

## ارائه رابطه‌ای برای تعیین ضریب انتقال جرم بین فازی در جریان تیلور بر مبنای شبیه‌سازی CFD

امین حسنونند<sup>\*۱</sup>

۱. گروه مهندسی پلیمر، دانشکده فنی و مهندسی دانشگاه لرستان، خرم آباد، ایران

چکیده	مشخصات مقاله
<p>در تحقیق حاضر بر مبنای نتایج حاصل از شبیه‌سازی CFD رابطه‌ای برای ضریب انتقال جرم بین فازی در جریان تیلور ارائه شده است. جهت شبیه‌سازی هیدرودینامیک رژیم تیلور در یک سلول واحد از این جریان از روش VOF استفاده شده است. در ادامه انتقال جرم از حباب تیلور به لخته مایع شبیه‌سازی شده است. در شبیه‌سازی‌های انجام شده، حباب تیلور با استفاده از یک روش تکراری در یک هندسه متقارن محوری ساکن شده و جریان مایع از روی آن عبور داده شده است. در رابطه ارائه شده، تأثیر پارامترهای حاکم بر جریان تیلور نظیر عدد موئینه، سرعت حباب گاز، کسر حجمی، طول سلول واحد و قطر لوله موئین بر انتقال جرم بین فازی دیده شده است. مزیت اصلی این رابطه کارایی آن در تخمین میزان انتقال جرم بین فازی در محدوده وسیعی از اعداد موئینه است. همچنین رابطه ارائه شده، تأثیر تغییر شکل حباب بر انتقال جرم بین فازی را در نظر می‌گیرد.</p>	<p><b>تاریخچه مقاله:</b> دریافت: ۲۰ اردیبهشت ۹۵ دریافت پس از اصلاح: ۴ مهر ۹۵ پذیرش نهایی: ۲۷ آبان ۹۵</p> <p><b>کلمات کلیدی:</b> رژیم تیلور انتقال جرم شبیه‌سازی CFD روش VOF</p>
<p>حقوق ناشر محفوظ است.</p>	<p>* عهده دار مکاتبات amin.hassanvand@gmail.com</p>

## ۱- مقدمه

جریان دوفازی گاز- مایع در میکرو کانالها یا لوله‌های موئین موضوع مطالعات فراوانی در سال‌های اخیر بوده است [۱،۲]. مبدل‌های حرارتی مینیاتوری، راکتورهای مونولیتی و سیستم‌های غشایی نمونه‌هایی از کاربرد جریان دوفازی گاز- مایع هستند. استفاده از این جریان در سیستم‌های غشایی باعث افزایش چشمگیر کارایی آن‌ها می‌شود. علت بهبود کارایی این سیستم‌ها به کاهش پلاریزاسیون غلظتی و کاهش رسوب در غشا به دلیل عبور جریان دوفازی از آن بازمی‌گردد [۳]. یکی از رژیم‌های متداول جریان دوفازی گاز-مایع در سیستم‌های غشایی رژیم جریانی تیلور است. جریان تیلور، رژیمی پویا و دوره‌ای از یکسری حباب همانند است. در این رژیم، حباب‌های گاز تقریباً تمام سطح مقطع لوله را پر کرده و یک فیلم بسیار نازک بین حباب و دیواره لوله تشکیل می‌شود. حباب‌های گاز در رژیم جریانی تیلور با استفاده از لخته‌های مایع از یکدیگر جدا می‌شوند. سرعت محوری این حباب‌ها باهم برابر بوده و در کل می‌توان جریان تیلور را یک جریان دوره‌ای در راستای محوری در نظر گرفت.

یکی از مزایای مهم جریان تیلور افزایش سطح فصل مشترک بین فازی و به تبع آن افزایش میزان انتقال جرم است. برای تعیین میزان انتقال جرم بین فازی در رژیم تیلور در منابع هم از روش‌های آزمایشگاهی و هم از شبیه‌سازی CFD استفاده شده است. برکیک و پینتار در سال ۱۹۹۷ [۴] و وندو و همکاران در سال ۲۰۰۵ [۵] بر مبنای مطالعات آزمایشگاهی، مدل‌های تجربی برای ضریب انتقال جرم بین فازی در رژیم تیلور مطرح کرده‌اند، اما این مدل‌ها در محدوده بسیار کوچکی از عدد موئینه کاربرد دارند. ون باتن و کریشنا در سال ۲۰۰۴ [۶] انتقال جرم بین فازی در رژیم تیلور را با شبیه‌سازی CFD مطالعه کردند. این محققین برای انجام شبیه‌سازی هیدرودینامیک رژیم تیلور از روش ساده‌ای استفاده کرده‌اند. آن‌ها حباب را به‌عنوان یک فضای خالی ساکن بدون تغییر در میان دامنه محاسباتی در نظر گرفتند و در سطح حباب از اثر کشش سطحی بر هیدرودینامیک جریان صرف‌نظر نمودند. در مدل ارائه‌شده توسط این محققین به دلیل استفاده از فرض‌های ساده‌کننده، تأثیر عدد موئینه بر میزان انتقال جرم بین فازی دیده نشده است؛ اما عدد موئینه یکی از مهم‌ترین پارامترهای حاکم بر هیدرودینامیک جریان تیلور است. به‌منظور بررسی اثر عدد موئینه بر انتقال جرم بین فازی، باید هیدرودینامیک رژیم تیلور با استفاده از روش‌های

تسخیر فصل مشترک شبیه‌سازی شود. از جمله این روش‌ها می‌توان به روش تک سیالی VOF اشاره کرد.

روش VOF برای شبیه‌سازی هیدرودینامیک رژیم تیلور در سلول واحد، توسط اکبر و غیاثیان در سال‌های ۲۰۰۳ و ۲۰۰۶ [۷، ۸]، طاه‌ها و سوئی در سال‌های ۲۰۰۴ و ۲۰۰۶ [۹، ۱۰]، وانگ و لیو در سال ۲۰۰۸ [۱۱] و گیدرسا و همکاران در سال ۲۰۰۴ [۱۲] به‌کاررفته است. طاه‌ها و سوئی در سال ۲۰۰۴ [۹] بر اساس دیدگاه VOF روشی را برای شبیه‌سازی CFD هیدرودینامیک رژیم تیلور ارائه کرده‌اند که در آن حباب تیلور در میان سلول واحد ساکن بوده و مایع از روی آن عبور می‌کند. به‌منظور حصول هیدرودینامیک رژیم تیلور در این دیدگاه، ابتدا دامنه محاسباتی به‌اندازه سلول واحد ایجاد شده و سپس با توجه به کسر حجمی گاز در سلول واحد، کسر حجمی اولیه فاز گاز در سلول تعیین می‌شود. این محققین با استفاده از این دیدگاه، هیدرودینامیک جریان تیلور در یک لوله موئین را به‌صورت دوبعدی با تقارن محوری شبیه‌سازی کرده‌اند. در کار دیگری از همین محققین در سال ۲۰۰۶ [۱۰]، هیدرودینامیک جریان تیلور در یک کانال با سطح مقطع مربعی شبیه‌سازی شده است. در این مطالعه شبیه‌سازی سه‌بعدی جریان در سلول واحد انجام شده است. شبیه‌سازی CFD رژیم تیلور در سلول واحد با استفاده از روش VOF توسط گیدرسا در سال ۲۰۰۳ [۱۳] انجام شده است. در این کار برخلاف روش طاه‌ها حباب درون سلول واحد متحرک و معادلات حاکم بر جریان طوری بازنویسی شده‌اند که فشار از حالت غیر دوره‌ای به‌صورت دوره‌ای تغییر می‌یابد. محققین دیگری هم با استفاده از روش گیدرسا هیدرودینامیک رژیم تیلور در سلول واحد را مورد مطالعه قرار داده‌اند [۱۴-۱۶].

