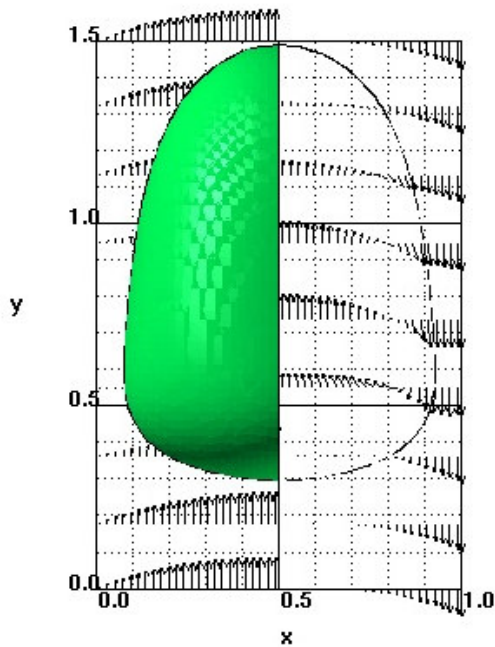
$$E_J = \begin{cases} 0 & \text{für } t < L_{uc}/U_B \\ \frac{J}{L_{uc}} \exp\left(-\frac{J}{L_{uc}} \cdot t + \frac{J}{U_B}\right) & \text{für } t \geq L_{uc}/U_B \end{cases}$$

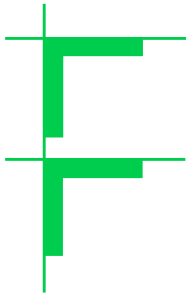
Modell 2: $\bar{t}_{CSTR} \cong \frac{L_{uc}}{U_L}$

$$E_{U_L} = \begin{cases} 0 & \text{for } t < L_{uc}/U_B \\ \frac{U_L}{L_{uc}} \exp\left(-\frac{U_L}{L_{uc}} \cdot t + \frac{U_L}{U_B}\right) & \text{for } t \geq L_{uc}/U_B \end{cases}$$



Vergleich der Ersatz-Modelle für Fall E



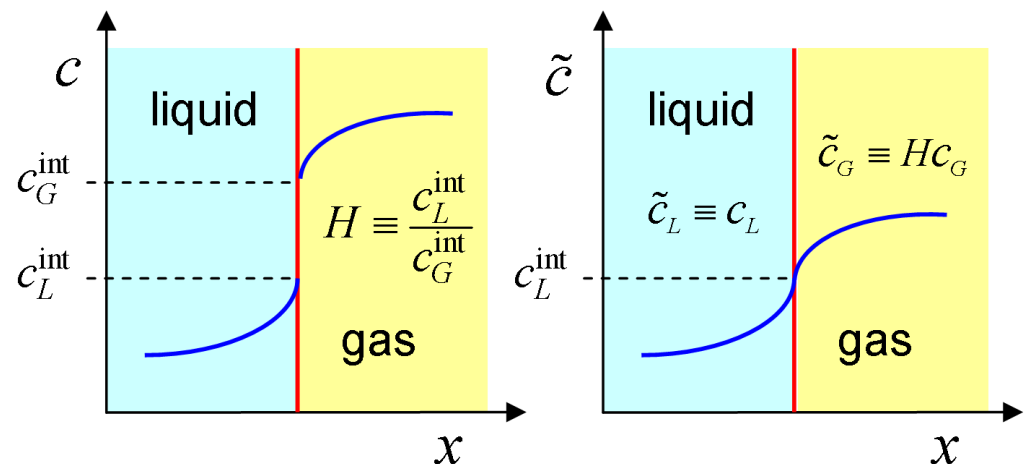


Gliederung des Vortrags

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerische Simulation der Taylor-Strömung im Minikanal**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
 - Abbildung des physikalischen Problems
- **Ergebnisse**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - Verweilzeitverteilung der Flüssigphase
 - **Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion**
 - Bewertung von kommerziellen CFD-Programmen
- **Zusammenfassung und Ausblick**

