

Numerische Untersuchungen von Transportphänomenen für Gas-Flüssig- Strömungen in einem Minikanal

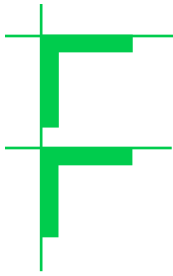
Dr.-Ing. Martin Wörner

Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Reaktorsicherheit

Seminar für Strömungsmechanik

Fachbereich Bio- und Chemieingenieurwesen, Universität Dortmund

6. Februar 2007

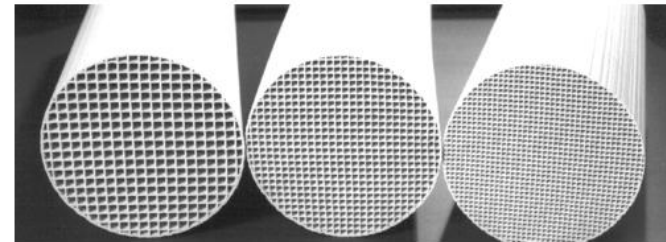


Gliederung des Vortrags

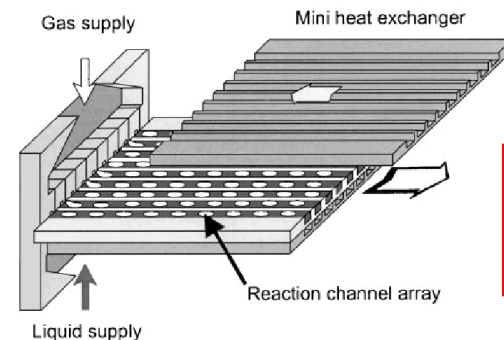
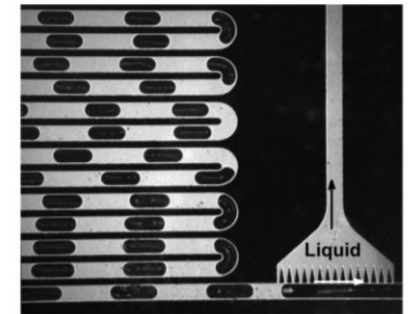
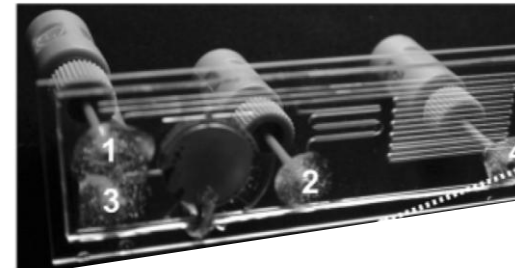
- **Einleitung und Motivation**
- **Numerische Simulation der Gas-Flüssig-Strömung**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
 - Abbildung des physikalischen Problems
- **Ergebnisse für einen quadratischen Minikanal**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - Bewertung von kommerziellen CFD-Programmen
- **Zusammenfassung und Ausblick**

Blasenströmung in kleinen Kanälen

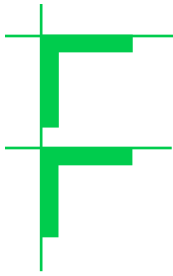
- Technische Anwendungen
 - Monolith-Reaktor mit katalytischen Wänden
 - Mikro-Kanal Netzwerk (MIT)
 - Mikro-Blasensäule (IMM)
- Vorteile
 - Gute Durchmischung der Flüssigkeit
 - Reduzierte axiale Dispersion
 - Effiziente Stoffübertragung über die Phasengrenzfläche



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

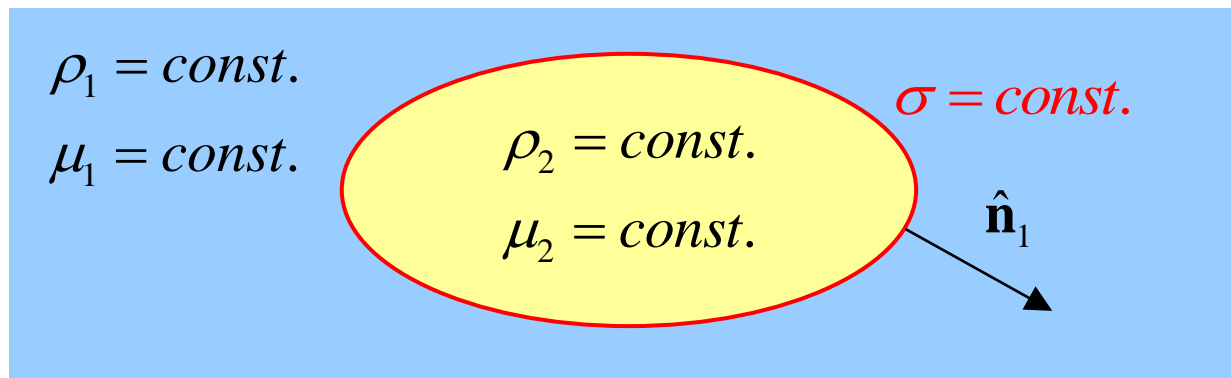


Gliederung des Vortrags

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerische Simulation der Gas-Flüssig-Strömung**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
 - Abbildung des physikalischen Problems
- **Ergebnisse für einen quadratischen Minikanal**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - 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)

Dimensionslose Grundgleichungen in Ein-Feld-Formulierung

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

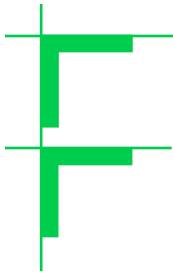
$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot f \mathbf{u}_m = 0$$

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

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

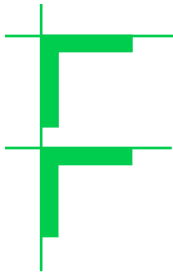
$$\mathbf{u}_m \equiv \frac{1}{U_{\text{ref}}^*} \frac{f \rho_1^* \mathbf{u}_1^* + (1-f) \rho_2^* \mathbf{u}_2^*}{f \rho_1^* + (1-f) \rho_2^*}, \quad P \equiv \frac{1}{\rho_1^* U_{\text{ref}}^{*2}} \left(p^* - \rho_1^* \mathbf{g}^* \cdot \mathbf{x}^* + \frac{|\Delta p^*|}{L_{\text{ref}}^*} \hat{\mathbf{e}}_p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

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



Gliederung des Vortrags

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerische Simulation der Gas-Flüssig-Strömung**
 - Grundgleichungen
 - **Rechenprogramm TURBIT-VOF**
 - Abbildung des physikalischen Problems
- **Ergebnisse für einen quadratischen Minikanal**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - Bewertung von kommerziellen CFD-Programmen
- **Zusammenfassung und Ausblick**



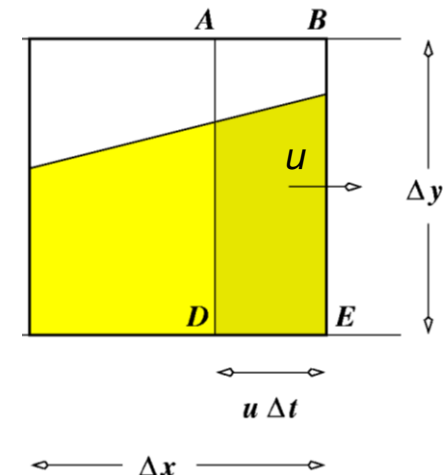
Rechenprogramm TURBIT-VOF

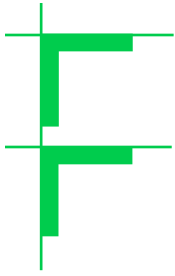
- Eigenentwicklung von FZK/IRS*
- Diskretisierung im Raum
 - Finite-Volumen Formulierung
 - Strukturiertes, kartesisches, versetztes Gitter
 - Zentrale Differenzen-Approximationen 2. Ordnung
- Lösungsstrategie
 - Projektionsmethode
 - Lösung der Druck-Poisson-Gleichung mit CG-Verfahren
 - Explizites 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
- Vorteil: sehr gute Massenerhaltung der Phasen

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



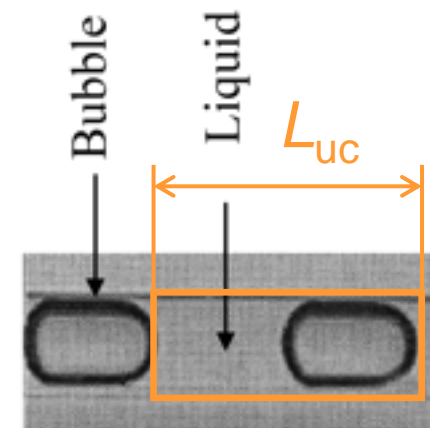


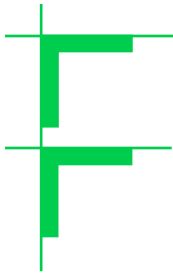
Gliederung des Vortrags

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerische Simulation der Gas-Flüssig-Strömung**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
 - **Abbildung des physikalischen Problems**
- **Ergebnisse für einen quadratischen Minikanal**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - Bewertung von kommerziellen CFD-Programmen
- **Zusammenfassung und Ausblick**

Charakterisierung der Strömung

- Blasen im Minikanal sind lang gestreckt und füllen nahezu den ganzen Querschnitt 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

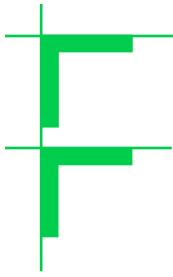
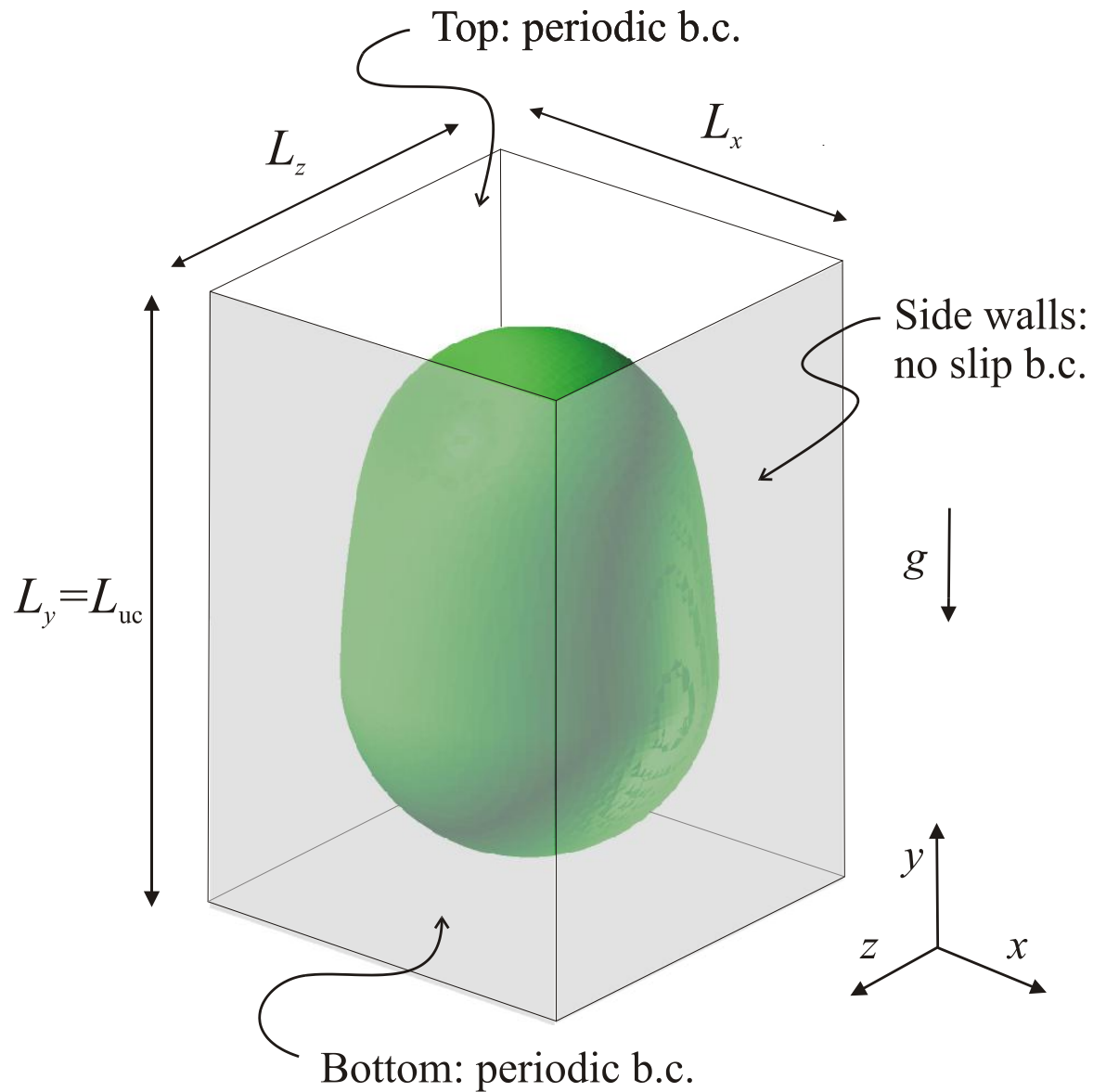


Abbildung im Rechenprogramm

- 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 Gas-Flüssig-Strömung**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
 - Abbildung des physikalischen Problems
- **Ergebnisse für einen quadratischen Minikanal**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - Bewertung von kommerziellen CFD-Programmen
- **Zusammenfassung und Ausblick**

Numerische Vorstudien

- Stoffwerte im Experiment von Thulasidas et al.