برخلاف کارهای زیادی که در زمینه شبیه‌سازی هیدرودینامیک رژیم تیلور صورت گرفته است، در زمینه شبیه‌سازی انتقال جرم بین فازی در این رژیم کارهای اندکی انجام شده است که از آن جمله می‌توان به کارهای انجام شده توسط ایراندوست و اندرسون در سال ۱۹۸۸ [۱۷]، کروتزر و همکاران در سال ۲۰۰۱ [۱۸]، ون باتن و کریشنا در سال ۲۰۰۴ [۶] و حسنوند و هاشم آبادی در سال ۲۰۱۲ [۱۹] اشاره کرد. ایراندوست و اندرسون در سال ۱۹۸۹ [۲۰] انتقال جرم همراه با واکنش در یک راکتور مونولیتی کاتالستی در رژیم تیلور را بررسی کرده‌اند. آن‌ها به این نتیجه رسیدند که در فرآیندهای دوفازی با واکنش، راکتورهای مونولیتی عملکرد بسیار خوبی از خود نشان می‌دهند. یکی از دلایل عملکرد

به صورت زیر محاسبه می‌شود [۲۳]:

$$f_{\sigma} = 2\sigma\alpha_2\kappa n \quad (5)$$

در این رابطه  $\sigma$  کشش سطحی،  $\kappa$  انحناى موضعی و  $n$  سطح نرمال بوده که توسط گرادیان کسر حجمی فاز ثانویه محاسبه می‌شود:

$$n = \nabla\alpha_2 \quad (6)$$

در معادله (۵) انحناى موضعی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\kappa = \frac{1}{|n|} \left[ \left( \frac{n}{|n|} \cdot \nabla \right) |n| - (\nabla \cdot n) \right] \quad (7)$$

شکل (۱) شماتیکی از دامنه محاسباتی مورد استفاده در تحقیق حاضر را نشان می‌دهد. شرط مرزی ورودی و خروجی سلول با توجه به سرعت حباب، به صورت یک پروفایل حدسی تعیین می‌شود. همان‌طور که در شکل (۱) پیداست هندسه مورد استفاده در تحقیق حاضر، یک هندسه دوبعدی با تقارن محوری است که در مرکز لوله شرط مرزی تقارن و در دیواره کناری لوله شرط مرزی دیواره متحرک در نظر گرفته شده است. سرعت این دیواره برابر با سرعت حباب به طرف پائین است. روش کار در این دیدگاه به این صورت است که برای یک سرعت حباب مشخص شرط مرزی ورودی سرعت به سلول، به صورت یک پروفایل حدسی تعیین می‌شود. رابطه (۸) پروفایل سرعت توسعه یافته ورودی را نشان می‌دهد:

$$u = U_B - 2U_{SL} \left[ 1 - \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (8)$$

در رابطه بالا  $U_B$  سرعت حباب و  $U_{SL}$  سرعت متوسط فاز مایع است. جهت تعیین پروفایل حدسی، برای یک سرعت حباب معلوم ابتدا یک مقدار برای سرعت متوسط فاز مایع ( $U_{SL}$ ) حدس زده می‌شود. با این سرعت حدسی شبیه سازی شروع شده و بعد از چند گام زمانی موقعیت حباب در دامنه محاسباتی مشخص می‌شود. اگر حباب به سمت بالا حرکت کرده بود سرعت متوسط فاز مایع باید نصف شود و اگر حباب به سمت پایین حرکت کرده بود سرعت متوسط فاز مایع باید دو برابر شود با ادامه دادن این روش می‌توان به سرعتی رسید که حباب در آن سرعت حرکت نمی‌کند. جهت دستیابی هرچه سریع‌تر به مقداری که حباب در آن سرعت ساکن می‌شود، حدس اولیه توسط رابطه (۹) استخراج می‌شود [۲۴]:

$$\frac{U_B - U_{SL}}{U_B} = Ca^{\frac{1}{2}} \quad (9)$$

در رابطه (۹)  $Ca$  عدد موئینه مربوط به سرعت حباب بوده و برابر  $\frac{\mu_L U_B}{\sigma}$  است.

مناسب این راکتورها سطح انتقال جرم بالا نسبت به حجم راکتور است. دلیل دیگر آن است که در جریان تیلور ضخامت فیلم مایع اطراف حباب بسیار نازک بوده و طول مسیر نفوذ کوتاه است، بنابراین مقاومت در مقابل انتقال جرم کم بوده و اجزاء واکنش‌دهنده راحت‌تر به درون فاز مایع نفوذ می‌کنند. اونوا و همکاران در سال ۲۰۰۹ با استفاده از روش VOF انتقال جرم از حباب تیلور به لخته مایع را در حضور واکنش و همچنین عدم حضور واکنش بررسی کرده‌اند [۲۱].

با توجه به مطالب گفته شده نیاز به تحقیقی جهت ارائه رابطه‌ای برای تعیین میزان انتقال جرم بین فاز با در نظر گرفتن تمامی پارامترهای حاکم بر جریان تیلور نظیر عدد موئینه، سرعت حباب گاز، کسر حجمی، طول سلول واحد و قطر لوله موئین احساس می‌شود. لذا در مطالعه حاضر ابتدا هیدرودینامیک رژیم تیلور بر اساس دیدگاه VOF شبیه سازی شده و سپس تأثیر پارامترهای مختلف بر انتقال جرم بین فاز در این رژیم بررسی شد. در نهایت رابطه‌ای برای انتقال جرم بین فاز با در نظر این پارامترها ارائه شده است.