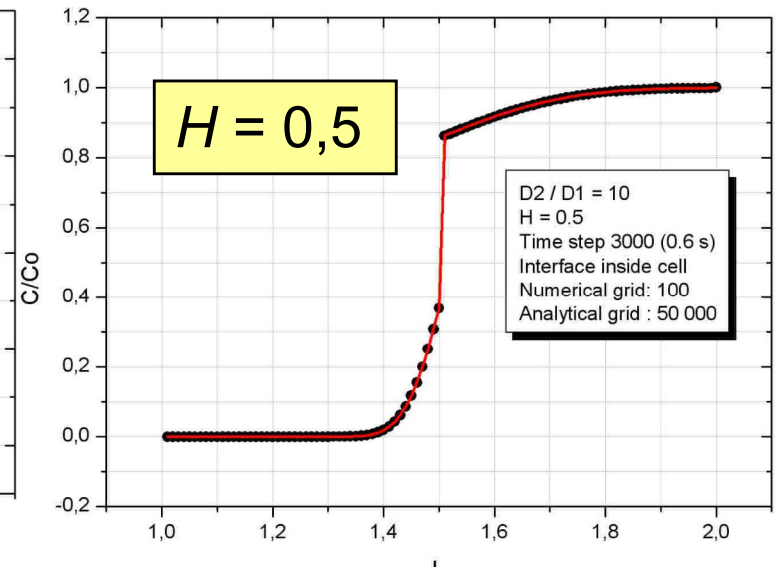
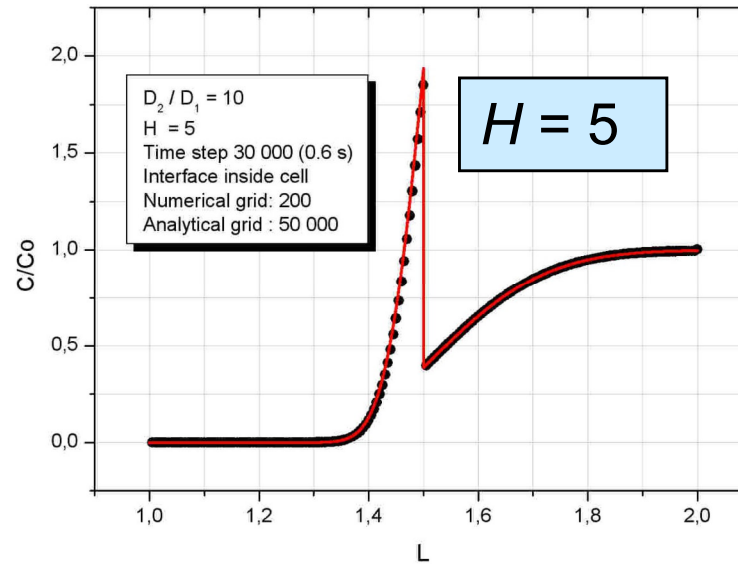
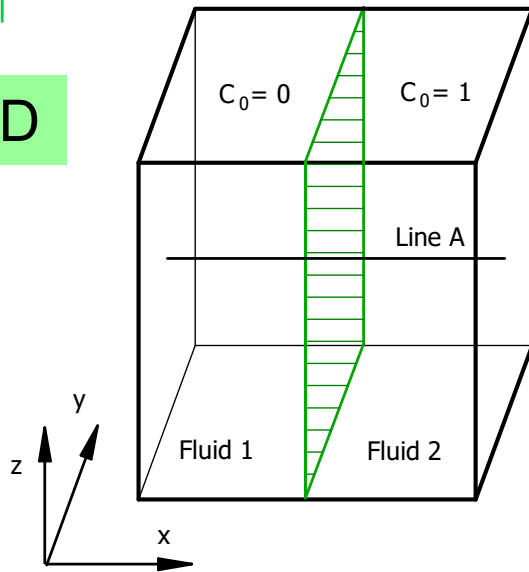
Stofftransport und chemische Reaktion

- Methodische Erweiterung von TURBIT-VOF*
 - Transportgleichung für eine/mehrere chemische Spezies
 - Annahmen:
 - keine Rückwirkung auf die Hydrodynamik
 - Konzentrationen an der Phasengrenzfläche sind im Gleichgewicht
- Numerische Problematik
 - Konzentration an Phasengrenzfläche ist i.A. unstetig
 - Transformation von c in ein stetiges Feld $\tilde{c}$ mit Hilfe der Henry-Zahl

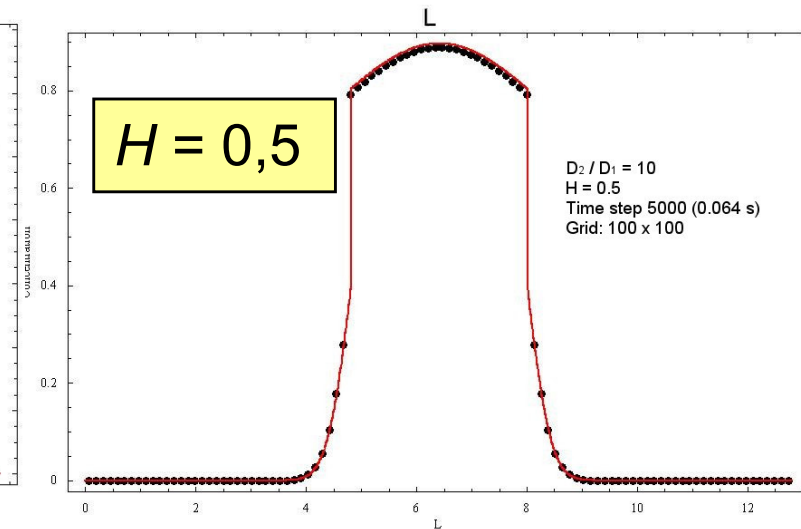
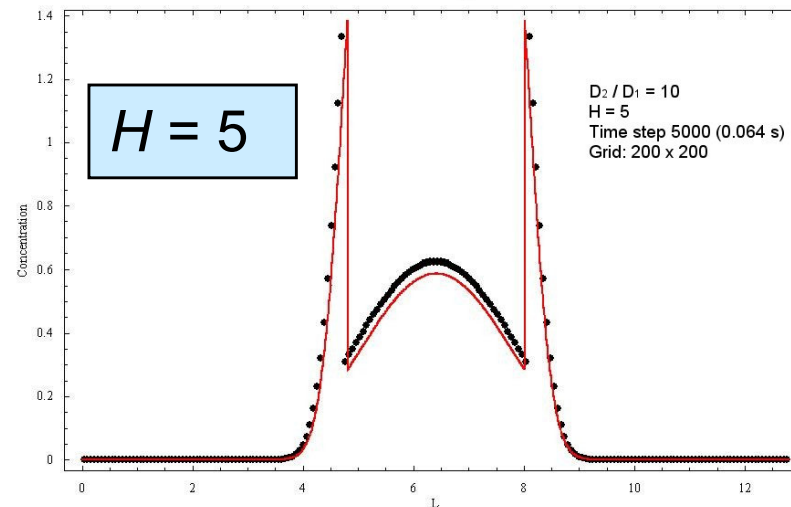
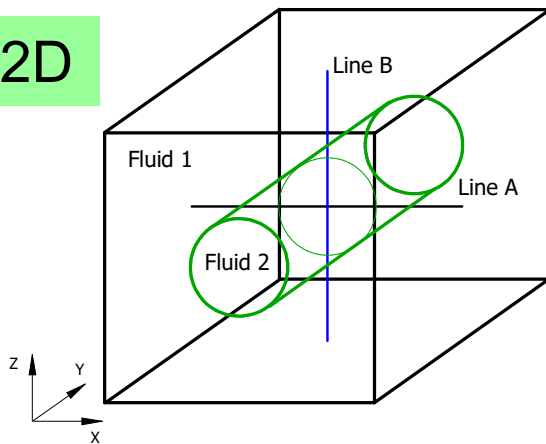