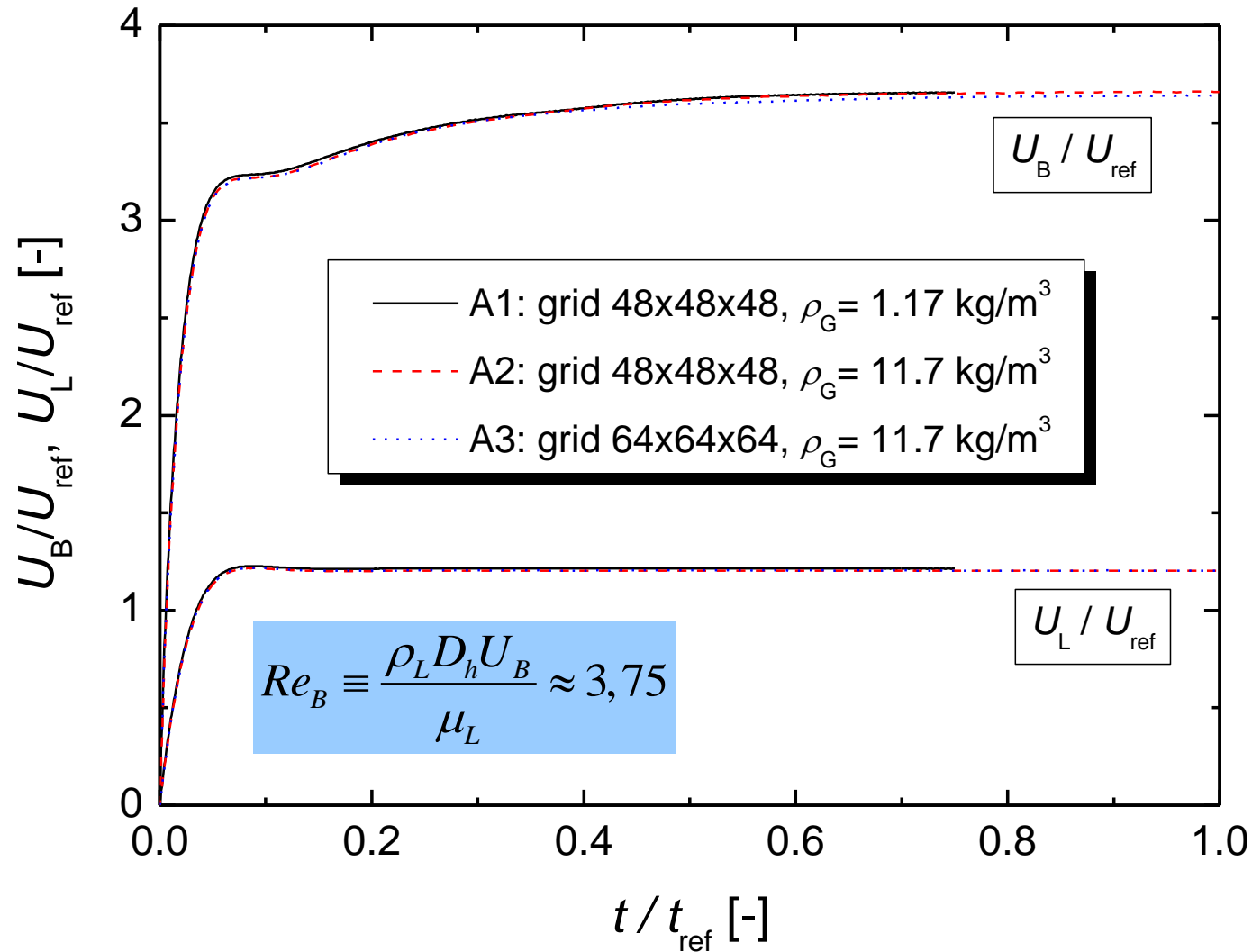
ρ_L	ρ_G	μ_L	μ_G	σ
957 kg/m ³	1,17 kg/m ³	0,048 Pa s	1,84×10 ⁻⁵ Pa s	0,022 N/m

- 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

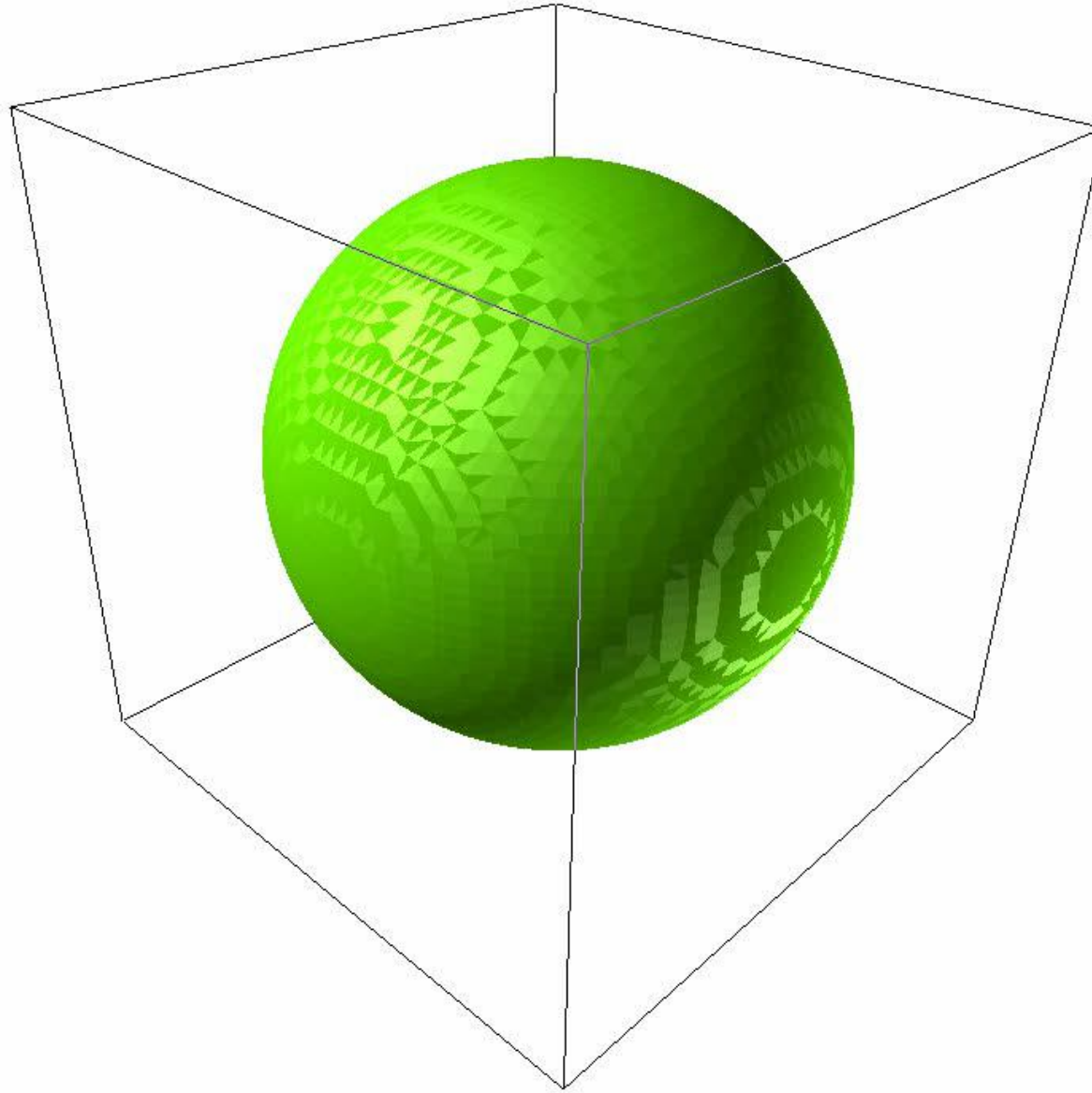
ρ_G und μ_G sind um Faktor 10 höher als bei Luft

Mittlere Geschwindigkeiten



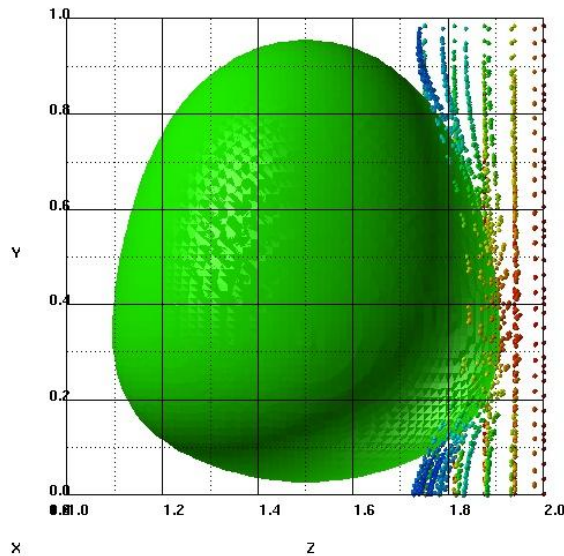
Simulationen für verschiedene Werte von L_{uc}

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	$1 \times 2 \times 1$	$48 \times 96 \times 48$

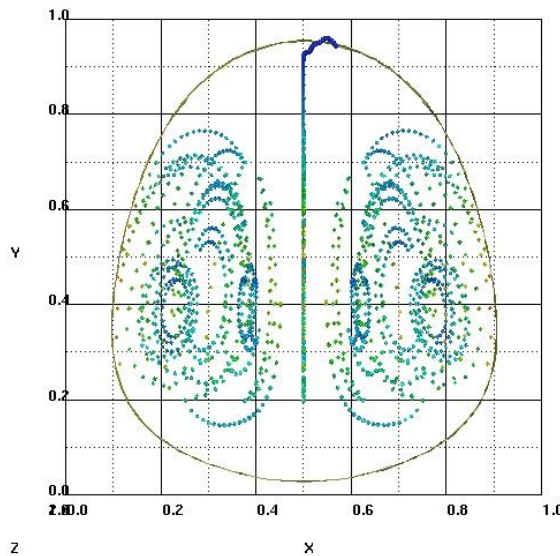


Fall A3

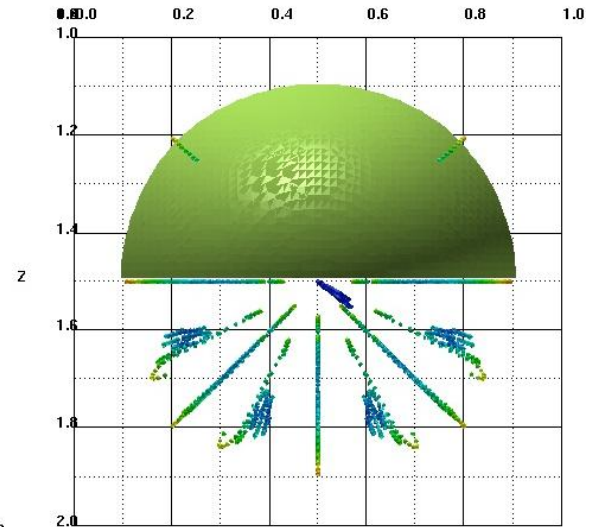
Blasenform und Bahnen von virtuellen Partikeln für Fall A3



Seitenansicht



Seitenansicht



Draufsicht

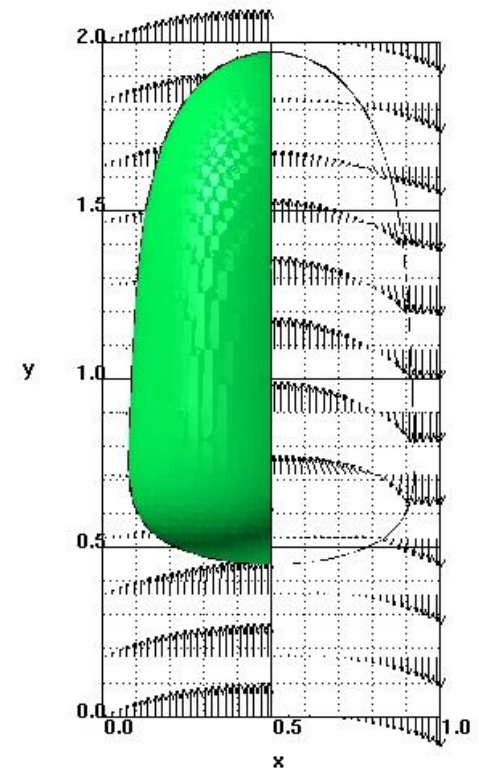
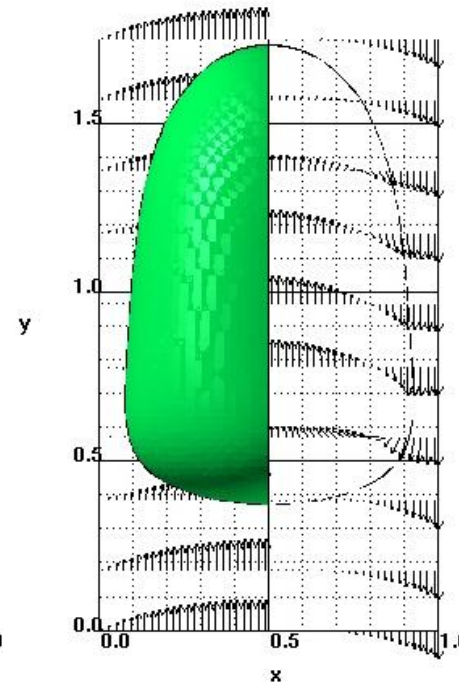
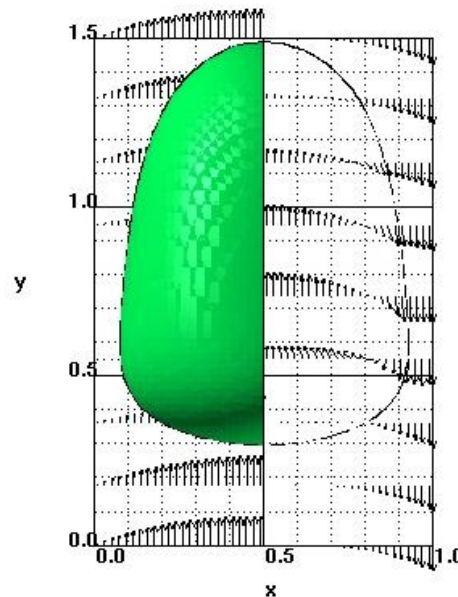
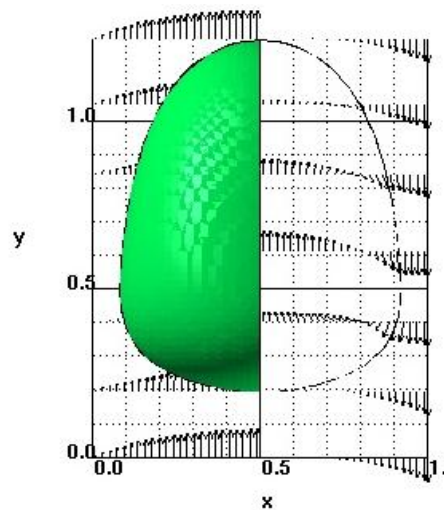
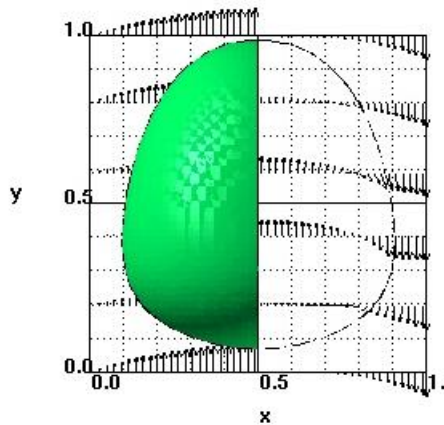
- Blase ist rotationssymmetrisch
- Ein großer Wirbel in der Blase
- Geringe Strömung in Umfangsrichtung innerhalb der Blase