## ۲- شبیه سازی CFD

### ۲-۱- شبیه سازی هیدرودینامیک

در تحقیق حاضر جهت شبیه سازی جریان دوفازی گاز-مایع همراه با انتقال جرم از نرم افزار Fluent ویرایش 6.3.26 استفاده شده است. برای شبیه سازی هیدرودینامیک رژیم تیلور از روش طاهها و سوئی در سال ۲۰۰۴ [۹] استفاده شده است. در این روش، دیدگاه VOF برای شبیه سازی جریان دوفازی در سلول واحد به کار می‌رود. معادلات پیوستگی (۱)، مومنوم (۲)، پیوستگی فاز ثانویه (۴) در دیدگاه VOF به صورت زیر می‌باشند [۲۲]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (1)$$

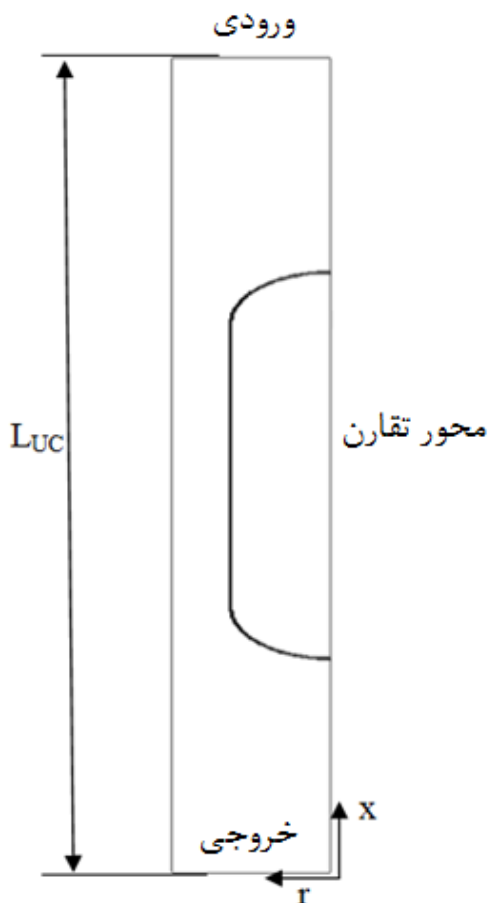
$$\frac{D\rho u}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 u + \rho g + f_{\sigma} + S_m \quad (2)$$

در روش VOF خواص فیزیکی مانند دانسیته و ویسکوزیته به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$\rho = \alpha \rho_g + (1 - \alpha) \rho_l \quad \mu = \alpha \mu_g + (1 - \alpha) \mu_l \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho_g \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \alpha u) = 0 \quad (4)$$

در معادله (۲)  $f_{\sigma}$  نیروی ناشی از کشش سطحی است که



شکل ۱: شماتیک دامنه محاسباتی در تحقیق حاضر

که در رابطه (۱۳)  $\tau$  زمان اقامت جریان تیلور و  $C_{L,sys}$  غلظت متوسط فاز مایع است.

### ۳- نتایج و بحث

#### ۳-۱- بررسی استقلال حل از شبکه

در تحقیق حاضر، استقلال حل از شبکه در شبیه‌سازی‌های هیدرودینامیک و انتقال جرم بررسی شده است. در شبیه‌سازی هیدرودینامیک، ضخامت فیلم مایع اطراف حباب به‌عنوان معیار استقلال حل از شبکه است. در شکل (۲) نمونه‌ای از شبکه با سازمان برای شبیه‌سازی هیدرودینامیک رژیم جریانی تیلور و همچنین فصل مشترک تسخیر شده نشان داده شده است. جدول (۱) ضخامت فیلم مایع حاصل از شبکه‌های مختلف برای لوله موئینی با قطر ۲mm، طول سلول واحد ۱۹mm و کسر حجمی گاز ۰/۳ را نشان می‌دهد. نتایج این شبیه‌سازی با نتایج رابطه تجربی اوسیلوس و کوئر [۳۰] مقایسه شده‌اند. همان‌طور که در جدول (۱) پیداست تفاوت بین شبکه‌هایی که المان‌های نزدیک دیواره به ترتیب ۱۰ و  $20\mu m$  دارند، کمتر از ۳٪ است. بر اساس این نتایج، شبکه‌ای

#### ۲-۲- شبیه‌سازی انتقال جرم بین فازی

پس از به دست آوردن هیدرودینامیک رژیم تیلور معادله انتقال جرم زیر روی دامنه محاسباتی حل می‌شود [۲۵]:

$$\frac{\partial \rho \omega_i}{\partial t} + \nabla \cdot (u \rho \omega_i) = D_{ij} \nabla^2 \rho \omega_i + S \quad (10)$$

که در معادله (۱۰)  $\omega_i$  کسر جرمی جزء  $i$ ام،  $D_{ij}$  ضریب نفوذ دوجزئی و  $S$  ترم چشمه مربوط به اعمال شرایط تعادلی در فصل مشترک است. در تحقیق حاضر معادلات بقاء (۱)، (۲)، (۳) و (۵) در تمامی دامنه محاسباتی شامل هر دو فاز مایع و گاز حل می‌شوند. ترم چشمه مربوط به انتقال جرم بین فازی در معادلات مومنتوم (۲) به‌صورت زیر محاسبه می‌شود [۲۶]:

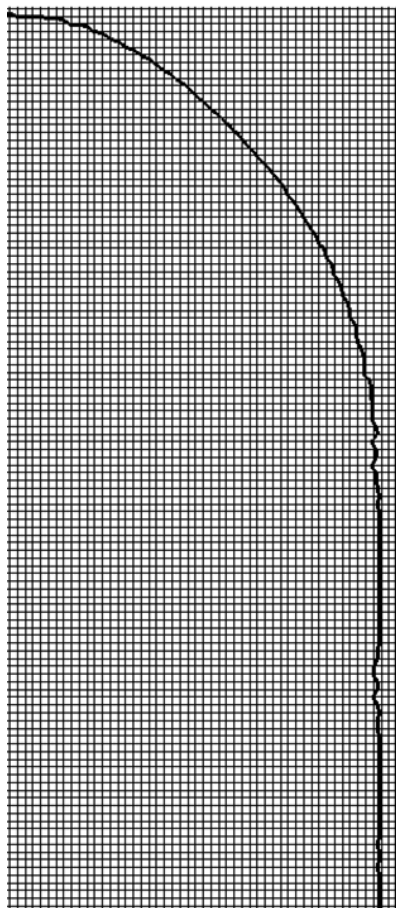
$$S_m = \left( \frac{D_{ij} \rho}{1 - \omega_i} \nabla \omega_i \Big|_{\text{interface}} \cdot \mathbf{A} \right) u \quad (11)$$