Validierung für diffusiven Stoffübergang

1D



2D



- TURBIT-VOF; — analytische Lösung (Crank, 1994) für 1D und numerische Lsg. von (Bothe et al., 2004) für 2D

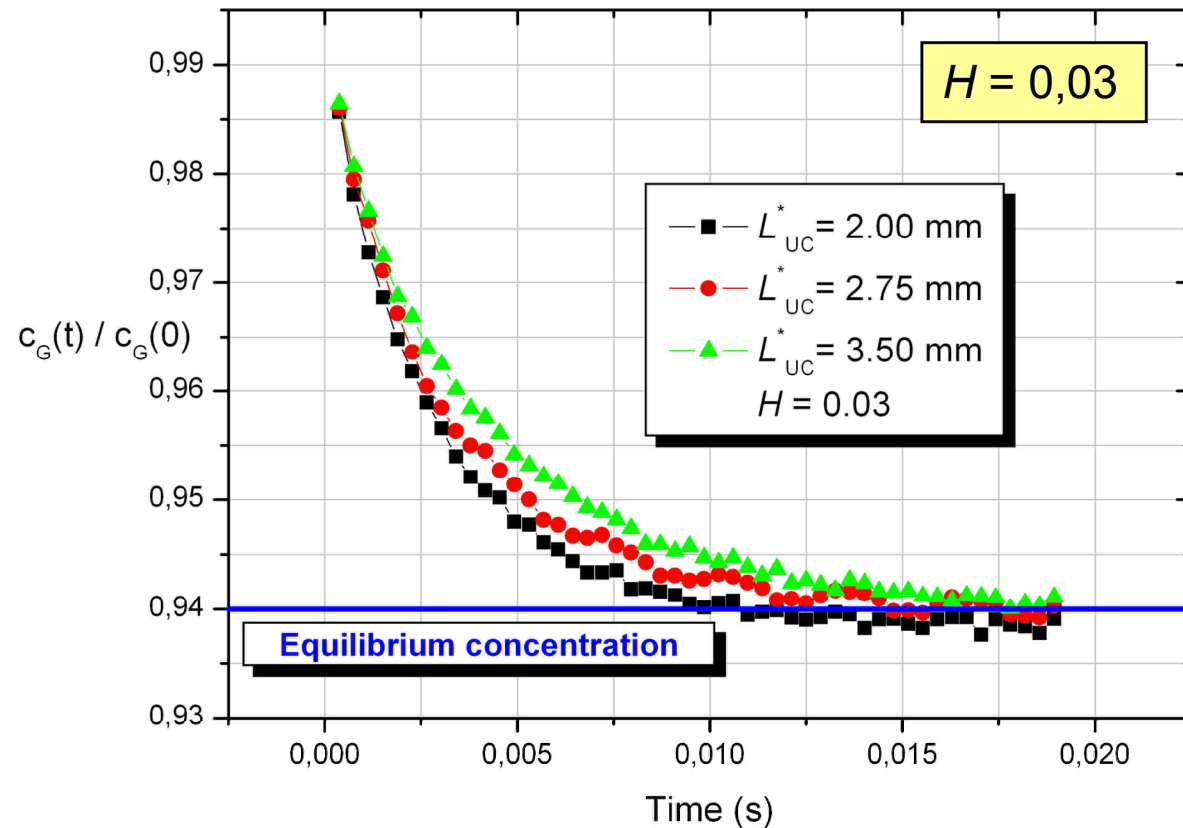
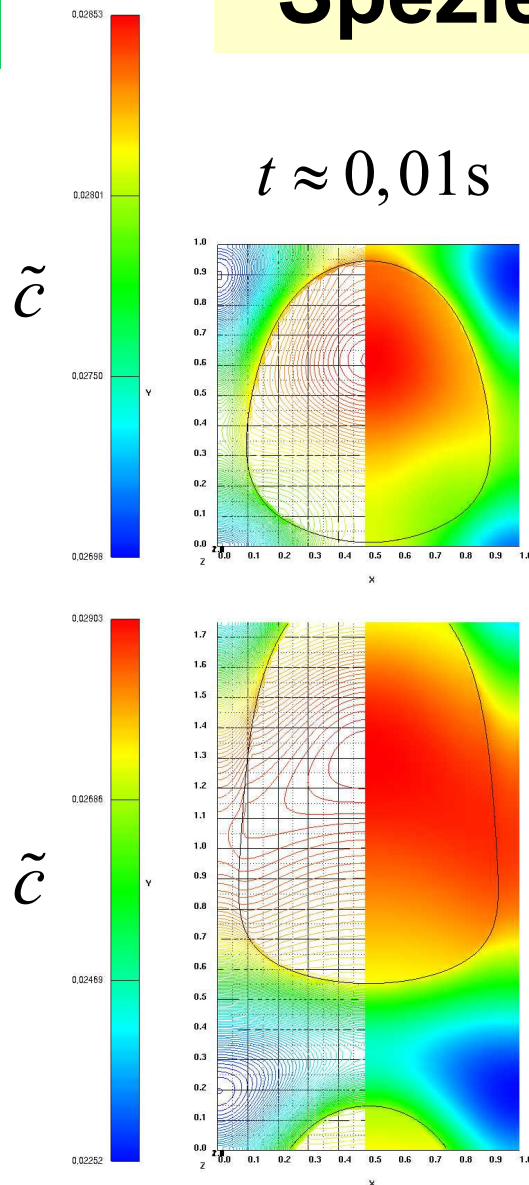
Stoffübergang in Taylor-Strömung