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

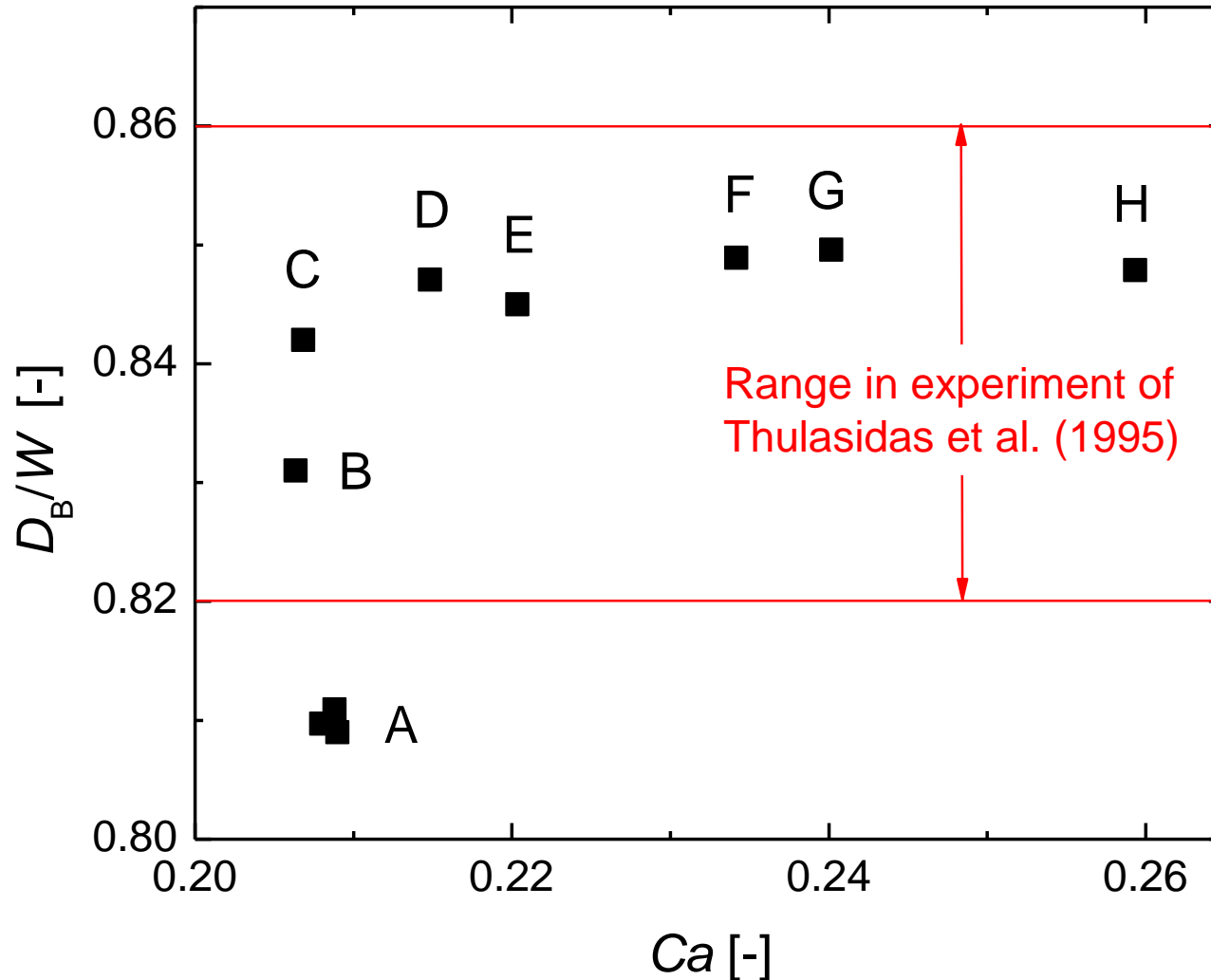
0,82 – 0,86

1,68 – 1,84

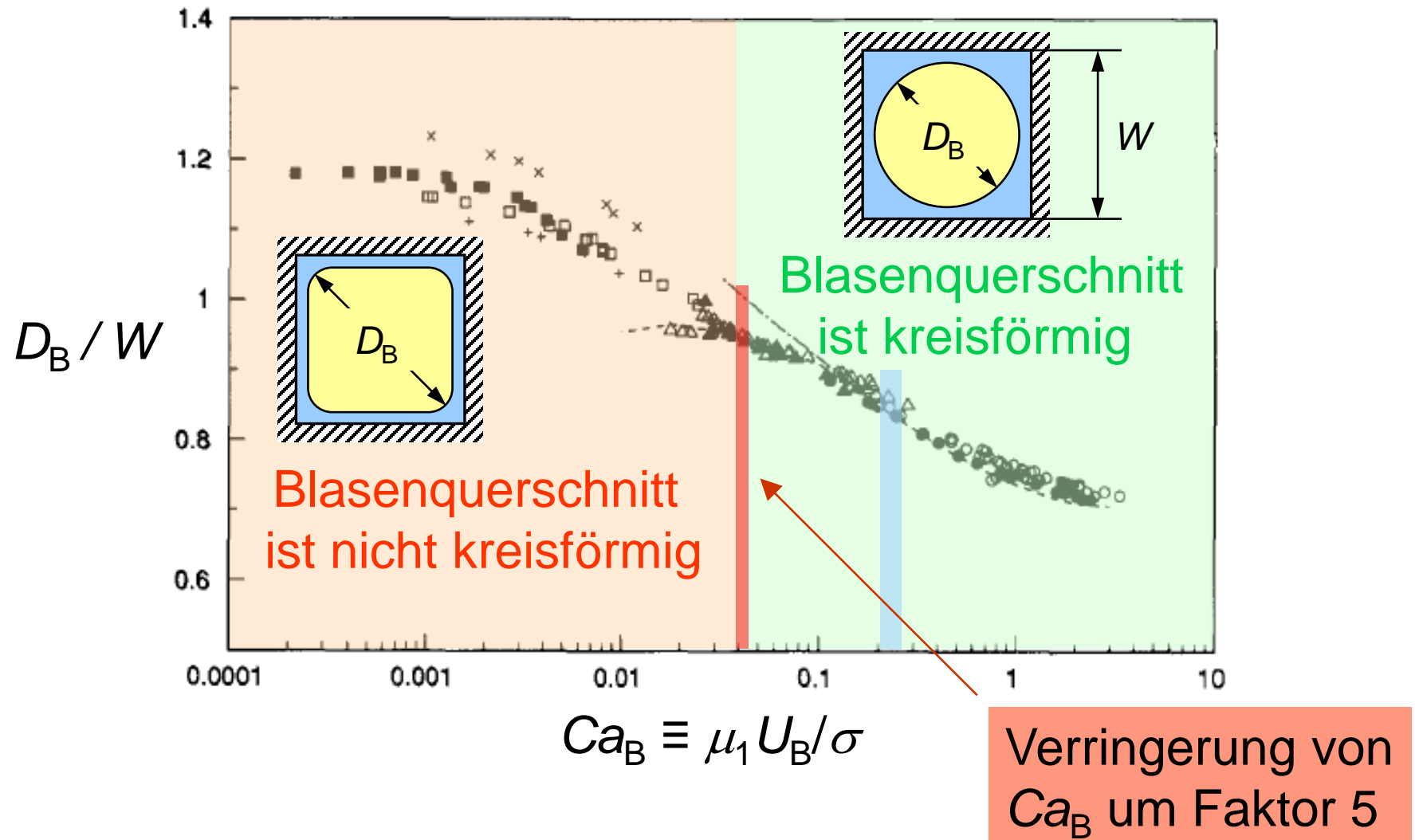
0,435–0,475



Dimensionsloser Blasendurchmesser

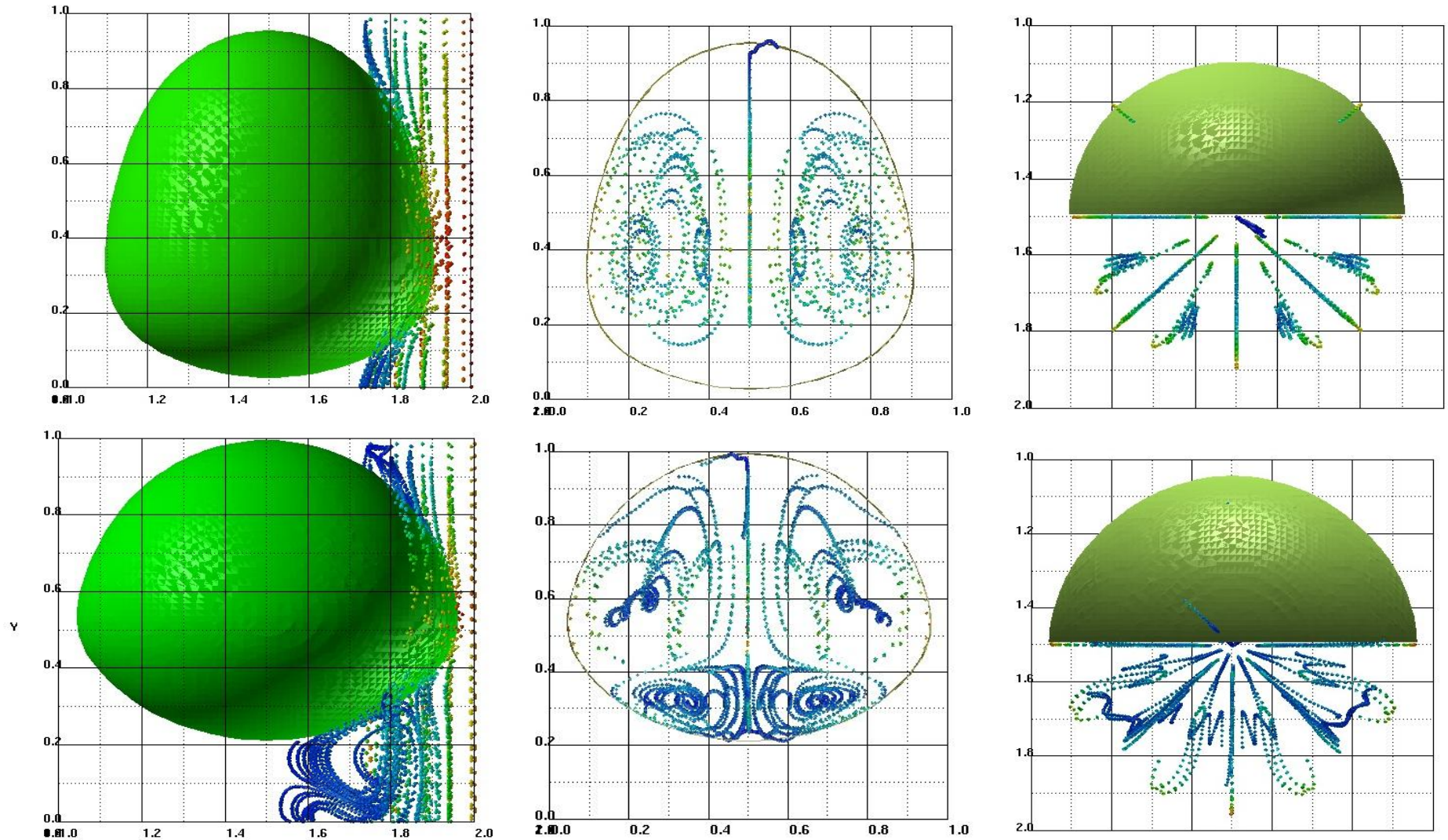


Blasendurchmesser über Diagonale*



Einfluss der Kapillar-Zahl*

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



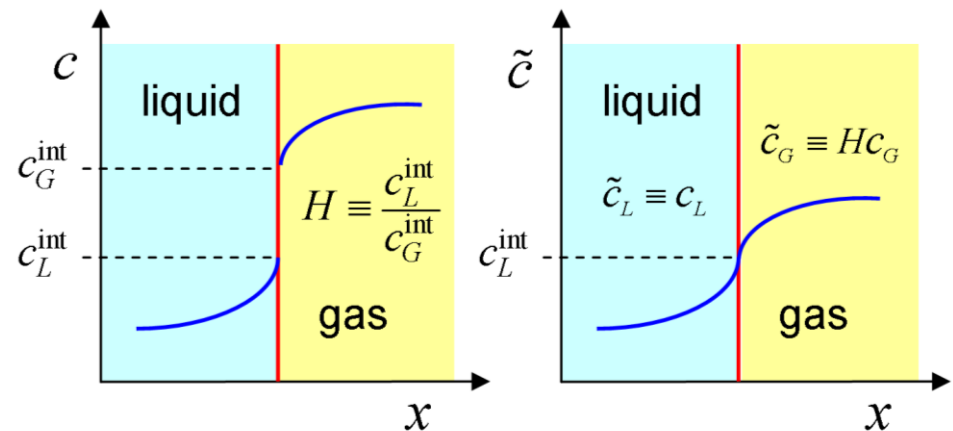


Gliederung des Vortrags

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerische Simulation der Gas-Flüssig-Strömung**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
 - Abbildung des physikalischen Problems
- **Ergebnisse für einen quadratischen Minikanal**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - **Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion**
 - Bewertung von kommerziellen CFD-Programmen
- **Zusammenfassung und Ausblick**