معادله بالا ترم چشمه مومنتوم ناشی از انتقال جرم بین فازی است که به معادله مومنتوم (۲) اضافه می‌شود. این ترم حاصل ضرب دبی جرمی ناشی از انتقال جرم و سرعت است. در معادله (۱۱) عبارت داخل پرانتز حاصل ضرب شار انتقال جرم از فصل مشترک و سطح بوده که میزان دبی جرمی انتقال جرم از سطح را نشان می‌دهد. در معادله (۱۱)،  $\mathbf{A}$  بردار نرمال سطح انتقال جرم بین فازی در سلول حاوی فصل مشترک است که به‌صورت زیر محاسبه می‌شود [۲۷]:

$$\mathbf{A} = V_{\text{cell}} \nabla \alpha \quad (12)$$

در شبیه‌سازی CFD انتقال جرم بین فازی اعمال شرایط تعادلی سلول‌های حاوی فصل مشترک مهم است. سلول‌های حاوی فصل مشترک سلول‌هایی هستند که یا کسر حجمی فاز ثانویه در آن‌ها بین صفر و یک باشد و یا اینکه سلول‌های کاملاً پری از فاز ثانویه هستند که در کنار سلول‌های کاملاً پری از فاز اولیه قرار گرفته‌اند و در نتیجه پیدا کردن این سلول‌ها در دامنه محاسباتی کار بسیار مشکلی است؛ اما از آنجائی که در این دیدگاه فاز اولیه خالص است و هدف شبیه‌سازی انتقال جرم به فاز ثانویه است، می‌توان فرض کرد که در سلول‌هایی که کسر حجمی فاز ثانویه مخالف یک است یعنی سلول‌های حاوی فصل مشترک و سلول‌های حاوی فاز اولیه، غلظت تعادلی حاکم است. برای اعمال شرایط تعادلی بر معادله بقای جزء منتقل‌شونده (۱۰) در فاز اولیه، از روش شرط مرزی داخلی [۲۸] استفاده می‌شود. شرط مرزی غلظت در ورودی و خروجی سلول واحد به‌صورت شرط مرزی دوره‌ای در نظر گرفته می‌شود؛ یعنی غلظت جزء منتقل‌شونده در خروجی به‌عنوان غلظت این جزء در ورودی در نظر گرفته می‌شود. با رابطه زیر ضریب انتقال جرم ( $k_L a$ ) محاسبه می‌شود [۲۹]:

$$k_L a = \frac{1}{\tau} \ln \frac{1}{1 - C_{L,sys}} \quad (13)$$



شکل ۲: بزرگنمایی شبکه بین حباب و دیواره در حبابی با بیشترین قطر در  $Ca = 0.11$

جدول ۱: مقایسه ضخامت فیلم حاصل از شبیه‌سازی CFD با اندازه المان نزدیک دیواره مختلف و رابطه تجربی اوسیلوس و کوئر [۳۰] در عدد موئینه  $0.25$

اندازه المان ( $\mu\text{m}$ )	شبیه‌سازی CFD ( $\mu\text{m}$ )	رابطه تجربی [۳۰] ( $\mu\text{m}$ )
۲۵	۸۸	۷۸
۲۰	۸۲	۷۸
۱۰	۸۰	۷۸

جدول ۲: غلظت متوسط در لخته مایع برای المان‌های نزدیک دیواره مختلف در عدد موئینه  $0.25$

اندازه المان ( $\mu\text{m}$ )	غلظت متوسط جزء ردیاب در لخته مایع
۲۰	۰/۱۷۶
۱۰	۰/۲۶
۵	۰/۳۵
۲/۵	۰/۳۶۸

کسر حجمی‌های مختلف را نشان می‌دهد. همان‌طور که در این جدول پیداست با افزایش کسر حجمی گاز، ضریب انتقال جرم افزایش می‌یابد. علت این افزایش به بزرگ شدن سطح

با اندازه اولین المان  $20\mu\text{m}$  به‌عنوان شبکه پایه شبیه‌سازی-های هیدرودینامیک رژیم تیلور در نظر گرفته شده است. دلیل این انتخاب، زمان محاسباتی کمتر آن در مقابل سایر شبکه‌ها است.

در شبیه‌سازی CFD انتقال جرم از حباب تیلور به لخته مایع اطراف آن، اندازه المان‌های محاسباتی در فیلم اطراف حباب پارامتر مهمی است که بر صحت حل بسیار تأثیرگذار است. اندازه این المان‌ها باید طوری باشد که لایه مرزی غلظتی ایجاد شده را با دقت قابل قبولی پیش‌بینی کنند. برای بررسی استقلال حل از شبکه در شبیه‌سازی انتقال جرم، اندازه المان‌ها در فیلم اطراف حباب چند مرحله ریزتر شده است. به‌منظور مقایسه شبکه‌های مختلف، غلظت متوسط در لخته مایع در این شبکه‌ها بعد از گذشت ۱s از شروع حل پویای معادله انتقال جرم باهم مقایسه شده‌اند (جدول ۲). همان‌طور که در این جدول پیداست نتایج حاصل از شبکه‌ای با اندازه المان  $5\mu\text{m}$  نسبت به شبکه‌ای با اندازه المان  $2/5\mu\text{m}$  کمتر از ۵٪ اختلاف دارد. بنابراین شبکه‌ای با اندازه المان  $5\mu\text{m}$  برای انجام محاسبات انتقال جرم در نظر گرفته شده است.

### ۳-۲- تأثیر کسر حجمی بر انتقال جرم در اعداد موئینه مختلف

شکل (۳) تأثیر تغییر عدد موئینه بر شکل حباب تیلور و چرخش سیال در لخته مایع را نشان می‌دهد. همان‌طور که در این شکل پیداست در اعداد موئینه کوچک، دو انتهای حباب کروی است و خطوط جریان در دو لخته بالا و پائین حباب شبیه به هم می‌باشند. مشاهدات آزمایشگاهی برای سیستم آب-هوا این شکل حباب را در اعداد موئینه پایین تأیید می‌کند [۳۱]. در اعداد موئینه کوچک ضخامت فیلم اطراف حباب بسیار کم است، روابط تجربی نیز این نتایج را تصدیق می‌کنند. با افزایش عدد موئینه نوک حباب باریک‌تر، عقب حباب تخت‌تر، حباب درازتر و فیلم اطراف آن ضخیم‌تر می‌شود. علاوه بر این‌ها، پهنای چرخش سیال در لخته مایع کوچک‌تر شده و مکان شعاعی آن به سمت مرکز لوله منتقل می‌شود. شبیه‌سازی CFD نشان می‌دهد که در عدد موئینه حدود  $0.5$  کنارگذر کامل اتفاق می‌افتد. در این حالت چرخش سیال در لخته مایع رخ نداده و مایع روی حباب می‌لغزد. در اعداد موئینه بزرگ‌تر هم این حالت رخ می‌دهد.