- Betrachtung eines artifiziellen Systems
 - Hydrodynamik: Gasphase = Luft, Flüssigphase = Silikonöl
 - Stofftransport: O_2 in Wasser, $D_G = 19,16 \times 10^{-6}$
 - Realistischer Wert für Diffusivität D_L in Flüssigkeit bewirkt
 - sehr dünne Konzentrationsgrenzschicht auf der Flüssigkeitsseite der Phasengrenzfläche, die numerisch nicht aufgelöst werden kann
 - sehr langsame Transportvorgänge und damit hohe Rechenzeiten
 - Diffusivität D_L wird um ca. den Faktor 30 000 erhöht

k_{Hmg} [m/s]	k_{Htg} [1/s]	H	D_L [m ² /s]	D_G [m ² /s]	Re_B	Sc
50	1500	0,03 and 3	$62,24 \times 10^{-6}$	$19,16 \times 10^{-6}$	10	0.8

- Betrachtung von zwei verschiedenen Werten der Henry-Zahl
 - $H = 0,03$ (Wert von O_2 in Wasser)
 - $H = 3$ (Wert von Methylchlorid CH_3Cl in Wasser)

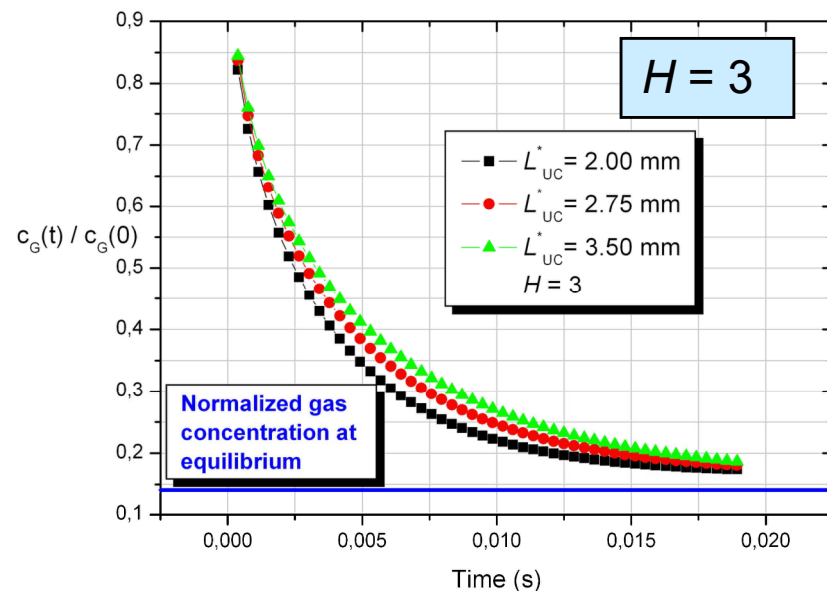
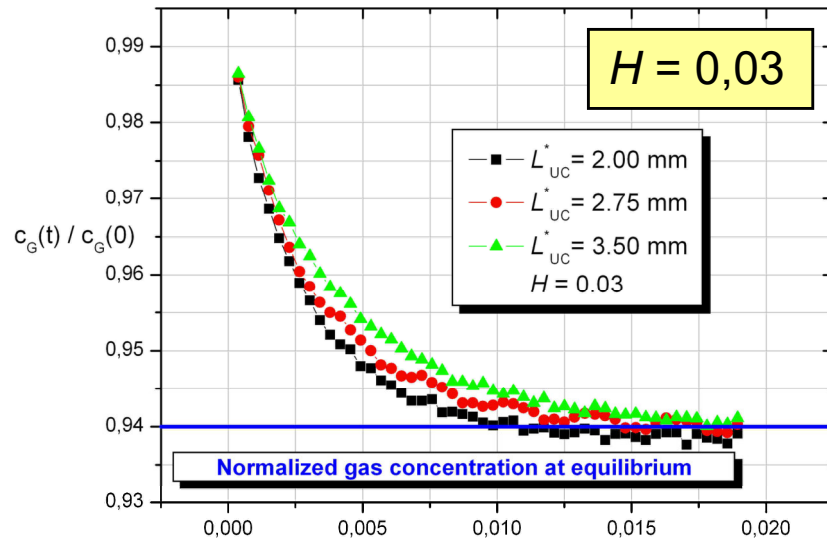
Stoffübertragung einer chemischen Spezies von der Blase in die Flüssigkeit*