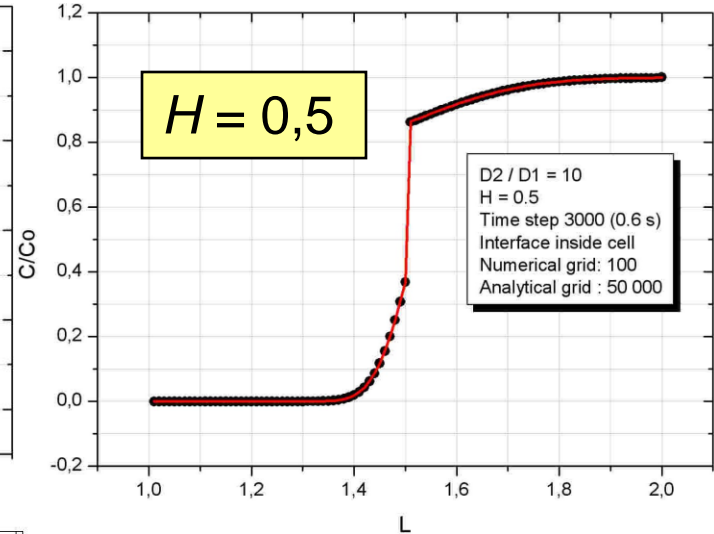
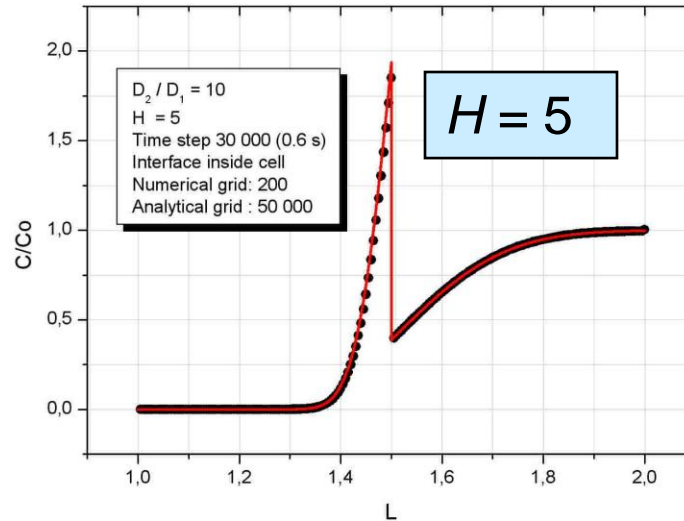
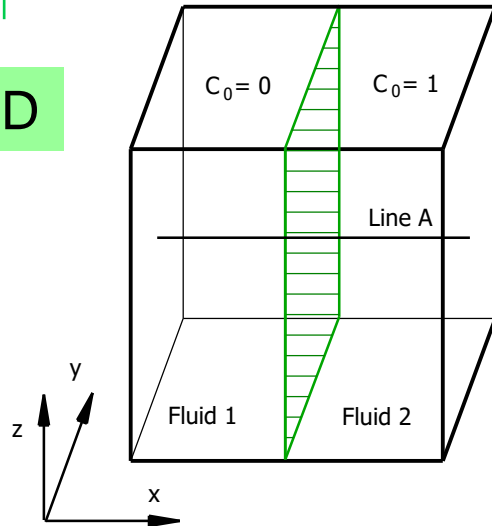
Stofftransport und chemische Reaktion*

- 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 H

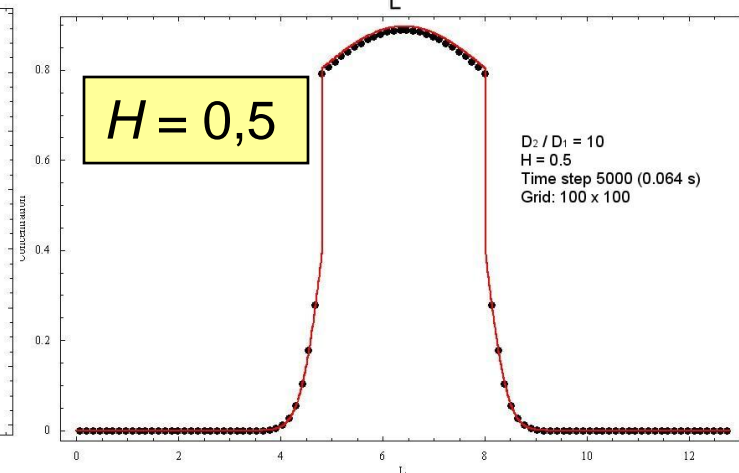
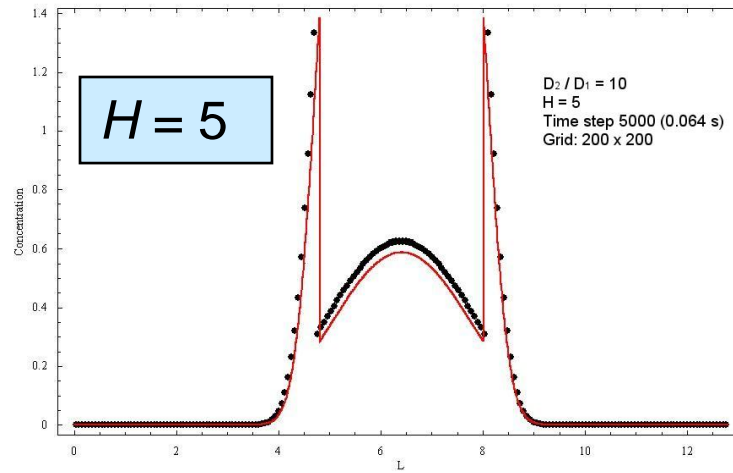
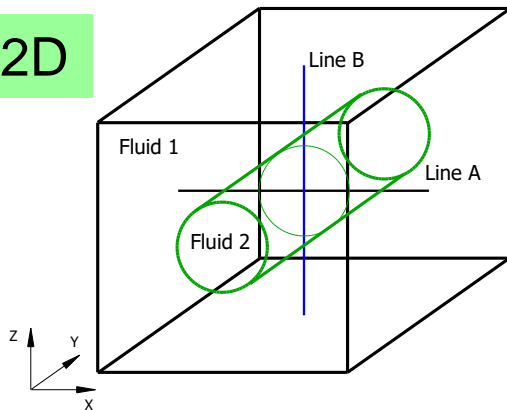


Validierung für diffusiven Stoffübergang

1D



2D



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

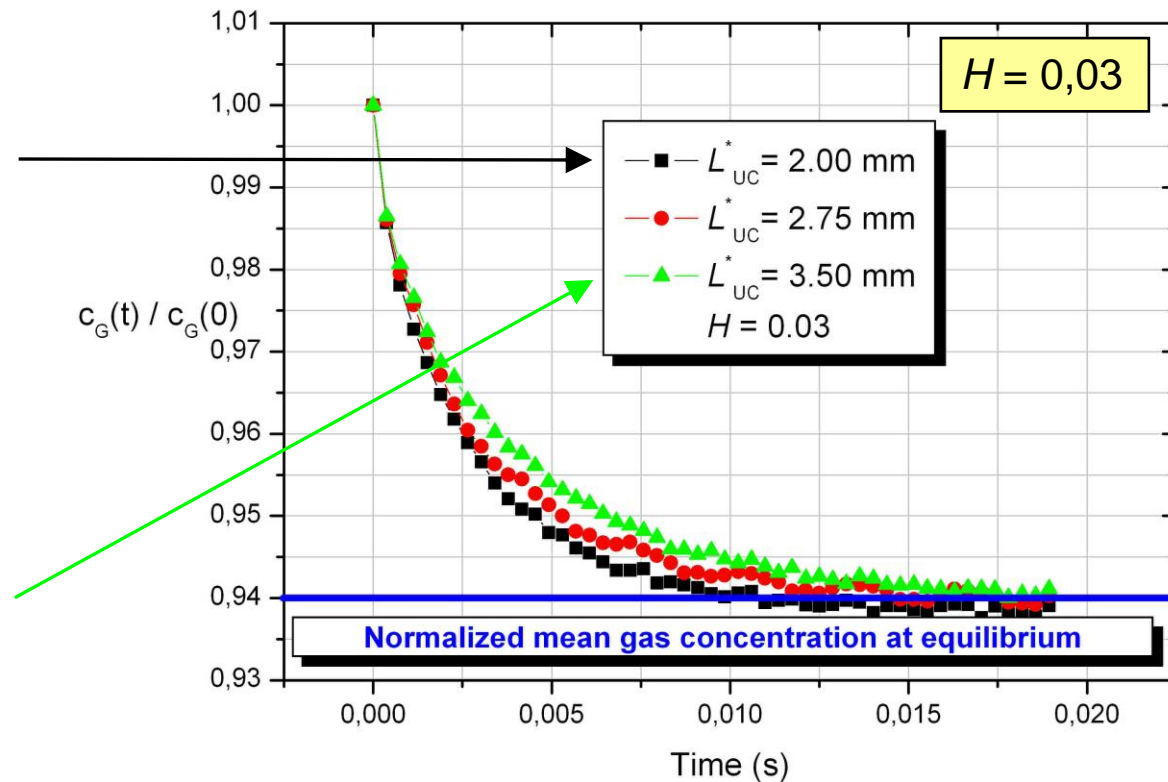
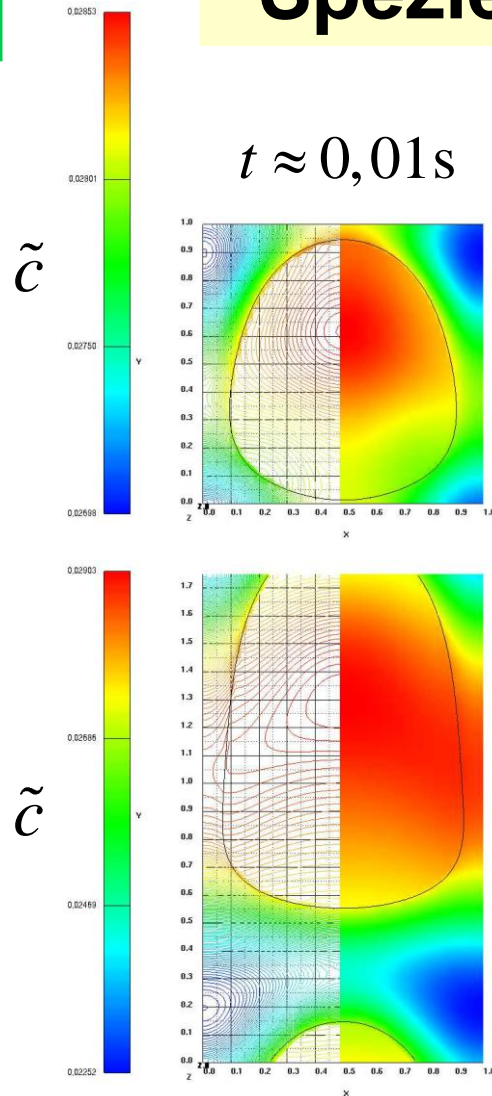
Stoffübergang in Taylor-Strömung

- Betrachtung eines artifiziellen Systems
 - Hydrodynamik: Gasphase = Luft, Flüssigphase = Silikonöl
 - Stofftransport: O_2 in Wasser, $D_G = 19,16 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
 - 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

$k_{Hmg} [\text{m/s}]$	$k_{Htg} [1/\text{s}]$	H	$D_L [\text{m}^2/\text{s}]$	$D_G [\text{m}^2/\text{s}]$	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*

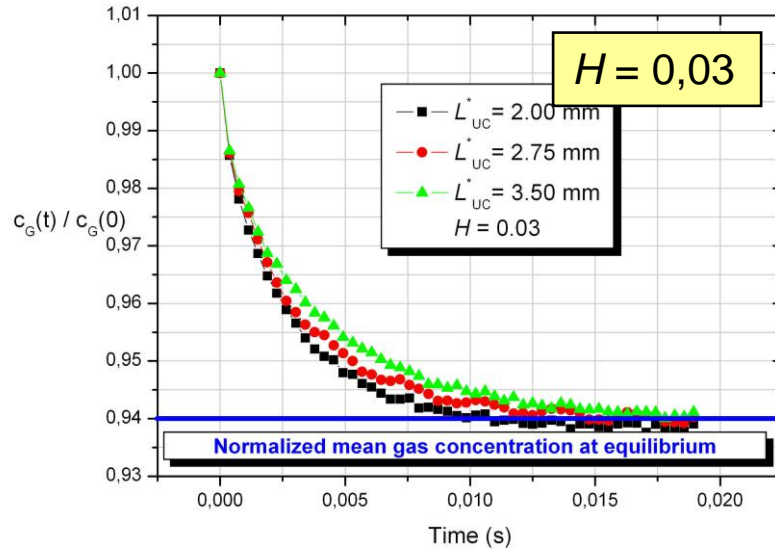


Normierte Konzentration
in der Gasphase im
Gleichgewichtszustand

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

Einfluss der Länge der Einheitszelle

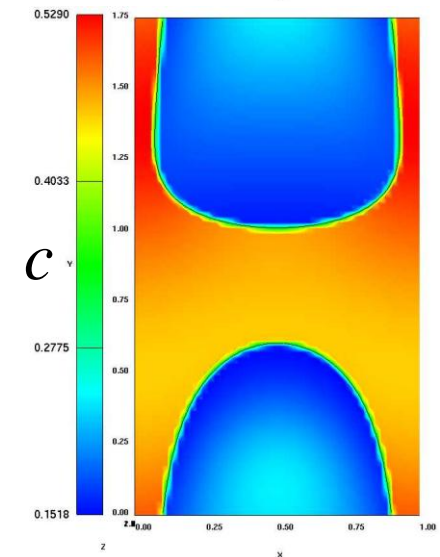
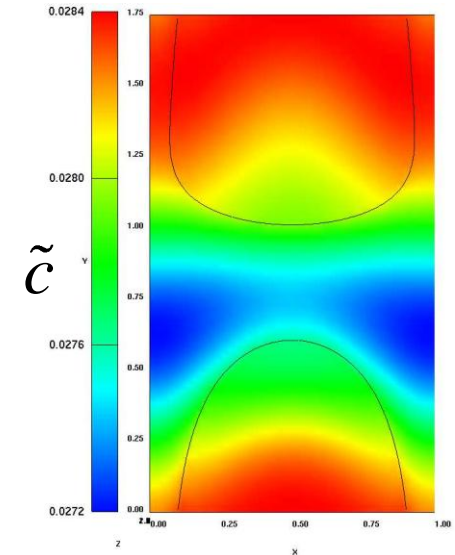
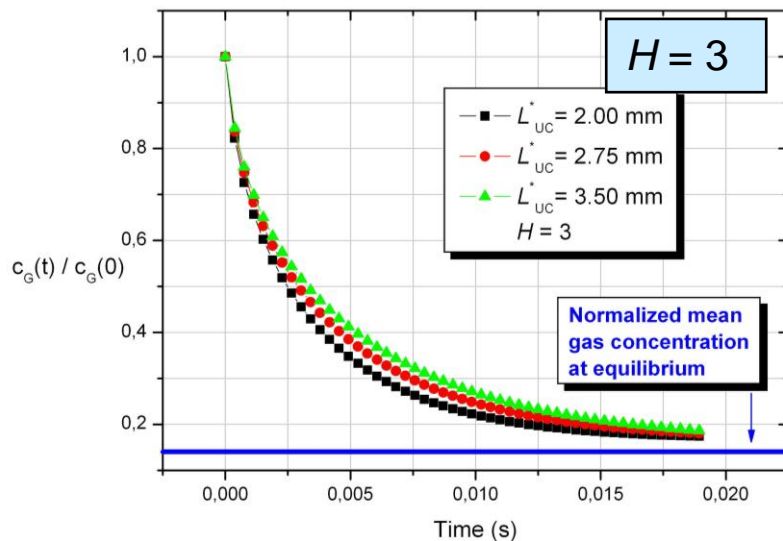
Konzentration
in vertikaler
Mittelebene