در تحقیق حاضر اثر کسر حجمی گاز بر انتقال جرم رژیم تیلور ( $d_c = 2\text{mm}$ ,  $L_{UC} = 19\text{mm}$ ,  $U_B = 1\text{m/s}$ ) بررسی شده است. جدول (۳) تغییرات ضریب انتقال جرم ( $k_{LA}$ ) با عدد موئینه در

(۰/۰۱۱، ۰/۰۲۵، ۰/۰۴۴ و ۰/۰۸۸) انجام شده‌اند. جدول (۴) تأثیر طول سلول واحد بر ضریب انتقال جرم بین فازی (kLa) را نشان می‌دهد. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که با کاهش طول سلول واحد، میزان انتقال جرم بین فازی افزایش می‌یابد. این نتیجه‌گیری با نتایج ون باتن و کریشنا در سال ۲۰۰۴ [۶] برای اعداد مؤئینه پایین تطابق دارد. در اعداد مؤئینه کوچک، حباب دارای دو سر نیمکره‌ای و یک بدنه استوانه‌ای است.

جدول ۳: تأثیر عدد مؤئینه بر ضریب انتقال جرم (kLa) در کسر حجمی‌های مختلف (dc=۲mm, LUC=۱۹mm, UB=۱m/s)

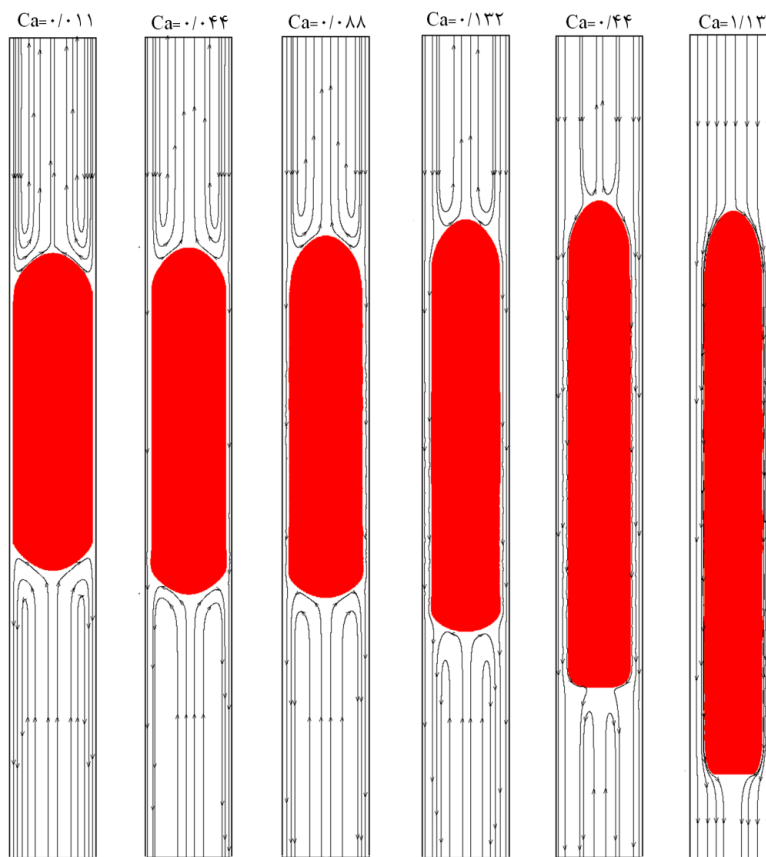
عدد مؤئینه	کسر حجمی		
	۰/۱۸	۰/۳۰	۰/۴۰
۰/۰۱۱	۰/۰۱۸	۰/۰۳۲	۰/۰۴۴
۰/۰۲۵	۰/۰۱۶	۰/۰۲۴	۰/۰۳۵
۰/۰۴۴	۰/۰۱۴	۰/۰۲۰	۰/۰۲۸
۰/۰۸۸	۰/۰۱۲	۰/۰۱۸	۰/۰۲۴
۰/۱۳۲	۰/۰۱۱	۰/۰۱۶	۰/۰۲۲
۰/۱۸۰	۰/۰۱۰	۰/۰۱۵	۰/۰۲۰
۰/۴۹۰	۰/۰۰۸	۰/۰۱۲	۰/۰۱۴
۱/۱۳۰	۰/۰۱۰	۰/۰۱۳	۰/۰۱۵

انتقال جرم ناشی از ازدیاد کسر حجمی گاز بازمی‌گردد. در واقع با زیاد شدن کسر حجمی گاز، انتقال جرم از فیلم اطراف حباب افزایش می‌یابد. نتایج آزمایشگاهی مشابه با این نتایج، توسط وندو و همکاران در سال ۲۰۰۵ [۵] ارائه شده است. در کار آزمایشگاهی انجام شده توسط این محققین مشخص شد که در زمان تماس کم دو فاز، انتقال جرم ناشی از فیلم نقش اساسی در انتقال جرم از حباب تیلور را بازی می‌کند. همچنین آن‌ها نشان دادند که با افزایش کسر حجمی در این حالت ضریب انتقال جرم هم افزایش می‌یابد.

### ۲-۳- تأثیر طول سلول واحد بر انتقال جرم در اعداد مؤئینه مختلف

در این بخش اثر تغییر طول سلول واحد بر میزان انتقال جرم بین فازی در رژیم تیلور مطالعه شده است. برای این منظور طول سلول واحد از ۰/۰۵m تا ۰/۰۴m تغییر داده شده است.

موارد شبیه‌سازی شده دارای سرعت حباب، قطر و کسر حجمی گاز یکسان هستند (UB=۱m/s, εG=۰/۳, dc=۲mm). در هر مورد، شبیه‌سازی‌ها برای چهار عدد مؤئینه متفاوت



شکل ۳: اثر عدد مؤئینه بر شکل حباب و چرخش سیال در فاز مایع (εG=۰/۳, UB=۱m/s, LUC=۱۹mm, dc=۲mm)

ارائه رابطه‌ای برای تعیین ضریب انتقال جرم بین فاز در جریان تیلور بر مبنای شبیه سازی CFD

جدول ۴: تأثیر طول سلول واحد در اعداد موئینه متفاوت بر ضریب

انتقال جرم ( $k_{La}$ ) ( $d_c=2mm$ ,  $\varepsilon_G=0/3$ ,  $U_B=1m/s$ )

عدد موئینه	طول سلول واحد (m)		
	۰/۰۰۵	۰/۰۱۹	۰/۰۴
۰/۰۱۱	۰/۰۴۴	۰/۰۳۲	۰/۰۲۵
۰/۰۲۵	۰/۰۳۸	۰/۰۲۷	۰/۰۲۰
۰/۰۴۴	۰/۰۳۵	۰/۰۲۵	۰/۰۲۰
۰/۰۸۸	۰/۰۳۰	۰/۰۲۲	۰/۰۱۸