Normierte Konzentration
in der Gasphase im
Gleichgewichtszustand

$$\frac{c_G^{eq}}{c_G^0} = \frac{1}{1 + H(1/\varepsilon - 1)}$$

Einfluss der Länge der Einheitszelle

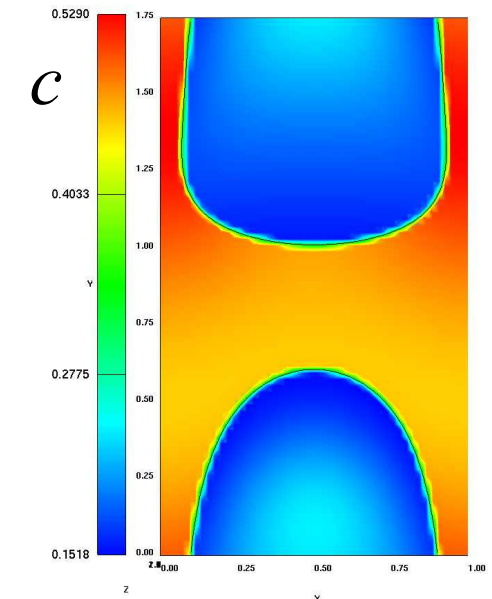
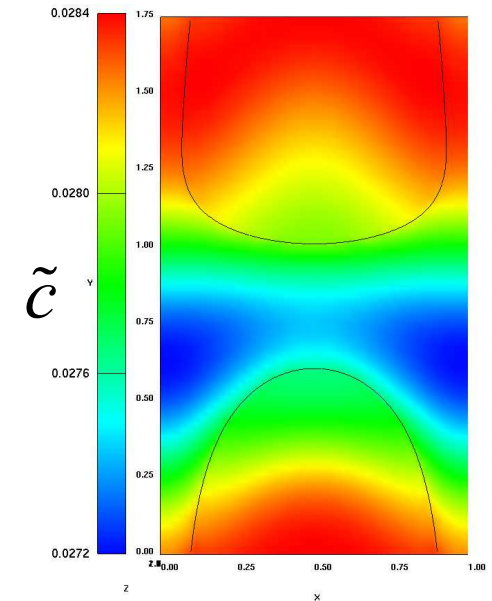


Normierte Konzentration in der Gasphase im Gleichgewichtszustand

$$\frac{c_G^{eq}}{c_G^0} = \frac{1}{1 + H(1/\varepsilon - 1)}$$

- Der Flüssigkeitsfilm ist gesättigt
- Der Stofftransport erfolgt hauptsächlich über Spitze und Boden der Blase in Übereinstimmung mit exp. Ergebnissen von Bercic & Pintar (1997)

Konzentration in vertikaler Mittelebene

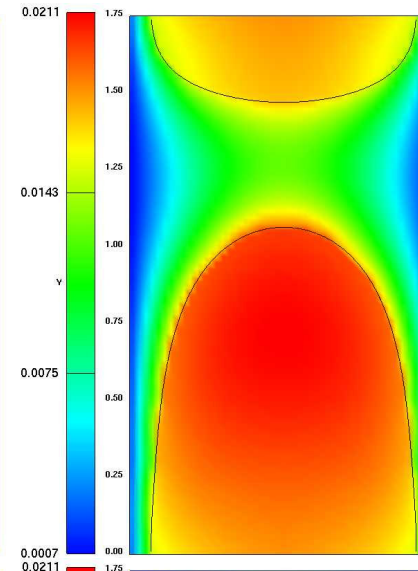
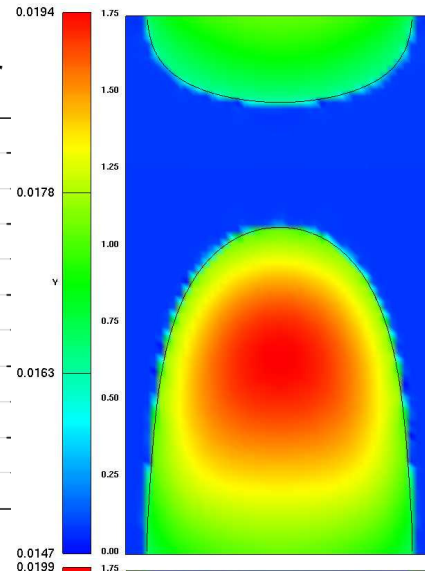
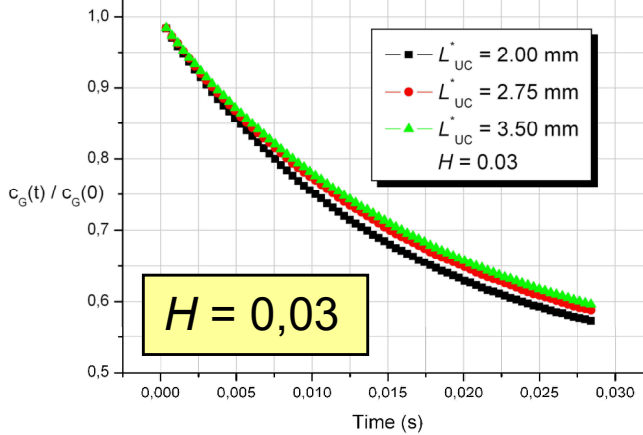