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)

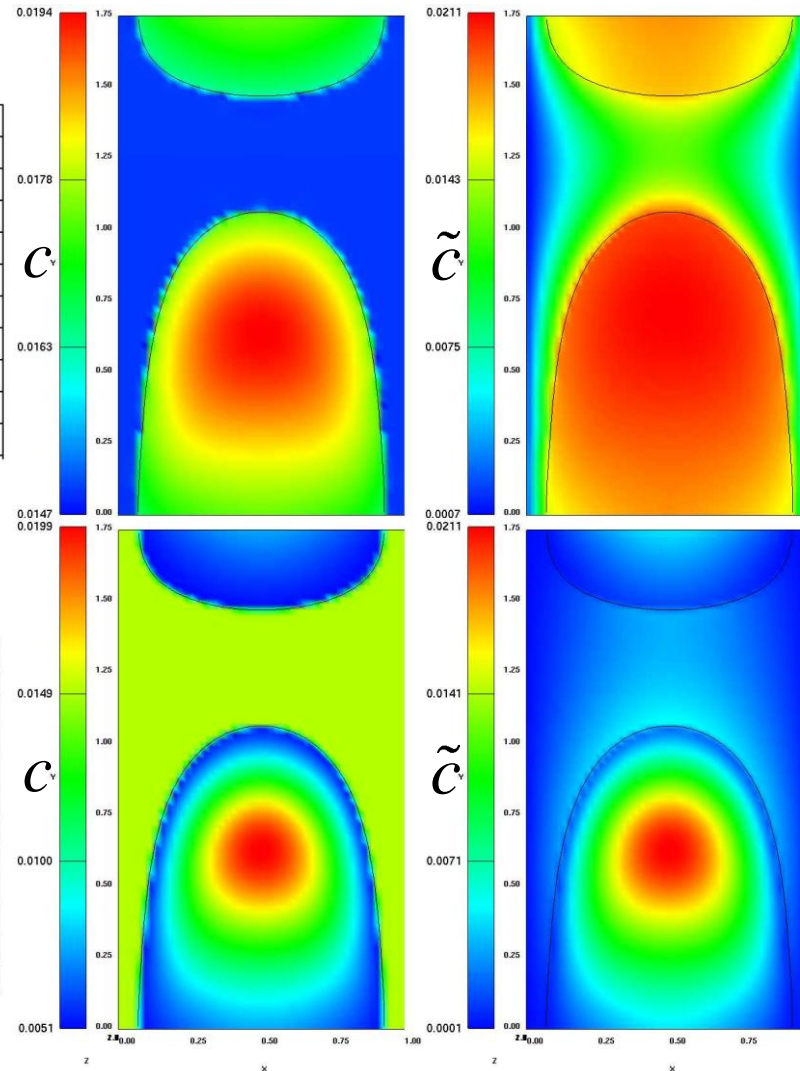
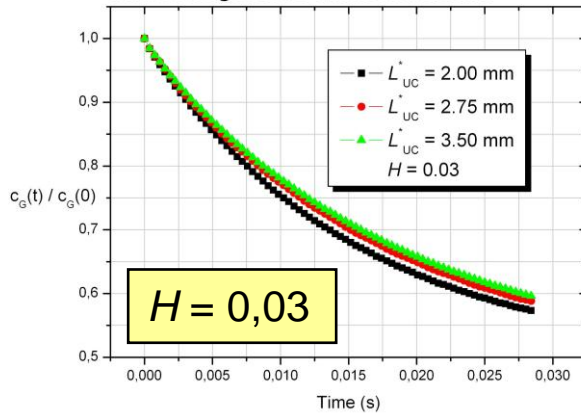


Einfluss von L_{uc} auf Reaktion 1. Ordnung Homogen - Heterogen

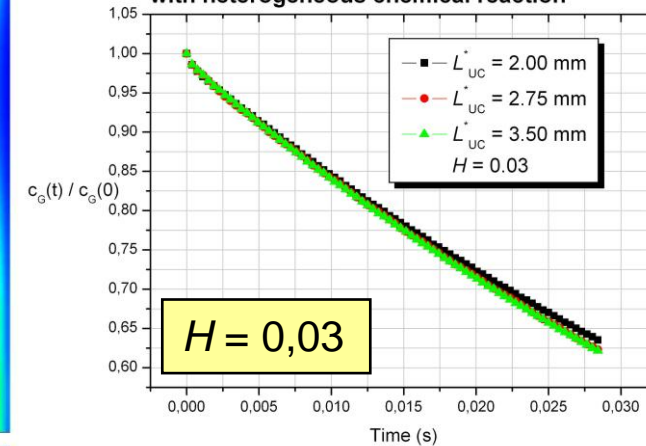
$Da = 96$

$Da = 1606$

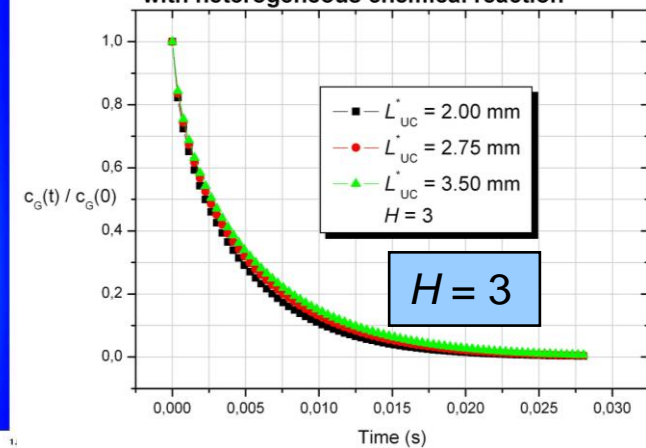
Influence of unit cell length on mass transfer with homogeneous chemical reaction



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



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





Gliederung des Vortrags

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerische Simulation der Gas-Flüssig-Strömung**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
 - Abbildung des physikalischen Problems
- **Ergebnisse für einen quadratischen Minikanal**
 - Validierung und Einfluss der Kapillarzahl
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - **Bewertung von kommerziellen CFD-Programmen**
- **Zusammenfassung und Ausblick**



Bewertung von kommerziellen Rechenprogrammen

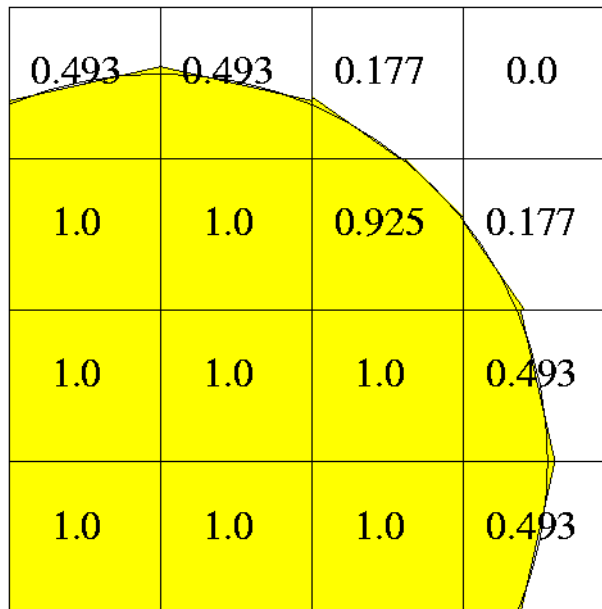
- TURBIT-VOF ist beschränkt auf Einzelkanal mit rechteckigem Querschnitt und kartesisches Gitter
- Komplexere Untersuchungen für mehrere Kanäle, die über Ein- und Austrittsplenum gekoppelt sind, erfordern den Einsatz kommerzieller CFD-Programme
- Ziel: Bewertung der VOF-Methoden in den kommerziellen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



VOF-Methoden in den Codes

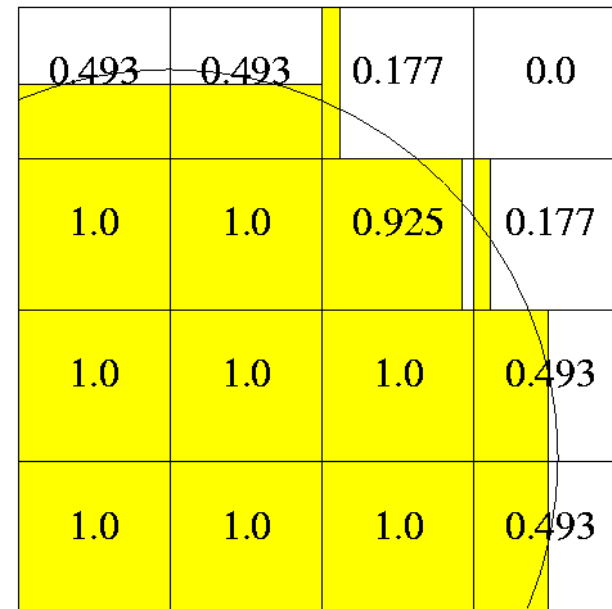
- TURBIT-VOF
 - Rekonstruktion der Phasengrenzfläche und lokale Approximation als Ebene (PLIC = piecewise linear interface calculation)
- CFX 10.0 und STAR-CD 4.0
 - Keine Rekonstruktion der Phasengrenzfläche sondern Lösung der f -Gleichung mit Differenzenverfahren
- FLUENT 6.2
 - Lösung der f -Gleichung mit Differenzenverfahren, oder
 - Rekonstruktion der Phasengrenzfläche mit
 - PLIC = piecewise linear interface calculation, oder
 - SLIC = simple line interface calculation

VOF-PLIC



- FLUENT: Geo-reconstruct
- TURBIT-VOF

VOF-SLIC



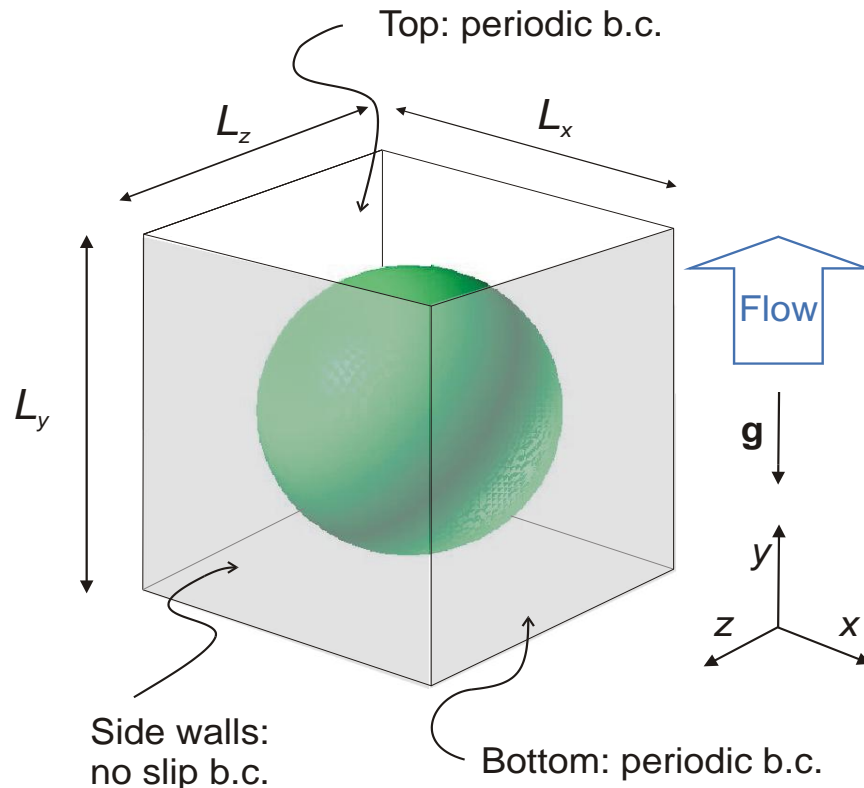
- FLUENT: Donor-acceptor

- Problem von Differenzenverfahren für f -Gleichung:
Verschmierung der Grenzfläche
durch numerische Diffusion



Setup für den Code-Vergleich

TURBIT-VOF, CFX, STAR-CD: Ortsfestes System



FLUENT: mitbewegtes System

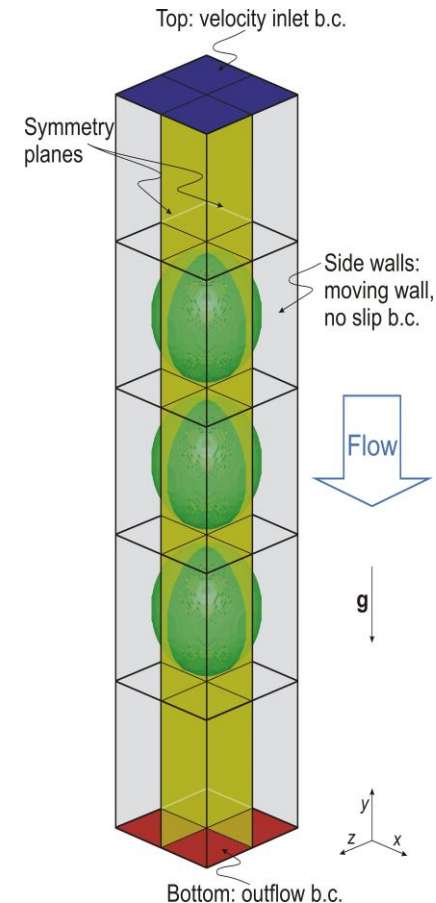


Table I: Overview on simulations performed with the different computer codes. The values of U_B , U_L and D_B are the terminal ones with exception of D_B which is, for CFX and STAR-CD only, for $t = 0.03$ s.