جدول ۵: تأثیر تغییرات قطر لوله موئین بر ضریب انتقال جرم ( $k_{La}$ )

( $L_{UC}=19mm$ ,  $\varepsilon_G=0/3$ ,  $U_B=1m/s$ )

عدد موئینه	قطر لوله موئین (mm)			
	۱	۲	۳	۴
۰/۰۱۱	۰/۰۵۲	۰/۰۳۲	۰/۰۲۱	۰/۰۱۴
۰/۰۲۵	۰/۰۴۷	۰/۰۲۷	۰/۰۱۷	۰/۰۱۲
۰/۰۴۴	۰/۰۴۱	۰/۰۲۳	۰/۰۱۳	۰/۰۰۹
۰/۰۸۸	۰/۰۳۶	۰/۰۱۸	۰/۰۱۰	۰/۰۰۷

ویژه فیلم اطراف حباب ( $a_{film}$ ) با کاهش قطر نسبت داد. همان‌طور که در رابطه (۱۵) پیداست با کاهش قطر لوله سطح ویژه فیلم اطراف حباب و به تبع آن میزان ضریب انتقال جرم بین فاز افزایش می‌یابد. با کاهش قطر لوله میزان ضریب انتقال جرم ناشی از دو سر حباب هم افزایش می‌یابد اما تأثیر افزایش ضریب انتقال جرم ناشی از فیلم اطراف حباب بیشتر است. شاهد این مدعی کار آزمایشگاهی انجام شده توسط وندو و همکاران در سال ۲۰۰۵ است [۵]. آن‌ها با محاسبه ضریب انتقال جرم بین فاز به صورت آزمایشگاهی، نشان دادند که در رژیم تیلور انتقال جرم بین فاز ناشی از فیلم غالب بوده و تعیین‌کننده میزان انتقال جرم کلی در این رژیم جریانی است.

### ۳-۵- رابطه‌ای برای ضریب انتقال جرم بین فاز در جریان تیلور

جهت به دست آوردن رابطه‌ای مناسب برای محاسبه ضریب انتقال جرم بین فاز با استفاده از نتایج شبیه‌سازی CFD تحقیق حاضر، می‌توان از رابطه آزمایشگاهی وندو و همکاران در سال ۲۰۰۵ شروع کرد [۵]:

$$k_{La} = C_1 \sqrt{\frac{D_{AB} U_G}{L_{UC} d_c}} \quad (16)$$

در این رابطه ضریب انتقال جرم بین فاز برای اعداد موئینه کوچک ارائه شده است. این محققین با کار آزمایشگاهی‌شان نشان دادند که انتقال جرم ناشی از فیلم نقش اساسی در انتقال جرم از حباب تیلور را بازی می‌کند [۵]. با استفاده از

بر مبنای این شکل حباب، این محققین ضریب انتقال جرم در رژیم تیلور را به صورت مجموع ضریب انتقال جرم ناشی از دو سر حباب ( $k_{L,cap} a_{cap}$ ) و ضریب انتقال جرم ناشی از فیلم اطراف حباب ( $k_{L,film} a_{film}$ ) در نظر گرفتند و رابطه زیر را برای ضریب انتقال جرم بین فاز بیان کردند [۶]:

$$k_{La} = k_{L,cap} a_{cap} + k_{L,film} a_{film} \quad (14)$$

ون باتن و کریشنا در سال ۲۰۰۴ [۶] بر مبنای تئوری هیگبی پارامترهای رابطه (۱۴) را به دست آوردند و در نهایت رابطه زیر را برای ضریب انتقال جرم بین فاز در رژیم تیلور ارائه کردند [۶]:

$$k_{La} = 2 \frac{\sqrt{2}}{\pi} \sqrt{\frac{D_{AB} U_B}{d_c}} \frac{4}{L_{UC}} + \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{D_{AB} U_B}{\varepsilon_G L_{UC}}} \frac{4 \varepsilon_G}{d_c} \quad (15)$$

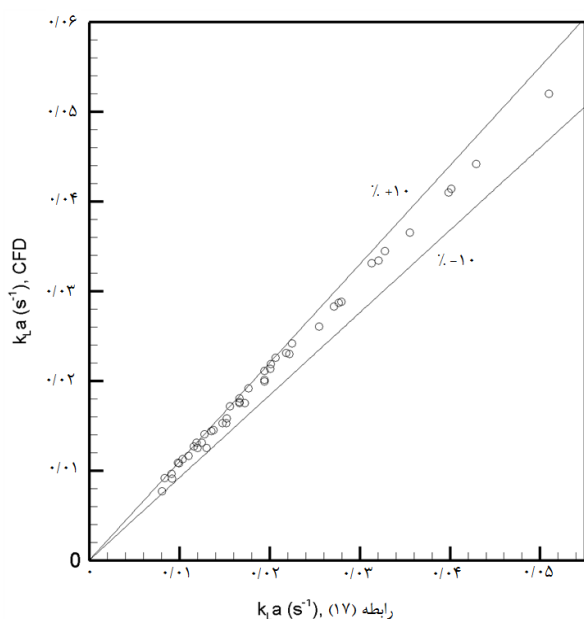
همان‌طور که در رابطه (۱۵) پیداست در اعداد موئینه کوچک با کاهش طول سلول واحد ( $L_{UC}$ ) میزان ضریب انتقال جرم بین فاز افزایش می‌یابد. نتایج حاصل از تحقیق حاضر نشان می‌دهند که در اعداد موئینه بزرگ هم با کاهش طول سلول واحد ضریب انتقال افزایش می‌یابد. تغییرات ضریب انتقال جرم با عدد موئینه در سلول واحد طولی‌تر، کمتر می‌شود. افزایش ضریب انتقال جرم با کاهش طول سلول واحد را می‌توان این‌گونه توجیه کرد که با کوچک شدن طول سلول واحد در واقع حباب‌ها به یکدیگر نزدیک‌تر شده و تعداد بیشتری حباب در لوله موئین جای گرفته و در نتیجه با افزایش تعداد حباب‌ها میزان انتقال جرم هم افزایش می‌یابد.