Einfluss von L_{uc} auf Reaktion 1. Ordnung Homogen - Heterogen

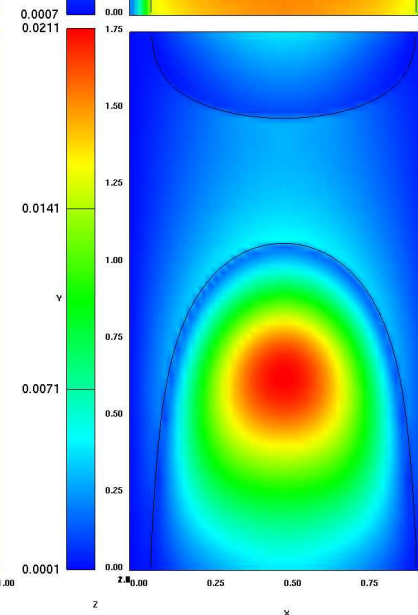
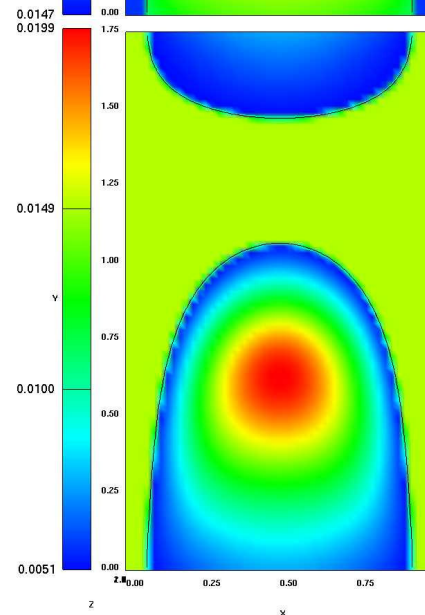
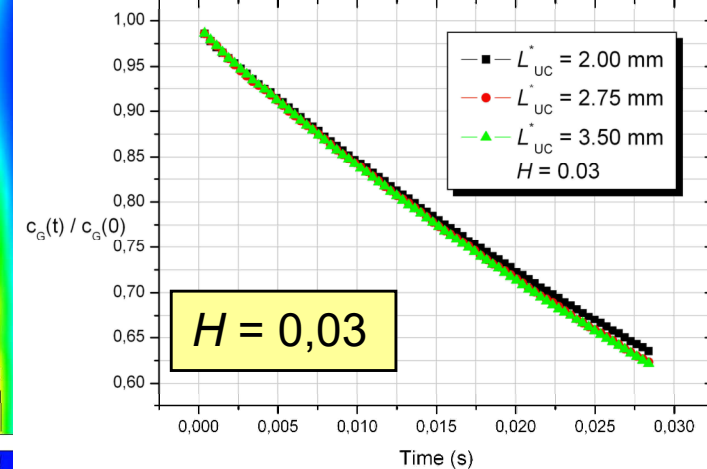
Da = 96

Da = 1606

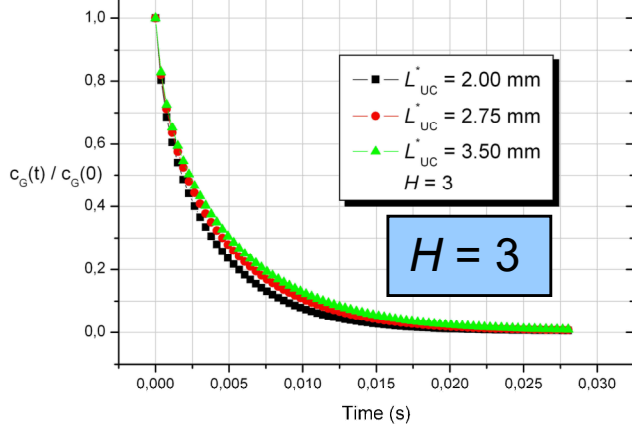
Influence of unit cell length on mass transfer with homogeneous chemical reaction