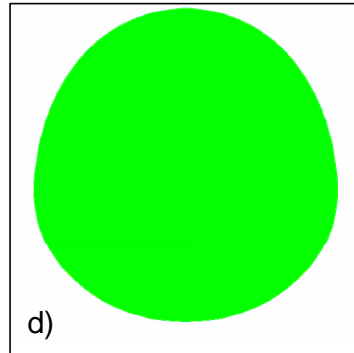
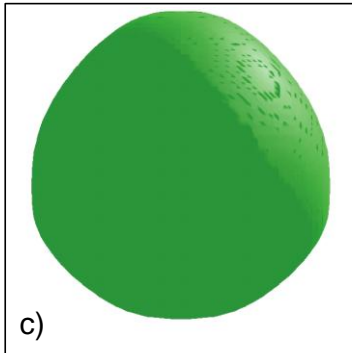
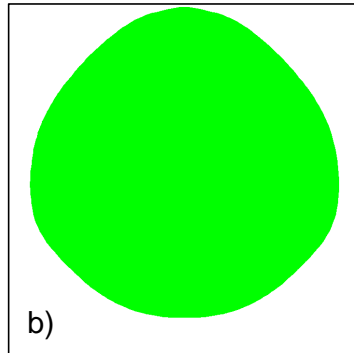
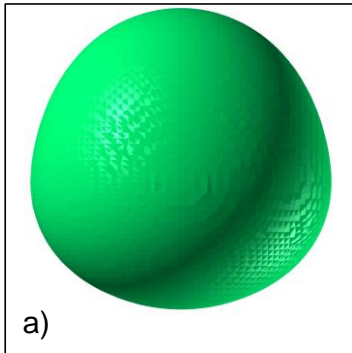
Code	Case#	$\Delta\tilde{p}$ [Pa]	a_0 [%]	Domain	Grid	Δt [μ s]	N_t [-]	U_B [cm/s]	U_L [cm/s]	D_B [mm]	Remark
TURBIT-VOF	TBL48F	0.0	30.38	Full	48×48×48	1.892	20 000	2.917	1.011	1.670	
	TBH48F	0.0	33.07	Full	48×48×48	1.892	22 000	3.012	1.066	1.628	
	TBH64F	0.0	33.07	Full	64×64×64	0.757	94 000	3.023	1.066	1.711	
	TPH48F	-18.0	33.07	Full	48×48×48	1.892	40 000	9.435	3.179	1.628	
	TPH64F	-18.0	33.07	Full	64×64×64	0.757	100 000	9.409	3.171	1.629	
STAR-CD	SBL48F	0.0	30.37	Full	48×48×48	0.750	80 000	2.699	0.956	1.713	
	SBL64F	0.0	30.37	Full	64×64×64	0.750	119 600	2.691	0.954	1.712	
	SBL128Q	0.0	30.37	Quarter	64×128×64	0.750	60 000	2.574	0.931	1.718	
	SBH48F	0.0	33.07	Full	48×48×48	0.750	60 000	2.714	0.989	1.750	
	SBH64F	0.0	33.05	Full	64×64×64	0.750	88 400	2.700	0.992	1.756	
	SPH64Q	-18.0	33.05	Quarter	32×64×32	0.750	82 000	8.098	3.009	1.693	
	SPH64Q-1	-18.0	33.05	Quarter	32×64×32	0.750	60 000	("Annular flow")			Upwind scheme for continuity equation
	SPH64Q-2	-18.0	33.05	Quarter	32×64×32	0.750	60 000	8.089	3.009	1.699	Upwind scheme for momentum equation
	SPH64Q-T	-18.0	33.05	Quarter	32×64×32	7.500	12 000	8.203	3.021	1.693	Tenfold Δt
CFX	CBL48Q-T	0.0	30.97	Quarter	24×48×24	7.500	4 000	3.117	0.999	1.658	Tenfold Δt
	CBH48Q	0.0	34.15	Quarter	24×48×24	0.750	40 000	3.143	0.951	1.704	
	CBH48Q-T	0.0	34.15	Quarter	24×48×24	7.500	6 000	2.796	0.931	1.700	Tenfold Δt
	CBH48Q-T-1	0.0	34.15	Quarter	24×48×24	7.500	4 000	3.000	0.948	1.708	2 nd order time integration
	CBH48Q-T-2	0.0	34.15	Quarter	24×48×24	3.785	7 927	2.988	0.941	1.708	Fivefold Δt
	CBH64Q	0.0	33.78	Quarter	32×64×32	0.750	10 000	-	-	-	(Only simulation of initial transient)
	CBH64Q-T	0.0	33.78	Quarter	32×64×32	7.500	6000	3.385	1.134	1.701	Tenfold Δt
	CPH48Q-T	-18.0	34.14	Quarter	24×48×24	7.500	4 000	("Annular flow")			Tenfold Δt
	CPH64Q	-18.0	33.01	Quarter	32×64×32	0.750	24 160	10.120	3.136	1.641	
FLUENT	FBH48Q-G	-0.13	33.05	Quarter	24×240×24	0.750	30 000	3.009	1.015	1.699	Geo-reconstruct
	FBH48Q-T-G	-0.02	33.05	Quarter	24×240×24	7.570	3 000	3.010	1.014	1.698	Geo-reconstruct, tenfold Δt
	FBH64Q-T-G	-0.7	33.06	Quarter	32×320×32	7.570	3 000	3.013	1.038	1.709	Geo-reconstruct, tenfold Δt
	FBH64Q-T-D	1.4	33.06	Quarter	32×320×32	7.570	3 000	2.943	1.073	1.727	Donor-acceptor, tenfold Δt
	FBH64Q-T-E	0.8	33.06	Quarter	32×320×32	7.570	3 000	2.969	1.060	1.689	Euler-explicit, tenfold Δt
	FBH64Q-T-I	-1.0	33.06	Quarter	32×320×32	7.570	3 000	2.974	1.057	1.689	Implicit, tenfold Δt
	FPH64Q-T-G	-21.5	33.06	Quarter	32×320×32	7.570	4 500	9.584	3.322	1.634	Geo-reconstruct, tenfold Δt
	FPH64Q-T-D	-17.9	33.06	Quarter	32×320×32	7.570	3 000	9.228	3.108	1.684	Donor-acceptor, tenfold Δt
	FPH64Q-T-E	-	33.06	Quarter	32×320×32	7.570	2 050	(Execution stop by code)			Euler-explicit, tenfold Δt
	FPH64Q-T-I	-	33.06	Quarter	32×320×32	7.570	300	(No converging solution)			Implicit, tenfold Δt

*The different cases are abbreviated as follows. The first letter indicates the computer code (C=CFX, F=FLUENT, S=STAR-CD, T=TURBIT-VOF), the second letter indicates the driving forces (B=buoyancy only, P=pressure gradient and buoyancy), the third letter indicates the gas content (H=high, L=low), the digits indicate the number of mesh cells per unit cell in y-direction, while the next letter indicates the computational domain (F=full, Q=quarter). Any further digit or character indicates variation of numerical scheme or time step width.