### ۳-۴- تأثیر قطر بر انتقال جرم در اعداد موئینه مختلف

تأثیر قطر لوله موئین بر میزان انتقال جرم بین فاز در رژیم تیلور برای محدود ۱mm تا ۴mm بررسی شده است. موارد شبیه‌سازی شده در این قسمت دارای طول سلول واحد، سرعت حباب و کسر حجمی گاز یکسان می‌باشند ( $U_B=1m/s$ ,  $L_{UC}=19mm$ ,  $\varepsilon_G=0/3$ ). برای هر مورد شبیه‌سازی در یک قطر خاص، شبیه‌سازی‌ها برای چهار عدد موئینه متفاوت (۰/۰۱۱، ۰/۰۲۵، ۰/۰۴۴ و ۰/۰۸۸) انجام شده‌اند. در جدول (۵) تأثیر تغییرات قطر بر ضریب انتقال جرم بین فاز ( $k_{La}$ ) آمده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی نشان می‌دهند که با کاهش قطر لوله موئین، میزان انتقال جرم بین فاز افزایش می‌یابد. این نتیجه‌گیری با نتایج ون باتن و کریشنا در سال ۲۰۰۴ [۶] برای اعداد موئینه پایین تطابق دارد. نتایج حاصل از تحقیق حاضر نشان می‌دهند که در اعداد موئینه بزرگ نیز با کاهش قطر لوله ضریب انتقال افزایش می‌یابد. افزایش ضریب انتقال جرم بین فاز با کاهش قطر لوله را می‌توان به افزایش سطح

جدول ۶: مقایسه طول فیلم حاصل از شبیه‌سازی و رابطه (۲۰)

عدد موئینه	طول فیلم از CFD (mm)	طول فیلم از رابطه ۲۰ (mm)	خطا %
۰/۰۱۱	۳/۵۴	۳/۸۵	-۸/۶۱
۰/۰۲۵	۳/۸۰	۴/۱۲	-۸/۴۶
۰/۰۴۴	۴/۰۵	۴/۳۹	-۸/۵۱
۰/۰۸۸	۴/۴۵	۴/۸۴	-۸/۷۳
۰/۱۳۲	۴/۷۸	۵/۱۶	-۷/۹۶
۰/۱۸۰	۴/۹۸	۵/۴۳	-۹/۰۹
۰/۴۴۰	۶/۱۲	۶/۳۱	-۳/۱۲
۱/۱۳۰	۷/۲۰	۷/۲۶	-۰/۸۴



شکل ۴: مقایسه نتایج حاصل از رابطه (۱۷) و شبیه‌سازی CFD

### فهرست علائم

A	بردار سطح، $m^2$
Ca	عدد موئینه، $\mu_L U_B / \sigma$
$D_{AB}$	ضریب نفوذ دوجزئی، $m^2/s$
$d_c$	قطر لوله موئین، mm
$f_\sigma$	نیروی کشش سطحی، $n/m^3$
$k_L a$	ضریب انتقال جرم حجمی، $1/s$
$L_{UC}$	طول سلول واحد در جریان تیلور، m
S	ترم چشمه معادلات بقاء
U	سرعت، m/s
$U_B$	سرعت حباب تیلور، m/s
$U_{SL}$	سرعت ظاهری مایع، m/s
$V_{cell}$	حجم سلول محاسباتی، $m^3$

این فرض و با استفاده از نتایج شبیه‌سازی رابطه زیر برای ضریب انتقال جرم بین فازی ارائه شده است:

$$k_L a = 0.45(1 + 1.1\varepsilon_G^{1.1} Ca^{-0.44}) \sqrt{\frac{D_{AB} U_B L_{film} d_c - 2\delta}{L_{UC} d_c^2}} \quad (17)$$

با استفاده از رابطه بالا می‌توان عدد شروود را به صورت زیر محاسبه نمود:

$$Sh a = 0.45(1 + 1.1\varepsilon_G^{1.1} Ca^{-0.44}) \sqrt{\frac{U_B L_{film} d_c - 2\delta}{D_{AB} L_{UC} d_c}} \quad (18)$$

در رابطه بالا  $\delta$  و  $L_{film}$  به ترتیب ضخامت و طول فیلم اطراف حباب می‌باشند که با استفاده از روابط زیر محاسبه می‌شوند:

$$\frac{\delta}{R} = \frac{1.34 Ca^{\frac{2}{3}}}{1 + 3.35 Ca^{\frac{2}{3}}} \quad (19)$$

$$L_{film} \approx \varepsilon_G L_{UC} \left( \frac{d_c}{d_c - 2\delta} \right)^2 \quad (20)$$

رابطه (۱۹)، رابطه اوسیلوس و کوئر [۳۰] است. رابطه (۲۰) بر این فرض استوار است که گاز موجود در سلول واحد به صورت استوانه‌ای است. برای نشان دادن صحت رابطه (۲۰)، در جدول (۶) طول فیلم حاصل از شبیه‌سازی CFD با طول فیلم حاصل از این رابطه با هم مقایسه شده‌اند. همان‌طور که در جدول پیداست اختلاف این دو مقدار کمتر از ۱۰٪ است، به عبارت دیگر با دقت قابل قبولی می‌توان از رابطه (۲۰) برای محاسبه طول فیلم استفاده نمود. شکل (۴) مقایسه نتایج شبیه‌سازی CFD با نتایج رابطه (۱۷) را نشان می‌دهد، همان‌طور که در این شکل پیداست رابطه (۱۷) دارای حداکثر خطای کمتر از ۱۰٪ نسبت به شبیه‌سازی است.

### ۴- جمع‌بندی

در مطالعه حاضر ابتدا با استفاده از روش VOF هیدرودینامیک رژیم تیلور شبیه‌سازی شده و سپس تأثیر پارامترهای حاکم بر جریان تیلور نظیر عدد موئینه، سرعت حباب گاز، کسر حجمی، طول سلول واحد و قطر لوله موئین بر انتقال جرم بین فازی در رژیم جریان تیلور بررسی شده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی نشان می‌دهند که در اعداد موئینه مختلف در رژیم تیلور با افزایش کسر حجمی گاز، کاهش طول سلول واحد و کاهش قطر لوله موئین ضریب انتقال جرم افزایش می‌یابد. در نهایت رابطه‌ای برای انتقال جرم بین فازی بر مبنای نتایج شبیه‌سازی با در نظر پارامترهای ذکر شده ارائه شده است.