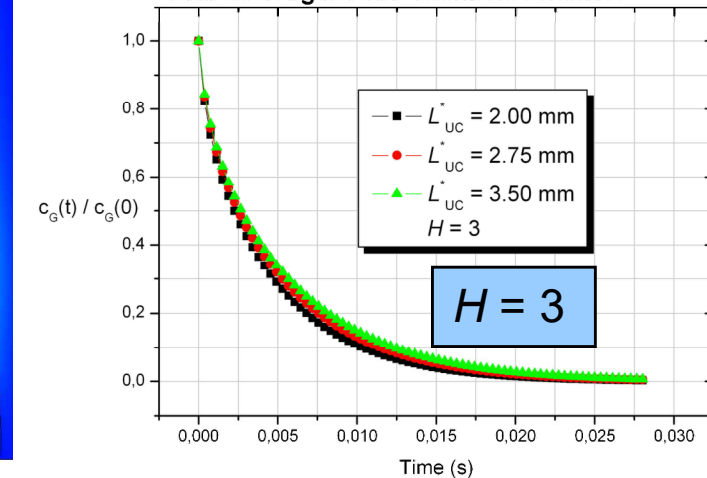
Influence of unit cell length on mass transfer with heterogeneous chemical reaction

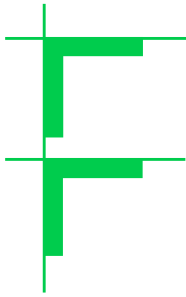


Influence of unit cell length on mass transfer with homogeneous chemical reaction



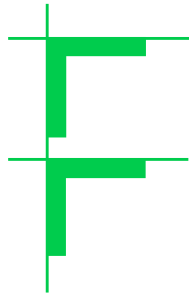
Influence of unit cell length on mass transfer with heterogeneous chemical reaction





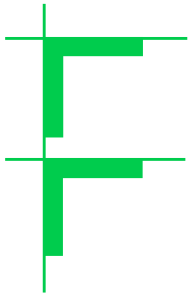
Gliederung des Vortrags

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerische Simulation der Taylor-Strömung im Minikanal**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
 - Abbildung des physikalischen Problems
- **Ergebnisse**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - Verweilzeitverteilung der Flüssigphase
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - **Bewertung von kommerziellen CFD-Programmen**
- **Zusammenfassung und Ausblick**



Bewertung von kommerziellen Rechenprogrammen

- TURBIT-VOF ist beschränkt auf Einzelkanal mit rechteckigem Querschnitt und kartesisches Gitter
- Komplexere Untersuchungen für mehrere Kanäle, die über Ein- und Austrittsplenum gekoppelt sind, erfordern den Einsatz kommerzieller CFD-Programme
- Ziel: Bewertung der VOF-Methoden in den kommerziellen Codes CFX, FLUENT und STAR-CD durch Vergleich mit TURBIT-VOF Ergebnissen

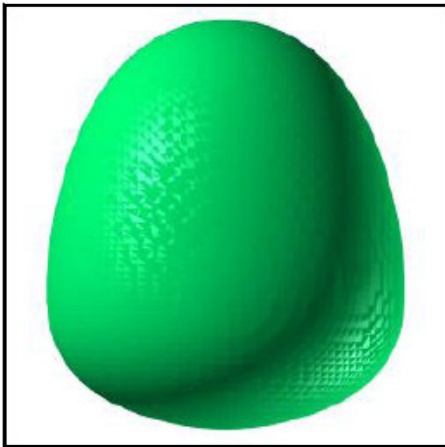


VOF-Methoden in den Codes

- TURBIT-VOF
 - Rekonstruktion der Phasengrenzfläche und lokale Approximation als Ebene
- CFX 10.0 und STAR-CD 4.0
 - Keine Rekonstruktion der Phasengrenzfläche sondern Lösung der f -Gleichung mit Differenzenverfahren
- FLUENT 6.2
 - Rekonstruktion der Phasengrenzfläche und lokale Approximation als Ebene, oder
 - Keine Rekonstruktion der Phasengrenzfläche sondern Lösung der f -Gleichung mit Differenzenverfahren

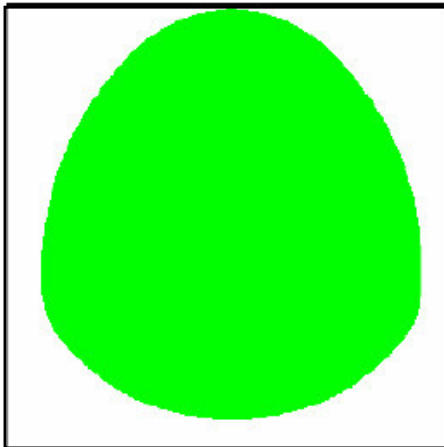
Ergebnisse*

TURBIT-VOF

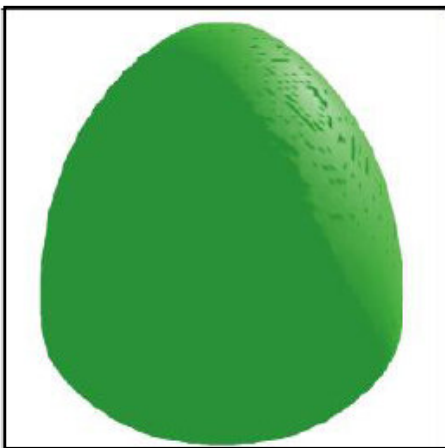


a)