Ergebnisse für „buoyancy driven flow“

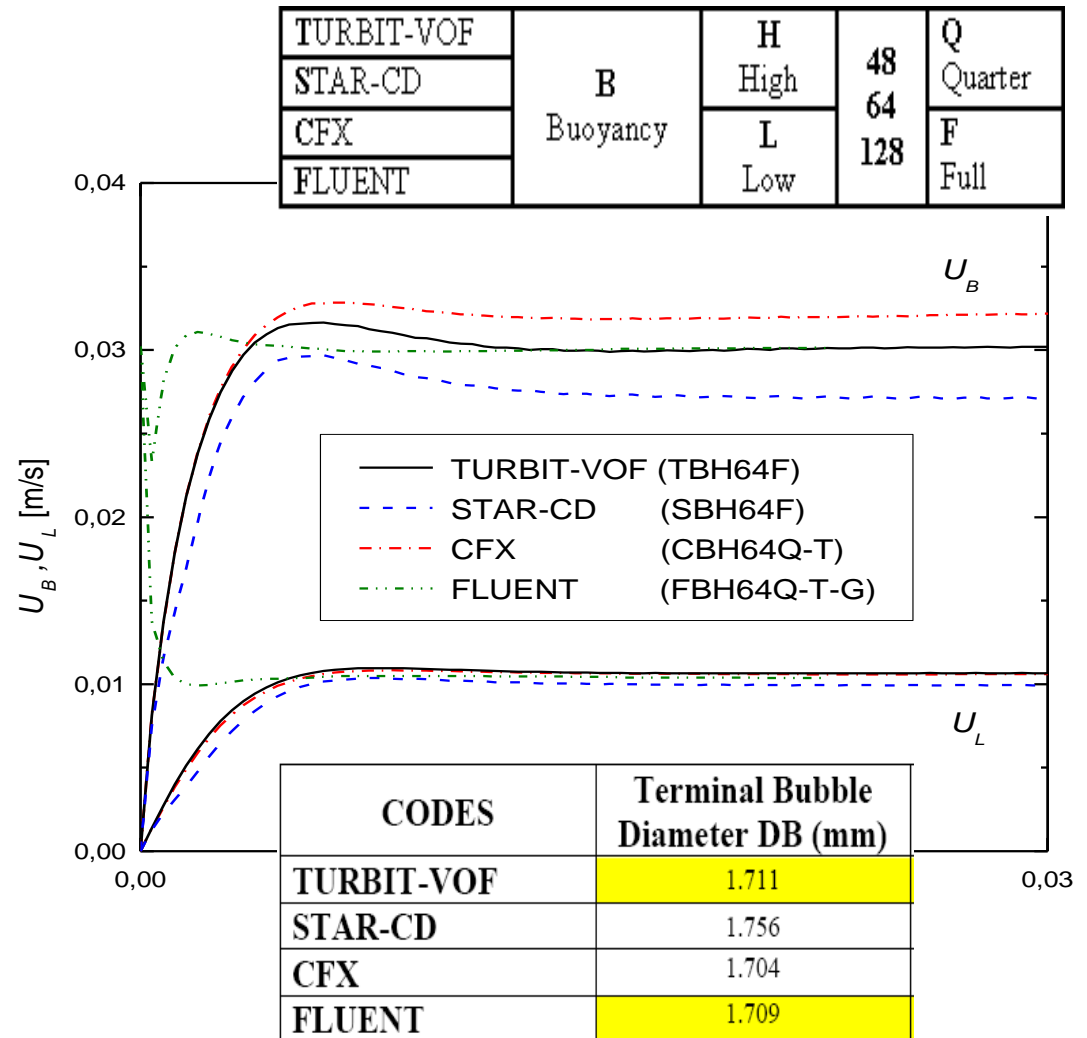
TURBIT-VOF

STAR-CD

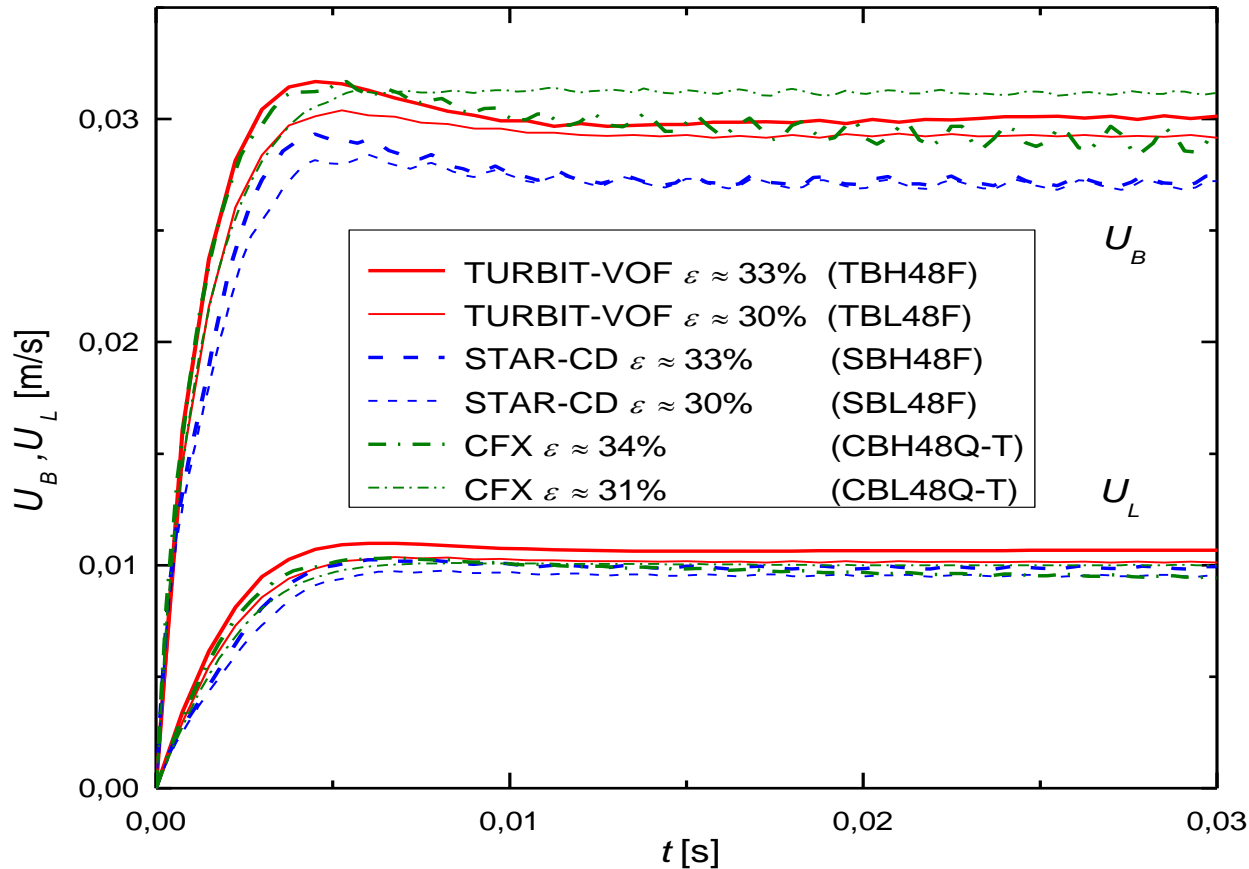


FLUENT

CFX

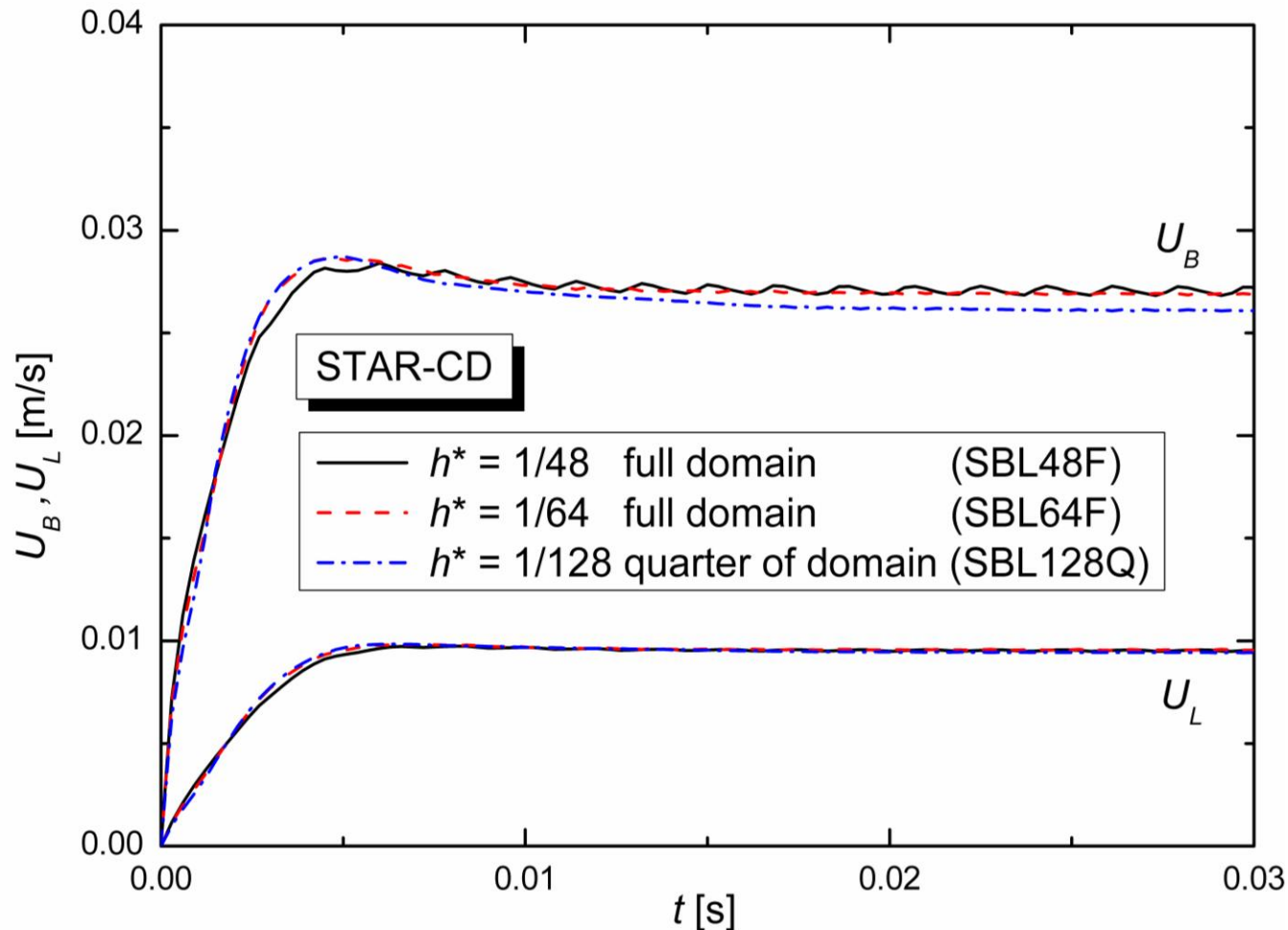


Studie zum Einfluss des Gasgehalts



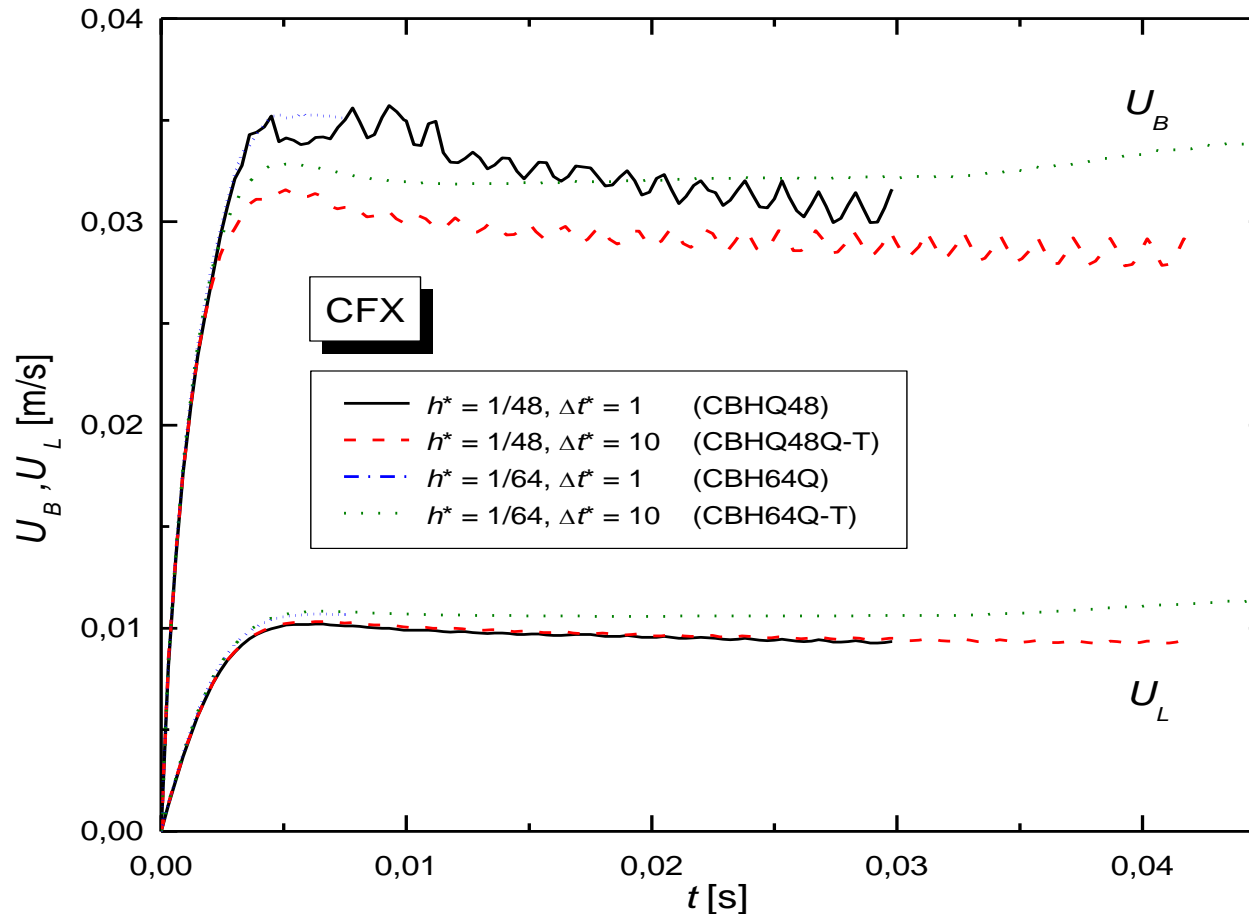
- Da die Strömung durch den Auftrieb angetrieben ist, sollte verringern des Gasgehalts ε eine Verringerung von U_B und U_L bewirken
- Dies ist bei STAR-CD und CFX nicht der Fall

Gitterstudie für STAR-CD



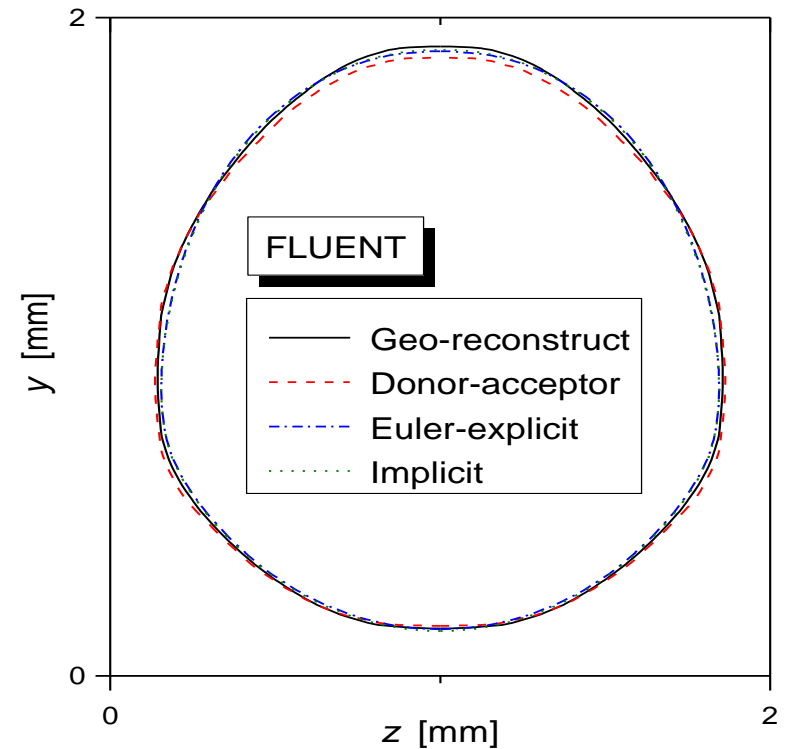
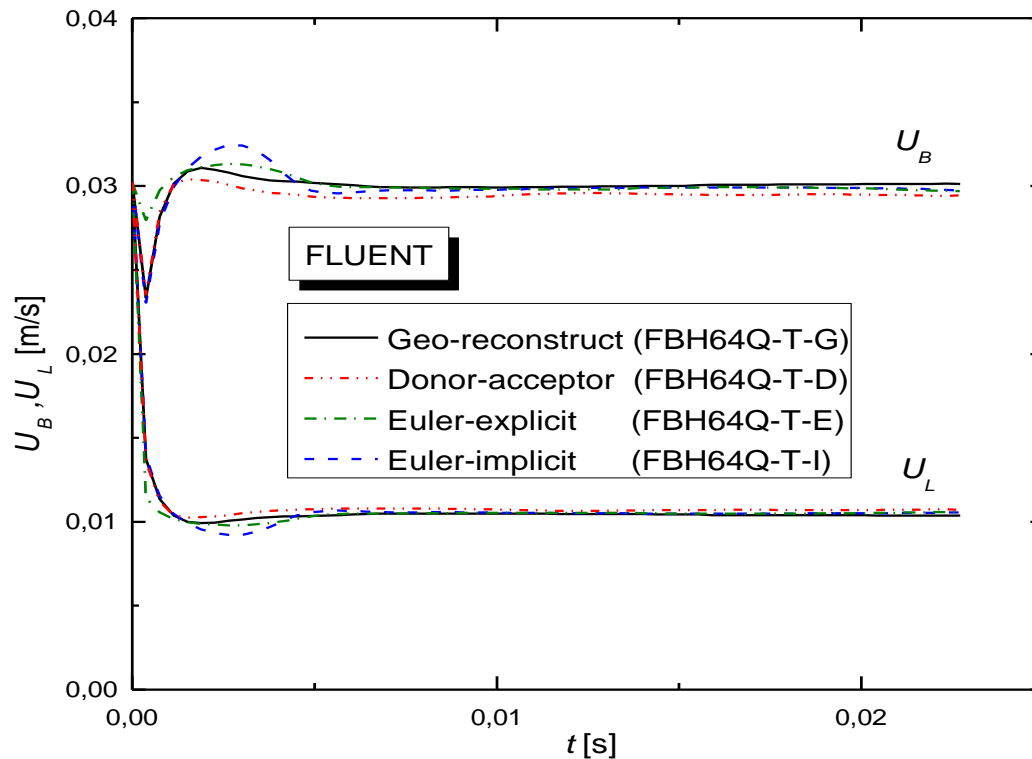
- Ergebnisse sind nicht Gitter-unabhängig
- Gitterverfeinerung bewirkt Verschlechterung der Ergebnisse (weitere Abnahme von U_B)

Gitter- und Zeitschrittstudie für CFX



- Ergebnisse hängen von Zeitschrittweite ab (für gleiches Δx)
- Ergebnisse hängen von Maschenweite ab (für gleiches Δt)

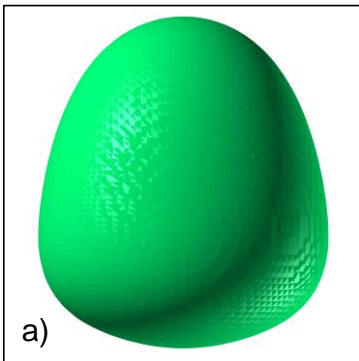
Vergleich der VOF-Methoden in FLUENT



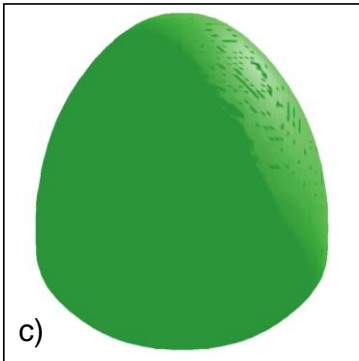
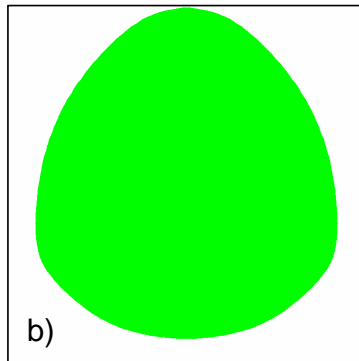
- Für „Geo-reconstruct“ sind Ergebnisse nahezu unabhängig von Δx und Δt