## حروف یونانی

$\varepsilon_G$	کسر حجمی کلی گاز در سلول واحد
$\alpha$	کسر حجمی
$\mu$	ویسکوزیته دینامیک، kg/m s
$\rho$	چگالی، kg/m <sup>3</sup>
$\omega$	کسر جرمی
$\Sigma$	کشش سطحی، N/m

## زیرنویس

G, g	گاز
L	مایع

## مراجع

- rectangular channels, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6889.
- [14] M. Wörner, B. Ghidersa (2007) "A. Onea, A model for residence time distribution of bubble-train flow in square mini channel based on direct numerical simulations results", *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 28, 83-94.
- [15] Furkan Özkan, M. Wörner, A. Wenka, H. S. Soyhan (2007) "Critical evaluation of CFD codes for interfacial simulation of bubble train flow in narrow channel", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 55, 537-564.
- [16] Ö. Keskin, M. Wörner, H. S. Soyhan, T. Bauer, O. Deutschmann, R. Lange (2009) "Viscous Co-Current Downward Taylor Flow in a Square Mini-Channel" *AIChE Journal*, 56, 1693-1702.
- [17] S. Irandoust, B. Andersson (1988) "Mass transfer and liquid-phase reactions in a segmented two-phase flow monolithic catalyst reactor", *Chemical Engineering Science*, 43, 1983-1988.
- [18] M. T. Kreutzer, P. Du, J. J. Heiszwolf, F. Kapteijn, J. A. Moulijn (2001) "Mass transfer characteristics of three-phase monolith reactors", *Chemical Engineering Science*, 56, 6015-6023.
- [19] A. Hassanvand, S. H. Hashemabadi (2012) "Direct numerical simulation of mass transfer from Taylor bubble flow through a circular capillary", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55, 5959-5971.
- [20] S. Irandoust, B. Andersson (1989) "Simulation of flow and mass transfer in Taylor flow through a capillary", *Computers & Chemical Engineering*, 13, 519-526.
- [21] A. Onea, M. Wörner, D. G. Cacuci (2009) "A qualitative computational study of mass transfer in upward bubble train flow through square and rectangular mini-channels", *Chemical Engineering Science*, 64, 1416-1435.
- [22] FLUENT User Manual (2005), version 6.3, Fluent Inc., Lebanon, NH, USA.
- [23] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, C. Zemach (1992) "A continuum method for modeling surface tension", *Journal of Computational Physics*, 100, 335-354.
- [24] F. Fairbrother, A. E. Stubbs (1935) "Studies in electroendosmosis—VI. The "bubble tube" method of measurement", *Journal of Chemical Society*, 1, 527-529.
- [25] A. Hassanvand, S.H. Hashemabadi (2011) "Direct numerical simulation of interphase mass transfer in gas-liquid multiphase systems", *International Communications in Heat Mass Transfer*, 38, 943-950.
- [26] R. Banerjee (2001) CFD Analysis of two-phase flow with vapor emission for automotive refueling system, PHD Thesis Department of Mechanical Engineering University of Missouri- Rolla.
- [27] V. Ranade (2002) Computational flow modeling for chemical reactor engineering, academic press.
- [28] S.V. Patankar (1980) Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Taylor and Francis, Philadelphia.
- [29] M. N. Kashid, A. Renken, L. Kiwi-Minsker (2011) "Gas-liquid and liquid-liquid mass transfer in microstructured reactors", *Chemical Engineering Science*, 66, 1480-1489.
- [30] P. Aussillous, D. Quere (2000) "Quick deposition of a fluid on the wall of a tube", *Physics of Fluids*, 12, 2367-2371.
- [31] C. O. Vandu, J. Ellenberger, R. Krishna (2004) Taylor bubble rise in circular and square capillaries, University of Amsterdam, Amsterdam.
- [1] K. Hayashi, S. Hosoda, G. Tryggvason, A. Tomiyama (2014) "Effects of shape oscillation on mass transfer from a Taylor bubble", *International Journal of Multiphase Flow*, 58, 236-245.
- [2] N. Shao, A. Gavriilidis, P. Angeli (2010) "Mass transfer during Taylor flow in microchannels with and without chemical reaction", *Chemical Engineering Journal*, 160, 873-881.
- [3] N.V. Ndinisa, D.E. Wiley, D.F. Fletcher (2005) "Computational Fluid Dynamics Simulations of Taylor Bubbles in Tubular Membranes: Model Validation and Application to Laminar Flow Systems", *Chemical Engineering Research and Design*, 83, 40-49.
- [4] G. Bercic, A. Pintar (1997) "The role of gas bubbles and liquid slug lengths on mass transport in the Taylor flow through capillaries", *Chemical Engineering Science*, 52, 3709-3719.
- [5] C. O. Vandu, H. Liu, R. Krishna (2005) "Mass transfer from Taylor bubbles rising in single capillaries", *Chemical Engineering Science*, 60, 6430-6437.
- [6] J. M. van Baten, R. Krishna (2004) "CFD simulations of mass transfer from Taylor bubbles rising in circular capillaries", *Chemical Engineering Science*, 59, 2535-2545.
- [7] M. K. Akbar, S. M. Ghiaasiaan (2006) "Simulation of Taylor flow in capillaries based on the volume-of-fluid techniques", *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 45, 5396-5403.
- [8] M. K. Akbar, D. A. Plummer, S. M. Ghiaasiaan (2003) "On the gas-liquid two-phase flow regimes in microchannels", *International Journal of Multiphase Flow*, 29, 855-865.
- [9] T. Taha, Z. F. Cui (2004) "Hydrodynamics of slug flow inside capillaries", *Chemical Engineering Science*, 59, 1181-1190.
- [10] T. Taha, Z. F. Cui (2006) "CFD modeling of slug flow inside square capillaries", *Chemical Engineering Science*, 61, 665.
- [11] S. Wang, D. Liu (2008) "Hydrodynamics of Taylor flow in noncircular capillaries", *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification*, 47, 2098-2106.
- [12] B. E. Ghidersa, M. Wörner, D. G. Cacuci (2004) "Exploring the flow of immiscible fluids in a square mini-channel by direct numerical simulation", *Chemical Engineering Journal*, 101, 285-294.
- [13] B. Ghidersa (2003) Finite-volume-based volume-of-fluid method for the simulation of two-phase flows in small

## CFD based correlation for interphase mass transfer coefficient in Taylor bubble flow

Amin Hassanvand <sup>1,\*</sup>

1. Department Of Polymer Eng., Faculty of Engineering, Lorestan University, Khorramabad, Iran

---

### ABSTRACT

In the present study volume of fluid based (VOF) interface tracking method has been used for the simulation of hydrodynamics of Taylor bubble flow in one unit cell. In this case the stationary bubble is supposed in an axis symmetric domain and the liquid flows over it. Afterwards, the effects of different parameters such as capillary number, gas volume fraction, unit cell length and capillary diameter on interphase mass transfer in Taylor flow have been investigated. Finally based on CFD simulation results a correlation has been proposed for interphase mass transfer coefficient. The ability for prediction of mass transfer coefficient in wide range of capillary number is the great advantage of the proposed correlation. In this correlation the change of bubble shape with capillary number has been regarded.

All right reserved.

---

### ARTICLE INFO

Article history:

Received: May 09, 2016

Revised from: Sep. 25, 2016

Accepted: Nov. 17, 2016

---

Key words:

Taylor regime

mass transfer

CFD simulation

VOF

\* Corresponding author

[amin.hassanvand@gmail.com](mailto:amin.hassanvand@gmail.com)

---