STAR-CD

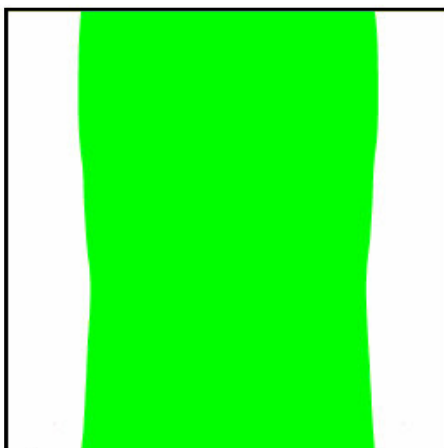


b)



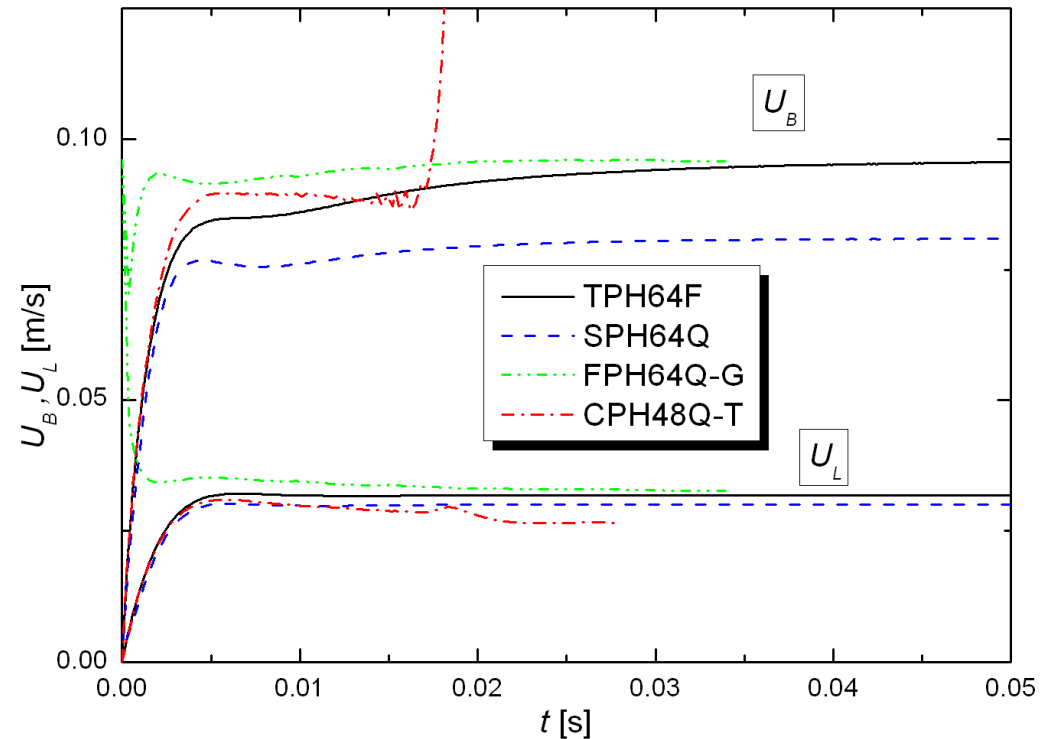
c)

FLUENT

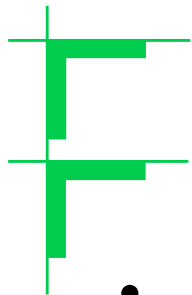


d)

CFX

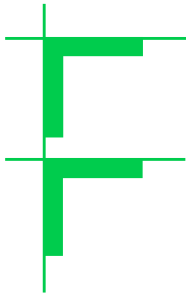


Nur VOF-Methode mit Rekonstruktion liefert in allen Fällen physikalisch sinnvolle und konsistente Ergebnisse



Zusammenfassung

- Direkte numerische Simulation von Taylor-Blasen
 - Quadratischer vertikaler Mini-Kanal (2 mm Kantenlänge)
 - Untersuchung des Einflusses der Länge der Einheitszelle
 - Gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten aus Literatur
- Großer Einfluss der Kapillar-Zahl auf Blasenform und Strömung in der Blase und im Flüssigkeits-Slug
- Neue Auswerte-Methode für die Verweilzeitverteilung und Entwicklung eines Ersatz-Modelles
- Untersuchung von Stofftransport ohne/mit chemischer Reaktion 1. Ordnung für ein artifizielles System
- Bewertung von kommerziellen Rechenprogrammen für DNS von mehrphasigen Strömungen in kleinen Kanälen



Ausblick (I)

- Aktuelle und geplante Arbeiten
 - Kleinere Werte der Kapillar-Zahl, so dass die Blasenform nicht mehr rotationssymmetrisch ist
 - Stabilität der Strömung (Blasen-Koaleszenz?)
 - Bestimmung der Verweilzeitverteilung für den Reaktor durch Faltung der RTD für die Einheitszelle
 - Erweiterung auf nicht-periodische Randbedingungen
- Generelle Problematik:
 - Fehlende Anbindung an experimentelles Programm
 - Experimentelle Daten zur detaillierten Validierung

Ausblick (II)

Mittelfristiges Ziel:

Detaillierte Simulation der Hydrodynamik von Blasenströmungen mit Stofftransport mehrerer Spezies und optionaler einfacher chemischer Reaktion mit Wärmetönung und des entsprechenden Wärmetransports inklusive Rückkopplung auf die Hydrodynamik