Ergebnisse für „pressure driven flow“

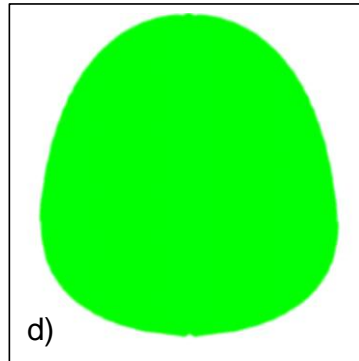
TURBIT-VOF



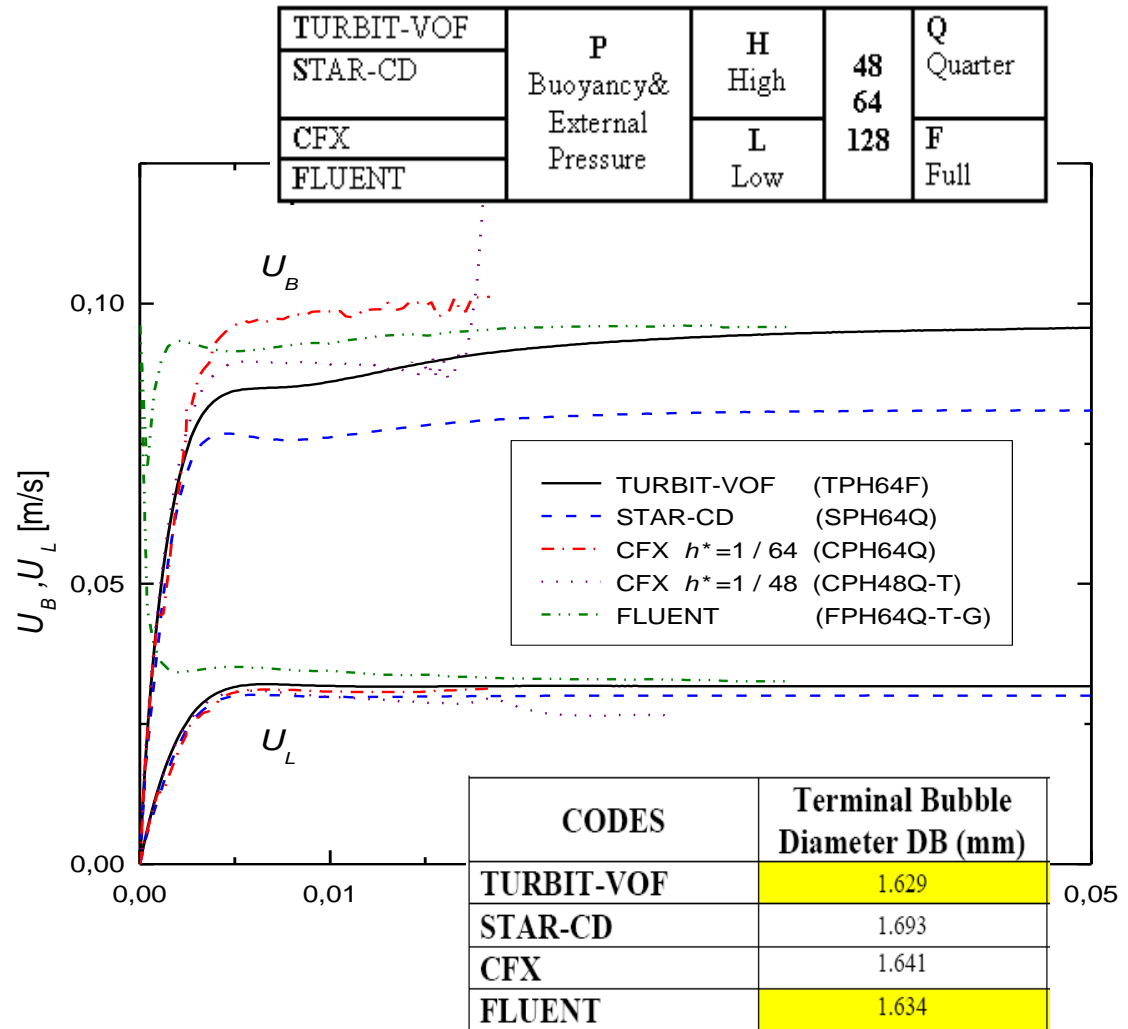
STAR-CD



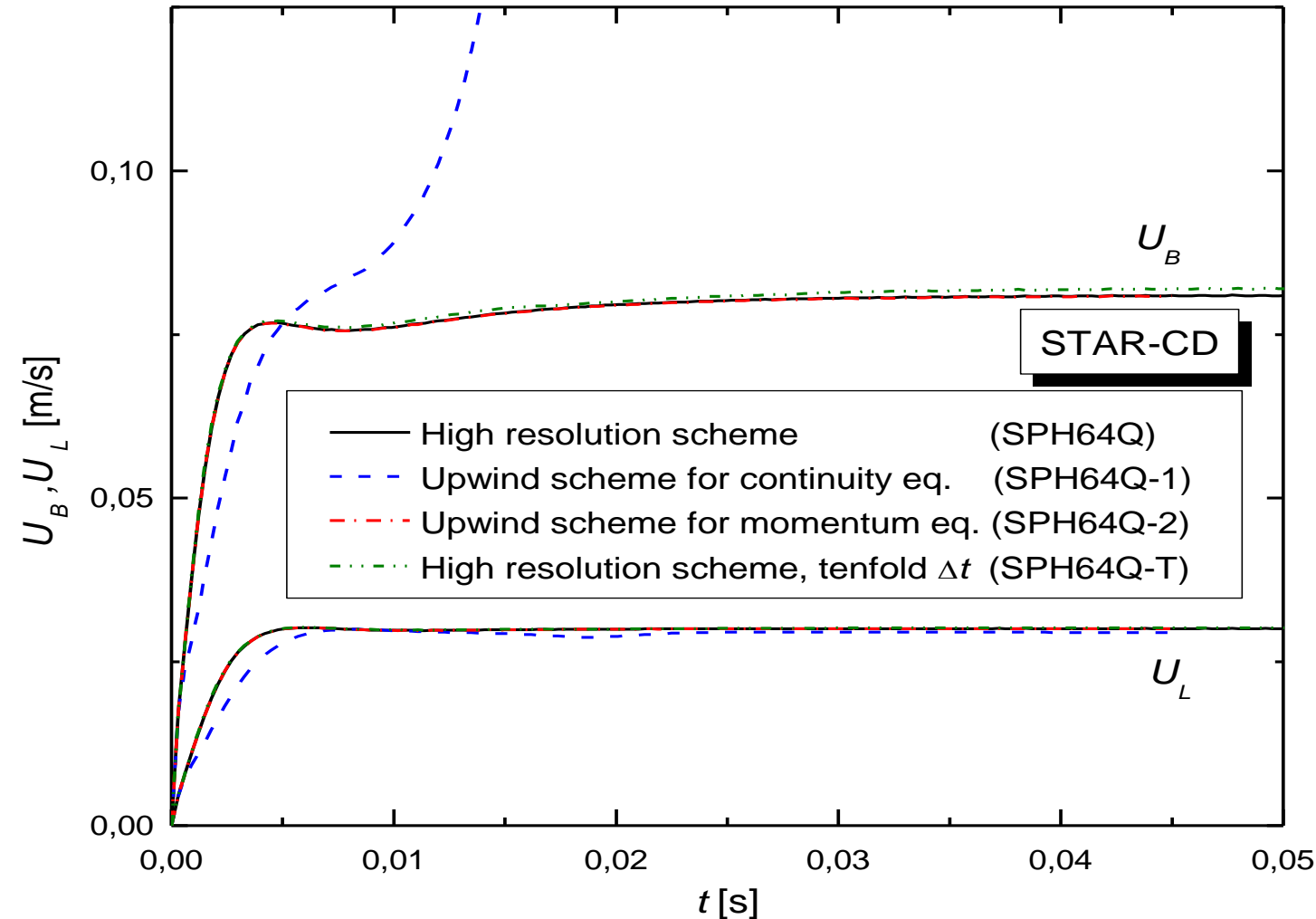
FLUENT



CFX

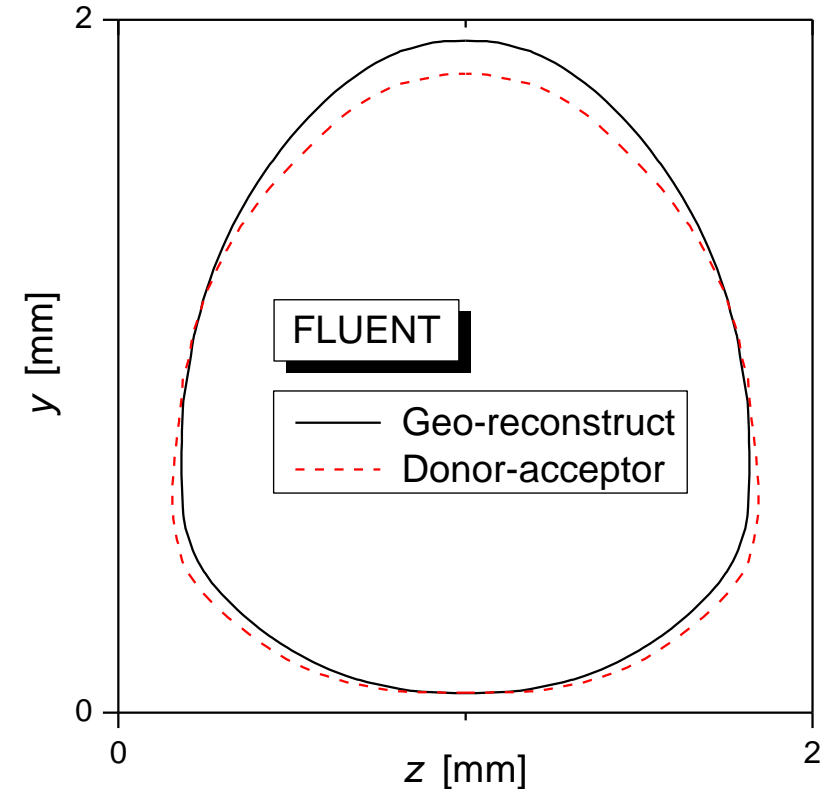
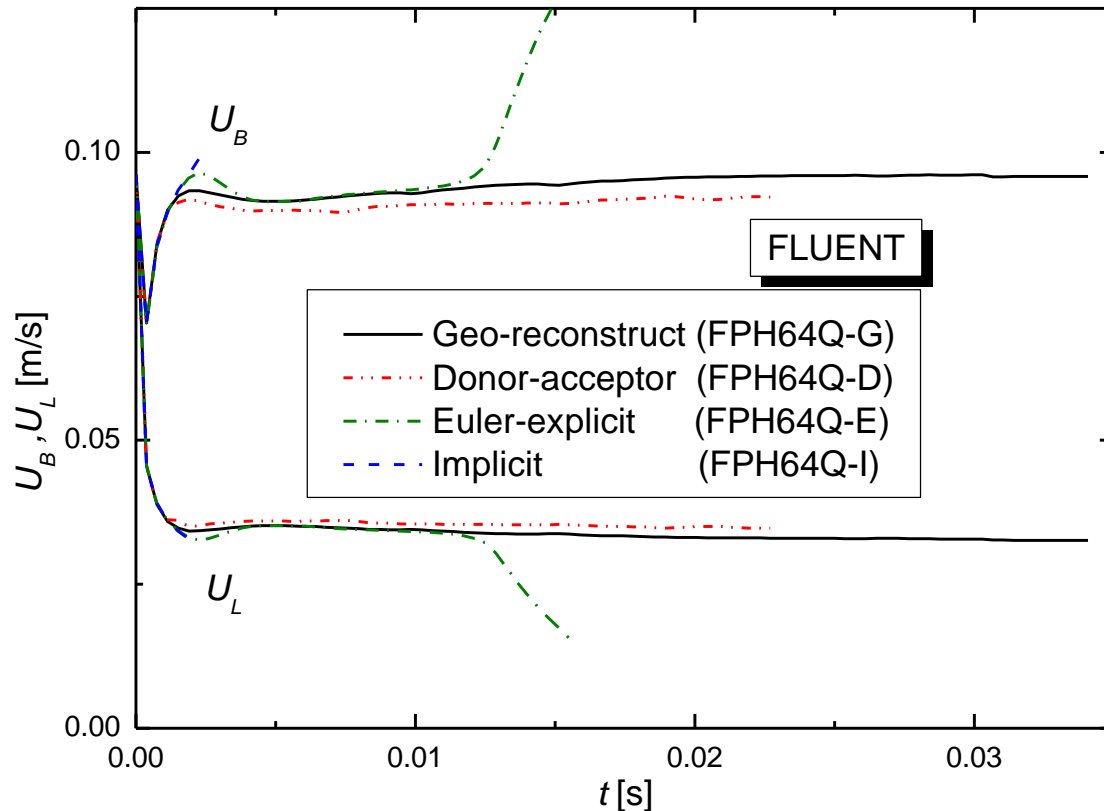


Vergleich verschiedener Differenzenverfahren für STAR-CD



- Entscheidend ist das Differenzenverfahren für die f -Gleichung (höhere Ordnung ist zwingend)
- Differenzenverfahren für die Impulsgleichung ist weniger wichtig

Vergleich der VOF-Methoden in FLUENT

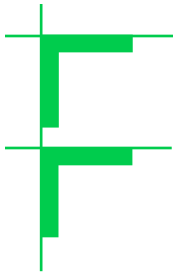


- Nur VOF-Methoden mit Rekonstruktion ergeben „bubble-train flow“



Zusammenfassung

- Direkte numerische Simulation von Taylor-Blasen
 - Quadratischer vertikaler Mini-Kanal ($2\text{ mm} \times 2\text{ mm}$)
 - 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
- Untersuchung von Stofftransport ohne/mit chemischer Reaktion 1. Ordnung für ein artifizielles System
- Bewertung der VOF-Methoden von kommerziellen CFD-Codes für die Gas-Flüssig-Strömungen in kleinen Kanälen
 - Nur VOF-Methoden mit Rekonstruktion der Phasengrenzfläche liefern konsistente Ergebnisse



Ausblick auf aktuelle Arbeiten

- Detaillierte Verifikation von TURBIT-VOF
 - Experimente der TU Dresden (Arbeitsgr. Prof. Lange)
 - 1 mm × 1 mm Kanal
 - Drei verschiedene Stoff-Paarungen
 - Weiterer Bereich der Kapillar-Zahl
 - Blasenform nicht mehr rotationssymmetrisch
- Stabilität der Strömung
 - Unter welchen Bedingungen ergibt sich stabiler „bubble-train flow“ bzw. wann tritt Koaleszenz auf

Ausblick auf das mittelfristige 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

